

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

9.1. ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА

Распространение электромагнитного излучения в проводящей среде описывается уравнением затухающей волны

$$u(x, t) = U_0 e^{i\omega(t - \frac{x}{v})}, \quad (9.1)$$

где u — мгновенное значение напряженности электрической или магнитной составляющей электромагнитного поля; ω — частота и v — комплексная скорость ($v = c/N$, где N — комплексный показатель преломления и c — скорость света в пустоте).

Показатель преломления выражается через диэлектрическую постоянную κ , электропроводность σ и магнитную проницаемость μ (на данной частоте ω):

$$N^2 = \mu\kappa - \frac{i\mu\sigma}{\omega}. \quad (9.2)$$

Полагая

$$N = n - ik, \quad (9.3)$$

т. е. выделив в N вещественную и мнимую часть, получаем

$$n^2 - k^2 = \mu\kappa \quad \text{и} \quad 2nk = \frac{\sigma\mu}{\omega}. \quad (9.4)$$

Согласно (9.1) и (9.4)

$$u(x, t) = U_0 e^{i\omega t} e^{-\frac{i\omega n x}{c}} e^{-\frac{\omega k x}{c}}. \quad (9.5)$$

Согласно (9.5) интенсивность света (\mathcal{I}) убывает по закону

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_0 e^{-Kx}, \quad (9.6)$$

где

$$K = \frac{2\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda}. \quad (9.7)$$

Для того чтобы найти частотную зависимость коэффициента поглощения и преломления, мы должны изучить взаимодействие света с различными группами электронов.

СВЯЗАННЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ

Напомним классическое уравнение движения электрона

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + mg \frac{dx}{dt} + m\omega_0^2 x = eEe^{i\omega t}. \quad (9.8)$$

Решение этого уравнения

$$x = \frac{\frac{eE}{m}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega g} = \chi E, \quad (9.9)$$

где χ — атомная поляризуемость.

Поляризация единицы объема

$$P = eN_{\text{эл}}\chi, \quad (9.9a)$$

где $N_{\text{эл}}$ — число электронов в 1 см^3 , и диэлектрическая постоянная

$$\kappa = 1 + 4\pi\chi. \quad (9.10)$$

Полагая для связанных электронов $\sigma = 0$ и $\mu = 1$, из (9.2) находим $N^2 = \kappa$; следовательно, согласно (9.9) и (9.10)

$$(n - ik)^2 = \frac{4\pi N_{\text{эл}} e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega g)} + 1, \quad (9.11)$$

откуда

$$n^2 - k^2 - 1 = \frac{4\pi N_{\text{эл}} e^2}{m} \left[\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 g^2} \right] \quad (9.12)$$

и

$$2nk = \frac{4\pi N_{\text{эл}} e^2}{m\kappa_0} \frac{\omega g}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 g^2}. \quad (9.13)$$

Выражения (9.12) и (9.13) показывают, что при $\omega_0 \gg \omega$ $n \approx 1$ и $k = 0$; это значит, что электроны, расположенные на глубоких уровнях (рентгеновских термов), практически не участвуют в преломлении и поглощении видимого и инфракрасного излучения.

Вблизи $\omega = \omega_0$ имеется максимум поглощения, а затем при дальнейшем увеличении частоты K уменьшается, оставаясь все же больше, чем в длинноволновой области спектра. Квантовомеханическая теория дисперсии дает соотношения, подобные (9.12) и (9.13). Согласно этой теории атом можно описать набором независимых осцилляторов, каждый из которых характеризуется своей частотой ω_i , коэффициентом затухания g_i и силой f_i . Уравнения (9.12) и (9.13) заменяются:

$$n^2 - k^2 - 1 = 4\pi \sum \frac{N_{\text{эл}} e^2 f_i / m (\omega_i^2 - \omega^2)}{(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 g_i^2}, \quad (9.14)$$

$$2nk = 4\pi \sum \frac{N_{\text{эл}} e^2 f_i / m \omega g_i}{(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 g_i^2}, \quad (9.15)$$

где суммирование проводится по всем осцилляторам.

