УДК 537.311.33

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ В БЕСЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ (БП) I РОДА

А. Д. Маргулис, Вл. А. Маргулис

Теоретически исследовано поглощение ИК излучения свободными носителями в бесщелевом полупроводнике с «ультрарелятивистскими» зонами. Учтено рассеяние электронов на смешанных плазмон-LO-фононных модах, а также на стехиометрических дефектах решетки. В этих двух случаях вычислена вещественная часть высокочастотной проводимости σ при $T=0$ и проанализирована ее частотная зависимость. Из расчета следует, что относительный вклад рассмотренных механизмов рассеяния в $\mathrm{Re}\,\sigma$ зависит от энергии поглощаемого фотона. В дальней ИК области доминирует поглощение, обусловленное рассеянием электронов на дефектах, в средней — на верхней (плазмоноподобной) гибридной моде. Показано, что на частоте этой моды должна возникать пороговая особенность в поглощение света, проявляющаяся в виде излома на кривой зависимости коэффициента поглощения от частоты.

1. В последнее время значительное внимание уделяется исследованию полупроводниковых твердых растворов на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$ (типа $Pb_{1-x}Sn_xTe$, $Pb_{1-x}Sn_xSe$), характеризующихся узкой запрещенной зоной ε_g. Интенсивное изучение этих полупроводников стимулируется их специфическими свойствами, в частности возможностью плавного управления величиной ε_g путем варьирования состава. С точки зрения физики наибольший интерес представляет тот факт, что при определенном значении x (вообще говоря, зависящем от температуры T) ε_g обращается в нуль, т. е. реализуется бесщелевое состояние.

Как было показано Диммоком [1], переход в бесщелевое состояние сопровождается существенной перестройкой энергетического спектра носителей заряда $\varepsilon(\mathbf{k})$ за счет сильного $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$-взаимодействия. В рамках модели, учитывающей взаимодействие только двух зон L_6^+ и L_6^-, энергия носителей вблизи экстремумов зон (в пренебрежении анизотропией) становится линейной функцией импульса $\hbar\mathbf{k}$; при этом эффективная масса носителей заряда обращается в нуль. После работы Абрикосова и Бенеславского [2], в которой была доказана устойчивость такого спектра относительно кулоновского взаимодействия, модель Диммока стала широко использоваться (см., например, [3–7]) для описания электронных свойств бесщелевых полупроводников с «ультрарелятивистскими» зонами (БП I рода).

Наличие в БП I рода высокой концентрации свободных носителей заряда, обусловленное отклонениями от стехиометрии, делает актуальным исследование поглощения света этими носителями. Такое поглощение происходит, как известно, лишь при взаимодействии носителей с рассеивателями — фононами или другими несовершенствами решетки. Исходя из природы рассматриваемых веществ, следует ожидать, что наиболее существенным окажется поглощение с участием продольных оптических (LO) фононов или стехиометрических дефектов. С другой стороны, из-за высокой концентрации носителей частоты LO-фононов близки к частотам плазмонов, так что практически всегда происходит гибридизация этих возбуждений с образованием плазмон-фононных мод. Такие моды являются хорошо определенными возбуждениями при всех значениях волнового вектора, поскольку, как показано в [7], ветвь плазменных колебаний в БП I рода целиком лежит выше порога бесстолкновительного затухания Ландау, а столкновительное затухание плазмонов по крайней мере при $T=0$ мало. Это позволяет предположить, что в области низких температур вклад в поглощение, связанный с рассеянием на гибридных модах, может конкурировать с вкладом от рассеяния на дефектах.

В настоящей работе теоретически исследуется поглощение света свободными носителями в БП I рода, обусловленное указанными выше механизмами. При этом нас будет интересовать квантовая область частот ω, удовлетворяющих условиям

$$T \ll \hbar\omega < \varepsilon_F, \quad \omega\tau \gg 1, \tag{1}$$

где T — температура в энергетических единицах, ε_F — энергия Ферми, τ — характерное время релаксации носителей. Для расчета коэффициента поглощения мы используем формализм, развитый в работах [8, 9] (см. также более поздние работы [10, 11]) и основанный на методе функций Грина.

