

P 型闪锌矿半导体带内光吸收的计算

黄长河* 俞振中 汤定元

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海, 200083)

摘要——采用 Kane 模型的重空穴带波函数, 导出重空穴带带内跃迁的光吸收理论公式, 其结果近似为采用球对称波函数计算结果的一半。

关键词——价带带内光吸收, Kane 模型, 声子散射, 电离杂质散射。

1. 引 言

P 型材料载流子最简单的光吸收理论是经典的 Drude 公式^[1], 更进一步的理论是量子力学处理方法^[2]. Seeger 给出了各向同性球型抛物带近似下各种跃迁机制的光吸收系数^[3].

闪锌矿结构的半导体材料在 Γ 点附近的能带可用 Kane 的 k-p 模型来描述^[4], 它的重空穴带在一阶近似下仍可看成是球型抛物带, 但波函数是反对称的 p 态波函数. Haga^[5]、Demidenko^[6] 等用 k-p 模型计算了导带的带内光吸收, 并与 InSb 的实验结果进行了比较. 把这一方法用于重空穴带的带内跃迁亦是一种尝试.

本文采用 Haga 的方法推导了重空穴带带内跃迁的光吸收. 对于混晶半导体 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, 其光学振动具有双模行为, 因此在计算中采用了唐文国^[7] 给出的光学声子与电子相互作用矩阵元. 全部计算采用国际单位制.

2. 重空穴带带内光吸收

按 Haga 采用的二阶微扰理论处理光吸收^[5], 与导带不同之处在于重空穴带是各向同性的抛物型能带, 色散关系为 $E_v = -\hbar^2 k^2 / 2m$, 波函数是反对称的 p 态波函数, 因此波函数交叠积分的平均值 $I_{av}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ 为^[8]

$$I_{av}^2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4}(1 + 3 \cos^2 \theta), \quad (1)$$

式中 θ 是 \mathbf{k} 与 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 之间的夹角. 在考虑光学声子散射时, 采用了唐文国^[7] 给出的考虑了

本文 1989 年 11 月 23 日收到, 修改稿 1990 年 3 月 24 日收到.

* 现在复旦大学材料科学研究所, 上海, 200433.

双模振动的矩阵元, 空穴由 \mathbf{k} 态跃迁到 $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ 态产生的光吸收截面可表示为对 \mathbf{k} 空间和 \mathbf{q} 空间的积分, 即

$$\sigma \propto \int |T(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 [(\mathbf{e}_\omega \cdot \mathbf{k}) + \mathbf{e}_\omega \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{q})]^2 f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}) d^3k d^3q, \quad (2)$$

式中 \mathbf{e}_ω 是入射光的偏振矢量, $f_{\mathbf{k}}$ 和 $f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 分别是 \mathbf{k} 态和 $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ 态的空穴态密度, $T(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ 是散射矩阵元, 而声学声子、光学声子和杂质散射的矩阵元都可表示为

$$T(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = T(q, l_D) I_{av}(\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (3)$$

式(3)中 l_D 是屏蔽半径, $I_{av}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ 是交叠积分平均值. 用 σ_{ac} 表示声学声子散射吸收截面, $\sigma_{op,j}$ 表示光学声子散射吸收截面, σ_{imp} 表示电离杂质散射吸收截面, 推导结果如下:

$$\left\{ \begin{aligned} \sigma_{ac} &= \frac{4\alpha}{3\sqrt{2\pi}} \frac{(k_B T)^{\frac{5}{2}}}{(\hbar\omega)^3} \frac{\sqrt{m} E_1^2}{n\hbar\rho s^2} [1 - \exp(-\theta)]_j \int_0^\infty 2\sqrt{yy'}(y+y') \exp(-y) dy, \\ \sigma_{op,j} &= \frac{\sqrt{2\pi}}{6} \frac{\alpha^2}{n\epsilon_\infty^2} \frac{\hbar\omega\tau_{0,j}}{\hbar\omega} \frac{\hbar^2 c \beta^{\frac{3}{2}}}{\theta^2 \sqrt{m_0}} \frac{S_j(x)}{\sqrt{m/m_0}} \\ &\quad \times \left\{ \frac{1 - e^{-\theta}}{e^{\theta_+} - 1} \int_0^\infty 2\sqrt{yy'_+} \exp(-y) \right. \\ &\quad \times \int_{-1}^1 (1 + 3u^2) \left(\frac{y + y'_+ - 2\sqrt{yy'_+}u}{y + y'_+ - 2\sqrt{yy'_+}u + \alpha} \right)^2 du dy \\ &\quad + \frac{1 - e^{-\theta}}{1 - e^{-\theta_-}} \int_0^\infty 2\sqrt{yy'_-} \exp(-y) \\ &\quad \times \left. \int_{-1}^1 (1 + 3u^2) \left(\frac{y + y'_- - 2\sqrt{yy'_-}u}{y + y'_- - 2\sqrt{yy'_-}u + \alpha} \right)^2 du dy \right\}, \\ \sigma_{imp} &= \frac{\alpha Z^2 e^4 N_I}{12 \sqrt{2\pi} n\epsilon_0^2 \epsilon_\infty^2 \omega^3 m^{\frac{3}{2}} (k_B T)^{\frac{1}{2}}} \times [1 - \exp(-\theta)] \\ &\quad \times \int_0^\infty 2\sqrt{yy'} \exp(-y) \int_{-1}^1 \frac{(1 + 3u^2)(y + y' - 2\sqrt{yy'}u)}{(y + y' - 2\sqrt{yy'}u + \alpha)^2} du dy. \end{aligned} \right. \quad (4)$$

式(4)中各符号的意义为:

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{\hbar\omega}{k_B T}, & \theta_l &= \frac{\hbar\omega_{LO,j}}{k_B T}, & \theta'_+ &= \theta + \theta_l, & \theta'_- &= \theta - \theta_l, \\ y &= \frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T}, & y' &= y + \theta', & \beta &= \frac{1}{k_B T}, & \alpha &= l_D^{-2} \hbar^2 (2mk_B T)^{-1}, \\ l_D^{-2} &= \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty k_B T} \cdot \frac{dp}{dz}, & z &= \frac{E_F}{k_B T}. \end{aligned}$$

各系数为: α 是精细结构常数 $1/137$, k_B 是玻耳兹曼常数, s 是纵向声速, ρ 是晶体的密度, “+”和“-”分别表示吸收和发射声子, E_1 是形变势常数, $\omega_{\tau_{0,j}}$ 及 $\omega_{LO,j}$ 分别表示横光学声子和纵光学声子的频率, $j=0, 1$ 分别对应不同格点的振动. n 是折射率, m_0 是真空电子质量, c 是光速, $2\pi\hbar$ 是普朗克常数, $S_j(x)$ 是振子强度, x 是混晶的组份, ϵ_0 是静态介电常数, ϵ_∞ 是高频介电常数, ϵ_0 是真空介电常数, Z 是电离杂质的电荷数, N_I 是电离杂质浓度, p 是空穴浓度, E_F 是费密能量.

3. 讨 论

3.1 与各向同性 s 态波函数结果的比较

以上计算的是反对称 p 态波函数在各向同性抛物带近似下的带内跃迁的光吸收, 与 Seeger 等计算的各向同性 s 态波函数结果相比, 区别在于 s 态波函数交叠积分平均值为 $I_{av}^2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 1$, 而对于 p 态波函数, $I_{av}^2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4}(1+3u)^2$, 其中 $u = \cos \theta$, θ 是 \mathbf{k} 与 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 之间的夹角. 在计算声学声子散射和忽略屏蔽作用的光学声子散射时, 吸收系数的计算取决于对 $\cos \theta$ 的积分值. 对于 s 态波函数, 有 $\int_{-1}^1 du = 2$. 而对于 p 态波函数, 有

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{4} (1+3u^2) du = 1.$$

所以, 当波函数由 s 态变为 p 态时, 吸收系数减小了一半. 如果忽略屏蔽, 用 Seeger 的结果除以 2 即可算得 p 态波函数结果. 对电离杂质散射的研究也得出了类似的结论, 参见附录.