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ

В сильнолегированных полупроводниках начинает играть существенную роль поглощение и преломление света за счет колебаний свободных носителей в электромагнитном поле. При этом следует учитывать, что совершенно свободные носители не могут поглотить энергию излучения — их колебания лишь вносят свой вклад в коэффициент преломления.

Однако зонный электрон, движущийся (или колеблющийся) в электромагнитном поле, непрерывно испытывает столкновения, и если частота их достаточно велика, то значительная часть электромагнитной энергии превращается в тепловую. Этим объясняется поглощение света свободными носителями и его увеличение по мере приближения к низким частотам. Эти рассуждения нетрудно оформить количественно. Количество электромагнитной энергии в единице объема

$$\mathcal{E} = \frac{E^2}{4\pi}. \quad (9.16)$$

Коэффициент поглощения определяется соотношением $\mathcal{J} = \mathcal{J}_0 e^{-Kx}$, откуда

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial x} = -K\mathcal{J} \quad \text{и} \quad K = -\frac{\partial \mathcal{J}}{\mathcal{J} \partial x}, \quad (9.17)$$

но $\partial \mathcal{J} / \partial x$ — это мощность, поглотившаяся в единице объема и равная

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial x} = P = jE = \sigma E^2, \quad (9.18)$$

$$\mathcal{J} = \mathcal{E}c = \frac{cE^2}{4\pi}. \quad (9.19)$$

Следовательно,

$$K = \frac{\sigma E^2}{\frac{cE^2}{4\pi}} = \frac{4\pi\sigma}{c}, \quad (9.20)$$

где $\sigma = eun$, n — концентрация носителей и u — их подвижность (на данной частоте).

Таким образом, нахождение коэффициента поглощения сводится к определению частотной зависимости подвижности. Для решения последней задачи напишем уравнение движения электрона в электрическом поле:

$$m\dot{\bar{v}} - \gamma\bar{v} = eE. \quad (9.21)$$

Здесь \bar{v} — скорость дрейфа в электрическом поле E .

Второй член слева в (9.21) описывает потери энергии электрона при столкновениях. При постоянном поле $\dot{\bar{v}} = 0$ и $\bar{v} = eE/\gamma$; но, с другой стороны, мы знаем, что в этом случае $\bar{v} = uE = (e/m)\tau E$; сопоставляя эти два выражения для \bar{v} , находим, что $\gamma = m/\tau$ или $\gamma = \nu m$, где ν — число столкновений в секунду. Переходя теперь к переменному полю и полагая $E = E_0 \sin \omega t$, найдем из (9.21)

$$\bar{v} = \frac{e}{m} \frac{1}{\nu^2 + \omega^2} (\nu \sin \omega t + \omega \cos \omega t) E_0 \quad (9.22)$$

и

$$j = en\bar{v} = \frac{e^2 n}{m} \frac{\nu}{\nu^2 + \omega^2} E + \frac{e^2 n}{m} \frac{1}{\nu^2 + \omega^2} \frac{\partial E}{\partial t}. \quad (9.23)$$

Второй член в (9.23) не создает потерь (поглощения), так как он сдвинут на $\pi/2$ по фазе по отношению к напряжению (т. е. для него $j\bar{E} = 0$). Таким образом,

$$K = \frac{4\pi e^2 n \nu}{cm(\nu^2 + \omega^2)} = \frac{4\pi\sigma_0}{c} \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\nu}\right)^2}, \quad (9.24)$$

где σ_0 — электропроводность на постоянном токе.

В том случае, когда мы имеем дело с несколькими сортами носителей, выражение (9.24) должно быть заменено суммой по всем сортам носителей.

Дифференциальное уравнение (9.22) было решено в предположении, что τ , время релаксации, не зависит от скорости v (или, что то же самое, энергии носителей). Если отбросить это ограничение и положить, как мы это делали раньше, $l \sim \varepsilon^r$, то в выражении для коэффициента поглощения появляется дополнительный множитель

$$A_r = \frac{\Gamma(r+2) \Gamma(2-r)}{\left[\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \right]^2}, \quad (9.25)$$

где Γ — гамма-функция от соответствующих аргументов; например, при рассеянии на ионах примеси $A_r = 3,4$.

МЕЖЗОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Согласно формуле (2.53) вероятность перехода электрона из состояния ψ_1 в состояние ψ_2 под действием возмущения пропорциональна матричному элементу возмущения

$$M_{1,2} = \int \psi_1 V \psi_2 dv. \quad (9.26)$$

В рассматриваемом нами случае ψ_1 и ψ_2 — модулированные плоские волны, описывающие состояния электрона до и после перехода, V — энергия возмущения, т. е. световой волны:

$$\psi_1 = u_{k_1} \exp\left(2\pi i k_1 r - \frac{\mathcal{E}_1}{h} t\right), \quad (9.27)$$

$$\psi_2 = u_{k_2} \exp\left(2\pi i k_2 r - \frac{\mathcal{E}_2}{h} t\right) \quad (9.28)$$

и V — энергия электрона в переменном электромагнитном поле, равная

$$V = V_0 \exp[i(qr - \omega t)]. \quad (9.29)$$

Подставив выражения (9.27), (9.28) и (9.29) в (9.26), нетрудно убедиться, что в нем появятся множители

$$\exp[i(k_1 - k_2 - q)r] \text{ и } \exp\left[\frac{i(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2 - h\omega)t}{h}\right],$$

которые очень быстро периодически меняются во времени и пространстве за исключением случая, когда

$$k_1 - k_2 = q \quad (9.30)$$

$$\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2 = h\omega. \quad (9.31)$$

Умножив и левую и правую части (9.30) на h , перепишем его в виде

$$p_1 - p_2 = p_\Phi. \quad (9.32)$$

Таким образом, из теории переходов квантовой механики непосредственно вытекают законы сохранения энергии и импульсов (9.32). Импульс световой волны (фотона)

$$p_\Phi = \frac{h\omega}{c} \quad (9.33)$$

ничтожно мал по сравнению с импульсом электрона, поэтому из (9.30) непосредственно вытекает очень важное следствие:

$$k_1 \approx k_2. \quad (9.34)$$

Таким образом, под действием электромагнитного излучения возможны только «вертикальные» переходы, т. е. переходы, представленные на рис. 9.1, *a* в пространстве импульсов вертикальными стрелками.

Соотношение (9.34) является дополнением принципа Франка — Кондона, согласно которому под действием света возможны только вертикальные переходы. Это вытекает из того, что время взаимодействия с фотоном очень мало и поэтому электрон не успевает изменить за это время своего положения.

Соотношения (9.31) и (9.32) для свободного электрона не могут быть удовлетворены одновременно; это значит, что внутрizonные переходы могут происходить лишь при участии третьего тела. При наличии третьего тела (фонона, примесного атома или другого дефекта) в выражение (9.32) должна быть включена соответствующая энергия возмущения и в (9.31) и (9.32) появятся дополнительные члены, описывающие изменение импульса и энергии третьего тела (фонона или примесного атома). Таким образом, мы получаем два уравнения с тремя неизвестными, которые имеют бесчисленное число решений. Такие переходы (с участием фонона и фотона), при которых импульс электрона меняется, изображаются на энергетической диаграмме наклон-

ными стрелками и поэтому называются непрямыми *) (см. рис. 9.1, б, в, г).

С точки зрения сказанного выше, на первый взгляд, кажется, что не прямые переходы более вероятны, чем

