Известия НАН Армении, Физика, т. 34, № 6, с. 333-339 (1999)

УДК 537.311.33

ВНУТРИЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ ДИСЛОКАЦИОННОМ МЕХАНИЗМЕ РАССЕЯНИЯ

А.П. ДЖОТЯН, Э.В. ГАЛСТЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 7 мая 1998 г.)

Рассмотрено внутризонное поглощение света в беспримесных полупроводниках с невырожденной зонной структурой при дислокационном механизме рассеяния носителей заряда. Расчеты проведены для винтовой дислокации. Получено выражение для коэффициента поглощения, усредненное по распределению носителей в зоне.

1. Введение

При частотах, меньших частоты, соответствующей краю поглощения, можно наблюдать внутризонное поглощение света [1]. В работе [2] было рассмотрено поглощение света свободными носителями заряда при рассеянии их на колебаниях решетки и на примеси. В настоящей работе вычисляется коэффициент внутризонного поглощения при новом – дислокационном механизме рассеяния носителей заряда. Последний механизм может сыграть решающую роль при поглощении света высокосовершенными беспримесными кристаллами, используемыми в современной полупроводниковой технике, в которых дислокации неминуемо возникают в процессе роста [3,4].

2. Общее выражение для коэффициента внутризонного поглощения света

Коэффициент внутризонного поглощения определяется, как известно [1], выражением

$$\alpha = \frac{W}{NVv}, \tag{1}$$

где N – число фотонов в единице объема, $v = \frac{c}{n}$ – фазовая скорость света, W – число переходов системы из начального состояния в конечное, V – объем образца.

Для W имеем выражение [3]

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} < \sum_m \left| M_{fo} \right|^2 \cdot \delta(E_f - E_0) >, \tag{2}$$

где угловые скобки означают усреднение по начальным состояниям M_{f0} – матричный элемент второго порядка для процесса поглощен электроном фотона с последующим рассеянием на рассеивающ центре, E_f – энергия системы в конечном состоянии, E_0 – в начальном

При упругом рассеянии на рассеивающем центре д коэффициента поглощения получаем [5]

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{N_v V} < \sum_f \left|(V_s)_{k_f k_0}\right|^2 \left[(V_{on})_{k_0 k_0} - (V_{on})_{k_f k_f}\right]^2 \times$$
$$\times (\hbar\omega)^{-2}\delta(E(\mathbf{k}_f) - E(\mathbf{k}_0) - \hbar\omega) >, \quad (3$$

где $\mathbf{k}_0$ – начальный, $\mathbf{k}_f$ – конечный волновые векторы электрона, (V_{on}) матричный элемент, связанный с поглощением фотона, а (V_s) матричный элемент, обусловленный упругим рассеянием н рассеивающем центре. Как известно [1], возмущение, связанное действием слабой световой волны, описывается гамильтонианом

$$\hat{H}' = \frac{e}{m_0 c}\mathbf{A}\hat{\mathbf{P}}, \quad (4)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ – вектор-потенциал электромагнитного поля световой волны m_0 – масса свободного электрона, c –скорость света, $\mathbf{A} = A_0\mathbf{e}e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}$, гд $\mathbf{k}$, ω – волновой вектор и частота падающей световой волны, $A_0 = \frac{\sqrt{2\pi N\hbar\omega}}{\mathbf{k}}$, $\mathbf{e}$ – вектор поляризации волны.

Пользуясь для описания состояний носителей в отдельной зоне волновой функцией, имеющей вид плоской волны

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\mathbf{kr}), \quad (5)$$

для матричного элемента, связанного с поглощением электроном фотона, имеем:

$$(V_{on})_{k_0 k_0} = \frac{e\hbar}{m_0 c}A_0\mathbf{e}\mathbf{k}_0; \qquad (V_{on})_{k_f k_f} = \frac{e\hbar}{m_0 c}A_0\mathbf{e}\mathbf{k}_f. \quad (6)$$

Найдем вид матричного элемента $(V_s)_{k_f k_0}$, описывающего рассеяние носителей заряда на винтовой дислокации. Взаимодействие носителей заряда с винтовой дислокацией обусловлено искажениями решетки, порожденными дислокацией. В изотропном кристалле с параболическим законом дисперсии неэкранированный потенциал поля, создаваемого винтовой дислокацией, имеет аксиальную симметрию и может быть представлен в цилиндрических координатах в виде [6]

$$V_s = \frac{\beta}{\rho} \quad (7)$$

(дислокация расположена вдоль оси OZ), β – константа, определяемая типом кристалла; потенциал (7) при любом знаке β обуславливает рассеяние носителей.

