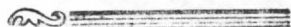


Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА



№ 5 — 1974



УДК 539.293.60.13

В. М. ЯРЦЕВ

К ТЕОРИИ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ОДНОИМЕННО ЗАРЯЖЕННЫМИ ПРИМЕСНЫМИ ЦЕНТРАМИ

Рассчитан коэффициент оптического поглощения при ионизации одноименно заряженных примесных центров. Рассмотрено влияние электрического поля на поглощение света с энергией кванта, меньшей энергии ионизации ловушки.

Изучение свойств полупроводников с примесными центрами, создающими глубокие уровни, представляет значительный интерес, так как именно такие примесные атомы оказываются эффективными центрами рекомбинации [1]. Надежной модели таких примесных центров до сих пор не существует. В ряде расчетов (см., например, [2]) предполагается, что радиус локализации волновой функции дискретного состояния много меньше всех других характерных расстояний в задаче. Следствием такой аппроксимации является, как правило, необходимость введения феноменологических параметров для удовлетворительного согласования с экспериментом, так как при этом пренебрегают влиянием «хвостов» волновых функций дискретного спектра.

Учет этого влияния, особенно в процессах с участием свободных носителей заряда, может оказаться существенным. В этом случае физически более оправданной кажется модель Луковского [3], согласно которой потенциал примесного центра аппроксимируется трехмерной δ -функцией. Действительно, при переходах из состояний дискретного спектра в непрерывный и наоборот, характерная длина волны носителей заряда в зоне много больше постоянной решетки, и, следовательно, при таких переходах точная структура силового поля примесного центра на малых расстояниях вряд ли может быть существенной. В [4] модель Луковского была обобщена для случая безызлучательного захвата и одноименно заряженных центров. Это обобщение использовано ниже для расчета коэффициента оптического поглощения в таких системах.

Сильное внешнее электрическое поле меняет оптические характеристики полупроводников. В [5] рассмотрено влияние поля на коэффициент межзонного поглощения, в [6] исследовано электропоглощение на нейтральных центрах, описываемых дельтообразным потенциалом. В настоящей работе явно вычислен коэффициент поглощения света с энергией кванта, меньшей энергии ионизации ловушки, для одноименно

заряженных центров. Результат оказывается существенно зависящим от взаимной ориентации электрического поля и поляризации падающего излучения.

Вычисление коэффициента оптического поглощения

Рассмотрим переход носителя заряда из локализованного состояния на одноименно заряженном примесном центре в непрерывный спектр при поглощении кванта света. Для определенности будем говорить

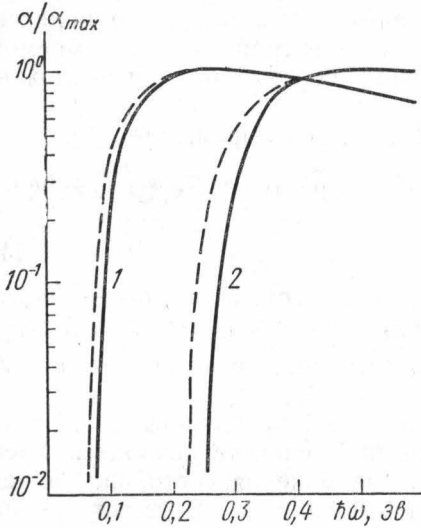


Рис. 1. Влияние взаимодействия с акустическими фононами на вид спектров поглощения (бесфононные кривые показаны пунктиром): 1 — $\lambda=0,04$ эв, $z=2$; 2 — $\lambda=0,2$ эв, $z=1$

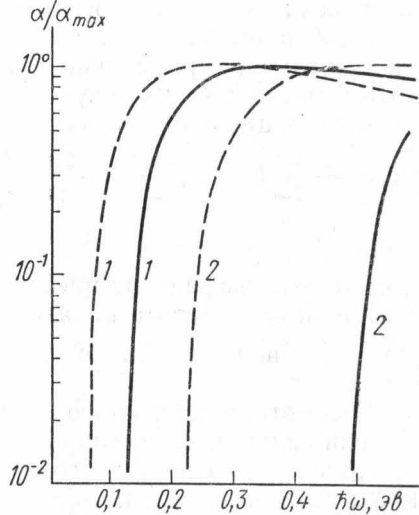


Рис. 2. Влияние взаимодействия с оптическими фононами на вид спектров поглощения. Обозначения те же, что на рис. 1

о переходе электрона в зону проводимости в поле отрицательно заряженного центра (например, при реакциях $Au^+ + \hbar\omega \rightarrow Au^0 + e^-$, $Au^+ + \hbar\omega \rightarrow Au^+ + e^-$ в Ge). Запишем потенциальную энергию электрона в поле такого центра в виде

$$V(\mathbf{r}) = -v_0 \delta(\mathbf{r}) + \frac{Ze^2}{\epsilon r}. \quad (1)$$

В [4] получены волновые функции электрона для дискретного и непрерывного спектров

$$\psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = N_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}, l} \frac{\psi_{\mathbf{k}, l}^{*}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}, l}(\mathbf{r})}{W_{\mathbf{k}, l} - \lambda}, \quad (2)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{\pi}{2k a_B}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{k a_B}\right) e^{i \mathbf{k} \mathbf{r}} F\left(\frac{i}{k a_B}, 1, -i(kr + \mathbf{k} \mathbf{r})\right). \quad (3)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор электрона в непрерывном спектре, l — номер энергетической зоны, $|\lambda|$ — глубина уровня, отсчитанная от дна