2. Начнем с рассмотрения поглощения света свободными носителями с участием плазмон-LO-фононных мод. В рамках двухзонной изотропной модели Диммока динамика электронов проводимости в БП I рода описывается гамильтонианом $\mathscr{H}$, который аналогичен гамильтониану Вейля для безмассовых релятивистских фермионов. Для дальнейшего удобно записать $\mathscr{H}$ в импульсном представлении

$$\mathscr{H} = \varepsilon(\mathbf{k})\,\hat{\Lambda}(\mathbf{k}), \tag{2}$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar u|\mathbf{k}|, \quad \hat{\Lambda}(\mathbf{k}) = {}^1/_2(1 + \hat{\sigma}\zeta_{\mathbf{k}}), \quad \zeta_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|, \tag{3}$$

где u — межзонный матричный элемент скорости, являющийся параметром модели; $\hat{\Lambda}(\mathbf{k})$ — оператор проектирования на состояния зоны проводимости; $\hat{\sigma}$ — спиновый оператор Паули.

Гамильтониан электрон-фононной системы с учетом взаимодействия электронов между собой представим в виде

$$H = H_0 + H_{EE} + H_{EL}, \tag{4}$$

где

$$H_0 = H_E + H_L = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{LO}\left(b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}\right), \tag{5}$$

$$H_{EE} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}, \tag{6}$$

$$H_{EL} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} (C_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} + \text{э. с.}). \tag{7}$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty q^2}, \quad |C_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{2\pi\hbar\omega_{LO} e^2}{q^2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right), \tag{8}$$

$a^+_{\mathbf{k}}(a_{\mathbf{k}})$, $b^+_{\mathbf{q}}(b_{\mathbf{q}})$ — операторы рождения (уничтожения) электронов и фононов соответственно; ω_{LO} — частота LO-фононов, малой дисперсией которых будем, как обычно, пренебрегать. В (8) ε_0 и ε_∞ — статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости кристалла, объем кристалла положен равным 1.

Для определения коэффициента поглощения света $K(\omega)$ свободными носителями необходимо вычислить вещественную часть проводимости $\sigma(\omega)$, которая связана с $K(\omega)$ формулой

$$K(\omega) = \frac{4\pi}{c\sqrt{\varepsilon'(\omega)}}\,\mathrm{Re}\,\sigma(\omega), \tag{9}$$

справедливой при условии $\varepsilon''(\omega) \ll \varepsilon'(\omega)$, где ε', ε'' — вещественная и мнимая части диэлектрической проницаемости кристалла $\varepsilon(\omega)$, содержащей как электронный, так и решеточный вклады. Общее выражение для $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ может быть получено стандартным образом на основе формулы Кубо и в интересующем нас случае имеет вид

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) = \frac{e^2 u^2}{3\omega} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \zeta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}'} \,\mathrm{Im}\, Q^R_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega), \tag{10}$$

где двухчастичная запаздывающая функция Грина $Q^R_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega)$ является аналитическим продолжением в верхнюю полуплоскость комплексной

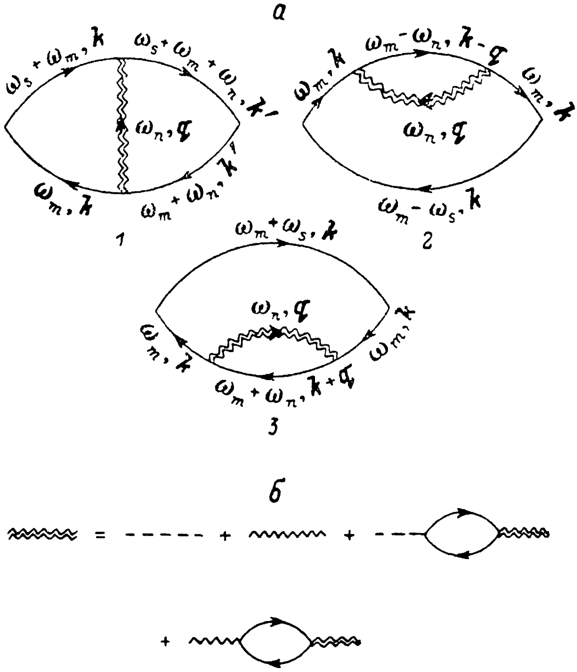

Рис. 1. Диаграммы, определяющие вклад в $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ от рассеяния электронов на плазмон-фононных колебаниях (*а*), и графическое уравнение для эффективного взаимодействия между электронами (*б*).

