Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1972

УДК 539.293.6.013

Б. ЭССЕР

# К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОПОГЛОЩЕНИЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ (I)

Вычисляется коэффициент поглощения света неупорядоченного полупроводника, случайное поле которого можно считать везде гладким, при наличии постоянного внешнего электрического поля. Приведены явные выражения для коэффициента поглощения на хвосте ($\hbar\omega<\Delta$) в случае сильного и слабого электрических полей.

Случайным полем будем считать то поле, которое остается после выделения из истинного поля в образце некоторого периодического поля, порождающего обычную зонную картину полупроводника (к последней и относятся такие величины, как закон дисперсии электронов в валентной зоне и зоне проводимости и ширина запрещенной зоны, используемые в дальнейшем).

Как было показано в [1], такое случайное поле приводит к появлению экспоненциально убывающего в запрещенную зону хвоста коэффициента поглощения. С другой стороны известно, что наложение достаточно сильного постоянного электрического поля на кристаллический полупроводник также приводит к экспоненциальному убыванию коэффициента поглощения в запрещенной зоне (эффект Франца—Келдыша [2, 3]).

В данной работе вычисляется коэффициент поглощения в условиях, когда на электрон действуют как случайное, так и постоянное электрическое поля. Случайное поле $U(\bar{R})$ будем описывать как в [4].

Пусть вероятность того, что случайное поле имеет вид $U(\overline{R})$, дается следующим функционалом $P[U]$:

$$P[U] = N \exp\left\{-\frac{1}{2}\int d\overline{R}'\, d\overline{R}''\, U(\overline{R}')\, B(\overline{R}', \overline{R}'')\, U(\overline{R}'')\right\}, \tag{1}$$

$N$ определяется из условия $\int\delta U P[U]=1$, $B(\overline{R}', \overline{R}'')$ — некоторое действительное, симметричное, положительно определенное ядро. Усреднение коэффициента поглощения $\alpha[U]$ по случайному полю будем проводить с помощью функционального интегрирования:

$$\langle\alpha\rangle = \int \delta U P[U]\, \alpha[U] \tag{2}$$

(символ $< >$ обозначает усреднение по случайному полю).

Результат усреднения будет выражаться через корреляционную функцию $\psi(\bar{R}, \bar{R}')$:

$$\psi(\bar{R}, \bar{R}') = \langle U(\bar{R})\, U(\bar{R}')\rangle. \tag{3}$$

Будем считать, что случайное поле $U(\bar{R})$ достаточно плавно изменяется в пространстве. Тогда для описания его достаточно ввести два параметра

$$\psi_1 = \psi(\bar{R}, \bar{R}) \text{ и } \psi_2 = \frac{3}{2} \left. \frac{\partial^2 \psi(\bar{R}, \bar{R}')}{\partial R_\alpha\, \partial R'_\alpha} \right|_{\bar{R}'=\bar{R}}. \tag{4}$$

При этом условие плавности случайного поля выражается неравенством

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi_2 \ll \psi_1^{3/2}. \tag{5}$$

Введем еще одно ограничение на величину постоянного электрического поля. Мы будем рассматривать влияние постоянного электрического поля на электронные состояния вблизи краев зон, пренебрегая туннелированием электронов из валентной зоны в зону проводимости под влиянием поля. Для этого нужно, чтобы электрическое поле было не слишком сильно:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} (eE)^2\right]^{1/3} \ll \Delta, \tag{6}$$

где $\Delta$ — ширина запрещенной зоны, $\bar{E}$ — напряженность электрического поля, $\mu$ — приведенная масса $\mu = \dfrac{m_c\, m_v}{m_c + m_v}$.

Будем считать число свободных носителей достаточно малым, так что квазиуровни ферми как для электронов $\mu_c$, так и для дырок $\mu_v$ лежат глубоко в запрещенной зоне (образец в этом смысле близок к собственному). Межэлектронное взаимодействие учтем только частично — в возможной экранировке случайного поля $U(\bar{R})$ электронами.

Таким образом, гамильтониан системы электронов в зоне проводимости и в валентной зоне, на которую наложено случайное поле $U(R)$ и постоянное электрическое поле $\bar{E}$, мы можем написать в виде

$$\hat{H}_l = \int dx\, \hat{a}^+(\bar{x}, t) \{W_l(-i\hbar \bar{\nabla}_{\bar{x}}) + U(\bar{x}) + e\bar{E}\bar{x}\} \hat{a}(\bar{x}, t), \tag{7}$$

здесь $l = c, v$; а $W_l(\bar{p})$ — закон дисперсии в $l$-той зоне. В дальнейшем будем предполагать, что законы дисперсии простые квадратичные:

$$W_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}, \tag{8}$$

$$W_v = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \tag{9}$$

($m_c$, $m_v$ — эффективные массы электронов и дырок).