С учетом (5) для матричного элемента рассеяния на дислокационном потенциале (7) получаем

$$\left(V_s\right)_{\mathbf{k}_f\mathbf{k}_0} = \frac{2\pi^2\beta}{V}\delta\left(k_z^0 - k_z^f\right)\cdot\frac{1}{\left|\mathbf{k}_\perp^0 - \mathbf{k}_\perp^f\right|}, \tag{8}$$

где $\mathbf{k}_\perp^0, \mathbf{k}_\perp^f$ – квазиимпульс носителя до и после рассеяния в плоскости, перпендикулярной оси дислокации.

3. Расчет коэффициента поглощения света

Рассмотрим случай, когда свет падает по оси OZ, а вектор поляризации $\mathbf{e}$ расположен в плоскости XOY; угол между $\mathbf{k}_0$ и OZ обозначим через ϑ_0 (рис.1).

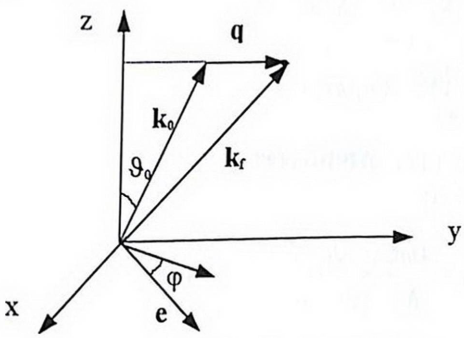

Рис.1. Взаиморасположение векторов начальных и конечных состояний носителей заряда и вектора поляризации света.

Для расчета коэффициента поглощения света по формуле (3) заменим суммирование по конечным состояниям $\mathbf{k}_f$ суммированием по векторам $\mathbf{q}\ (\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_0)$ с последующим переходом от суммирования к интегрированию $\left(\sum_q \to \frac{2V}{(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{q}\right)$.

В результате вычислений, после усреднения по направлениям $\mathbf{k}_0$, получаем:

$$\alpha(\omega) = C\int_0^\infty q\,dq\int_{-1}^{1}\delta\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 q k_0\sin\vartheta_0}{m} - \hbar\omega\right)d\cos\vartheta_0, \tag{9}$$

где $C = \frac{2\pi^3 e^2\beta^2 L}{cn\omega^3 m_0 V^2}$, L – размер образца вдоль оси OZ.

Приравнивая к нулю аргумент δ-функции, находим значения импульса передачи q, удовлетворяющие закону сохранения энергии:

$$q_1 = -k_0\sin\vartheta_0 + \sqrt{k_0^2\sin^2\nu_0 + \frac{2m\omega}{\hbar}},$$
$$q_2 = -k_0\sin\vartheta_0 - \sqrt{k_0^2\sin^2\nu_0 + \frac{2m\omega}{\hbar}}. \tag{10}$$

Второй корень не имеет физического смысла, т.к. отрицателен; значения первого корня лежат в интервале

$$q_{\min} \le q_1 \le q_{\max} \ , \qquad (11)$$

где $q_{\min} = k_0\left(\sqrt{1+\frac{\hbar\omega}{E_{\mathbf{k}_0}}}-1\right)$, $q_{\max} = k_0\left(\sqrt{\frac{\hbar\omega}{E_{\mathbf{k}_0}}}\right)$, $E_{\mathbf{k}_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ – начальная кинетическая энергия носителя заряда.

