

оставались параболическими. Таким образом, частотная зависимость коэффициента поглощения при прямых запрещенных переходах имеет вид

$$\gamma \sim \frac{1}{\omega} (\omega - \omega_m)^{3/2}. \quad (7.16)$$

Как уже отмечалось, формулы (7.13) и (7.16) справедливы при не слишком больших значениях разности  $\omega - \omega_m$ : энергии электронов и дырок должны быть такими, чтобы законы дисперсии оставались параболическими и чтобы имело смысл разложение (7.3). Количественно эти условия можно сформулировать только применительно к тому или иному конкретному материалу. Следует также иметь в виду, что формулы (7.12) — (7.16) оказываются несправедливыми не только при очень больших частотах, но и при частотах, очень близких к пороговой. Дело в том, что вывод этих формул основан на зонной теории, в рамках которой носители заряда рассматриваются как невзаимодействующие частицы. Фактически, однако, такое взаимодействие имеет место: электрон и дырка испытывают взаимное кулоновское притяжение. Как мы видели в § XVII.7, характерная энергия последнего — порядка боровской энергии в кристалле  $\frac{m_r e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2}$ . Следует ожидать поэтому, что принятый выше упрощенный подход будет оправдан, лишь если

$$\hbar\omega - E_g \gg \frac{m_r e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2}. \quad (7.17)$$

Тщательное теоретическое исследование [6] действительно показывает, что в условиях (7.17) формулы (7.12)—(7.16) остаются в силе, в то время как при меньших частотах частотная зависимость коэффициента поглощения оказывается иной.

Во многих кристаллах боровская энергия, фигурирующая в правой части (7.17), сравнительно невелика. Так, в арсениде галлия и фосфиде индия она составляет около 0,004 эВ, в антимониде галлия — около 0,003 эВ. По этой причине область применимости формул (7.12)—(7.16) оказывается довольно широкой. Исключения составляют лишь узкозонные полупроводники, в которых отклонения законов дисперсии от параболических становятся заметными уже при довольно малых энергиях носителей заряда.

## § 8. Критические точки

Обратимся к изучению коэффициента поглощения при прямых разрешенных переходах в области частот, заметно превышающих пороговую. Здесь надо прежде всего выяснить, какие точки в зоне Бриллюэна представляют наибольший интерес. Для этой цели вернемся вновь к формуле (7.6). Фигурирующий в ней тройной

интеграл удобно вычислять, интегрируя сначала по поверхности

$$E_c(\mathbf{p}) - E_v(\mathbf{p}) \equiv E = \text{const}, \quad (8.1)$$

а затем по всем таким поверхностям, т. е. по всем значениям  $E$  (сравните с аналогичной выкладкой для плотности состояний в § V.7). Обозначив через  $dS$  элемент площади на поверхности (8.1), получим, как и в § V.7,

$$\rho_{\text{комб}}(\omega) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{p}}E|} \Big|_{E=\hbar\omega}. \quad (8.2)$$

Вспоминая формулу (IV.1.3), видим, что

$$|\nabla_{\mathbf{p}}E| = |\mathbf{v}_c(\mathbf{p}) - \mathbf{v}_v(\mathbf{p})|, \quad (8.3)$$

где  $\mathbf{v}_c(\mathbf{p})$  и  $\mathbf{v}_v(\mathbf{p})$  — скорости электрона с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  в зонах проводимости и валентной.

Интеграл в (8.2) представляет собой гладкую функцию частоты при всех значениях  $\omega$ , кроме тех, при которых знаменатель обращается в нуль:

$$|\nabla_{\mathbf{p}}E|_{E=\hbar\omega} = 0. \quad (8.4)$$

Если выполнено равенство (8.4), то интеграл должен иметь особенность: будет расходиться либо сама комбинированная плотность состояний, либо какие-то ее производные по  $\omega$  (как мы увидим, в трехмерном случае сам интеграл в (8.2) остается конечным). Согласно (8.3) так обстоит дело, если междузонный переход происходит между состояниями с одинаковыми скоростями электронов (в частности, возможен и случай  $\mathbf{v}_c(\mathbf{p}) = \mathbf{v}_v(\mathbf{p}) = 0$ ). Точки в зоне Бриллюэна, для которых

$$|\mathbf{v}_c(\mathbf{p}) - \mathbf{v}_v(\mathbf{p})| = 0, \quad (8.5)$$

называются *критическими*. Соответствующие сингулярности плотности состояний и коэффициента поглощения называются особенностями Ван-Хова.

