

Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА



№ 3 — 1973



УДК 621.3

Б. ЭССЕР

К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОПОГЛОЩЕНИЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ (II)

Вычисляется коэффициент поглощения света $\alpha(\omega)$ неупорядоченного полупроводника, случайное поле которого создается заряженными примесными центрами (достаточно высокая компенсация), при наличии постоянного внешнего электрического поля. Получено представление для $\alpha(\omega)$ в виде интеграла, которое справедливо как при сильных, так и при слабых электрических полях. Приводятся кривые для $\alpha(\omega)$ вблизи «края поглощения» для разных электрических и примесных полей.

Введение

Рассмотрим неупорядоченный полупроводник, силовое поле которого можно разбить на регулярную часть, порождающую обычную зонную картину полупроводника, и случайную часть. В отличие от работы [1], где это случайное поле считалось везде гладким, в данной работе будет рассмотрено случайное поле, создаваемое заряженными примесными центрами (в частности это может быть примесное поле сильно легированного полупроводника). При этом пусть концентрация таких центров достаточно высока, так что $na_B^3 \gg 1$, где n — эффективная концентрация примеси, $n = \sum_t z_t^2 n_t$ (z_t — заряд примесного

центра t -того типа в единицах заряда электрона, n_t — концентрация таких центров), a_B — боровский радиус в кристалле $\left(a = \frac{\epsilon \hbar^2}{me^2}\right)$.

Будем предполагать компенсацию достаточно высокой, так что при низких температурах число свободных носителей мало (уровень Ферми лежит глубоко в запрещенной зоне). Экранировка данного примесного центра осуществляется тогда в основном окружающими его центрами и $n^{-1/3} < r_0 < a_B$, где r_0 — радиус экранирования.

Как показано в [2], случайное поле приводит к появлению экспоненциально убывающего в запрещенную зону хвоста коэффициента поглощения. С другой стороны, при наложении сильного электрического поля на кристаллический полупроводник в коэффициенте поглощения возникают при $\hbar\omega > \Delta$ (Δ — ширина запрещенной зоны) характерные осцилляции, а при $\hbar\omega < \Delta$ также появляется экспоненциально убывающий хвост (эффект Франца—Келдыша [3 и 4]). В данной работе вычисляется коэффициент поглощения в условиях, когда на элек-

трон действуют как случайное поле указанного типа, так и постоянное электрическое поле.

В дальнейшем мы будем предполагать температуру достаточно низкой:

$$T \ll \min \left[(na_B^3)^{2/5} W_B; \left(\frac{\hbar^2}{2m_c} e^2 E^2 \right)^{1/3} \right], \quad (1)$$

а ширину запрещенной зоны — достаточно большой:

$$\Delta \gg \max \left[(na_B^3)^{2/5} W_B; \left(\frac{\hbar^2}{2m_c} e^2 E^2 \right)^{1/3} \right]. \quad (2)$$

Здесь $(na_B^3)^{2/5} W_B$ и $\left(\frac{\hbar^2}{2m_c} e^2 E^2 \right)^{1/3}$ — характерные энергии, определяющие скорость убывания коэффициента поглощения по мере углубления в запрещенную зону при наличии только примесного или только постоянного электрического поля ($W_B = \frac{me^4}{2\hbar^2 e^2}$ — боровская энергия в кристалле).

Условия (2) означают, что зонный индекс остается хорошо определенным квантовым числом. Взаимодействием между электронами пренебрежем (оно может быть частично учтено в экранировке отдельного центра). В таких условиях для вычисления вещественной части проводимости $\text{Re} \sigma(\omega)$, связанной с междозонными переходами, можно пользоваться известным выражением:

$$\begin{aligned} \text{Re} \sigma(\omega) &= 8\pi \frac{e^2 \Gamma}{\hbar \omega \Omega} \int \bar{d}\bar{x} \int \bar{d}\bar{x}' \int d\omega' [n_F(\omega' - \omega) - n_F(\omega')] < \\ &< \text{Im} G_{\text{ret}}(\bar{x}, \bar{x}'; v; \omega' - \omega) \text{Im} G_{\text{ret}}(\bar{x}', \bar{x}; c; \omega) >. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\Gamma = \frac{1}{3} \left| \int U_c^* \hat{V} U_v \bar{d}\bar{x} \right|^2$, \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, Ω — объем образца, $G_{\text{ret}}(\bar{x}, \bar{x}'; l, \omega)$ — Фурье-образ запаздывающей функции Грина, отвечающей l -той зоне. Эта функция вычисляется с гамильтонианом

$$\hat{H}_l = \int \bar{d}\bar{x} \hat{a}^\dagger(\bar{x}, t) [W_l(-i\hbar \nabla_{\bar{x}}) + U(\bar{x}) + e\bar{E}\bar{x}] \hat{a}(\bar{x}, t), \quad (4)$$