С учетом (11) выражение для $\alpha(\omega)$ представим в интегральном виде:

$$\alpha(\omega) = C\cdot\frac{4m}{\hbar^2} < \int\limits_{q_{\min}/2k_0}^{q_{\max}/2k_0} \frac{z^2-c}{\sqrt{z^2-\left(z^2-c\right)^2}}dz > \quad , \qquad (12)$$

где $z = \frac{q}{2k_0}$, $c = \frac{\hbar\omega}{4E_{k_0}}$.

Интеграл в (12) вычисляется точно [7], в результате вычислений для $\alpha(\omega)$ получаем:

$$\alpha(\omega) = \frac{4mC}{\hbar^2} < \frac{\sqrt{t+1}-1}{2}F(\chi,p) - \frac{\sqrt{t+1}-1}{2}F(\chi,p)+1 >, \qquad (13)$$

где $t = \frac{\hbar\omega}{E_{k_0}}$, $F(\chi,p)$ и $E(\chi,p)$ – эллиптические интегралы I и II родов;

$$\chi = \arcsin\frac{(\sqrt{t+1}+1)}{t}\sqrt{\frac{\sqrt{t+1}-1}{2\sqrt{t+1}}}; \quad p = \frac{2\sqrt[4]{t+1}}{\sqrt{t+1}+1}. \qquad (14)$$

При усреднении (13) по начальным состояниям воспользуемся статистикой Максвелла–Больцмана; критерий применимости к электронам в зоне проводимости (к дыркам в валентной зоне) состоит в выполнении неравенства $(2\pi m^* kT)^{3/2}/4\pi^3\hbar^3 n >> 1$, что для полупроводников с $m^*\approx 10^{-28}$ г и $n^*\approx 10^{18}$ см$^{-3}$ реализуется и при комнатных температурах [1].

После усреднения (13) по начальным состояниям на основе статистики Максвелла–Больцмана методом перевала (функции $E(\chi,p)$ и $F(\chi,p)$ изменяются медленно в допустимой области изменения аргументов, а функция $y = k_0^2 \exp\left(-\frac{\hbar^2 k_0^2}{2mkT}\right)$ достигает максимума в точке $k_0 = \frac{2mkT}{\hbar^2}$), получаем

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^3\hbar e^2 m n_e N_D}{(\hbar\omega)^3 c n m_0^2}\times$$

$$\times\left\{2-E(\chi',p')-F(\chi',p')-\frac{2}{\sqrt{\pi}}e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\left[E(\chi',p')-F(\chi',p')\right]\right\}, \qquad (15)$$

где χ', p' по-прежнему определяются выражениями (14), но при значении $t = \frac{\hbar\omega}{kT}$; $\Gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{\hbar\omega}{kT}\right)$ – неполная гамма-функция, n_e – концентрация электронов в объеме образца, N_d – концентрация дислокаций (число их на единицу поверхности).

4. Асимптотические выражения для коэффициента поглощения

Найдем вначале асимптотические разложения для $\alpha(\omega)$ в области высоких температур, $\hbar\omega < kT$ (классический предел). Воспользуемся выражениями (15) и (14) и с учетом малости величины $t = \frac{\hbar\omega}{kT} < 1$ разложим в ряд выражения для аргументов p' и χ' эллиптических интегралов $F(\chi, p)$ и $E(\chi', p')$. Легко видеть, что при $t \to 0$ эллиптические интегралы $F(\chi, p)$ и $E(\chi', p')$ переходят в полные $E(p')$ и $K(p')\left(\chi \to \frac{\pi}{2}\right)$ и выражение для $\alpha(\omega)$ принимает вид

$$\alpha(\omega) \approx \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \frac{1}{2kT}\left[K(p') - E(p')\right] = \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \cdot \frac{1}{2kT} p'^2 D(p'), \qquad (16)$$

где $D(p')$ – эллиптический интеграл 3-го рода [7]:

$$p'^2 D(p') = K(p') - E(p'). \qquad (17)$$

Таким образом, в области $t<1$ $\alpha(\omega) \sim (\hbar\omega)^{-2}$, что соответствует классическому пределу. Действительно, согласно классической теории поглощения света свободными носителями, в области $\hbar\omega < kT$ коэффициент внутризонного поглощения света

$$\alpha(\omega) \sim \frac{1}{1 + \omega^2\tau^2}. \qquad (18)$$

где τ – время свободного пробега носителя заряда.