Можно указать два типа критических точек:

1) критические точки первого рода:

$$\nabla_{\mathbf{p}}E_c(\mathbf{p}) \equiv \mathbf{v}_c(\mathbf{p}) = 0, \quad \nabla_{\mathbf{p}}E_v(\mathbf{p}) \equiv \mathbf{v}_v(\mathbf{p}) = 0; \quad (8.6a)$$

2) критические точки второго рода:

$$\nabla_{\mathbf{p}}E_c(\mathbf{p}) = \nabla_{\mathbf{p}}E_v(\mathbf{p}) \neq 0. \quad (8.6b)$$

Как правило, условия (8.6a) выполняются только в силу тех или иных соотношений симметрии в зоне Бриллюэна. Так, например, в гл. IV было указано, что энергия электрона есть четная функция квазиимпульса и, следовательно, градиенты  $\nabla_{\mathbf{p}}E_c(\mathbf{p})$  и  $\nabla_{\mathbf{p}}E_v(\mathbf{p})$  суть функции нечетные. Отсюда явствует, что если в центре зоны Бриллюэна энергетические зоны не вырождены, то там

расположена критическая точка. В произвольных точках зоны Бриллюэна критические точки первого рода могут возникнуть только случайно. С другой стороны, равенства (8.6б) в принципе могут удовлетворяться при любых значениях  $\mathbf{p}$  (при каких именно — зависит от явного вида законов дисперсии  $E_c(\mathbf{p})$  и  $E_v(\mathbf{p})$ ). По этой причине критические точки второго рода встречаются гораздо чаще, нежели первого.

Согласно формуле (V.7.8) и аналогичной ей формуле для  $N_v(E)$  в критических точках первого рода особенности имеет не только комбинированная плотность состояний, но и отдельно плотности состояний в валентной зоне и в зоне проводимости. В критических точках второго рода сингулярной оказывается только комбинированная плотность состояний.

Критические точки первого рода представляют особый интерес для исследования структуры зон. Действительно, вблизи них плотности состояний  $N_c(E)$  и  $N_v(E)$  изменяются наиболее быстро; с другой стороны, в пространстве между ними функции  $N_c(E)$  и  $N_v(E)$  — гладкие, и их можно аппроксимировать путем интерполяции от одной критической точки до другой. Таким путем, определив из опыта положения критических точек первого рода, можно восстановить вид плотностей состояний — тем точнее, чем больше критических точек известно. Точно так же, определив положения ряда критических точек обоих типов, можно восстановить вид комбинированной плотности состояний. Отсюда явствует, что в качестве  $\mathbf{p}_0$  в (7.3) надо выбирать именно критические точки.

Как видно из равенств (8.6а), критические точки первого рода отвечают потолку и дну зоны, а также седловым точкам функций  $E_c(\mathbf{p})$  и  $E_v(\mathbf{p})$ . С одной из таких точек мы уже имели дело в предыдущем параграфе, рассматривая междузонные оптические переходы вблизи порога поглощения. Как видно из формулы (7.12), функция  $\rho_{\text{комб}}(\omega)$  действительно имеет особенность при  $\hbar\omega = E_g$ : производная

$$\frac{d\rho_{\text{комб}}}{d\omega} \sim (\hbar\omega - E_g)^{-1/2} \xrightarrow{\hbar\omega \rightarrow E_g} \infty. \quad (8.7)$$

Критические точки второго рода отвечают экстремумам и седловым точкам только разности  $E(\mathbf{p}) = E_c(\mathbf{p}) - E_v(\mathbf{p})$ . Можно доказать, что периодическая функция  $E(\mathbf{p})$  всегда имеет такие точки.

