

МЕЖДУЗОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
СОЕДИНЕНИЯХ ТИПА $A^{III}B^V$

Л. Л. АЛИХАНОВА, Э. М. КАЗАРЯН

Теоретически рассчитан коэффициент междузонного поглощения для полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^V$ со сложным законом дисперсии носителей заряда. Получены явно частотные зависимости коэффициента поглощения для прямых междузонных переходов и также для непрямых переходов с участием акустических и оптических фононов.

Хорошо известно, что полупроводники, так же как и металлы, в видимой области спектра имеют большой коэффициент поглощения — порядка 10^5 см^{-1} . В полупроводниках это обусловлено собственным поглощением, которое реализуется прямыми или непрямыми переходами. Для полупроводников с простым квадратичным законом дисперсии носителей заряда коэффициент поглощения имеет следующие частотные зависимости (см., напр. [1], [2]):

$$а) \text{ для прямых переходов } - \alpha(\omega) \sim (\hbar\omega - \Delta)^{1/2}, \quad (1)$$

$$б) \text{ для непрямых переходов с участием акустических фононов } - (1) \alpha(\omega) \sim (\hbar\omega - \Delta')^2.$$

в) в случае оптических фононов $- \alpha(\omega) \sim (\hbar\omega + \hbar\omega_0 - \Delta) \theta(\hbar\omega + \hbar\omega_0 - \Delta)$, где ω — частота падающего света, Δ — ширина запрещенной зоны, ω_0 — частота оптических фононов*. С другой стороны, уже хорошо установлено, что для многих полупроводниковых соединений закон дисперсии сильно отличается от квадратичного. Соответственно, представляет интерес расчет коэффициента междузонного поглощения для полупроводников со сложным законом дисперсии.

Будем исходить из результатов работы [4], где с помощью метода функции Грина, не конкретизируя вид взаимодействия, получена формула для коэффициента поглощения света при междузонных переходах:

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2}{\pi m_0 c \omega \sqrt{\epsilon}} \int dp f_{cv}(p) \Delta_{cv}(p) \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Im} Gr(p, c, E) \operatorname{Im}(p, v, E - \hbar\omega) \times \\ \times [n_F(E - \hbar\omega) - n_F(E)]. \quad (2)$$

Здесь c — скорость света в пустоте, m_0 — масса свободного электрона, ϵ — вещественная часть диэлектрической проницаемости, ω — частота падающего света, f_{vc} — сила осциллятора, $\Delta_{cv} = w_c(p) - w_v(p)$ (c и v — соответственно индексы зоны проводимости и валентной зоны), Gr —

* В работе [3] рассмотрен случай непрямых переходов с учетом кулоновского взаимодействия между электронами проводимости.

запаздывающая одночастичная функция Грина, $n_F = (e^{\beta E} + 1)^{-1}$ — функция распределения Ферми.

Как видно из выражения для мнимой части функции Грина

$$\text{Im } Gr(p, l, E) = - \frac{\text{Im } M(p, E)}{[E - W_l(p) - \text{Re } M(p, E)]^2 + [\text{Im } M(p, E)]^2}, \quad (3)$$

вся задача сводится к вычислению мнимой части массового оператора, который в общем случае выражается следующей формулой:

$$M(p, E) = -ig^2 \int dk Gr(k) \Gamma(k, p) D(k-p),$$

здесь g — константа связи, $\Gamma(k, p)$ — вершинная функция, $D(k-p)$ — функция распространения.

Сделаем ряд приближений:

а) $\text{Re } M \cong 0$, т. е. изменение энергии электронов за счет взаимодействия мало. Нетрудно убедиться, что учет его привел бы только к несущественной перенормировке носителя заряда.

б) $[\text{Im } M(p, E)]^2 \ll [E - W(p)]^2$, что вполне допустимо, так как при этом у нас не возникает никаких особенностей.

в) $\text{Im } Gr(p, v, E - \hbar\omega) = \pi\delta(E - \hbar\omega - W_v(p))$, т. е. предполагается, что электрон под действием света переходит из валентной зоны в зону проводимости „вертикально“ (виртуальный переход) и только потом, уже находясь в зоне проводимости, взаимодействует с фононами.

