

В. М. ЯРЦЕВ

## К ТЕОРИИ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ГЛУБОКИМИ УРОВНЯМИ В ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ

Вычислено влияние взаимодействия электронов с акустическими и оптическими фононами на вид спектра поглощения в полупроводниках с одноименно заряженными примесными центрами.

В предыдущей работе [1] спектр оптического поглощения в полупроводниках, содержащих одноименно заряженные примесные центры, был рассчитан в приближении жесткой решетки. Изменение положений равновесия примесных атомов при фотопереходе должно влиять на спектр нормальных кристаллических колебаний. Ниже проводится оценка влияния как акустических, так и оптических мод колебаний на форму спектра примесного поглощения. Расчеты проведены для псевдопотенциала [2], который является обобщением модели Луковского [3] на случай одноименно заряженных центров. Энергетические зоны предполагаются изотропными, спектр акустических фононов считается дебаевским. В качестве энергии взаимодействия носителей заряда с фононами взят обычный изотропный потенциал деформации. Для определенности будем рассматривать переход электрона в зону проводимости.

### Взаимодействие с акустическими фононами

В адиабатическом приближении (см., например, обзор [4]) коэффициент поглощения для кубического кристалла равен

$$\alpha = \left[ \left( \frac{E_{\text{эфф}}}{E_0} \right)^2 \frac{1}{n} \right] \frac{4\pi^2 e^2 N \lambda}{3c m_0^2 \omega} \sum' A_{\nu}(n_{\mathbf{q}}) \sum_{\mathbf{q}} \left| (\mathbf{k} | \mathbf{p} | \lambda) \prod_{\mathbf{q}} \langle n'_{\mathbf{q}} | n_{\mathbf{q}} \rangle \right|^2. \quad (1)$$

Здесь  $E_{\text{эфф}}/E_0$  — отношение действующего на электрон электрического поля к среднему полю в кристалле;  $n$  — коэффициент преломления,  $c$  — скорость света;  $m_0$  — масса электрона;  $\omega$  — частота падающего света;  $N$  — концентрация исследуемых примесных центров;  $\mathbf{k}$  — квазиволновой вектор электрона в непрерывном спектре;  $(\mathbf{k} | \mathbf{p} | \lambda)$  — матричный элемент оператора импульса для перехода «ловушка — зона»;  $\mathbf{q}$  — волновой вектор нормального колебания с частотой  $\omega_{\mathbf{q}}$ ;  $n_{\mathbf{q}}$ ,  $n'_{\mathbf{q}}$  —

квантовые числа, соответствующие нормальному колебанию с вектором  $\mathbf{q}$  до и после перехода, символ  $A_v(n_q)$  означает усреднение по всем начальным состояниям системы. Суммирование по конечным состояниям  $n'_q$  происходит при условии сохранения энергии:

$$\sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (n'_q - n_q) = \hbar \omega - (\omega_{\mathbf{k}} + \lambda), \quad (2)$$

где  $\omega_{\mathbf{k}}$  — энергия электрона в зоне проводимости, отсчитанная от дна зоны,  $\lambda$  — энергия ионизации ловушки

$$\langle n'_q | n_q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{n'_q}(x_q - x_{qk}^{\circ}) \Phi_{n_q}(x_q - x_{q\lambda}^{\circ}) dx_q, \quad (3)$$

где  $\Phi$  — волновая функция нормального осциллятора,  $x_q$  — безразмерные нормальные координаты,  $x_{qk}^{\circ}$ ,  $x_{q\lambda}^{\circ}$  — равновесные координаты центра, когда электрон находится соответственно в зоне проводимости и на ловушке.

Как обычно, можем переписать равенство (1) в виде

$$\alpha = \left[ \left( \frac{E_{\text{эфф}}}{E_0} \right)^2 \frac{1}{n} \right] \frac{4\pi^2 e^2 N_{\lambda}}{3c m_0^2 \omega} \sum_{n'_q} A_v(n'_q) \sum_{\mathbf{k}} |(\mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | \lambda) \prod_{\mathbf{q}} \times \\ \times \langle n'_q | n_q \rangle|^2 \delta \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (n'_q - n_q) + \omega_{\mathbf{k}} + \lambda - \hbar \omega \right\}. \quad (4)$$

Перейдем к безразмерному аргументу  $\delta$ -функции, полагая

$$\delta \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (n'_q - n_q) + \omega_{\mathbf{k}} + \lambda - \hbar \omega \right\} = \\ = \frac{1}{\hbar \omega_0} \delta \left[ \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_0} (n'_q - n_q) - \frac{\hbar \omega - (\omega_{\mathbf{k}} + \lambda)}{\hbar \omega_0} \right], \quad (5)$$

где  $\omega_0$  — произвольная величина, имеющая размерность частоты.