Исследуем поведение комбинированной плотности состояний в окрестности критической точки (безразлично, первого или второго рода). Удобно совместить с ней начало координат в  $\mathbf{p}$ -пространстве (в противном случае величины  $\mathbf{p}$  в следующих ниже формулах надо было бы заменить на  $\mathbf{p} - \mathbf{p}_0$ ). В силу (8.4) функцию  $E$  вблизи данной критической точки можно представить в виде

$$E(\mathbf{p}) = E(0) + \frac{1}{2} m_{\alpha\beta}^{-1} p_\alpha p_\beta + \dots \quad (8.8)$$

Здесь многоточие обозначает члены высшего порядка малости, а величины  $m_{\alpha\beta}^{-1}$  суть компоненты тензора обратной эффективной массы в точке  $\mathbf{p} = 0$ . Направим оси координат в  $\mathbf{p}$ -пространстве вдоль главных осей тензора  $m_{\alpha\beta}^{-1}$ , обозначив, как всегда, через  $m_{\alpha}^{-1}$  главные значения этого тензора. Тогда вместо (8.8) мы получим

$$E(\mathbf{p}) = E(0) + \sum_{\alpha=x, y, z} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}}. \quad (8.8')$$

Эффективные массы  $m_{\alpha}$  могут иметь разные знаки. В зависимости от их сочетания здесь имеются четыре случая:

1) Особая точка типа  $M_0$  (минимум): все три величины  $m_{\alpha}$  положительны.

2) Особая точка типа  $M_1$  (седловая точка): одна из величин  $m_{\alpha}$  (для определенности  $m_z$ ) отрицательна, две — положительны.

3) Особая точка типа  $M_2$  (седловая точка): две из величин  $m_{\alpha}$  отрицательны, одна (для определенности  $m_z$ ) — положительна.

4) Особая точка типа  $M_3$  (максимум): все три величины  $m_{\alpha}$  отрицательны.

Для вычисления функции  $\rho_{\text{комб}}(\omega)$  в условиях (8.8') удобно воспользоваться выражением (7.6). Следует лишь помнить о необходимости ограничить область интегрирования окрестностью критической точки, где только и имеет смысл разложение (8.8'). Произведем в выражении (7.6) замену переменных интегрирования, полагая

$$p_{\alpha} = \sqrt{2} q_{\alpha} |m_{\alpha}|^{1/2}.$$

Получим

$$\rho_{\text{комб}}(\omega) = \frac{2^{5/2} |m_x m_y m_z|^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} I, \quad (8.9)$$

где

$$I = \begin{cases} \int \delta(q^2 + E_{\text{кр}} - \hbar\omega) dq, & \text{точка } M_0, \quad (8.10a) \\ \int \delta(-q^2 + E_{\text{кр}} - \hbar\omega) dq, & \text{точка } M_3, \quad (8.10б) \\ \int \delta(q_x^2 + q_y^2 - q_z^2 + E_{\text{кр}} - \hbar\omega) dq, & \text{точка } M_1, \quad (8.10в) \\ \int \delta(-q_x^2 - q_y^2 + q_z^2 + E_{\text{кр}} - \hbar\omega) dq, & \text{точка } M_2. \quad (8.10г) \end{cases}$$

Здесь

$$E_{\text{кр}} \equiv E(0) = E_c(0) - E_v(0)$$

есть разность между энергиями электрона в зоне проводимости и в валентной зоне, вычисленная в критической точке. Так, в случае поглощения у порога в прямом полупроводнике, рассмотренном в § 7,  $E_{\text{кр}} = E_g$  — ширине запрещенной зоны.

Интеграл  $I$  для точки типа  $M_0$  рассматривался в § 7. Опуская несущественные множители, не зависящие от частоты, мы имеем:

$$\text{Точка } M_0: \rho_{\text{комб}}(\omega) \sim \begin{cases} (\hbar\omega - E_{\text{кр}})^{1/2}, & \hbar\omega \geq E_{\text{кр}}, \\ 0, & \hbar\omega < E_{\text{кр}}. \end{cases} \quad (8.11a)$$

Аналогичный результат получается и для точки типа  $M_3$ . Действительно, пользуясь соотношением (Приложение IV)

$$\delta(-q^2 + E_{\text{кр}} - \hbar\omega) = \delta(q^2 - E_{\text{кр}} + \hbar\omega),$$

мы получаем:

$$\text{Точка } M_3: \rho_{\text{комб}}(\omega) \sim \begin{cases} (E_{\text{кр}} - \hbar\omega)^{1/2}, & \hbar\omega \leq E_{\text{кр}}, \\ 0, & \hbar\omega > E_{\text{кр}}. \end{cases} \quad (8.11б)$$

Как и в точке  $M_0$ , комбинированная плотность состояний имеет здесь корневую особенность.

