Письма в ЖЭТФ, том 19, вып. 3, стр. 145 – 149 5 февраля 1974 г.

ВЛИЯНИЕ ПЛАВНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ СОСТАВА ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТВЕРДОГО РАСТВОРА НА ФОРМУ КРАЯ СОБСТВЕННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

С.Н.Артеменко, А.Я.Шульман

С помощью квазиклассического приближения вычислена зависимость эффективного коэффициента поглощения света $\overline{K}(\omega)$ от частоты вблизи края фундаментальной полосы в полупроводниковых твердых растворах с учетом неизбежных флуктуаций состава и ширины запрещенной зоны $\mathcal{E}_g$. Для случая пластинки из материала, в котором свет поглощается за счет разрешенных прямых междузонных переходов, вместо обычного закона $\overline{K}(\omega) \sim \sqrt{\hbar\omega - \mathcal{E}_g}$ будет измерено $\overline{K}(\omega) \sim (\hbar\omega - \mathcal{E}_g)^{3/2}$ либо $(\hbar\omega - \mathcal{E}_g)^1$ в зависимости от характера изменения $\mathcal{E}_g$ с толщиной пластинки.

Зависимость коэффициента оптического поглощения K от частоты ω вблизи края собственного поглощения используется для определения типа междузонных переходов, с которыми связано поглощение света в полупроводниках. В случае полупроводниковых твердых растворов, когда ширина запрещенной зоны $\mathcal{E}_g$ сильно зависит от состава, неизбежные неоднородности в распределении компонент раствора вызовут пространственные вариации $\mathcal{E}_g$, которые, как мы покажем, могут существенно изменить наблюдаемую форму края поглощения. Неучет этого обстоятельства приведет к неверным выводам о типе междузонных переходов.

Будем рассматривать длинноволновую часть пространственного спектра флуктуаций концентрации компонент твердого раствора, которую можно учесть, введя локальную ширину запрещенной зоны $\mathcal{E}_g(\mathbf{r})$ и локальную комплексную диэлектрическую проницаемость $\epsilon(\omega, \mathbf{r}) = \epsilon_1 + i\epsilon_2$. Такое описание оптических характеристик твердого раствора должно быть достаточно точным, когда концентрация мало меняется на длине волны света в веществе λ, и позволяет свести анализ оптических свойств

© "Письма в ЖЭТФ", 1974.

неоднородного твердого раствора к задаче о распространении электромагнитной волны в среде с плавно меняющейся $\epsilon(\mathbf{r})$

Выражение для коэффициента пропускания $T(\omega)$ полупроводниковой пластинки, оптические свойства которой меняются по толщине, может быть получено из двух линейно независимых решений $E_+(x)$, $E_-(x)$ волнового уравнения для вектора E электрического поля. Если выбрать направление изменения ϵ за ось x, то для поперечных волн, распространяющихся вдоль Ox, справедливо уравнение

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(x)\,E = 0. \qquad (1)$$

В квазиклассическом приближении

$$E_+(x) = E_0[\epsilon(x)/\epsilon(0)]^{-1/4}\exp\left[i\frac{\omega}{c}\int_0^x\sqrt{\epsilon(x')}dx'\right], \qquad (2а)$$

$$E_-(x) = E_0[\epsilon(x)/\epsilon(0)]^{-1/4}\exp\left[-i\frac{\omega}{c}\int_0^x\sqrt{\epsilon(x')}dx'\right], \qquad (2б)$$

где E_+ соответствует уходящей на $+\infty$ волне, а E_- – приходящей из $+\infty$. Желая определить зависимость $T(\omega)$ в окрестности края собственного поглощения, мы можем положить $\epsilon_1 \gg \epsilon_2$, т. е. считать поглощение на длине волны в веществе малым. Это справедливо вплоть до значений $K \approx 10^4 \div 10^5$ *см*$^{-1}$ [1]. Тогда для пластины толщиной d:

$$T(\omega) = \frac{[1 - R(d)][1 - R(0)]\,e^{-\bar{K}(\omega)d}}{1 + R(d)R(0)e^{-2\bar{K}(\omega)d} - 2\sqrt{R(d)R(0)}e^{-\bar{K}(\omega)d}\cos 2\kappa}, \qquad (3)$$

где $R(0)$ и $R(d)$ – коэффициенты отражения от передней и задней граней пластинки, $\kappa = \frac{\omega}{c}\int_0^d\sqrt{\epsilon_1(x)}\,dx$,

$$\bar{K}(\omega) = \frac{1}{d}\int_0^d K(\omega, x)dx; \qquad K(\omega, x) = \frac{\omega}{c}\,\frac{\epsilon_2(\omega, x)}{2\sqrt{\epsilon_1(\omega, x)}}. \qquad (4)$$