Коэффициент поглощения в наших условиях можно вычислить по формуле

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{c\sqrt{\varepsilon}} Re\, \sigma(\omega), \tag{10}$$

где $c$ — скорость света в пустоте, $\varepsilon$ — вещественная часть диэлектрической проницаемости, а $Re\sigma(\omega)$ — вещественная часть высокочастотной электропроводности, последнюю в случае аддитивного гамильтониана (7) можно найти по известной формуле:

$$Re\,\sigma(\omega) = 8\pi\frac{e^2\Gamma}{\omega}\,\frac{1}{\Omega}\int d\bar{x}\int d\bar{x}'\int d\omega'\,\{n_F(\omega'-\omega,\mu_v)-n_F(\omega',\mu_c)\}\times$$

$$\times\langle ImG_{\text{ret}}(\bar{x},\bar{x}';v;\omega'-\omega)\,ImG_{\text{ret}}(\bar{x}',\bar{x};c;\omega')\rangle. \tag{11}$$

Здесь $\Gamma=\frac{1}{3}\left|\int u_c^*\hat{V}u_v d\bar{x}\right|^2$, где $\hat{V}$ — оператор скорости электрона $u_c$ и $u_v$ — периодические части функций Блоха, отвечающие рассматриваемым экстремумам зоны проводимости и валентной зоны, $n_F$ — функция Ферми, $\Omega$ — объем образца, $G_{\text{ret}}(\bar{x},\bar{x}',l,\omega)$ — Фурье-образ от запаздывающей функции Грина, отвечающей $l$-той зоне $(\hbar=1)$.

## Вычисление коэффициента поглощения

В силу плавного характера случайного поля (неравенство (5)) функции Грина для электронов с гамильтонианом (7) можно вычислять в квазиклассическом приближении. Учет постоянного электрического поля при этом не вызывает затруднений, так как производные выше первого порядка от потенциальной энергии электрона во внешнем электрическом поле, $e\bar{E}\bar{R}$, равны нулю (функция Грина в одном постоянном электрическом поле вообще вычисляется точно). Будем учитывать производные от случайного поля порядка не выше второго.

Таким образом, для функции Грина

$$G_{\text{ret}}(\bar{x},\bar{x}',l,\omega)=\frac{i}{(2\pi)}\int\limits_0^\infty ds\,\times$$

$$\times\,e^{-\varepsilon s+is\omega\pm is\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{4}\Delta_{\bar{R}}+\Delta_{\bar{r}}\right)-is\frac{1}{2}\left[U\left(\bar{R}+\frac{\bar{r}}{2}\right)+U\left(\bar{R}-\frac{\bar{r}}{2}\right)\right]-ise\bar{E}\bar{R}}\,\delta(\bar{r}) \tag{12}$$

после соответствующих вычислений имеем

$$ImG_{\text{ret}}(\bar{x},\bar{x}',l,\omega)=\frac{1}{2}\,\frac{1}{(2\pi)\,4}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}ds\int d\bar{k}e^{is[\omega-W_l(\bar{k})-U(\bar{R})-e\bar{E}\bar{R}]+i\bar{k}\bar{r}}\times$$

$$\times\,e^{\mp\frac{i}{12}\frac{s^2}{2m_l}[\bar{\nabla}_{\bar{R}}U(\bar{R})+e\bar{E}]^2+S_l}, \tag{13}$$

здесь $\bar{r}=\bar{x}-\bar{x}'$; $\bar{R}=\frac{1}{2}(\bar{x}+\bar{x}')$; а в $S_l$ входят производные второго порядка от случайного поля. Знак минус перед предпоследним членом в экспоненте соответствует случаю $l=c$, знак плюс $l=v$.