При $\omega\tau >> 1$ из (18) получаем

$$\alpha(\omega) \sim \frac{1}{(\hbar\omega)^2}. \qquad (19)$$

В противоположном случае $t > 1$ $\left(\frac{\hbar\omega}{kT} > 1\right)$ находим: $p' < 1$, $\chi' \approx \frac{\pi}{4}$.

Тогда

$$\alpha(\omega) \approx \frac{1}{(\hbar\omega)^3}\left\{\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^{1/2}\left[F\left(\frac{\pi}{4}, p'\right) - E\left(\frac{\pi}{4}, p'\right)\right] + 2\right\} \approx$$

$$\approx \frac{C}{(\hbar\omega)^3}\left\{\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^{1/2} p^2 D\left(\frac{\pi}{4}, p'\right) + 2\right\} \approx \frac{2C}{(\hbar\omega)^3} \sim (\hbar\omega)^{-3}. \qquad (20)$$

5. Обсуждение результатов

Оценим величину коэффициента поглощения света при комнатной температуре при фиксированном значении ω на основе формулы (15). Экспериментально внутризонное поглощение света легче наблюдать, когда частота электромагнитной волны $\omega < \frac{E_G}{\hbar}$ (для Ge это условие выполняется при частотах $\omega < 10^{15} c^{-1}$).

При $T \approx 300$К и $\omega = 10^{14} c^{-1}$ для $\alpha(\omega)$ из (15) получаем:

$$\alpha_d \approx 4 \cdot 10^{-28} n_e N_d . \tag{21}$$

Сравним величину $\alpha_d(\omega)$ при дислокационном механизме рассеяния со значениями коэффициента поглощения при рассеянии на фононах ($\alpha_p(\omega)$) и на примеси ($\alpha_i(\omega)$)[1]. Согласно [1]

$$\alpha_p(\omega) = \frac{16 n_e e^2 G^2 (2m^*)^{1/2}}{cn\rho\hbar^2 s^2} \frac{kT}{(\hbar\omega)^{3/2}} < \left(1 + \frac{2E_k}{\hbar\omega}\right)\left(1 + \frac{2E_k}{\hbar\omega}\right)^{1/2} >, \tag{22}$$

где s – скорость распространения продольных акустических волн в кристалле, G – константа, ρ – плотность кристалла. При $\omega \approx 10^{14} c^{-1}$ и T= 300К $\alpha_p \approx 2 \cdot 10^{-17..5} n_e$ и $\frac{\alpha_d}{\alpha_p} \approx 1$ при концентрации дислокаций $N_d \approx 10^{10}$ см$^{-1}$.

При примесном механизме рассеяния имеем [1]

$$\alpha_i = \frac{16\sqrt{2}\pi^2 e^6 \hbar^2}{3cn^5 (m^*)^{3/2} (\hbar\omega)^{7/2}} N_i n_e , \tag{23}$$

где N_i – концентрация примесных центров.

Из сравнения (21) и (23) при $\omega \approx 10^{14}$ см$^{-1}$ и $T \approx 300$К получаем:

$$\alpha_d/\alpha_i = 10^{\,8.5}\, N_d/N_i . \tag{24}$$

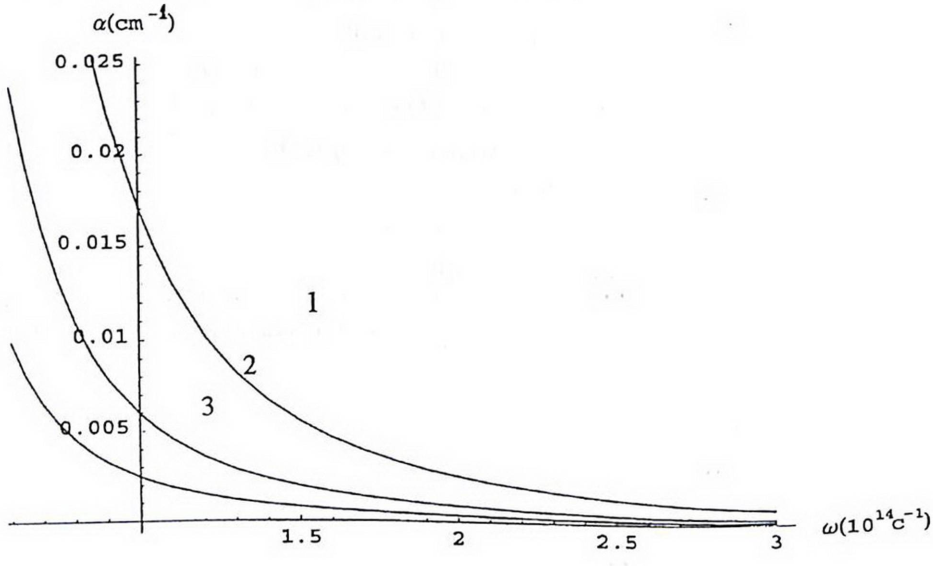

Рис.2. Зависимость коэффициента внутризонного поглощения света от частоты при дислокационном механизме рассеяния при различных температурах ($n_e = 10^{17}$ см $^{-3}$, $N_d = 10^9$ см $^{-2}$). 1 – 50K, 2 -- 100K, 3 – 250K.

Отсюда видно, что при концентрации примесных центров $N_i \approx 10^{17}$ см$^{-3}$ дислокационный механизм рассеяния дает равный вклад в поглощение при концентрации дислокаций $N_d \approx 10^9$ см$^{-2}$.

Графически зависимость коэффициента поглощения при различных температурах и концентрациях носителей заряда $n_e = 10^{17}$ см$^{-3}$ и дислокаций $N_d \approx 10^9$ см$^{-2}$ приведена на рис.2.

В заключение выражаем благодарность академику Э.М.Казаряну и профессору А.А.Киракосяну за плодотворные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.И.Ансельм.** Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1979.
2. **Н.И.Фань.** УФН, **54**, 316 (1958).
3. **А.А.Киракосян, М.К.Кумашян, К.А.Мхоян, А.А.Саркисян.** Известия НАН Армении, Физика, **30**, 208 (1995).
4. **E.M.Kazaryan, K.A.Mkhoyan, H.A.Sargsyan.** Thin Solid Films, **302**, 54 (1997).
5. **R.Rozenberg, M.Lax.** Phys. Rev., **112**, 843 (1958).
6. **В.Л.Бонч-Бруевич.** ФТТ, **3**, 36 (1961).
7. **И.С.Градштейн, И.М.Рыжик.** Таблицы интегралов, сумм, рядов, произведений. М., Наука, 1962.

ԼՈՒՅՍԻ ՆԵՐԳՈՏԻԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻՈՆ ՑՐՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ա.Պ. ՋՈԹՅԱՆ, Է.Վ. ԳԱԼՍՏՅԱՆ

Դիտարկված է լույսի ներգոտիական կլանումը չայլասերված գոտիական կառուցվածքով ոչխառնուրդային կիսահաղորդիչներում լիցքակիրների ցրման դիսլոկացիոն մեխանիզմի դեպքում: Հաշվարկները կատարված են պտուտակային դիսլոկացիայի համար: Ստացված է գոտում լիցքակիրների բաշխմամբ միջինացված անալիտիկ արտահայտություն կլանման գործակցի համար:

INNER-BAND LIGHT ABSORPTION IN SEMICONDUCTORS WITH DISLOCATION MECHANISM OF SCATTERING

A.P. DJOTYAN, E.V. GALSTYAN

Inner-band absorption of light in pure semiconductors with a non-degenerate band structure for dislocation mechanism of charge carriers scattering is considered. The calculations are carried out for the case of a screw dislocation. The expression is obtained for the absorption coefficient averaged over the distribution of charge carriers in a band.