1993 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 27, N 4

ПОГЛОЩЕНИЕ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛАЗМОЙ ПРИ РАССЕЯНИИ НА ПРИМЕСЯХ И ПЛАЗМОН-ФОНОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЯХ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. А. Клюканов, Н. И. Балмуш

Кишиневский государственный университет им. В. И. Ленина,
277003, Кишинев, Молдова
(Получена 24.08.1990. Принята к печати 6.11.1992)

Методом кумулянт в рамках флуктуационно-диссипативной теоремы получены выражения для коэффициента поглощения инфракрасного излучения электронной плазмой в полупроводниках. Подробно рассмотрен случай взаимодействия электронов с примесями и плазмон-фононными возбуждениями в приближении случайных фаз. Численные расчеты проведены для GaAs. Показано, что затухание фононов существенным образом влияет на положение и ширину резонансных пиков коэффициента поглощения. Предложенный метод допускает обобщение на случай произвольной электрон-фононной и электрон-примесной связи.

При расчете коэффициента поглощения инфракрасного (ИК) излучения $K(\omega)$ в случае высоких концентраций свободных носителей заряда в полупроводниках необходимо учитывать их кулоновское взаимодействие, которое приводит к смешиванию плазмонов и фононов, динамическому экранированию и изменению частотной зависимости $K(\omega)$ [1–6]. В пионерских работах [7, 8], посвященных поглощению на свободных носителях, плазменные эффекты не рассматривались. В работах [1–4] рассчитывалась функция $K(\omega)$ при рассеянии зонных электронов на ионизованных примесях, акустических фононах и продольных оптических колебаниях решетки с учетом кулоновского взаимодействия в электронной плазме. Работы [5, 6] посвящены поглощению ИК излучения свободными носителями при их рассеянии на примесях, а также устранению недостатков предыдущих исследований. Выражение для $K(\omega)$, полученное авторами [5, 6], дает более высокие значения по сравнению с результатами работы [4], а пики на частотах плазмон-фононных колебаний смещены в коротковолновую область спектра [5]. Антирезонанс в отличие от результатов [4] лежит не на частоте продольного оптического фонона ω_0, что является причиной появления третьего пика вблизи ω_0 [5]. Однако авторам работ [5, 6] также не удалось избежать недостатков, которые будут отмечены далее. Здесь мы рассчитаем электропроводность плазмы $\sigma(\omega)$ при рассеянии на примесях и *LO*-фононах с использованием флуктуационно-диссипативных соотношений и учтем поляронный эффект. Будем следовать схеме расчета, подробно изложенной в [9]. Согласно [9], усреднение матрицы плотности по состояниям фононов и хаотически расположенным примесям позволяет заменить взаимодействие электронов с фононами и примесями

$$V(r) = \sum_{\varkappa} v_{\varkappa} \rho_{\varkappa}^{e} (\rho_{-\varkappa}^{\mathrm{imp}} + \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{ph}}), \quad v_{\varkappa} = \frac{4\pi}{\varepsilon_{\infty} V \varkappa^{2}}, \tag{1}$$

запаздывающим взаимодействием электронов, которое характеризуется фазой влияния $\Phi(r, r') = \sum_{\varkappa'} \Phi_{\varkappa'}(r, r')$,

$$\Phi_\varkappa(r, r') = \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t} ds_1 \int_{t_1}^{s} ds_2 v_\varkappa^2 \left[\rho_\varkappa^e(s_1) - \rho_\varkappa'^e(s_1)\right] \times$$

$$\times \left\{\rho_{-\varkappa}^e(s_2) K_\varkappa(s_1 - s_2) - \rho'^e_{-\varkappa}(s_2) K_\varkappa^*(s_1 - s_2)\right\}, \tag{2}$$