Тогда

$$\text{Im } Gr = - \frac{\text{Im } M(p, E)}{[E - W(p)]^2}. \quad (4)$$

Подставив (4) в формулу (2) и учтя условие в), после интегрирования по E , получим

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2}{\pi m_0 c \omega \sqrt{\epsilon}} \int dp f_{cv} \Delta_{cv} \frac{\text{Im } M(p, W_v + \hbar\omega)}{[W_c(p) - W_v(p) - \hbar\omega]^2} [n_F(W_v) - n_F(W_v + \hbar\omega)] \quad (5)$$

Пусть $W_c(p) - W_v(p) \cong \Delta$ (почти не зависит от P и есть расстояние между границами зон в центре зоны Бриллюэна). Это допустимо, так как нас интересует край собственного поглощения. Далее примем

$$n_F(W_c(p)) \cong 0, \quad n_F(W_c(p) - \hbar\omega) \cong 1. \quad (6)$$

Это означает, что валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости — свободна. Тогда, учитывая, что f_{cv} медленно меняющаяся функция p , окончательно получаем

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2}{\pi m_0 c \omega \sqrt{\epsilon}} \frac{f_{cv} \Delta_{cv}}{(\Delta - \hbar\omega)^2} \int dp \cdot \text{Im } M(p, W_v + \hbar\omega). \quad (7)$$

Для рассматриваемых ниже случаев междузонного поглощения восполь-

зависимостью энергии электрона в зоне проводимости, взятой по теории Кейна [5]:

$$W_c(p) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m_0} + \frac{\sqrt{\Delta^2 + \frac{8}{3} \frac{P^2}{\hbar^2} \hbar^2 p^2} - \Delta}{2}, \quad (8)$$

где $P^2 = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 \Delta}{m_c(0)}$ — постоянная Кейна, $m_c(0)$ — масса электрона на дне зоны проводимости.

Однако, как будет показано ниже, интегрирование по p ведется около точки $p=0$, поскольку интересуемся краем полосы поглощения. Тогда (8) можно представить в виде

$$W_c(p) = \alpha p^2 - \beta p^4, \quad (9)$$

где

$$\alpha = \frac{2}{3} \frac{P^2}{\Delta} + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \quad \beta = \frac{8}{9} \frac{P^4}{\Delta^3}.$$

Для энергии электрона в валентной зоне берем

$$W_v(p) = -\Delta - \frac{\hbar^2 p^2}{2m_v}. \quad (10)$$

Рассмотрим сначала случай прямых переходов. Так как при таких переходах отсутствует взаимодействие электрона с другими частицами, то

$$\text{Im } Gr(p, c, E) = -\pi \delta(E - W_c(p)).$$

Тогда, после интегрирования по E , формула (2) принимает вид

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2 \pi}{m_0 c \omega \sqrt{\epsilon}} f_{cv} \Delta_{cv} \int dp \delta(W_c(p) - \hbar\omega - W_v(p)). \quad (11)$$

Выполняя интегрирование по p , получим

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 [2m_c(0)]^{1/2}}{m_0 c \omega \sqrt{\epsilon} \hbar^3} \left[(\hbar\omega - \Delta)^{1/2} + \frac{5}{16} \frac{(\hbar\omega - \Delta)^{3/2}}{\Delta} \right]. \quad (12)$$

Для непрямых переходов рассмотрим отдельно случаи поглощения света с участием акустических и оптических фононов. В первом случае мнимая часть массового оператора имеет вид (напр. [6])

$$\text{Im } M(p, E) = - \frac{g^2}{4(2\pi)^3} \int dk \cdot \frac{k^2}{\omega(k)} [\nu(k) + n_F(p+k)] \times \quad (13)$$

$$\times \delta(E + \hbar\omega(k) - W(p+k)) + [\nu(k) + 1 - n_F(p+k)] \delta(E - \hbar\omega(k) - W(p+k)),$$

где $\nu(k)$ — функция распределения фононов, $g = E_c \sqrt{\frac{\hbar}{d}}$, E_c — потенциал деформации, d — плотность кристалла, $\omega = v_0 |k|$ — частота акустических фононов, v_0 — скорость звука.

