

УДК 621.315.592

И. П. ЗВЯГИН

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ СВОЙСТВА НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Рассмотрены нелинейные высокочастотные электромагнитные свойства неупорядоченных полупроводников, обусловленные перескоками электронов между локализованными состояниями. Полученное выражение для плотности тока использовано для оценки эффектов, связанных с предложенным механизмом.

Характерная особенность неупорядоченных систем состоит в том, что в определенных областях энергетического спектра электронные состояния локализованы. Соответственно, если уровень Ферми расположен в одной из этих областей, а температура достаточно низка, то электронные процессы в таких системах в основном обусловлены переходами между локализованными состояниями. Интенсивная электромагнитная волна оказывает заметное влияние на динамику электронных перескоков; она, например, меняет протекание процессов низкочастотной релаксации и стационарные кинетические характеристики системы [1]. Ниже мы рассмотрим нелинейные высокочастотные эффекты, связанные с перескоками электронов между локализованными состояниями.

Будем считать, что переходами электронов в делокализованные состояния под действием волны (типа рассмотренных в [2]) можно пренебречь. Это накладывает ограничения на частоту волны Ω и ее интенсивность сверху; в частности, необходимо, чтобы энергия кванта $\hbar\Omega$ не превышала энергетического расстояния между порогом локализации и уровнем Ферми. В отличие от нелинейных эффектов, связанных с внутриатомными переходами, в нашей системе заметный вклад могут давать не только обычные дипольные переходы, но и перескоки с одновременным участием фотонов и фононов, играющие определяющую роль в процессах низкочастотной релаксации [1]. Кроме того, случайный характер расположения точек локализации состояний и, вообще говоря, их энергий обуславливает нерезонансный характер взаимодействия волны с локализованными электронами.

В дипольном приближении напряженность электрического поля волны, действующего на электроны, можно записать в виде

$$E = E_0 \cos \Omega t. \quad (1)$$

Пусть $|\lambda\rangle$ — векторы состояний локализованных электронов, а a_λ^+ , a_λ — операторы рождения и уничтожения электронов в этих состояниях. Плотность тока можно найти с помощью известного соотношения

$$j = \frac{e}{V} \sum_{\lambda\lambda'} (\lambda | r | \lambda') \frac{\partial f_{\lambda\lambda'}(t)}{\partial t}, \quad (2)$$

где V — объем системы; $f_{\lambda\lambda'}(t) = \text{Sp } \rho(t) a_{\lambda'}^+ a_{\lambda}$ — одночастичная матрица плотности, а $\rho(t)$ — полная неравновесная матрица плотности. В интересующей нас области частот, вообще говоря, следует учитывать вклад как диагональных, так и недиагональных элементов функции $f_{\lambda\lambda'}$ в плотность тока.

Диагональные элементы $f_{\lambda}(t) \equiv f_{\lambda\lambda}(t)$, описывающие прыжковый перенос с участием фононов, можно найти, воспользовавшись кинетическим уравнением, записанным с учетом высокочастотных составляющих $\tilde{f}_{\lambda}$ функции f_{λ} :

$$\frac{\partial \tilde{f}_{\lambda}}{\partial t} = - \sum_{\lambda'} \{ \Phi_{\lambda\lambda'} \bar{f}_{\lambda} (1 - \bar{f}_{\lambda'}) - \Phi_{\lambda'\lambda} \bar{f}_{\lambda'} (1 - \bar{f}_{\lambda}) \}. \quad (3)$$

Здесь $\bar{f}_{\lambda}$ — стационарная (медленно меняющаяся) часть функции f_{λ} , $\tilde{f}_{\lambda} = f_{\lambda} - \bar{f}_{\lambda}$, причем $\tilde{f}_{\lambda} \ll f_{\lambda}$.