впервые введенной Фейнманом в формализме континуального интегрирования [10]. Здесь ε_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, V — объем кристалла, $\rho_\varkappa^e = e \sum_k \exp(i\varkappa \mathbf{r}_k)$ — фурье-образ плотности заряда электронов, $\rho_\varkappa^{\mathrm{ph}}$ — плотность заряда, обусловленная колебаниями ионов в сплошной среде с высокочастотной проницаемостью ε_∞, $\rho_\varkappa^{\mathrm{imp}}$ — плотность заряда примесей,

$$K_\varkappa(s_1 - s_2) = \left\langle \left[\rho_\varkappa^{\mathrm{ph}}(s_1) + \rho_\varkappa^{\mathrm{imp}}(s_1)\right] \left[\rho_{-\varkappa}^{\mathrm{ph}}(s_2) - \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{imp}}(s_2)\right]\right\rangle_{\mathrm{ph,\,imp}}. \tag{3}$$

В формуле (3) необходимо выполнить усреднение по равновесной матрице плотности фононов и по хаотически расположенным примесям. В работах [9, 10] гамильтониан фононов был выбран в гармоническом, а электрон-фононное взаимодействие в линейном по смещениям ионов приближении. Здесь мы вычислим корреляционную функцию (3) с использованием флуктуационно-диссипативной теоремы в общем случае. Прежде всего отметим, что необходимо учесть взаимодействие фононов с примесями. Это приводит к тому, что корреляционная функция типа

$$\langle \rho_\varkappa^{\mathrm{imp}}(s_1) \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{ph}}(s_2)\rangle_{\mathrm{ph,\,imp}}$$

отлична от нуля, и мы получаем

$$K_\varkappa(s_1 - s_2) = \langle \rho_\varkappa^{\mathrm{ph}}(s_1) \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{ph}}(s_2)\rangle_{\mathrm{ph}} + \langle \rho_\varkappa^{\mathrm{imp}}(s_1) \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{imp}}(s_2)\rangle_{\mathrm{imp}} \cdot \frac{\varepsilon_\infty^2}{\varepsilon_{\mathrm{ph}}^2(\varkappa, 0)}. \tag{4}$$

Выражение для продольной диэлектрической функции $\varepsilon_{\mathrm{ph}}(\varkappa, \omega)$ по определению имеет вид [11]

$$\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_{\mathrm{ph}}(\varkappa, \omega)} = 1 + \frac{2v_\varkappa}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \operatorname{Im} \langle \rho_\varkappa^{\mathrm{ph}}(t) \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{ph}}(0)\rangle_{\mathrm{ph}}. \tag{5}$$

Усреднение в (4) и (5) проводится по состояниям невзаимодействующих фононов и примесей. Их взаимодействие привело к появлению множителя $[\varepsilon_\infty/\varepsilon_{\mathrm{ph}}(\varkappa, 0)]^2 = (\varepsilon_\infty/\varepsilon_0)^2$ в примесной части корреляционной функции (4). В работах [4–6] взаимодействие примесей с фононами не учитывалось. Правильный учет этого взаимодействия, которое приводит к ионной экранировке потенциала примеси, выражается в замене ε_∞ на статическую диэлектрическую проницаемость ε_0 в электрон-примесном взаимодействии (1).

Уравнение (5) можно обратить с помощью флуктуационно-диссипативной теоремы [11] и вычислить корреляционную функцию

$$K_\varkappa^{\mathrm{ph}}(s_1 - s_2) = \langle \rho_\varkappa^{\mathrm{ph}}(s_1) \rho_{-\varkappa}^{\mathrm{ph}}(s_2)\rangle_{\mathrm{ph}} =$$

$$= \frac{\hbar}{\pi \alpha_\varkappa} \int_{-\infty}^{\infty} n_\omega e^{j\omega (s_1 - s_2)} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon^*_{\text{ph}}(\varkappa, \omega)} \right\} d\omega, \quad n_\omega = \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_0 T} \right) - 1 \right]}. \tag{6}$$

Усредняя по хаотически расположенным примесям, находим

$$K_\varkappa^{\text{imp}} = \frac{\varepsilon_\infty^2}{\varepsilon_{\text{ph}}^2 (\varkappa, 0)} N_{\text{imp}} e^2 V. \tag{7}$$