Рассмотрим случай высоких температур, при которых $\hbar\omega(k) \ll k_0 T$.

Тогда

$$\nu(k) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega(k)}{k_0 T}} - 1} \cong \frac{k_0 T}{\hbar\omega(k)} \gg 1. \quad (14)$$

Подставляя (14) в (13) и учитывая условие (6), получаем

$$\text{Im } M(p, W_v + \hbar\omega) = \frac{k_0 T g^2}{2(2\pi)^3 v_0^2 \hbar} \int dk \cdot \delta(W_v(p) + \hbar\omega - W_c(p+k)). \quad (15)$$

Из вида δ -функции находим верхний предел для p :

$$p^2 < \frac{2m_v}{\hbar^2} (\hbar\omega - \Delta'),$$

где Δ' есть энергетическое расстояние между побочным минимумом зоны проводимости и максимумом валентной зоны (рис. 1).

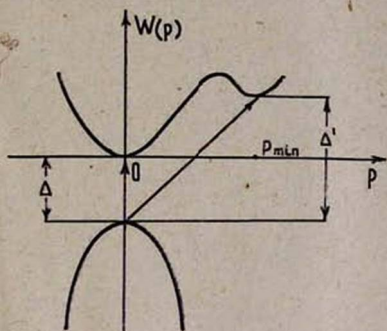


Рис. 1. Упрощенная энергетическая структура полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^V$.

Формула (7), после подстановки (15) и интегрирования по k , получит следующий вид:

$$\alpha(\omega) = \frac{k_0 T g^2 e^2}{2(2\pi)^3 m_0 c \omega \sqrt{\epsilon} v_0^2 \hbar} \int dp \sqrt{\frac{2m_v}{\hbar^2} (\hbar\omega - \Delta - \alpha p^2 + \beta p^4)}. \quad (16)$$

Воспользовавшись малостью параметра β , разложим подкоренное выражение в ряд. Тогда, выполняя интегрирование, окончательно получим

$$\alpha(\omega) = \frac{4 k_0 T g^2 e^2 m_v^2 \Delta}{3(2\pi)^4 m_0 c \omega \sqrt{\epsilon} \hbar^2 v_0^2 (\Delta - \hbar\omega)^2} \left[(\hbar\omega - \Delta')^2 - \frac{m_v}{m_c(0)} \frac{(\hbar\omega - \Delta')^3}{\Delta} \right]. \quad (17)$$

Для оптических фононов, частота которых в первом приближении величина постоянная, мнимая часть массового оператора дается следующим выражением (см., напр. [6]):

$$\text{Im } M(p, E) = - \frac{g^2}{4(2\pi)^3} \int \frac{dk}{k^2 \omega_0} [\nu(k) + n_F(p+k)] \times \quad (18)$$

$$\times \delta(E + \hbar\omega_0 - W(p+k)) + [\nu(k) + 1 - n_F(p+k)] \delta(E - \hbar\omega_0 - W(p+k)).$$

где $g = 4\pi ze^2 \sqrt{\frac{\hbar}{mv}}$, m — приведенная масса ионов, v — объем элементарной ячейки, ω_0 — частота оптических фононов. Рассмотрим случай не слишком высоких температур, когда $\nu(k) \ll 1$, $\pi_F(p) \ll 1$. Тогда выявляется поглощение уже для длин волн с частотами, меньшими $\frac{\Delta}{\hbar}$.

Подставив мнимую часть массового оператора в (7) и проинтегрировав по k , получим

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m_0 c \omega \sqrt{\varepsilon}} \frac{f \Delta}{(\Delta - \hbar \omega)^2} \frac{g^2}{4(2\pi)^4} \frac{m_v}{\omega_0 \hbar^2} \int dp \times p \times \times \ln \frac{\sqrt{\frac{2m_v}{\hbar^2} (\hbar \omega + \hbar \omega_0 - \Delta - \alpha p^2 + \beta p^4)} + p}{\sqrt{\frac{2m_v}{\hbar^2} (\hbar \omega + \hbar \omega_0 - \Delta - \alpha p^2 + \beta p^4)} - p} \quad (19)$$