Подставляя (13) в (11), возьмем сперва интеграл по $\omega'$:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\omega'\,\{n_F(\omega'-\omega;\mu_v)-n_F(\omega';\mu_c)\}\,e^{i(s+s')\omega'}=2\pi e^{i(s+s')\nu_+}\frac{\sin(s+s')\nu_-}{\beta\,\mathrm{sh}\,\frac{\pi(s+s')}{\beta}}.$$

Здесь

$$\nu_\pm=\frac{1}{2}(\omega+\mu_v\pm\mu_c),\ \beta=\frac{1}{kT}.$$

Так как нас будет интересовать коэффициент поглощения ниже «порога» ($\omega < \Delta$), то мы имеем по порядку величины $\nu_- \sim \frac{\Delta}{2}$. Как будет видно из дальнейшего, существенные значения $s$ будут порядка

$$s_0 = \min\left[\left(\frac{1}{9}\,\frac{\psi_2}{2\mu}\right)^{-1/3},\ \left(\frac{1}{12}\,\frac{(eE)^2}{2\mu}\right)^{-1/3}\right].$$

Требуя, чтобы

$$\Delta s_0 \gg 1 \quad \text{и} \quad kTs_0 \ll 1, \tag{14}$$

получим

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \left\{n_F(\omega' - \omega;\, \mu_v) - n_F(\omega';\, \mu_c)\right\} e^{i(s+s')\omega'} \cong 2\pi\,\delta(s + s'). \tag{15}$$

Используя тождество

$$e^{-\frac{i}{12}\,\frac{s^3}{2\mu}\,[\bar{\nabla}U]^2} \equiv \frac{1}{\pi^{3/2}} \int d\bar{q}\, e^{-q^2 - \sqrt{\frac{|s|^3}{6\mu}}\,(\bar{q}\,\bar{\nabla}U)\, e^{-i\frac{\pi}{4}\,\mathrm{sign}\, s}}, \tag{16}$$

выполним усреднение по случайному полю.

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2\Gamma}{(2\pi)^5\,\omega c\sqrt{\varepsilon}\;\Omega} \int d\bar{x} \int d\bar{x}'\, \frac{1}{\pi^{3/2}} \int d\bar{q}\, e^{-q^2} \int d\bar{k} \int d\bar{k}' \times$$

$$\times \int\limits_{-\infty}^{+\infty} ds\, e^{is[\omega - W_c(\bar{k}) - W_v(\bar{k}')] + i(\bar{k} - \bar{k}')\bar{r} - \frac{i}{12}\,\frac{s^3(eE)^2}{2\mu}}\, A(s, q), \tag{17}$$

где $A(s, q)$ дается выражением

$$A(s, q) \equiv \left\langle e^{-\frac{i}{6}\,\frac{s^3 e\,\bar{E}\,\bar{\nabla}U}{2\mu} - \sqrt{\frac{|s|^3}{6\mu}}\,(\bar{q}\,\bar{\nabla}U)\, e^{-i\frac{\pi}{4}\,\mathrm{sign}\, s} + S_c + S_v} \right\rangle =$$

$$= e^{-i\frac{s^3}{9}\,\frac{\psi_2}{2\mu}\,q^2 - \frac{s^6}{108}\,\frac{(eE)^2\psi_2}{(2\mu)^2} + e^{i\frac{\pi}{4}\,\mathrm{sign}\, s}\,\frac{|s|^{9/2}}{9\sqrt{3}}\,\frac{(\bar{q}e\,\bar{E})}{(2\mu)^{3/2}}\,\psi_2} \tag{18}$$

(Можно убедиться, что слагаемые в $S_c$ и $S_v$ в принятом приближении не дают вклада.)

В формуле (17) легко выполнить интегрирование по координатам $\bar{x}$ и $\bar{x}'$, надо лишь перейти к переменным $\bar{r} = \bar{x} - \bar{x}'$ и $\bar{R} = \frac{1}{2}(\bar{x} + \bar{x}')$. Таким образом, получаем $\delta$-функцию по $(\bar{k} - \bar{k}')$. Выполняя еще интегрирование по $\bar{q}$, получим

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2\Gamma}{(2\pi)^2\,\omega c\sqrt{\varepsilon}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} ds \int d\bar{k}\, \frac{1}{\left(1 + i\,\frac{s^3}{9}\,\frac{\psi_2}{2\mu}\right)^{3/2}} \times$$

$$\times\, e^{-is\left(\Delta - \omega + \frac{k^2}{2\mu}\right) - i\,\frac{\frac{s^3}{12}\,\frac{(eE)^2}{2\mu}}{1 + i\,\frac{s^3}{9}\,\frac{\psi_2}{2\mu}}}. \tag{19}$$

Случайное поле входит в (19) только в виде параметра $\psi_2$. Это есть выражение, показывающее, что чисто классическое приближение (производные от случайного поля вообще отбрасываются) недостаточно для вычисления проводимости.

Полагая в (19) $\bar{E}=0$ или $\psi_2=0$, получаем известные выражения для коэффициента поглощения только в случайном или только в постоянном поле.