Формулы (2)—(7) определяют фазу влияния фононов и примесей на электроны. В гармоническом приближении

$$\varepsilon_{\text{ph}}(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_0^2 - (\omega + i\gamma)^2}{\omega_{TO}^2 - (\omega + i\gamma)^2}, \quad \omega_{TO} = \omega_0 \left(\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0} \right)^{1/2}. \tag{8}$$

С учетом (8) без учета затухания фононов ($\gamma \to 0$) легко получить

$$K_\varkappa^{\text{ph}}(t) = \frac{\hbar \varepsilon_0 \varepsilon_\infty}{2 V_\varkappa \varepsilon^*} T_{\omega_0}(t), \tag{9}$$

где

$$\frac{1}{\varepsilon^*} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0},$$

$$T_\omega(t) = n_\omega e^{i\omega t} + (n_\omega + 1) e^{-i\omega t}. \tag{10}$$

При этом для фазы влияния фононов на электроны получим известное фейнмановское выражение [10]. Формула (6) позволяет легко учесть затухание фононов. Для этого параметр γ надо считать конечной величиной. При $\gamma \ll \omega_0$ функция $K_\varkappa^{\text{ph}}(t)$ (9) получает дополнительный множитель $\exp(-\gamma t)$.

Согласно работе [9], дальнейший расчет электропроводности электронов сводится к усреднению $\langle \rho_\varkappa^e(s_1) \rho_{-\varkappa}^e(s_2) \rangle_E$ по неравновесной матрице плотности — по состояниям системы в электрическом поле E. С учетом второй кумулянты по полю [9] ($\mathbf{E} \parallel 0z$)

$$\langle \rho_\varkappa^e(s_1) \rho_{-\varkappa}^e(s_2) \rangle_E = \frac{\sigma(\omega) \varkappa_z}{N_e \omega e} E(s_1) \left[e^{i\omega(s_1 - s_2)} - 1 \right] \langle \rho_\varkappa^e(s_1) \rho_{-\varkappa}^e(s_2) \rangle. \tag{11}$$

Слагаемые нулевого порядка по напряженности электрического поля $E(t)$ вклада не дают. Среднее в формуле (11) вычисляется по равновесной матрице плотности. С использованием результата (11) находим

$$\sigma(\omega) = i \frac{N_e e^2}{m^*} \left[\omega + \Delta(\omega) + \frac{i}{\tau(\omega)} \right], \tag{12}$$

где время релаксации τ и сдвиг частоты Δ определяются выражением

$$\Delta(\omega) + i/\tau(\omega) = 2 (\hbar \omega N_e m^* V)^{-1} \sum_\varkappa \alpha_\varkappa^2 \varkappa_z^2 \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{t} [1 - e^{i\omega(t-s)}] \operatorname{Im} \left\{ \langle \rho_\varkappa^e(t) \rho_{-\varkappa}^e(s) \rangle K_\varkappa(t - s) \right\} ds. \tag{13}$$

Вклад в τ и Δ дает взаимодействие электронов с диссипативной подсистемой фононов и примесей, так как электрон-электронное взаимодействие коммутирует с оператором плотности тока. Результаты работы [9] можно получить из (12), (13), если для функции $K_\varkappa(t)$ использовать формулу (9) и $\langle \rho^e_\varkappa(t)\,\rho^e_{-\varkappa}(s)\rangle$ вычислить методом кумулянт в одноэлектронном приближении и ограничиться учетом второй кумулянты по методу, изложенному в [9]. Здесь корреляционную функцию $\langle \rho^e_\varkappa(t)\,\rho^e_{-\varkappa}(s)\rangle$ мы вычислим точно, используя флуктуационно-диссипативные соотношения. Прежде всего заметим, что τ и Δ выражаются через две функции:

$$A^{(\omega)}_\varkappa = \frac{2u_\varkappa}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} e^{i\omega(t-s)}\,\mathrm{Im}\,\langle \rho^e_\varkappa(t)\,\rho^e_{-\varkappa}(s)\rangle\,ds, \tag{14}$$

$$B_\varkappa(\omega) = \frac{2u_\varkappa}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} e^{i\omega(t-s)}\,\mathrm{Re}\,\langle \rho^e_\varkappa(t)\,\rho^e_{-\varkappa}(s)\rangle\,ds. \tag{15}$$