где $U(\bar{x}) = \sum_{i,j} V_j(\bar{x} - \bar{R}_i)$, $V_j(\bar{x} - \bar{R}_i)$ — потенциальная энергия электрона

в точке \bar{x} в поле примесного центра j -того типа, расположенного в точке \bar{R}_i ; \bar{E} — напряженность постоянного электрического поля, $W_l(\bar{p})$ — закон дисперсии в l -той зоне (в чистом образце). В дальнейшем мы будем предполагать, что законы дисперсии простые квадратичные:

$$W_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}, \quad (5)$$

$$W_v(p) = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \quad (6)$$

(при расчете будем считать $m_c/m_v \ll 1$). Коэффициент поглощения в наших условиях можно вычислить по формуле

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{c\sqrt{\epsilon}} \operatorname{Re} \sigma(\omega), \quad (7)$$

где c — скорость света в пустоте, ϵ — вещественная часть диэлектрической проницаемости.

§ 1. Расчет коэффициента поглощения

Теперь вычислим функции Грина, входящие в (3). Функцию Грина можно представить в следующем виде:

$$G_{\text{ret}}(\bar{r}, \bar{R}; \omega) = i \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} ds e^{is\hbar\omega - \epsilon s} \hat{L} \delta(\bar{r}), \quad (8)$$

где мы перешли к новым координатам $\bar{r} = \bar{x} - \bar{x}'$, $\bar{R} = \frac{1}{2}(\bar{x} + \bar{x}')$, а \hat{L} есть следующий оператор:

$$\hat{L} = e^{-is[\hat{T}_{\bar{R}} + \hat{T}_{\bar{r}} + W(\bar{R}, \bar{r})]}, \quad (9)$$

здесь

$$\hat{T}_{\bar{R}} = -\frac{\hbar^2}{8m} \Delta_{\bar{R}}, \quad \hat{T}_{\bar{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\bar{r}} \quad \text{и}$$

$$W(\bar{R}, \bar{r}) = \frac{1}{2} \left[U\left(\bar{R} + \frac{\bar{r}}{2}\right) + U\left(\bar{R} - \frac{\bar{r}}{2}\right) \right] + eE\bar{R}.$$

Для вычисления функции Грина в (8) мы будем пользоваться схемой расчета работы [2], обобщив ее на случай присутствия постоянного электрического поля. Этим подходом можно хорошо описать электронные состояния не слишком глубоко в запрещенной зоне. С другой стороны, в этой области плотность состояний еще достаточно велика, чтобы давать заметный вклад в межзонное поглощение, которое мы рассматриваем. Содержание этого подхода заключается в следующем: при вычислении действия оператора \hat{L} (9) на $\delta(\bar{r})$ в (8) суммируются все члены типа $\Delta_{\bar{R}}^n U$, после чего можно получить везде регулярную потенциальную энергию, не имеющую кулоновских особенностей в точках расположения примесных центров. По такой «перенормированной» потенциальной энергии можно выполнять квазиклассическое разложение, если справедливо неравенство:

$$\frac{1}{(\pi a_B^3)^{2/3}} \left(\frac{a_B}{r_0} \right)^2 < 1. \quad (10)$$

Мы будем учитывать производные от «перенормированной» случайной потенциальной энергии порядка не выше второго. Оказывается, что учет постоянного электрического поля не приводит к новым ограничениям. Неравенство (10) обеспечивает и малость смешанных членов высшего порядка, содержащих как постоянное, так и случайное поле.