Обратимся теперь к точкам типа  $M_1$  и  $M_2$ . Введем в интеграле (8.10в) цилиндрические координаты, полагая

$$q_x = q_{\perp} \cos \varphi, \quad q_y = q_{\perp} \sin \varphi, \quad dq = q_{\perp} dq_{\perp} d\varphi dq_z.$$

Получим

$$\begin{aligned} I &= 2\pi \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} q_{\perp} dq_{\perp} \int dq_z \delta(E_{\text{кр}} - \hbar\omega + q_{\perp}^2 - q_z^2) = \\ &= 2\pi \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} q_{\perp} dq_{\perp} (E_{\text{кр}} - \hbar\omega + q_{\perp}^2)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Нижний предел  $q_{\min}$  находим из условия положительности выражения в скобках:

$$q_{\min} = \begin{cases} (\hbar\omega - E_{\text{кр}})^{1/2}, & \hbar\omega \geq E_{\text{кр}}, \\ 0 & \hbar\omega < E_{\text{кр}}. \end{cases} \quad (8.13)$$

Верхний предел  $q_{\max}$  определяется размерами области, в которой справедливо разложение (8.8'); как будет видно из дальнейшего, точное его значение несущественно.

Вычисляя интеграл (8.12), мы получаем:

$$\text{Точка } M_1: \rho_{\text{комб}}(\omega) \sim \begin{cases} (E_{\text{кр}} - \hbar\omega - q_{\max}^2)^{1/2} - (E_{\text{кр}} - \hbar\omega)^{1/2}, & \hbar\omega \leq E_{\text{кр}}, \\ (E_{\text{кр}} - \hbar\omega - q_{\max}^2)^{1/2} & \hbar\omega > E_{\text{кр}}. \end{cases} \quad (8.11в)$$

Таким образом, здесь комбинированная плотность состояний имеет излом в точке  $\hbar\omega = E_{\text{кр}}$ , точное значение  $q_{\max}$  при этом роли не играет.

Аналогично вычисляется и интеграл (8.10г). Мы имеем:

$$\text{Точка } M_2: \rho_{\text{комб}}(\omega) \sim \begin{cases} (\hbar\omega - E_{\text{кр}} + q_{\text{max}}^2)^{1/2} & \hbar\omega < E_{\text{кр}}, \\ (\hbar\omega - E_{\text{кр}} + q_{\text{max}}^2)^{1/2} - (\hbar\omega - E_{\text{кр}})^{1/2}, & (8.11г) \\ \hbar\omega \geq E_{\text{кр}}. \end{cases}$$

Здесь также имеется излом в точке  $\hbar\omega = E_{\text{кр}}$ .