Снова проинтегрируем (19), предварительно разложив подкоренное выражение по малому параметру β . В итоге получим

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{4\pi} f_{cv} \frac{e^2}{\hbar c \sqrt{\varepsilon}} \frac{z^2 e^4}{\hbar^2 V \omega \omega_0} \frac{m_v m_r}{m_0 m} \frac{1}{\frac{m_v}{m_e}} \frac{\theta(\hbar \omega + \hbar \omega_0 - \Delta)}{(\Delta - \hbar \omega)^2} \times \times \left\{ \hbar \omega + \hbar \omega_0 - \Delta + \frac{(\hbar \omega + \hbar \omega_0 - \Delta)^2}{\Delta m_v \sqrt{m_e m_c(0)} \left(\frac{m_v}{m_e} + 1 \right)} \right\} \times \times \left[\frac{9}{4} m_c^2(0) - 4 \sqrt{m_e m_c^3(0)} + 4 m_c^2(0) \ln \frac{\sqrt{m_v} + \sqrt{m_c}}{\sqrt{m_v} - \sqrt{m_c}} \right]. \quad (20)$$

Сравнивая полученные результаты (см. формулы (12), (17), (20)) с коэффициентами междужонного поглощения при квадратичном законе дисперсии носителей заряда, замечаем, что вследствие непараболичности закона дисперсии электронов наряду с основным членом возникает дополнительная зависимость коэффициента поглощения от частоты (исчезающая при $\beta \rightarrow 0$).

В заключение оценим поправки к коэффициенту поглощения, обусловленные непараболичностью закона дисперсии. Так, например, для ImSb ($m_v = 0,2 m_0$, $m_c(0) = 0,0116 m_0$, $\Delta = 0,1 \text{ эВ}$, $\hbar \omega - \Delta = 0,1 \text{ эВ}$) при $T = 300^\circ \text{К}$ поправка составляет при прямых переходах 4% , при не прямых переходах в случае акустических фононов 16% , в случае оптических — 7% .

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Э. М. Казарян, Дипломная работа, МГУ (1964).
2. В. Л. Бонч-Бруевич, Основы строгой теории оптических явлений в твердых телах. Лекции в летней школе им. Энрико Ферми. Италия, 1966.
3. Э. М. Казарян, ФТТ, 8, 1053 (1966), E. M. Kazarian, Phys. Lett., 19, 471 (1965).
4. В. Л. Бонч-Бруевич, Р. Розман, ФТТ, 5, 2890 (1963).
5. Е. О. Капе, J. Phys. Chem. Sol., 1, 249 (1957).
6. В. Л. Бонч-Бруевич, Т. В. Тябликов, Методы функции Грина в статистической механике, М., 1961.

ՄԻՋՁՈՆԱՅԻՆ ԱՆՅՈՒՄՆԵՐ $A^{III}B^V$ ՏԻՊԻ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԱՅԻՆ
ՄԻԱՅՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐՈՒՄ

Լ. Լ. ԱԼԻԽԱՆՈՎԱ, Է. Մ. ԴԱՋԱՐՅԱՆ

Տեսականորեն հաշված է միջլոնային կլանման գործակիցը $A^{III}B^V$ տիպի, հոսանքակիրների բարդ դիսպերսիայի օրենքով կիսահաղորդչային միացություններում:

Բացահայտ ստացված են կլանման գործակցի կախումները հաճախականություններից ուղղակի միջլոնային անցումների համար ինչպես նաև օպտիկական և ձայնային ֆոնոնների մասնակցությամբ անուղղակի անցումների համար:

INTERBAND TRANSITIONS IN $A^{III}B^V$ SEMICONDUCTOR
CONNECTION TYPES

L. L. ALIKHANOVA, E. M. KAZARIAN

The constant of the interband absorption for $A^{III}B^V$ semiconductor connection types with complex law of dispersion of charge carriers was calculated. The frequency dependence of the absorption coefficient for direct interband transitions as well as for indirect transitions with participation of acoustic and optical phonons was obtained explicitly.