Соответствующие вычисления упрощаются, если считать $\frac{m_c}{m_v} \ll 1$ и перейти к пределу $m_v \rightarrow \infty$. Таким образом, для функции Грина валентной зоны мы получим

$$G_{\text{ret}}(\bar{r}, \bar{R}; v; \omega) = i \frac{\hbar}{2\pi} \delta(\bar{r}) \int_0^{\infty} ds \exp \left[is(\hbar\omega - e\bar{E}\bar{R} + \Delta) - \right. \\ \left. - i \int_0^s d\lambda \int d\bar{q} e^{i\bar{q}\bar{R}} U'(\bar{q}, \lambda, m_v) \Big|_{m_v \rightarrow \infty} \right], \quad (11)$$

а для функции Грина зоны проводимости имеем

$$G_{\text{ret}}(\bar{r}, \bar{R}; c; \omega) = i \frac{\hbar}{(2\pi)^+} \int_0^{\infty} ds \int d\bar{k} \exp \left\{ is \left(\hbar\omega - e\bar{E}\bar{R} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \right) - \right. \\ \left. - i \frac{s^3}{12} \frac{\hbar^2}{2m_c} (eE)^2 - i \int_0^s d\lambda \int d\bar{q} \left[e^{i\lambda^2} \frac{\hbar^2}{8m_c} \bar{B} \left[\bar{E} + \int d\bar{x} e^{i\bar{x}\bar{R}} U'(\bar{x}, \lambda, 2m_c) \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + i\lambda^2 \frac{\hbar^2}{8m_c} \bar{q}\bar{E} \right] e^{i\bar{q}\bar{R}} U'(\bar{q}, \lambda, m_c) \right\}.$$

Здесь $U'(\bar{q}, \lambda, m) = e^{i\lambda^2} \frac{\hbar^2 q^2}{4m} U(\bar{q})$ — Фурье-образ «перенормированной» потенциальной энергии.

Подставим (11) и (12) в (3). С помощью неравенства (1) интегрирование по ω' выполняется легко:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' [n_F(\omega' - \omega) - n_F(\omega')] e^{i(s'+s)\omega'} \cong 2\pi\delta(s + s').$$

Усреднение по случайному полю в (3) выполним, считая все положения \bar{R}_i данного примесного центра в образце равновероятными:

$$\langle \dots \rangle = \prod_t \frac{1}{\Omega} N_t \int d\bar{R}_1 \dots d\bar{R}_t \dots$$

Здесь N_t — число примесных центров данного типа, $n_t = \frac{N_t}{\Omega}$. Произведя вычисления, найдем следующее выражение для коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ (7):

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 \Gamma}{2\pi^2 \omega c \sqrt{\varepsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \int d\bar{k} \exp \left[-is \left(\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} - \hbar\omega \right) - F(s) \right], \quad (13)$$

где

$$F(s) = \frac{i}{12} s^3 (\hbar\theta)^3 + 5,1 (1 + i \operatorname{sig} ns) |s|^{3/2} W_0^{5/2} + 0,12 (1 - i \operatorname{sig} ns) |s|^{11/2} W^{11/2}. \quad (14)$$

Здесь введены обозначения:

$$\theta^3 = \frac{e^2 E^2}{2m_c \hbar}, \quad (15, a)$$

$$W_0^{5/2} = (na_B^3) W_B^{5/2}, \quad (15, б)$$

$$W^{1/2} = (na_B^3) W_B^{7/2} (eEa_B)^2. \quad (15,в)$$

(Числа 5,1 и 0,12 в (14) появились после взятия элементарных интегралов.)

Обратим внимание на то обстоятельство, что смешанный член (15,в) оказался просто произведением двух других характерных энергетических параметров (15,а) и (15,б). Согласно (13) электрические поля будут относительно сильными при $E > E_{пр}$ и слабыми при $E < E_{пр}$, где

$$eE_{пр} = (na_B^3)^{3/5} \frac{W_B}{a_B} \quad (16)$$

характерное примесное поле.

Выполнив в (13) предельный переход $E \rightarrow 0$, получим результат работы [2], а положив $(na_B^3) W_B^{5/2} \rightarrow 0$ — известное выражение для коэффициента электропоглощения через функции Эйри:

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2\Gamma(2m_c)^{3/2}}{\hbar^3\omega c \sqrt{\epsilon}} (\hbar\theta)^{1/2} [A_i^{12}(x) - xA_i^2(x)] \Big|_{x=\frac{\Delta-\hbar\omega}{\hbar\theta}} \quad (17)$$

Отметим, однако, что, хотя формально можно выполнять предельный переход $(na_B^3) W_B^{5/2} \rightarrow 0$ в (13), абсолютная величина примесного поля в нашей задаче не может быть сколь угодно малой, так как для него должно выполняться неравенство $na_B^3 > 1$. Выполнение такого предельного перехода имеет смысл лишь при относительной малости примесного поля $E_{пр} \ll E$. В таком случае ход коэффициента электропоглощения такой же, как в чистом образце, и дается формулой (17).