Рассмотрим общее выражение (19) для $\hbar\omega<\Delta$.

1. $(eE)^2<\psi_2$ — слабые электрические поля (если

$$\frac{1}{9}\,\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\psi_2\sim 10\ \textit{Мэв},\ \mu\sim 10^{-27}\ \textit{г},\ \text{то}\ eE<10^5\ \textit{эв/см}).$$

Разлагая второе слагаемое в экспонентное в ряд по параметру $\frac{(eE)^2}{\psi_2}$ и учитывая лишь первый член по электрическому полю, имеем

$$\alpha(\omega)=\frac{2e^2\Gamma(2\mu)^{3/2}}{3\sqrt{3}\,\hbar^3\omega c\sqrt{\varepsilon}}\,e^{-\frac{\Delta-\hbar\omega}{\frac{\hbar^2}{18\mu}\psi_2^{1/3}}}\sqrt{\Delta-\hbar\omega}\left[1+\frac{e^2E^2}{6\psi_2}\,\frac{\Delta-\hbar\omega}{\left(\frac{\hbar^2}{18\mu}\psi_2\right)^{1/3}}\right],\tag{20}$$

здесь

$$\frac{\Delta-\hbar\omega}{\left(\frac{\hbar^2}{18\mu}\psi_2\right)^{1/3}}>1,\quad \frac{e^2E^2}{\psi_2}<1.\tag{20'}$$

При $\bar{E}\to 0$ выражение (20) аналогично такому же [1][1].

Из формулы (20) видно, что прямая $\ln\alpha(\omega)$ при включении электрического поля сдвигается на величину $\ln\left\{1+\frac{e^2E^2}{6\varphi_2}\,\frac{\Delta-\hbar\omega}{\left(\frac{\hbar^2}{18\mu}\psi_2\right)^{1/3}}\right\}$ в сторону длинных волн.

В случае, когда

$$\frac{e^2E^2}{\psi_2}\,\frac{\Delta-\hbar\omega}{\left(\frac{\hbar^2}{18\mu}\psi\right)^{1/3}}<1,\tag{20''}$$

этот сдвиг пропорционален квадрату электрического поля. (Неравенство (20″) не вытекает из (20′) и для вывода формулы (20) не требуется; оно, однако, хорошо выполняется для очень малых электрических полей.)

2. $(eE)^2>\psi_2$ — сильные электрические поля. В этом случае интеграл в (19) можно вычислить по методу перевала, если справедливы неравенства

$$\frac{\Delta-\hbar\omega}{\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}(eE)^2\right)^{1/3}}>1\ \text{и}\ \frac{\psi_2}{(eE)^2}\,\frac{(\Delta-\hbar\omega)^{3/2}}{\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}(eE)^2\right)^{1/2}}<1\tag{21'}$$

---

[1] В [1] $\psi_2$ определен с дополнительным множителем $\hbar^2/2\mu$, который в этой работе выделен из $\psi_2$.

(второе неравенство используется для приближенного нахождения перевальной точки).

Тогда получаем

$$\alpha(\omega) = \frac{e^3 E \Gamma_\mu}{2\hbar^2 \omega c \sqrt{\varepsilon}\,(\Delta - \hbar\omega)}\, e^{\frac{-4(2\mu)^{1/2}(\Delta-\hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar eE} + \frac{32\psi_2}{27(eE)^2}\frac{\mu'(\Delta-\hbar\omega)^3}{(\hbar eE)^2}}. \tag{21}$$

При $\psi_2=0$ выражение (21) переходит в известную формулу для эффекта Франца—Келдыша.

Второй член в экспоненте в (21′) может быть порядка единицы. Так, уже при $\psi_2 \sim (eE)^2 \frac{\hbar^2 (eE)^2}{\mu(\Delta - \hbar\omega)^3}$ коэффициент поглощения заметно увеличивается. Если можно доститчь в эксперименте больших значений электрических полей, $(eE)^2 > \psi_2$, то отсюда возникает возможность оценить параметр $\psi_2$.

В заключение выражаю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за постоянное внимание и помощь в работе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Bonch-Bruevich V. L. Phys. stat, sol., **42**, 35, 1970.
2. Келдыш Л. В. ЖЭТФ, **34**, 1138, 1958.
3. Franz W. Zs. Naturforsch., **13-a**, 484, 1958.
4. Бонч-Бруевич В. Л. ДАН СССР, **189**, 505, 1969; Z of Non-Crystalline Solids., **4**, 410—416, 1970.

Поступила в редакцию
8.7 1971 г.

Кафедра
полупроводников