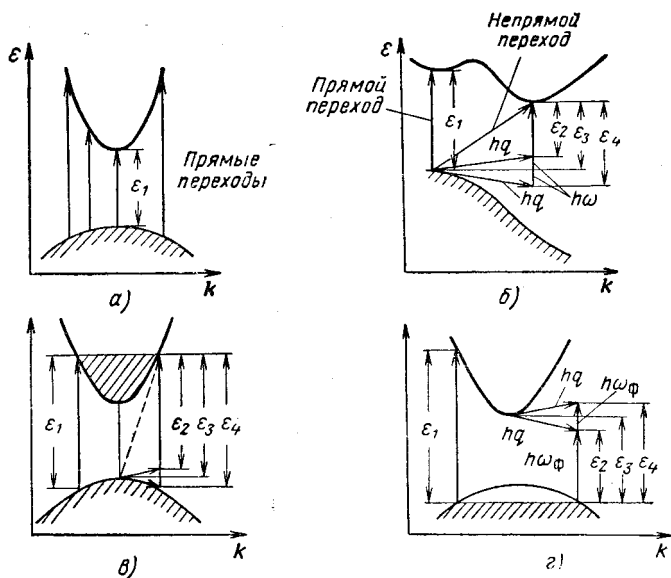


Рис. 9.1. Схема различного расположения зон в k -пространстве, иллюстрирующая прямые и не прямые переходы:

а — прямые межзонные переходы; (ϵ_1 — минимальная энергия фотона, определяющая красную границу полосы собственного поглощения и фотоэффекта); б — не прямые межзонные переходы с участием фононов при смещенных экстремумах; в — не прямые межзонные переходы при вырожденном электронном газе; г — не прямые межзонные переходы при вырожденном дырочном газе.

прямые. В действительности это неверно. Можно показать, что вероятность их значительно меньше, поскольку при вычислении вероятности перехода появляются еще множители типа $\int \Phi^2 dg$, связанные, например, с интегрированием по какой-то части «фононного конфигурационного пространства»; эти множители всегда меньше единицы.

*) В гл. 4 мы показали, что соударения электрона с фононом почти упруги, т. е. что в этом случае наоборот, изменение энергии электрона очень мало. При тройном соударении электрон — фотон — фонон одновременно меняются и энергия и импульс электрона.

Качественно это объясняется тем, что вероятность такого процесса так же мала, как одновременное столкновение трех частиц. Поэтому непрямые переходы начинают играть существенную роль в тех случаях, когда прямые переходы по какой-либо причине невозможны. Это иллюстрируется рис. 9.1, б, на котором представлен энергетический спектр полупроводника, в котором экстремумы валентной и свободной зоны смещены относительно друг друга. В случае, представленном на этом рисунке, прямые межзонные переходы возможны лишь при энергиях фотонов $\epsilon > \epsilon_1$, в то время как переходы с одновременным поглощением фона возможны начиная с энергии фотона ϵ_2 , переходы с испусканием фона — начиная с энергии ϵ_3 и, наконец, забросы под действием одного только теплового движения — начиная с энергии ϵ_4 . Как видно из рисунка, все четыре энергии активации различны:

$$\epsilon_1 > \epsilon_3 > \epsilon_4 > \epsilon_2.$$

Второй случай, когда непрямые переходы начинают играть существенную роль, проиллюстрирован рис. 9.1, в; на этом рисунке представлена зонная диаграмма полупроводника, в которой электронный газ в зоне проводимости находится в вырожденном состоянии. Здесь сохранены те же обозначения, что и на предыдущем рисунке, и имеет место то же соотношение между различными энергиями активации. На рис. 9.1, г представлена аналогичная ситуация для вырожденного дырочного полупроводника.

К сказанному выше следует добавить, что все три упомянутых выше типа поглощения (за счет прямых переходов, с захватом и испусканием фононов) обладают разной температурной зависимостью, так как вероятность прямых переходов непосредственно не связана с температурой, вероятность переходов с поглощением фононов пропорциональна числу последних, а переходы с излучением фона могут происходить спонтанно и вынужденно, вероятность вынужденных переходов также пропорциональна наличию фононов.

ЭКСИТОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ

Представление об экситонах *) (т. е. о возбужденных, но не проводящих состояниях кристалла) было введено в 1931 г.

*) Название «экситон» происходит от английского слова *excitation* — возбуждение.

Я. И. Френкелем для того, чтобы объяснить тот факт, что поглощение света, связанное с переходами электронов, не всегда сопровождается появлением фотопроводимости.