Выберем  $\omega_0$  столь малым, что  $\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_0}$  и  $\frac{\hbar \omega - (\omega_{\mathbf{k}} + \lambda)}{\hbar \omega_0} = p$  были целыми числами. Тогда, как показано в работе [5],

$$\alpha = \left[ \left( \frac{E_{\text{эфф}}}{E_0} \right)^2 \frac{1}{n} \right] \frac{4\pi^2 e^2 N_{\lambda}}{3c m_0^2 \omega} A_v(n_q) \sum_{\mathbf{k}} |(\mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | \lambda) \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{\hbar \omega_0} \cdot \Phi \frac{P(z) dz}{z^{p+1}}, \quad (6)$$

где

$$P(z) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 \left( n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 \left[ (n_{\mathbf{q}} + 1) z^{\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_0}} + n_{\mathbf{q}} z^{-\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_0}} \right] \right\}, \quad (7)$$

$$\Delta_{\mathbf{q}} = x_{qk}^{\circ} - x_{q\lambda}^{\circ}. \quad (8)$$

Усреднение по начальным состояниям сводится к замене их равновесными значениями

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e \frac{\hbar \omega_q}{T-1}}, \quad (9)$$

где  $T$  — температура в энергетических единицах.

Вычисляя контурный интеграл методом перевала, для коэффициента поглощения получим

$$\alpha = \left[ \left( \frac{E_{\text{эфф}}}{E_0} \right)^2 \frac{1}{n} \right] \frac{4\pi^2 e^2 N_\lambda}{3c m_0^2 \omega} \sum_{\mathbf{k}} |(\mathbf{k}|\hat{\rho}|\lambda)|^2 \sqrt{\frac{2\pi}{\Phi_p''(y_0)}} e^{\Phi_p(y_0)}, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_p(y_0) &= -\frac{\hbar \omega - (\omega_{\mathbf{k}} + \lambda)}{\hbar s} y_0 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 [(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{y_0 q} + n_{\mathbf{q}} e^{-y_0 q} - 2n_{\mathbf{q}} - 1], \\ \Phi_p''(y_0) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 \omega_{\mathbf{q}}^2 [(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{y_0 q} + n_{\mathbf{q}} e^{-y_0 q}], \end{aligned} \quad (11)$$

$y_0$  — корень уравнения.

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}} [(n_{\mathbf{q}} + 1) e^{y_0 q} - n_{\mathbf{q}} e^{-y_0 q}] = \hbar \omega - (\omega_{\mathbf{k}} + \lambda). \quad (12)$$

Координаты равновесного состояния можно найти, используя невозмущенные волновые функции электрона соответственно для дискретного и непрерывного спектров:

$$x_{\mathbf{q}}^{\circ} = -\frac{1}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}} \int \psi^*(\mathbf{r}) A_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (13)$$

Для обычного изотропного потенциала деформации

$$A_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \frac{iE_1}{\sqrt{G}} q \sqrt{\frac{\hbar}{M \omega_{\mathbf{q}}}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (14)$$

где  $E_1$  — константа потенциала деформации,  $G$  — число элементарных ячеек,  $M$  — масса атома.

Используем выражения для волновых функций и матричного элемента, полученные для модельного потенциала одновременно заряженного примесного центра в работе [2].

При

$$2\pi \left( \frac{\omega_B}{\lambda} \right)^3 > 1, \quad \frac{\hbar \omega_m}{\pi \sqrt{8mS^2 \omega_B}} < 1 \quad (15)$$

легко находим

$$\Delta_{\mathbf{q}}^2 = \frac{0,285}{\hbar^2 s^2} E_1^2 a_B^2 \frac{m v_0}{M V} \frac{\omega_B}{\hbar s q}. \quad (16)$$

Здесь  $s$  — скорость звука в кристалле,  $v_0$  — объем элементарной ячейки,  $m$  — эффективная масса электрона,

$$a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{Z m e^2}, \quad \omega_B = \frac{m z^2 e^4}{2 \epsilon^2 \hbar^4},$$

$z$  — заряд в единицах  $|e|$ . Отметим, что в данном приближении смещение равновесных состояний центров не зависит от того, в состояние с какой конечной энергией перейдет электрон при оптическом возбуждении. Подставляя полученное выражение (16) в уравнение (12), получим

$$4\pi \int_0^{q_m} q^2 dq \left( \frac{e^{yq}}{1 - e^{-\frac{\hbar s q}{T}}} - \frac{e^{-yq}}{e^{\frac{\hbar s q}{T}} - 1} \right) = \frac{(2\pi)^3 \hbar^3 s^2}{E_1^2 a_B^2 0,285 v_0} \frac{M}{m} \frac{\hbar \omega - (\omega_k + \lambda)}{\omega_B}, \quad (17)$$

где  $q_m$  — предельное волновое число, на котором обрывается дебаевский спектр.