зоны проводимости $a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{z m e^2}$, Z — заряд центра в единицах $|e|$, m — эффективная масса электрона, $N_\lambda = 2 \sqrt{6\pi} \left(\frac{\hbar^2 W_B^{1/3}}{2m} \right)^{3/4}$, где $W_B = \frac{m Z^2 e^4}{2 \epsilon^2 \hbar^2}$.

Множитель Блоха $u_k^j(\mathbf{r})$ нормирован так, что $\int_V u_k^*(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$,

где V — объем кристалла. Функции $\psi_{k,e}(\mathbf{r})$ суть решения типа (3) для случая, когда в выражении (1) для потенциальной энергии нет члена с δ -функцией. Эти функции составляют полную систему, по которой происходит разложение. Однако из структуры выражения (2) видно, что фактически достаточно ограничиться значениями $e=c, v$, где индексы c и v соответствуют зоне проводимости и валентной зоне, понимаемой как дырочная. При сильно асимметричном положении уровня можно учитывать лишь ближайшую зону.

Коэффициент оптического поглощения дается выражением

$$\alpha = \frac{n}{c} \sum_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}}) \sum_{\lambda} n_{\lambda} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m_0^2} \frac{2\pi\hbar}{\epsilon\omega V} |(\xi, (\mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | \lambda))|^2 \delta(W_{\mathbf{k}} + |\lambda| - \hbar\omega). \quad (4)$$

Здесь n — коэффициент преломления, c — скорость света, m_0 — масса электрона, ω — частота падающего света, ξ — орт поляризации, $n_{\mathbf{k}}, n_{\lambda}$ — функции заполнения соответствующих состояний, $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса.

Рассмотрим ионизацию с одного уровня в запрещенной зоне, когда ловушки заняты, а состояния в непрерывном спектре свободны. Учет нескольких уровней и другого характера заполнения состояний может быть проведен обычным образом с использованием соответствующих функций распределения. У кубического кристалла нет выделенных направлений, поэтому как для поляризованного, так и для неполяризованного света коэффициент поглощения

$$\alpha = \frac{n}{c} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m_0^2} \frac{2\pi\hbar}{\epsilon\omega} N_t \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{3} |(\mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | \lambda)|^2 \delta(W_{\mathbf{k}} + |\lambda| - \hbar\omega), \quad (5)$$

где N_t — концентрация примесных центров. Для уровня, лежащего вблизи зоны проводимости, в выражении (2) можно положить $l=c$ и записать матричный элемент перехода

$$(\mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | \lambda) = e^{-\frac{\pi}{2ka_B}} \Gamma \left(1 - \frac{i}{ka_B} \right) N_\lambda \frac{u_{\mathbf{k}}^*(0)}{W_{\mathbf{k}} + |\lambda|} \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \left(\frac{m_0}{m} + 1 \right). \quad (6)$$

Для сферических изоэнергетических поверхностей

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (7)$$

переходя в выражении (5) от суммирования к интегрированию и заменяя $|u_{\mathbf{k}}(0)|^2$ на V^{-1} , получим

$$\alpha = 16\pi^2 N_t a_B^2 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{n} \left(\frac{m}{m_0} + 1 \right)^2 \frac{(\hbar\omega - |\lambda|) W_B^2}{(\hbar\omega)^3} \times \left[\exp \left(\frac{2\pi\hbar}{a_B \sqrt{2m(\hbar\omega - |\lambda|)}} \right) - 1 \right]^{-1}. \quad (8)$$

Влияние внешнего электрического поля

В сильном электрическом поле в непрерывном спектре не будет стационарных состояний и вместо $\psi_{\mathbf{k}, e}(\mathbf{r})$ следует рассматривать функцию [7]

$$\psi_{\mathbf{k}, l}(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t W_i \left(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} E t \right) dt \right\} \psi_{\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} E t, e}(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Легко показать, что волновую функцию дискретного состояния можно по-прежнему брать в виде (2) при выполнении условия

$$\frac{\sqrt{m}}{e\hbar E} |\lambda|^{\frac{3}{2}} \gg 1. \quad (10)$$

Будем исходить из выражения для вероятности поглощения кванта света

$$\omega(\mathbf{k}, \omega, t) = \left(\frac{e}{m_0} \right)^2 \frac{2\pi\hbar}{\epsilon\omega v} \left| \int_0^t dt \int d\tau \varphi_{\mathbf{k}, e}^*(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} \xi \nabla \psi_{\lambda}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (11)$$