Фактически же достаточно вычислить одну из них, так как они связаны между собой соотношениями типа Крамерса—Кронига:

$$B_\varkappa(\omega) = \frac{1}{i\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} n_\nu\left(\frac{1}{\omega+\nu+i\gamma}+\frac{1}{\omega-\nu-i\gamma}\right)\mathrm{Im}\left\{A_\varkappa(\nu)\right\}d\nu. \tag{16}$$

Используя определение полной продольной диэлектрической функции $\varepsilon(\varkappa,\omega)$, аналогичное формуле (5), с тем отличием, что необходимо заменить $\varepsilon_{\mathrm{ph}}(\varkappa,\omega)$ на $\varepsilon(\varkappa,\omega)$ и $\rho^{\mathrm{ph}}_\varkappa$ на полную плотность заряда, а также флуктуационно-диссипативную теорему [11], получим

$$A_\varkappa(\omega) = \frac{\varepsilon^2_{\mathrm{ph}}(\varkappa,\omega)}{\varepsilon^2_\infty}\left[\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon(\varkappa,\omega)}-\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_{\mathrm{ph}}(\varkappa,\omega)}\right]. \tag{17}$$

Формулы (12)—(17) дают решения задачи об определении электропроводности $\sigma(\omega)$, а следовательно, и коэффициента ИК поглощения света $K(\omega)$ электронной плазмой в полупроводниках:

$$K(\omega) = \frac{4\pi}{cn}\,\mathrm{Re}\,\sigma(\omega). \tag{18}$$

Поскольку эти формулы получены с помощью флуктуационно-диссипативной теоремы, они являются точными и не предполагают какого-либо специального вида диэлектрической функции $\varepsilon(\varkappa,\omega)$. В приближении случайных фаз [1–6]

$$\varepsilon(\varkappa,\omega) = \varepsilon_{\mathrm{ph}}(\varkappa,\omega) - \frac{4\pi e^2}{\varkappa^2}\,Q(\varkappa,\omega),$$

$$Q(\varkappa,\omega) = \frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{n_k+n_{k+\varkappa}}{\hbar\omega-\varepsilon_{k+\varkappa}+\varepsilon_k+i\gamma},\quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m^*}. \tag{19}$$

Здесь n_k — функция распределения Ферми—Дирака.

Рассмотрим вклад в τ и Δ от взаимодействия электронной плазмы с продольными оптическими колебаниями решетки:

$$\frac{i}{\tau_{\mathrm{ph}}(\omega)} + \Delta_{\mathrm{ph}}(\omega) = \frac{\hbar}{2\pi\omega N_e m^* V}\sum_\varkappa \varkappa_z^2\int\limits_{-\infty}^{\infty} n_\nu C_\varkappa(\omega,\nu)\,\mathrm{Im}\left\{\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon^*_{\mathrm{ph}}(\varkappa,\nu)}\right\}d\nu, \tag{20}$$

$$C_\varkappa(\omega,\nu) = 2\,\mathrm{Re}\,A_\varkappa(\nu) - A_\varkappa(\omega+\nu) - A_\varkappa(\omega-\nu) +$$

$$+\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} n_\mu\,[D(\mu,\nu,0) - D(\mu,\nu,\omega)]\,\mathrm{Im}\left\{A_\varkappa(\mu)\right\}d\mu, \tag{21}$$