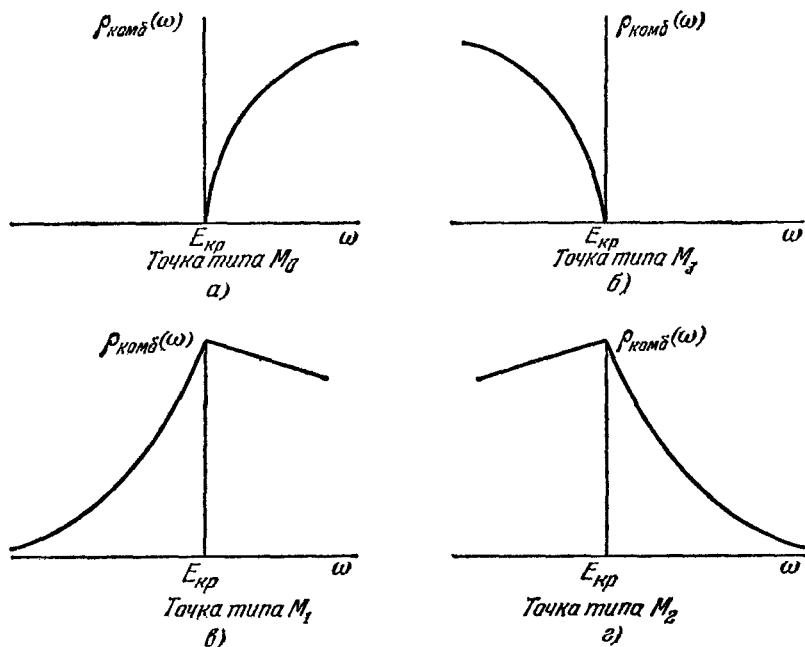


Рис. 18.9. Комбинированная плотность состояний вблизи критических точек (схематически).

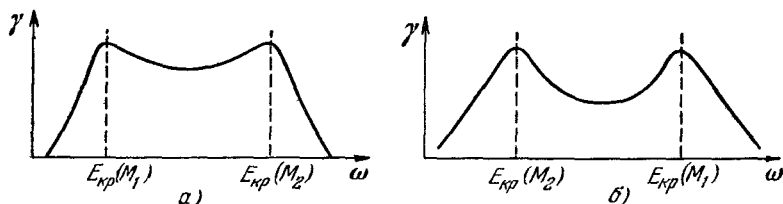


Рис. 18.10. Плато коэффициента поглощения, возникающее при наличии двух критических точек (схематически).

На рис. 18.9 схематически представлен ход комбинированной плотности состояний вблизи критических точек всех четырех

типов. Как видно из рис. 18.9, *в*, *г*, при наличии двух близких по энергии критических точек типа  $M_1$  и  $M_2$  на кривой  $\gamma(\omega)$  может возникнуть плато (рис. 18.10). Такие плато действительно иногда наблюдаются.

### § 9. Непрямые переходы

Рассмотрим не прямые междузонные переходы в веществах типа Ge и Si. Ограничимся при этом невырожденными материалами и областью частот вблизи пороговой. Функцию распределения электронов по энергиям будем считать равновесной:  $f_0(E_c(\mathbf{p})) \approx 0$ ,  $f_0(E_v(\mathbf{p})) \approx 1$ .

В рассматриваемых веществах точка  $\mathbf{p}_0$ , в которой расположен главный минимум зоны проводимости, находится недалеко от границы зоны Бриллюэна. Это означает, что не прямой переход, изображенный на рис. 18.4, *а*, связан с изменением квазиимпульса на величину порядка  $\hbar/a$ , где  $a$  — постоянная решетки. Как видно из формулы (XIV.5.18), вероятность передачи квазиимпульса  $|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|$  при рассеянии на заряженной примеси пропорциональна

$$\frac{N_t Z^2 e^4}{\epsilon^2 [\hbar^2 r_0^{-2} - (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2]}, \quad (9.1)$$

где  $N_t$  — концентрация примеси, заряд иона которой (в единицах  $e$ ) равен  $Z$ , а  $r_0$  — радиус экранирования. В не слишком сильно легированных материалах  $r_0 \gg a$ , и выражение (9.1) оказывается пропорциональным малой величине

$$N_t a^4 a_B^{-1},$$

где, как всегда, через  $a_B$  обозначен боровский радиус в кристалле. С другой стороны, согласно (XIV.4.15) вероятность рассеяния на акустических колебаниях решетки слабо зависит от величины передаваемого квазиимпульса. По этим причинам при не слишком большой концентрации заряженной примеси рассеяние носителей заряда на ней не играет заметной роли при не прямых междузонных переходах. Доминирующим — при всех температурах, представляющих экспериментальный интерес, — оказывается рассеяние на акустических колебаниях решетки \*). При этом возможны процессы, связанные как с поглощением, так и с испусканием фононов. В большинстве интересных полупроводников энергия взаимодействия электронов с фононами сравнительно невелика. Это позволяет ограничиться рассмотрением только однофононных процессов. Обозначим частоту и квазиволновой вектор фонона через  $\omega_{\mathbf{q}}$  и  $\mathbf{q}$ . Тогда

\*) Положение меняется в сильно легированных полупроводниках, когда из-за взаимодействия с атомами примеси изменяется сама структура энергетического спектра носителей заряда (гл. XIX).