3.2 与实验结果的比较

为了便于数值计算, 把式(4)改写成

$$\left\{ \begin{aligned} \sigma_{ac}(\text{nm}^2) &= 2.43 \times 10^9 \sqrt{\frac{m}{m_0}} \frac{\theta^{-3} E_i^2(\text{eV})}{\sqrt{T}(\text{K}) \rho(\text{gcm}^{-3}) u_i^2(\text{cms}^{-1})} \\ &\quad \times [1 - \exp(-\theta)] \int_0^\infty 2\sqrt{yy'} (y+y') \exp(-y) dy, \\ \sigma_{op,i}(\text{nm}^2) &= \frac{1.2 \times 10^{-3} S_j(x)}{n \epsilon_\infty^2 \sqrt{m/m_0}} \frac{\hbar \omega_{T0,i}}{\theta^2} \frac{\hbar \omega_{T0,i}}{\hbar \omega} \frac{\hbar \omega_{T0,i}}{\hbar \omega_{L0,i}} \\ &\quad \times \left\{ \frac{1 - e^{-\theta}}{e^{\theta} - 1} \int_0^\infty 2\sqrt{yy'_+} \exp(-y) \right. \\ &\quad \times \int_{-1}^1 (1+3u^2) \left(\frac{y+y'_+ - 2\sqrt{yy'_+} u}{y+y'_+ - 2\sqrt{yy'_+} u + a} \right)^2 du dy \\ &\quad + \frac{1 - e^{-\theta}}{1 - e^{-\theta}} \int_0^\infty 2\sqrt{yy'_-} \exp(-y) \\ &\quad \times \left. \int_{-1}^1 (1+3u^2) \left(\frac{y+y'_- - 2\sqrt{yy'_-} u}{y+y'_- - 2\sqrt{yy'_-} u + a} \right)^2 du dy \right\}, \\ \sigma_{imp}(\text{nm}^2) &= \frac{9.41 \times 10^{-11} Z^2 N_i(\text{cm}^{-3})}{n \epsilon_0^2 (m/m_0)^{3/2} \sqrt{T}(\text{K}) \tilde{\nu}^3(\text{cm}^{-1})} \\ &\quad \times [1 - \exp(-\theta)] \int_0^\infty 2\sqrt{yy'} \exp(-y) \\ &\quad \times \int_{-1}^1 \frac{(1+3u^2)(y+y' - 2\sqrt{yy'} u)}{(y+y' - 2\sqrt{yy'} u + a)^2} du dy. \end{aligned} \right. \quad (5)$$

式(5)中 $a = 6.85 \times 10^{-23} \frac{p(\text{cm}^{-3})}{\epsilon_0 [k_B T(\text{eV})]^2 (m/m_0)}$, $\tilde{\nu}$ 是用波数表示的光子频率, 用数值计算重积分. 在用式(5)计算 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 吸收截面 σ_{ac} 时, 采用的纵向声速是由弹性系数^[9] 求出, $u_i = 3 \times 10^5 \text{cms}^{-1}$, 密度^[10] $\rho = 7.31 \text{gom}^{-3}$, 估计形变势^[11] $E_{1v} = 4.8 \text{eV}$; 在计算 $\sigma_{op,i}$ 时,

取^[7] $S_0=5.22$, $S_1=0.47$, $\varepsilon_0=17$, $\varepsilon_\infty=12.5$, $\omega_{L0,0}=137\text{ cm}^{-1}$, $\omega_{L0,1}=155.2\text{ cm}^{-1}$, $\omega_{T0,0}=120.5\text{ cm}^{-1}$, $\omega_{T0,1}=149.3\text{ cm}^{-1}$, 取 $m=0.5m_0$ ^[12]; 在计算 σ_{imp} 时, 设 $p=N_I=10^{17}\text{ cm}^{-3}$, $Z=1$. 在 $T=77\text{ K}$, $\lambda=25\text{ }\mu\text{m}$ 时, 数值计算得到的吸收截面为

$$\begin{aligned}\sigma_{ac} &= 2.6 \times 10^{-18}\text{ cm}^2, \\ \sigma_{0p,0} &= 1.3 \times 10^{-17}\text{ cm}^2, \\ \sigma_{0p,1} &\ll \sigma_{0p,0}\end{aligned}$$

因为类 HgTe 模式 ($j=0$) 的贡献远大于类 CdTe ($j=1$) 的贡献, 这与唐文国^[7] 在考虑自由电子光吸收时所得的结果是一致的.

$$\sigma_{imp} = 2.4 \times 10^{-18}\text{ cm}^2.$$

在 $T=300\text{ K}$, $\lambda=25\text{ }\mu\text{m}$ 时, 得到

$$\begin{aligned}\sigma_{ac} &= 2.1 \times 10^{-17}\text{ cm}^2, \\ \sigma_{0p,0} &= 3.9 \times 10^{-17}\text{ cm}^2.\end{aligned}$$