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda\lambda'} &= \frac{2}{\hbar} \sum_q |B_{\lambda\lambda'}^q|^2 \sum_{k, l=-\infty}^{\infty} J_l(z_{\lambda\lambda'}) J_{l+k}(z_{\lambda\lambda'}) \times \\ &\times \text{Im} \left\{ \frac{N_q e^{i\hbar\Omega t}}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\omega_q - l\hbar\Omega - i\varepsilon} + \frac{(N_q + 1) e^{ik\Omega t}}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'} - \hbar\omega_q - l\hbar\Omega - i\varepsilon} \right\}, \quad (4) \\ B_{\lambda\lambda'}^q &= B_q(\lambda | e^{iq\mathbf{r}} | \lambda'), \end{aligned}$$

B_q — обычный матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, q и ω_q — волновой вектор и частота фононов, рассматриваемых в континуальном приближении; ε_{λ} — энергия локализованного состояния λ ; $J_l(z_{\lambda\lambda'})$ — функция Бесселя,

$$z_{\lambda\lambda'} = \frac{eE_0(x_{\lambda} - x_{\lambda'})}{\hbar\Omega}, \quad (5)$$

$x_{\lambda} = (\lambda | x | \lambda)$, а ось x направлена вдоль вектора $\mathbf{E}_0$.

Недиагональные элементы $f_{\lambda\lambda'} (\lambda \neq \lambda')$ в нулевом приближении по константе электрон-фононного взаимодействия определяют бесфононный вклад в плотность высокочастотного тока; этот вклад нетрудно найти с помощью уравнения движения для $f_{\lambda\lambda'}$.

В результате плотность высокочастотного тока можно представить в виде

$$j = \frac{e}{2V} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\lambda\lambda'} (A_{\lambda\lambda'}^{(k)} \cos k\Omega t + B_{\lambda\lambda'}^{(k)} \sin k\Omega t), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} A_{\lambda\lambda'}^{(k)} &= (a_{\lambda\lambda'}^{(k)} + c_{\lambda\lambda'}^{(k)}) \bar{f}_{\lambda} (1 - \bar{f}_{\lambda'}), \quad B_{\lambda\lambda'}^{(k)} = (b_{\lambda\lambda'}^{(k)} + d_{\lambda\lambda'}^{(k)}) \bar{f}_{\lambda} (1 - \bar{f}_{\lambda'}), \quad (7) \\ a_{\lambda\lambda'}^{(k)} &= \frac{4\pi}{\hbar} (x_{\lambda} - x_{\lambda'}) \sum_{l=-\infty}^{+\infty} J_l(z_{\lambda\lambda'}) [J_{l-k}(z_{\lambda\lambda'}) + J_{l+k}(z_{\lambda\lambda'})] \times \end{aligned}$$

$$\times \sum_q |B_{\lambda\lambda'}^q|^2 \{N_q \delta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\omega_q - l\hbar\Omega) + (N_q + 1) \delta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} - \hbar\omega_q - l\hbar\Omega)\}, \quad (8)$$

$$c_{\lambda\lambda'}^{(k)} = \frac{4\pi k \hbar \Omega^2}{x_\lambda - x_{\lambda'}} |(\lambda | x | \lambda')|^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} l J_l(z_{\lambda\lambda'}) \times \\ \times [(l-2k) J_{l-k}(z_{\lambda\lambda'}) + (l+2k) J_{l+k}(z_{\lambda\lambda'})] \delta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} - l\hbar\Omega), \quad (9)$$

$$d_{\lambda\lambda'}^{(k)} = -\frac{4k \hbar \Omega^2}{x_\lambda - x_{\lambda'}} |(\lambda | x | \lambda')|^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} l J_l(z_{\lambda\lambda'}) \times$$

$$\times [(l-2k) J_{l-k}(z_{\lambda\lambda'}) - (l+2k) J_{l+k}(z_{\lambda\lambda'})] \frac{\mathcal{P}}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} - l\hbar\Omega}, \quad (10)$$