В зависимости от знака правой части уравнения (17) рассмотрим два случая.

*Процессы с выделением фононов:*

$$\hbar \omega > \omega_k + \lambda, \text{ т. е. } |k| < \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\hbar \omega - \lambda)}. \quad (18)$$

При этом в левой части можно пренебречь вторым слагаемым, если  $e^{yq_m} \gg 1$ . Для температур меньше дебаевской  $T_D = \hbar s q_m$  приближенно получим

$$y_0 = \frac{1}{q_m} \ln \left[ b \frac{\hbar \omega - (\omega_k + \lambda)}{\omega_B} \right], \quad (19)$$

где

$$b = \frac{3}{0,285} \frac{\hbar^2 s^2}{E_1^2 a_B^2} \frac{M}{m}.$$

Отсюда следует, в частности, что допущение  $e^{yq_m} \gg 1$  справедливо при

$$b \frac{\hbar \omega - (\omega_k + \lambda)}{\omega_B} \gg 1. \quad (20)$$

В этом случае выражения (11) и (12) запишутся явно

$$\Phi_p(y_0) = - \frac{\hbar \omega - (\omega_k + \lambda)}{T_D} \left\{ \ln \left[ b \frac{\hbar \omega - (\omega_k + \lambda)}{\omega_B} \right] - \frac{1}{2} \right\} - \frac{1}{2} \frac{\omega_B}{T_D} \frac{1}{b}, \quad (21)$$

$$\Phi_p''(y_0) = \frac{s q_m}{2\hbar} [\hbar \omega - (\omega_k + \lambda)]. \quad (22)$$

Матричный элемент бесфононного перехода при фотоионизации одноименно заряженного примесного центра вычислен в работе [1]:

$$|(k|p|\lambda)|^2 = \frac{24\pi}{v} \left( \frac{\hbar^2 \omega_B^3}{2m} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\hbar^2 k^2}{4} \left( \frac{m_0}{m} + 1 \right)^2 \times \frac{2\pi}{ka_B} \frac{1}{(\omega_k + \lambda)^2} \times \frac{2\pi}{e^{\frac{ka_B}{\hbar}} - 1}. \quad (23)$$

Пределы интегрирования по  $k$  в выражении (10) определяются условием (18). Результаты численного счета коэффициента поглощения для центров Au в Ge, получаемые при подстановке выражений (21), (22) и (23) в формулу (10), представлены на рис. 1.

Процессы с поглощением фононов:

$$\hbar\omega \langle \omega_{\mathbf{k}} + \lambda, \text{ т. е. } |k\rangle \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\hbar\omega - \lambda)}. \quad (24)$$

Корень уравнения (18) в этом случае будет отрицательным:

$$y_0 = -\frac{1}{q_m} \ln \left[ \exp\left(\frac{T_D}{T}\right) b \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \lambda - \hbar\omega}{\omega_B} \right]. \quad (25)$$

Подстановка этого значения в выражении (11) и (12) показывает, что при  $T < T_D$  вклад процессов с поглощением фононов в величину коэффициента поглощения экспоненциально мал.