Видно, что в случае однородной пластинки $\bar{K}(\omega)$ переходит в обычный коэффициент поглощения. Если изменение $\mathcal{E}_g$ внутри пластинки не превосходит $0{,}1\,\mathcal{E}_g$, то при определении $\bar{K}(\omega)$ из (3) в первом приближении можно положить $R(d) = R(0)$, так как нетрудно показать, что ($\epsilon_1 \gg 1$)

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\sqrt{\epsilon_1}}{\epsilon_1 - 1}\,\frac{\Delta\epsilon_1}{\epsilon_1} \quad \text{и} \quad \frac{\Delta R}{1 - R} = \frac{1}{4}[1 + R]\frac{\Delta\epsilon_1}{\epsilon_1},$$

а из эмпирической формулы Мосса $1/\epsilon_1^2 \sim \mathcal{E}_g$ [1] следует, что $\Delta\epsilon_1/\epsilon_1 = 2\Delta\mathcal{E}_g/\mathcal{E}_g$. Тогда формула (3) становится очень похожей на известное выражение для пропускания однородной пластинки, в котором роль эффективного коэффициента поглощения играет $\bar{K}(\omega)$. Как будет показано, его частотная зависимость существенно отличается от частотной зависимости локального коэффициента поглощения $K(\omega, x)$, когда $\min \mathcal{E}_g(x) < \hbar\omega < \max \mathcal{E}_g(x)$. Видно, что при обычном определении поглощения пластинки по пропусканию будет измерен как раз $\bar{K}(\omega)$.

Полагая, что состав твердого раствора, а значит и $\mathcal{E}_g$ мало меняются на расстояниях порядка d, и ограничиваясь в разложении $\mathcal{E}_g(x)$ членами второго порядка $\mathcal{E}_g(x) = \mathcal{E}_g(0) + \mathcal{E}_g' x + \frac{1}{2}\mathcal{E}_g'' x^2$, исследуем зависимость $\bar{K}(\omega)$ в случае, когда поглощение света определяется разрешенными прямыми переходами из валентной зоны в зону проводимости. При этом[1]

$$K(\omega, x) \sim [\hbar\omega - \mathcal{E}_g(x)]^{1/2}.$$

Тогда поглощение вблизи края начинает расти по характерному для запрещенных прямых переходов закону

$$\bar{K}(\omega) \sim [\hbar\omega - \mathcal{E}_{g_{min}}]^{3/2}, \tag{5а}$$

если $\partial\mathcal{E}_g/\partial x > (\partial^2\mathcal{E}_g/\partial x^2)d$ в точке, где ширина запрещенной зоны минимальна (рис. *а*) и

$$\bar{K}(\omega) \sim [\hbar\omega - \mathcal{E}_{g_{min}}], \tag{5б}$$

если минимум $\mathcal{E}_g(x)$ достигается внутри пластинки $(\partial\mathcal{E}_{g_{min}}/\partial x = 0)$ (рис. *б*)[2]. При $\hbar\omega > \mathcal{E}_{g_{max}}$ вид $\bar{K}(\omega)$ приближается к обычной для разрешенных переходов корневой зависимости. На частоте равной максимальному значению $\mathcal{E}_g$, где $\bar{K}(\omega)$ непрерывно, $d^2\bar{K}(\omega)/d\omega^2$ имеет особенность. Характер этой особенности

$$(\hbar\omega - \mathcal{E}_{g_{max}})^{-1}, \tag{6а}$$

если $\max \mathcal{E}_g(x)$ достигается внутри пластинки (рис. *а*) и

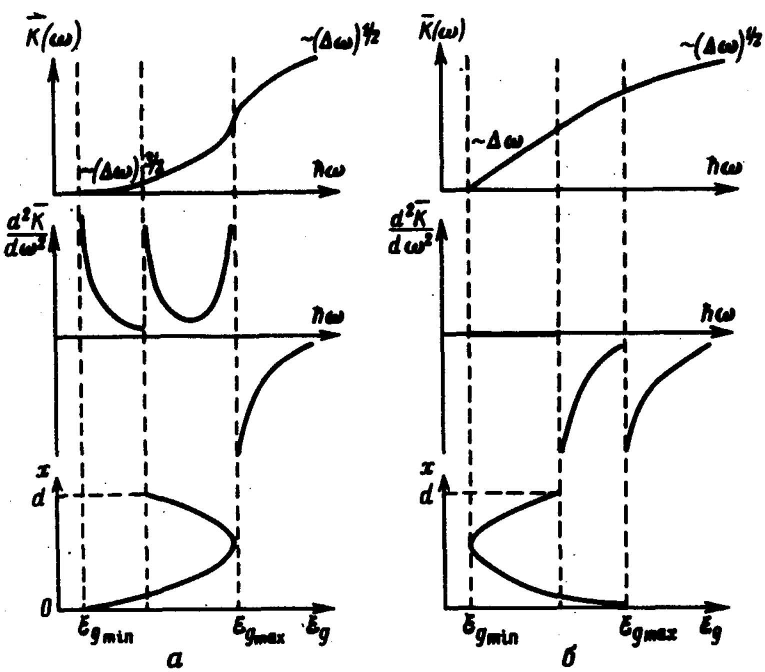
$$(\hbar\omega - \mathcal{E}_{g_{max}})^{-1/2} \tag{6б}$$