где

$$D(\mu,\nu,\omega) = \frac{1}{\omega-\nu+\mu+i\gamma} + \frac{1}{\omega-\nu-\mu+i\gamma} -$$

$$-\frac{1}{\omega+\nu+\mu+i\gamma} - \frac{1}{\omega+\nu-\mu+i\gamma}.$$

Выполняя в (20) интегрирование по ν в гармоническом приближении по $\varepsilon_{\text{ph}}(\varkappa,\omega)$ (8), для времени релаксации получаем выражение

$$\frac{1}{\tau_{\text{ph}}(\omega)} = \frac{\hbar\omega_0\varepsilon_\infty}{2\omega N_e m^* V\varepsilon^*}\sum_\varkappa \varkappa_z^2\,[G_\varkappa(\omega,\omega_0) - G_\varkappa(\omega,-\omega_0)], \tag{22}$$

где

$$G_\varkappa(\omega,\omega_0) = (n_{\omega_0} - n_{\omega+\omega_0})\,\mathrm{Im}\left\{A^*_\varkappa(\omega+\omega_0)\right\}.$$

В пределе больших частот $\omega \gg \omega_0$ ионной поляризации можно пренебречь и положить $\varepsilon_{\text{ph}}(\varkappa,\omega) = \varepsilon_\infty$. В этом пределе формула (22) переходит в результат работ [1] и [4]. Функция (22) описывает в общем случае резонансы на комбинационных частотах связанных плазмон-фононных мод $\omega = \omega_0 \pm \omega_\pm$, обусловленные нулями диэлектрической функции $\varepsilon(\varkappa,\omega\pm\omega_0)$. Поглощение ИК излучения электронной плазмой при рассеянии на ионизованных примесях характеризуется функциями

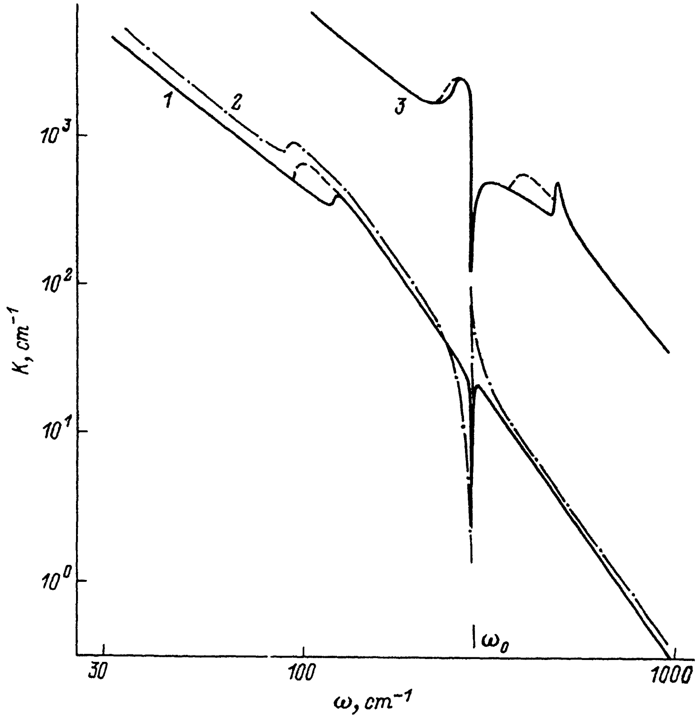
$$\frac{i}{\tau_{\text{imp}}(\omega)} + \Delta_{\text{imp}}(\omega) = \frac{4\pi N_{\text{imp}}e^2}{\omega N_e m^* V\varepsilon_\infty}\sum_\varkappa \frac{\varkappa_z^2}{\varkappa^2}\,\frac{\varepsilon_\infty^2}{\varepsilon_{\text{ph}}^2(\varkappa,0)}\,[A_\varkappa(0) - A_\varkappa(\omega)]. \tag{23}$$

Заметим, что $\mathrm{Im}\,A_\varkappa(0) = 0$, поэтому в выражение для $\tau(\omega)$ не могут войти функции $\varepsilon(\varkappa,0)$ и $Q(\varkappa,0)$, как в работах [4–6]. В общем случае, согласно формуле (23), коэффициент поглощения имеет резонансы вблизи точек $\omega = \omega_\pm$, $\omega = \omega_{TO}$ и антирезонансы при $\omega = \omega_0$.