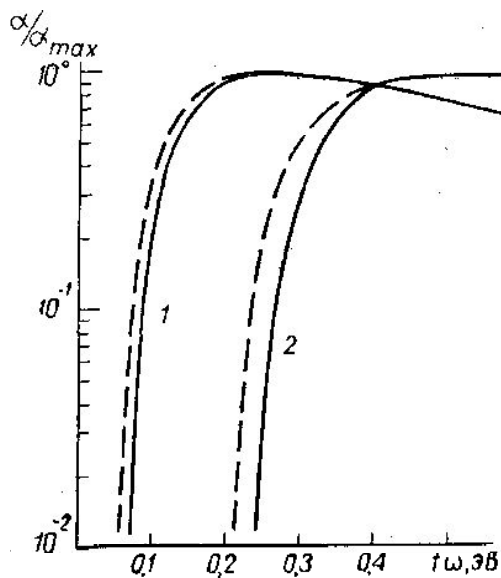


Рис. 1

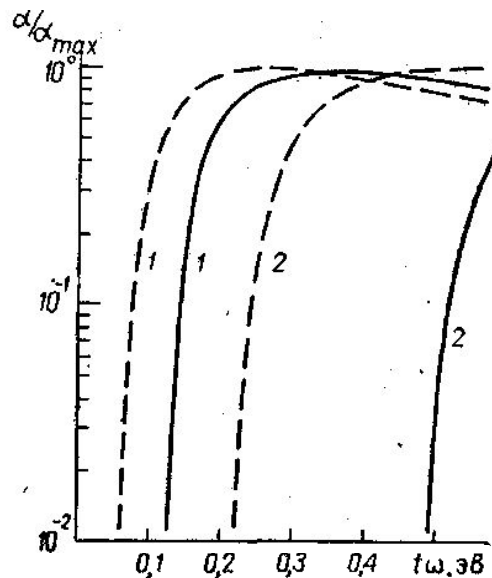


Рис. 2

### Взаимодействие с оптическими фононами

При рассмотрении взаимодействия с оптическими фононами будем исходить из общего выражения [5]:

$$\alpha = \left[ \left( \frac{E_{\text{эфф}}}{E_0} \right)^2 \frac{1}{n} \right] \frac{4\pi^2 e^2 N_{\lambda}}{3cm_0^2 \omega} \sum_{\mathbf{k}} |(k|p|\lambda)|^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{T} \frac{p}{2}} \times \\ \times I_p(\sqrt{G_0 G'_0}) \exp\left(-\frac{G_0 + G'_0}{2}\right), \quad (26)$$

где

$$p = \frac{\hbar\omega - (\omega_{\mathbf{k}} + \lambda)}{\hbar\omega_0}, \quad \sigma_0 = \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 (n_{\mathbf{q}} + 1),$$

$$\sigma'_0 = \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2 n_{\mathbf{q}},$$

$\hbar\omega_0$  — энергия оптического фонона.

При  $T < \hbar\omega_0$  перейдем к асимптотическим выражениям для функций Бесселя  $I_p$ . Тогда

$$\alpha = \left[ \left( \frac{E_{\text{эфф}}}{E_0} \right)^2 \frac{1}{n} \right] \frac{4\pi^2 e^2 N_\lambda}{3c m_0^2 \omega} \sum_{\mathbf{k}} |(\mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | \lambda)|^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi p}} \times \\ \times \exp \left\{ -A - p \ln \left( \frac{p}{A} - 1 \right) \right\}, \quad (27)$$

где

$$A = 2 \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^2.$$

Как известно [6], матричный элемент для неполярного взаимодействия с оптическими колебаниями может содержать волновой вектор фонона или носителя в нулевой или более высокой степени. Если это степень не нулевая, то матричный элемент мал и взаимодействием с оптическими фононами можно пренебречь. В работе [7] показано, что в германии матричный элемент содержит нулевую степень. Для этого случая квадрат смещения положения равновесия атомов при фотопереходе равен

$$\Delta_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{(\hbar\omega_0)^3} 0,285 \frac{mV_0}{MV} \omega_B D^2 a_B^2, \quad (28)$$

где величина  $D$  может быть определена [8]. Следовательно,

$$A = 2 \cdot 0,285 \frac{m}{M} \frac{\omega_B}{\hbar\omega_0} \left( \frac{Da_B}{\hbar\omega_0} \right)^2. \quad (29)$$

Результаты численного интегрирования в выражении (27) для центров  $Au$  в  $Ge$  представлены на рис. 2.

В заключение выражаю глубокую благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и помощь в работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ярцев В. М. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 15, № 6, 1974.
2. Бонч-Бруевич В. Л. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 12, № 5, 1971.
3. Liscovsky G. Solid. State Comm., 3, 299, 1965.
4. Перлин Ю. Е. «Успехи физических наук», 80, 553, 1963.
5. Пекар С. И., Кривоглаз М. И. «Труды Института физики АН УССР», 4, 37, 1953.
6. Конвелл Э. М. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М., 1970.
7. Harrison W. A. Phys. Rev., 104, 1281, 1956.
8. Meyer H. J. G. Phys. Rev., 112, 298, 1958.

Поступила в редакцию  
19.9 1972 г.

Кафедра  
полупроводников