Рассмотрим экситонное состояние на примере цепочки из N одинаковых атомов, один из которых возбужден. Так как все атомы одинаковы, то энергия этого состояния не зависит от того, какой из атомов возбужден, и поэтому такое состояние было бы N -кратно вырождено, если бы не существовало возмущения — взаимодействия атомов. В результате этого взаимодействия такое локализованное состояние становится неустойчивым и образуется квазинепрерывная зона экситонных состояний, каждое из которых описывается плоской модулированной волной, движущейся с определенной скоростью по кристаллу.

При этом существенно подчеркнуть, что движение экситона — это *движение возбужденного состояния*, а не перенос заряда, т. е. не движение электрона или дырки в отдельности.

Качественно механизм этого движения можно представить следующим образом: электрон, находящийся в возбужденном состоянии на i -м атоме, переходит в нормальное состояние; освободившаяся при этом энергия передается валентному электрону соседнего атома и т. д.

Каждому возбужденному состоянию атома соответствует зона экситонных состояний. Таким образом, в кристалле должна быть целая серия экситонных зон, часть из которых может перекрываться. Пределом этой серии является зона проводимости, которая образуется в результате коллективизации уровней, соответствующих ионизации атома.

Мотт предложил рассматривать экситон как совместное движение электрона и дырки, вращающихся синхронно по квантованной орбите вокруг общего центра тяжести и одновременно движущихся поступательно по кристаллу. При этом радиус орбиты определяется главным квантовым числом, т. е. номером экситонного состояния (или экситонной зоны), а скорость поступательного движения — положением уровня в зоне.

На первый взгляд кажется, что спектр поглощения, обусловленный возбуждением экситонных состояний, должен состоять из серии постепенно расширяющихся полос, ширина каждой из которых равна ширине соответствующей экситонной зоны. В действительности это неверно: дело в том, что, как мы уже неоднократно упоминали, импульс

фотона $h\nu/c$ очень мал. Поэтому под действием света могут образовываться только неподвижные экситоны, соответствующие нижним состояниям каждой зоны. Поэтому спектр экситонного поглощения состоит из серии дискретных линий, расширяющихся с ростом температуры за счет тепловых колебаний атомов.

9. 2. ФОТОПРОВОДИМОСТЬ СПЕКТРАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Спектральное распределение fotocувствительности зависит от того, что является источником фотоэлектронов — примесные центры или валентная зона (рис. 9.2).

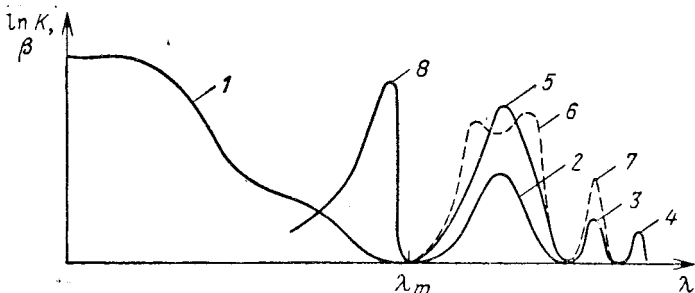


Рис. 9.2. Схема спектрального распределения поглощения и fotocувствительности:

1 — полоса собственного поглощения; 2 — примесное поглощение, соответствующее ионизации примесных атомов; 3 и 4 — кривые, соответствующие возбуждению примесных атомов; 5, 6 и 7 — кривые спектрального распределения fotocувствительности при примесном фотоэффекте; 8 — спектральное распределение fotocувствительности при собственном фотоэффекте.

В случае примесного фотоэффекта спектральное распределение fotocувствительности (кривая 5) обычно совпадает с широкой полосой поглощения, соответствующей переходу с примесных уровней в зону проводимости (кривая 2). В некоторых случаях, впрочем, в центре полосы поглощения наблюдается провал fotocувствительности (кривая 6), который объясняется тем, что в этой области при большой концентрации примесей поглощение очень велико и весь свет поглощается в поверхностном слое полупроводника. При этом скорость рекомбинации носителей оказывается очень велика (за счет поверхностной рекомбинации и большой концентрации фотоносителей) и время жизни носителей очень мало. Кроме того, эффективная