если в максимуме $\partial\mathcal{E}_g/\partial x \neq 0$ (рис. *б*). Таким образом по частотной зависимости $\bar{K}(\omega)$ можно судить о виде и характерных значениях функции $\mathcal{E}_g(x)$.

---

[1] Мы отвлекаемся здесь от похожего на эффект Келдыша – Франца изменения локального коэффициента поглощения, которое может быть в такой неоднородной системе. Этот вопрос будет рассмотрен в другом месте.

[2] Формулы (5) дают асимптотику $\bar{K}(\omega)$ в двух предельных и, как нам кажется, наиболее вероятных случаях. Точные выражения легко получить, выполнив интегрирование в (4).



Схематическое изображение частотной зависимости эффективного коэффициента поглощения $\bar{K}(\omega)$ при различном виде изменения $\mathcal{E}_g$ по толщине пластинки $\Delta\omega = \omega - \mathcal{E}_{g_{min}}/\hbar$

Отметим, что в случае прямых разрешенных переходов $\partial\epsilon_2/\partial x \sim \sim [\hbar\omega - \mathcal{E}_g(x)]^{-1/2}$ и обычное условие применимости квазиклассики нарушается вблизи особой точки, где $\epsilon_2(\omega, x) = 0$. Тем не менее использование решений (2) для вычисления коэффициента поглощения оправдано и в этом случае, как можно убедиться, исследуя поведение решений уравнения (1) в окрестности особой точки. Анализ показывает, что точное решение остается вместе со своими производными конечным в особой точке и хорошо апроксимируется квазиклассическими формулами (2) при удалении от нее на расстояния бо́льшие λ. Из-за малости поглощения на длине волны отличие квазиклассического решения от точного не существенно при вычислении поглощения пластинки толщиной $d >> \lambda$. Остаются в силе и результаты, касающиеся поведения $d^2\bar{K}/d\omega^2$, за тем исключением, что рост ее в особых точках будет ограничен. Порядок величины $d^2\bar{K}/d\omega^2$ вблизи особых точек можно оценить, подставив в (6) $\hbar\omega - \mathcal{E}_{g_{max}} = max\{(\partial\mathcal{E}_g/\partial x)\lambda, (\partial^2\mathcal{E}_g/\partial x^2)\lambda^2\}$, где производные берутся в особой точке $\epsilon_2(\mathcal{E}_{g\,max}/\hbar, x) = 0$. Влияние неоднородности состава в плоскости, перпендикулярной направлению распространения света, если флуктуации $\mathcal{E}_g$ по-прежнему плавны по сравнению с λ, можно рассмотреть с помощью трехмерного квазиклассического приближения. При этом выясняется, что выражение для $T(\omega)$ может быть получено усреднением (3) по площади пластинки. Однако реальные случаи, когда флуктуации состава вдоль направления роста кристалла могут быть существеннее флуктуаций в поперечном направлении. Если пластинка для исследования поглощения вырезана перпендикулярно направлению роста, то ее пропускание должно хорошо описываться формулой (3).

В заключение отметим, что в работе [2] сообщалось об обнаружении зависимости вида (5а) при исследовании формы края поглощения в твердом растворе $Bi_x Sb_{1-x}$, хотя оптическое поглощение в этом веществе должно быть связано с разрешенными прямыми переходами. Это противоречие, с нашей точки зрения, объясняется изменением концентрации сурьмы по толщине пластинки, причем для наблюдавшейся в интервале ~ 2 *мэв* зависимости $\overline{K}(\omega)$ достаточно, чтобы концентрация сурьмы менялась на 1%.

Мы признательны Т.М.Лифшицу и Е.Г.Чирковой за дискуссии и ознакомление с экспериментальными результатами до публикации, а также Ш.М.Когану за критику.

Институт радиотехники
и электроники
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
12 октября 1973 г.

Литература

[1] Т.Мосс. Оптические свойства полупроводников. ИИЛ, 1961.

[2] А.А.Абдуллаев, В.Г.Алексеева, Н.Ф.Заец, Т.М.Лифшиц, А.Б.Ормонт, Е.Г.Чиркова. Письма в ЖЭТФ, 17, 292, 1973.