После выполнения интегрирования по \bar{k} в (13) и интегрирования по частям по переменной s получаем два представления для $\alpha(\omega)$, сделав еще замены $s = \frac{t}{W_0}$ или $s = \frac{t}{\hbar\theta}$:

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2\Gamma(2m_c)^{3/2}}{\hbar^3\omega c \sqrt{\epsilon}} \delta_l^{1/2} I_l(\omega), \quad (18)$$

где

$$I_l(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{1/2}} e^{it \frac{\Delta-\hbar\omega}{\delta_l} + F\left(\frac{t}{\delta_l}\right)} \left[-i \frac{\Delta-\hbar\omega}{\delta_l} + F'\left(\frac{t}{\delta_l}\right) \right], \quad (19)$$

$$al = 1, 2; \quad \delta_1 = W_0 \text{ и } \delta_2 = \hbar\theta.$$

В представлении $l = 1$ $\alpha(\omega)$ является функцией двух параметров $\frac{\Delta-\hbar\omega}{W_0}$ и $\left(\frac{\hbar\theta}{W_0}\right)^3$ (это следует из (14), (15, а) — (15, в)). Это представление удобно для случая фиксированного характерного примесного поля (16) и разных постоянных электрических полей, т. е. для рассмотрения электропоглощения одного и того же образца в разных электрических полях. В представлении $l = 2$ $\alpha(\omega)$ является функцией двух параметров $\frac{\Delta-\hbar\omega}{\hbar\theta}$ и $\left(\frac{W_0}{\hbar\theta}\right)^{3/2}$.

Это представление в свою очередь удобно для случая фиксированного электрического поля и разных характерных примесных полей, т. е. рассматривается поглощение разных образцов в одном и том же постоянном электрическом поле.

Интегралы (19) вычислялись на машине. Результаты счета обсуждаются в следующем параграфе.

§ 2. Результаты счета

Вычисление $I_1(\omega)$. Интеграл вычислялся при $4 \geq \frac{\Delta - \hbar\omega}{W_0} \geq -4$ для разных значений постоянного электрического поля, последнее входит в $I_1(\omega)$ через параметр $\lambda \equiv \left(\frac{\hbar\theta}{W_0}\right)^3 = \left(\frac{E}{E_{пр}}\right)^2$, так что $E = \sqrt{\lambda} E_{пр}$ (сравни (16)).

График $I_1^{(0)}(\omega)$ для $\lambda = 0$ (электрическое поле отсутствует, результат работы [2]) изображен на рис. 1. В интервале $0 < \lambda < 1$ разность $I_1(\omega) - I_1^{(0)}(\omega) < 0,5 \cdot 10^{-3}$, слабое электрическое поле мало меняет поглощение. На рис. 2 изображены графики $[I_1(\omega) - I_1^{(0)}(\omega)] \frac{10^3}{6,4}$ для значений пара-

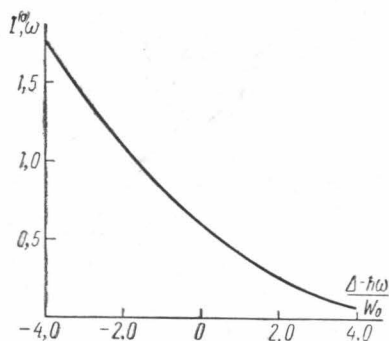


Рис. 1. Коэффициент поглощения (18) в случае отсутствия электрического поля, $E = 0$

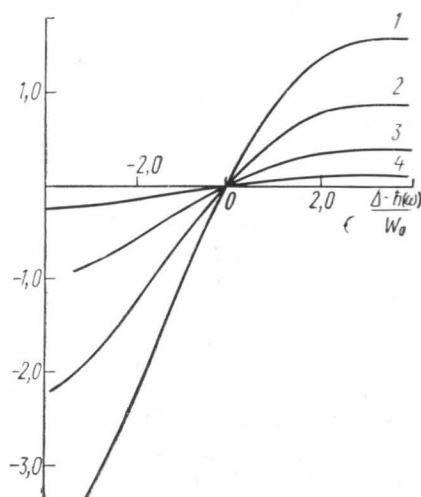


Рис. 2. Изменение коэффициента поглощения (18) при наложении постоянного электрического поля E и фиксированного характерного примесного поля $E_{пр}$ (16). 1 — $\lambda = 16$, 2 — $\lambda = 9$, 3 — $\lambda = 4$ и 4 — $\lambda = 1$

метра λ : $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 4$, $\lambda_3 = 9$ и $\lambda_4 = 16$. Видно, что сильное электрическое поле увеличивает поглощение «на хвосте» и уменьшает его «в зоне». На данной частоте, исключая малую область вокруг $\Delta - \hbar\omega$, соответствующее смещение примерно пропорционально параметру λ , т. е. квадрату электрического поля. В области хвоста на отрезке $4 \geq \frac{\Delta - \hbar\omega}{W_0} \geq 2,8$ оно хорошо¹ описывается формулой $I_1(\omega) - I_1^{(0)}(\omega) = 0,64 \cdot 10^{-3} \left(\frac{E}{E_{пр}}\right)^2$.