На рисунке представлены спектры поглощения ИК излучения, рассчитанные по формуле (18) в приближении $\omega\tau \gg 1$. Использованы параметры кристалла GaAs [4]. Сравнение кривых *1* и *2* при $N_e = 10^{17}$ см$^{-3}$ показывает, что предложенные выше формулы (18) и (23) дают более низкие значения коэффициента поглощения, чем полученные в [4] и [5]. Кроме этого, положение и ширина резонансных пиков вдали от ω_0 существенным образом зависят от затухания фононов.

В заключение отметим, что приближение случайных фаз (19) легко можно обобщить на случай произвольной электрон-фононной и электрон-примесной связи. Функцию $Q(\varkappa,\omega)$ (19) в случае невырожденной плазмы при этом нужно заменить на

$$\widetilde{Q}(\varkappa,\omega) = \frac{2N_e}{\hbar}\int_0^\infty e^{i\omega t}\,\mathrm{Im}\,e^{-\varkappa^2 D(t)}dt, \tag{24}$$



Коэффициент поглощения света в GaAs при $T = 4$ K. *1*, *3* — расчет по формуле (18) для $\gamma = 0$ (сплошные линии) и $\gamma = 0.001\ \omega_0$ (штриховые); *2* — результат работы [4]. Параметры GaAs для расчета взяты из [4]. Концентрация n, см$^{-3}$: *1*, *2* — 10^{17}, *3* — 10^{18}.

где функция $D(t)$ с помощью флуктуационно-диссипативной теоремы может быть выражена через электропроводность поляронов произвольной силы связи, согласно формуле (27) из работы [9], полученной в одноэлектронном приближении. Этот результат получается, если при вычислении функции $A_\varkappa(\omega)$ (14) произвести разложение по кулоновскому взаимодействию электронов и одной компоненте фазы влияния $\Phi_{\varkappa'}$ при $\varkappa' = \varkappa$, а затем выполнить простейшее расцепление (факторизация Хартри) в духе приближения случайных фаз [11]. При этом

$$A(\varkappa, \omega) = \frac{4\pi e^2}{\varkappa^2} \widetilde{Q}(\varkappa, \omega) \left[1 - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_{\text{ph}}(\varkappa, \omega)} \frac{4\pi e^2}{\varkappa^2} \widetilde{Q}(\varkappa, \omega)\right]^{-1}. \tag{25}$$

Приближение (25), по-видимому, справедливо в случае достаточно разреженной плазмы, когда поляронный радиус меньше дебаевского радиуса экранировки.

Авторы благодарны В. А. Коварскому за ряд полезных замечаний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] R. Sirko, D. Mills. Phys. Rev. B, 18, 4373 (1978).
[2] R. Sirko, D. Mills. Phys. Rev. B, 18, 5637 (1978).
[3] S. Katayama, D. Mills, R. Sirko. Phys. Rev. B, 28, 6079 (1983).
[4] P. Kleinert, M. Ciehler. Phys. St. Sol. (b), 136, 763 (1986).
[5] А. И. Касиян, И. В. Сур. ФТП, 22, 1127 (1988).
[6] B. E. Sernellius. Phys. Rev. B, 36, 1082 (1987).
[7] В. Л. Гуревич, И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов. ФТТ, 4, 1252 (1962).

[8] R. Wolfe. Proc. Phys. Soc., A67, 74 (1954).
[9] А. А. Клюканов, А. П. Мунтян, Е. П. Покатилов. ФТТ, 22, 1284 (1980).
[10] R. P. Feynman, R. W. Hellwarth, C. K. Iddings, P. M. Plattzman. Phys. Rev., 127, 1004 (1962)
[11] Ф. Платцман, П. Вольф. Волны и взаимодействия в плазме твердого тела, 436. М. (1975).

Редактор Л. В. Шаронова