根据 Mroczkowski 等的实验结果^[13], 300 K 时 $\sigma_p=7 \times 10^{-19}\lambda^2(\text{cm}^2)$, 代入 $\lambda=25\text{ }\mu\text{m}$, 得 $\sigma_p=4 \times 10^{-16}\text{ cm}^2$, 远大于本文的理论计算值. 他们将温度降到 77 K 时认为 σ_p 基本没有变化, 但理论计算的 77 K 时的吸收比 300 K 时的数值还要小, 这时理论与实验的差距更大.

计算表明 σ_{0p} 随温度升高增大, 与波长的关系为 $\sigma_{0p} \propto \lambda^{2.4}$; σ_{ac} 随温度升高增加得更快, 它与波长的关系为 $\sigma_{ac} \propto \lambda^2$. 而电离杂质散射只在低温下才显示出来.

本文推导的理论与实验结果尚有较大的分歧. 分歧的来源可能是多方面的. 例如, 在数值计算中采用的参数是否准确, 实验数据较少, Mroczkowski 等^[13] 采用的 σ_{ac} 数据(由实测吸收截面减去理论计算的轻空穴带到重空穴带带间跃迁的吸收截面得到的)引进了多大的误差, 其它吸收过程(如无序散射、微沉淀等)可能有更大的影响等等. 这些都值得进一步研究.

附 录

在考虑杂质散射的吸收时, 采用 p 态波函数的结果 I' 与采用 s 态波函数的结果 I 之比为

$$I'/I = \left(\frac{3}{4} \int_{-1}^1 \frac{1+3u^2}{1-su} du \right) / \left(\int_{-1}^1 \frac{1}{1-su} du \right),$$

其中 $s=2\sqrt{yy'}/(y+y')$. 因为电离杂质散射只在低温时起较大作用, 所以只考虑 $T=77\text{ K}$ 的情况. 如果入射波长为 $25\text{ }\mu\text{m}$, 入射光子的能量为 50 mV , 而大部分电子的动能约 7 mV , 所以散射是非弹性的, 可得 $s=0.62$, $I'/I \approx 0.53$. 如果 $0 < s < 0.9$, 则有 $0.5 < I'/I < 0.6$, 所以正文的结论成立.

参 考 文 献

- [1] Moss T.S. et al., *Semiconductor Opto-Electronics*, Butterworth, London, 1973.
- [2] Fan H. Y. et al, *Phys. Rev.*, **101**(1956), 566.
- [3] Seeger K., *Semiconductor Phys.*, Chapt. 11, Springer-Verlag, 1982.
- [4] Kane E. O., *J. Phys. Chem. Solids*, **1**(1957), 249.
- [5] Haga E. et al., *J. Phys. Soc. Japan*, **18**(1963), 777.
- [6] Demidenko Z. A., *Solid State Communication*, **8**(1970), 533.
- [7] 唐文国, *半导体学报*, **4**(1983), 415.

- [8] Wiley J. D., *Phys. Rev.*, B4(1971), 2485.
[9] R. Dornhaus. et al., *Springer Tracts in Modern Physics*, Vol. 78, Springer, 1976.
[10] Long D. et al., *Semiconductors and Semimetals*, Vol. 5, Academic, New York, 1970.
[11] Scott W. J., *Appl. Phys.*, 43(1972): 1055.
[12] Reine M. B. et al., *Semiconductors and Semimetals*, Vol. 18, Academic, New York, 1981.
[13] Mroczkowski J. A. et al., *J. Appl. Phys.*, 54(1983), 2041.

CALCULATION OF INTRABAND OPTICAL ABSORPTION IN P-TYPE ZINCBLLENDE STRUCTURE SEMICONDUCTORS

HUANG CHANGHE*, YU ZHENZHONG, TANG DINGYUAN

(*Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica, 200083, Shanghai, China*)

ABSTRACT

Intravalence absorption in P-type zincblende structure semiconductors is calculated with the P-like wave function given by the Kane model. The result is approximately half of the value calculated with S-like wave function.

* Present address: Materials Science Institute, Fudan University, 200433, Shanghai, China.