Вычисление $I_2(\omega)$. Интеграл вычислялся при $4 \geq \frac{\Delta - \hbar\omega}{\hbar\theta} \geq -4$ для разных значений примесного поля, входящего в $I_2(\omega)$ через параметр $\mu \equiv \left(\frac{W_0}{\hbar\theta}\right)^{5/2} = na_B^3 \left(\frac{W_B}{eEa_B}\right)^{5/2}$. В этом случае $E_{пр} = \mu^{2/5} E$.

¹ Относительная ошибка $I_1(\omega) - I_1^{(0)}(\omega)$ тогда меньше 7%.

На рис. 3 изображены кривые для значений параметра μ : $\mu_1 = 1$ (эта кривая совпадает с той для $\lambda = 1$); $\mu_2 = 0,32$ ($\mu_2^{3/5} = \frac{1}{2}$); $\mu_3 = 0,16$ ($\mu_3^{3/5} = \frac{1}{3}$); $\mu_4 = 0,10$ ($\mu_4^{3/5} = \frac{1}{4}$).

Как видно, «уменьшение» примесного поля довольно заметно скачивается на ходе коэффициента поглощения, приводя ко все более крутому подъему последнего. На том же рисунке приведены частично кривые для значений параметра μ : $\mu_5 = 10^{-2}$ ($\mu_5^{3/5} = \frac{1}{16}$) и $\mu = 0$ (эта кривая получена из (17) с помощью таблицы для функции Эйри). В верхней части кривой $\mu_5 = 10^{-2}$ появляется характерная для эффекта Франца—Келдыша структура (осцилляции), которая еще более четко видна на кривой $\mu_6 = 0,47 \cdot 10^{-2}$ ($\mu_6^{3/5} = \frac{1}{25}$). Эта ситуация изображена на рис. 4. Для сравнения показана соответствующая кривая для $\mu = 0$.

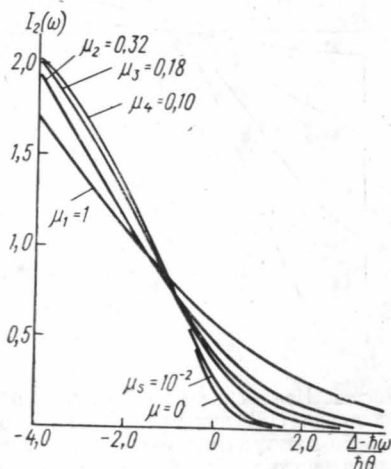


Рис. 3. Коэффициент поглощения (18) в случае фиксированного постоянного электрического поля E и разных характерных примесных полей $E_{пр} = E_{пр3/5}E$

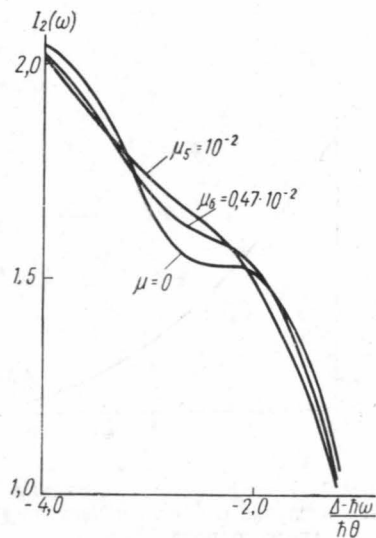


Рис. 4. Появление характерных для эффекта Франца — Келдыша осцилляций в коэффициенте поглощения при уменьшении примесного поля

Автор признателен В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и постоянное внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Эссер Б. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 12, № 2, 1973.
2. Bonch-Bruевич V. L. «Phys. stat. sol.», 42, 35, 1970.
3. Келдыш Л. В. ЖЭТФ, 34, 1138, 1958.
4. Franz W. «Zs. Naturforsch», 13-a, 484, 1958.

Поступила в редакцию
6.10 1971 г.

Кафедра
полупроводников