а величины $b_{\lambda\lambda'}^{(k)}$ отличаются от $a_{\lambda\lambda'}^{(k)}$ тем, что в них вместо $\rho\delta(\varepsilon)$ стоят главные значения $\mathcal{P}/\varepsilon$. Слагаемые в (6), содержащие $A_{\lambda\lambda'}^{(k)}$ и $B_{\lambda\lambda'}^{(k)}$, отвечают соответственно реальным и виртуальным процессам. Фононный вклад в плотность тока описывается слагаемыми, содержащими $a_{\lambda\lambda'}^{(k)}$ и $b_{\lambda\lambda'}^{(k)}$, а бесфононный — содержащими $c_{\lambda\lambda'}^{(k)}$ и $d_{\lambda\lambda'}^{(k)}$.

Выражения (6)–(10) в общем виде дают решение задачи о вычислении тока на частотах, кратных частоте падающей волны. С их помощью нетрудно записать выражения для линейного и многофотонных коэффициентов поглощения и для нелинейных восприимчивостей. Отметим, что макроскопическая симметрия рассматриваемой неупорядоченной системы (в отсутствие постоянного внешнего электрического поля) приводит к тому, что четные гармоники обращаются в нуль.

Как видно из полученных выражений, роль нелинейных эффектов и относительная величина нелинейных восприимчивостей определяются характерным значением параметра (5), т. е. отношением $E_0/E_{кр}$, где $E_{кр} = \hbar\Omega/eR(\Omega)$, а $R(\Omega)$ — характерная длина перескока на частоте Ω . В области не слишком низких частот, которая как раз и интересна для рассматриваемых эффектов, можно пренебречь многократными перескоками и ограничиться парным приближением. При этом $R(\Omega) = \gamma^{-1} \ln(\Omega_0/\Omega)$, где γ — обратный радиус локализации, а Ω_0 — параметр, связанный с предэкспоненциальным множителем в темпе перескоков [3].

Для рассматриваемых частот, когда $\hbar\Omega$ меньше энергии ионизации в область делокализованных состояний, Ω_0 заметно превышает Ω , и $R(\Omega) > \gamma^{-1}$. В аморфных материалах $\gamma^{-1} \cong 5 \cdot 10^{-8}$ см и, полагая для оценки $R = 10^{-7}$ см, получаем $E_{кр} \cong 10^2 \left(\frac{\Omega}{5 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}} \right) \text{ CGSE}$. Величина R может быть большей в случае, когда определяющую роль играют переходы в примесной зоне компенсированного кристаллического полупроводника. Для n -Si, например, $\gamma^{-1} = 2,5 \cdot 10^{-7}$ см, а R по оценкам [4] порядка 10^{-6} см. Соответственно, при $\Omega = 5 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ имеем $E_{кр} \cong 10 \text{ CGSE}$. Оценку нелинейной восприимчивости χ_3 , определяющей отклик системы на частоте 3Ω , можно провести либо методом, применяемым при расчете линейного коэффициента поглощения α [4], либо используя экспериментальные значения α [5]. При $\lambda = 0,3$ мм и при указанном выше значении $E_{кр}$ эта оценка дает $|\chi_3| \sim (10^{-4} - 10^{-5}) \text{ CGSE}$.

Таким образом, рассмотренный механизм нелинейности может играть заметную роль в инфракрасной области и на более низких частотах.

Выражаю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу, А. П. Сухорукову и Э. М. Эпштейну за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zvyagin I. P. «Phys. stat. sol. (b)», 1978, 88, 149.
2. Келдыш Л. В. ЖЭТФ, 1964, 47, 1945.
3. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических материалах. М., 1974, гл. 2.
4. Blinowski J., Micielski J. «Phys. Rev.», 1964, 136, A266; 1965, 140, A1024.
5. Milward R. C., Newringer L. J. «Phys. Rev. Lett.», 1965, 15, 664.

Кафедра
физики полупроводников

Поступила в редакцию
23.06.78