которое связано с коэффициентом поглощения

$$\alpha = \frac{4\pi}{nc} \int dk \frac{d\omega(k, \omega, t)}{dt}. \quad (12)$$

Так как волновая функция непрерывного спектра зависит от времени, то δ -функция зависит от энергии как в выражении (4) уже не будет, и станут возможными переходы в непрерывный спектр под действием света, энергия кванта которого меньше энергии ионизации электрона. Как и в работе [5], интеграл по t в выражении (11) вычислим методом перевала, используя волновые функции (2), (9). Пусть поле \mathbf{E} направлено вдоль оси x . Положим $k'_x = k_x - \frac{eE}{\hbar} t$. Перевальная точка k'_{x_0} определяется из условия

$$W_c(k'_{x_0}, k_y, k_z) + |\lambda| - \hbar\omega = 0. \quad (13)$$

Для $\hbar\omega > |\lambda|$ k'_{x_0} — действительное число. При

$$\frac{\sqrt{m}}{e\hbar E} (\hbar\omega - |\lambda|)^{\frac{3}{2}} \gg 1 \quad (14)$$

коэффициент поглощения одинаков для различных поляризаций падающего излучения и не зависит от напряженности внешнего поля и совпадает с выражением (8).

Для $\hbar\omega < |\lambda|$ при законе дисперсии (7) получим

$$k'_{x_0} = i \left[\frac{2m}{\hbar^2} (|\lambda| - \hbar\omega) + k_y^2 + k_z^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

Подставляя это значение в выражение (6) для матричного элемента и вычисляя интеграл по \mathbf{k} , получим для параллельного и перпендикулярного расположения векторов \mathbf{E} и ξ соответственно

$$\alpha_{11} = 6\pi \frac{1}{n} \frac{e^2}{\hbar c} N_i a_B^2 \left[\Gamma \left(1 + \frac{1}{a_B \sqrt{\eta}} \right) \right]^2 \left(\frac{m}{m_0} + 1 \right)^2 \frac{e E a_B}{\hbar \omega} \left(\frac{\omega_B}{\hbar \omega} \right)^2 \times \\ \times \exp \left(-\gamma \eta^{\frac{3}{2}} \right), \quad (16)$$

$$\alpha_{\perp} = 4\pi \frac{1}{n} \frac{e^2}{\hbar c} N_i a_B^2 \left[\Gamma \left(1 + \frac{1}{a_B \sqrt{\eta}} \right) \right]^2 \left(\frac{m}{m_0} + 1 \right)^2 \frac{e E a_B}{\hbar \omega} \times \\ \times \left(\frac{\omega_B}{\hbar \omega} \right)^2 \left\{ \frac{\exp \left(-\gamma \eta^{\frac{3}{2}} \right)}{\gamma \eta^{\frac{3}{2}}} - \gamma^{-\frac{1}{3}} \eta^{-\frac{1}{2}} \Gamma \left(\frac{1}{3}, \gamma \eta^{\frac{3}{2}} \right) \right\}, \quad (17)$$

где

$$\eta = \frac{2m}{\hbar^2} (|\lambda| - \hbar \omega); \quad \gamma = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{e \hbar E} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Эти формулы, как и сам метод перевала, применимы при $x = \gamma \eta^{\frac{3}{2}} \gg 1$, т. е. при

$$\frac{\sqrt{m}}{e \hbar E} (|\lambda| - \hbar \omega)^{\frac{3}{2}} \gg 1. \quad (18)$$

Раскладывая в выражении (16) неполную гамма-функцию по степеням $1/x$, получим

$$\frac{\alpha_{\perp}}{\alpha_{\parallel}} \simeq \frac{1}{3x}. \quad (19)$$

Большее поглощение для продольно поляризованного света было и в случае межзонных переходов [8], так как под действием электрического поля наиболее эффективно туннелируют в глубь запрещенной зоны и, следовательно, дают основной вклад в сдвиг края поглощения электроны с малыми значениями компонентов квазиимпульса перпендикулярных полю. В данном случае этот эффект проявляется сильнее, так как параллельно происходит уменьшение кулоновского барьера в направлении внешнего электрического поля.

В заключение благодарю В. Л. Бонч-Бруевича за постоянную помощь и полезные обсуждения, А. Г. Миронова и И. П. Звягина за ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л., Ландсберг Е. Г. Phys. Stat. Sol., 29, 9, 1968.
2. Тимашев С. Ф. «Физика твердого тела», 14, 171, 1972.
3. Lucovsky G. Sol. St. Comm., 3, 299, 1965.
4. Бонч-Бруевич В. Л. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астроном., 12, 586, 1971 и 12, 631, 1971.
5. Келдыш Л. В. ЖЭТФ, 34, 1138, 1958.
6. Виноградов В. С. «Физика твердого тела», 13, 3266, 1971.
7. Houston V. W. Phys. Rev., 57, 184, 1940.
8. Буляница Д. С. «Вестн. Ленингр. ун-та», № 10, 20, 1959.

Поступила в редакцию
19.9 1972 г.

Кафедра
физики полупроводников