Сплошные линии — электронные G-функции, штриховые — прямое кулоновское взаимодействие $V_{\mathbf{q}}$, ломаные — фрелиховское взаимодействие $|C_{\mathbf{q}}|^2 D(i\omega_n, \mathbf{q})$, двойные ломаные — эффективное взаимодействие $\Gamma(i\omega_n, \mathbf{q})$.

частоты ω температурной функции Грина $\tilde{Q}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s)$, определенной на мацубаровских частотах $\omega_s = 2\pi s T/\hbar$

$$\tilde{Q}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s) = \frac{1}{2} \int\limits_{-1/T}^{1/T} e^{i\hbar\omega_s\tau} \left\langle T_\tau \left(e^{H'\tau} a^+_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} e^{-H'\tau} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}\right)\right\rangle d\tau. \tag{11}$$

Здесь T_τ — оператор упорядочения по переменной τ, $H' = H - \mu N$ (μ — химический потенциал, N — оператор числа электронов), угловые скобки обозначают усреднение по распределению Гиббса.

Для вычисления функции $\tilde{Q}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s)$ в случае рассеяния электронов на плазмон-фононных модах удобно воспользоваться диаграммной техникой [12]. Разлагая выражение (11) в ряд по степеням гамильтониана взаимодействия и предполагая выполненными условие $e^2/\varepsilon_\infty \hbar u \ll 1$ и второе из неравенств (1), нетрудно убедиться, что в графическом представлении $\tilde{Q}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s)$ определяется суммой диаграмм (рис. 1, *а*). Этим диаграммам соответствуют следующие аналитические выражения:

$$\tilde{Q}^{(1)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s) = T^2 \sum_{\omega_m,\,\omega_n} \Gamma(i\omega_n,\ \mathbf{k}'-\mathbf{k})\,\mathrm{Sp}\,\{\hat{G}(i\omega_m,\ \mathbf{k})\,\hat{G}(i\omega_m+i\omega_s,\ \mathbf{k})\,\hat{G}(i\omega_m+i\omega_n,\ \mathbf{k}')\times$$
$$\times\,\hat{G}(i\omega_m+i\omega_n+i\omega_s,\ \mathbf{k}')\}, \tag{12а}$$
$$\tilde{Q}^{(2)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}T^2 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\omega_m,\,\omega_n} \Gamma(i\omega_n,\ \mathbf{q})\,\mathrm{Sp}\,\{[\hat{G}(i\omega_m,\ \mathbf{k})]^2\,\hat{G}(i\omega_m-i\omega_s,\ \mathbf{k})\times$$
$$\times\,\hat{G}(i\omega_m-i\omega_n,\ \mathbf{k}-\mathbf{q})\}, \tag{12б}$$
$$\tilde{Q}^{(3)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s) = \tilde{Q}^{(2)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(-i\omega_s), \tag{12в}$$

где невозмущенная температурная функция Грина электронов $\hat{G}(i\omega_m,\ \mathbf{k})$, отвечающая гамильтониану (2), имеет вид

$$\hat{G}(i\omega_m,\ \mathbf{k}) = [i\hbar\omega_m - (\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)]^{-1}\,\hat{\Lambda}(\mathbf{k}), \tag{13}$$

а суммирование ведется по фермионным $\omega_m=(2\pi+1)mT/\hbar$ и бозонным $\omega_n=2\pi nT/\hbar$ частотам. Эффективное взаимодействие между электронами $\Gamma(i\omega_n,\ \mathbf{q})$ в (12) удовлетворяет уравнению, графически представленному на рис. 1, *б* и аналитически записываемому в виде

$$\Gamma(i\omega_n,\ \mathbf{q}) = [V_{\mathbf{q}} + |C_{\mathbf{q}}|^2 D(i\omega_n,\ \mathbf{q})]\,[1+\Pi(i\omega_n,\ \mathbf{q})\,\Gamma(i\omega_n,\ \mathbf{q})], \tag{14}$$

где $D(i\omega_n,\ \mathbf{q})$ — температурная фононная функция Грина, взятая в нулевом приближении

$$D(i\omega_n,\ \mathbf{q}) = 2\hbar\omega_{LO}\,[(i\hbar\omega_n)^2-(\hbar\omega_{LO})^2]^{-1}, \tag{15}$$

$\Pi(i\omega_n,\ \mathbf{q})$ — неприводимый поляризационный оператор электронов, который в приближении хаотических фаз задается формулой

$$\Pi(i\omega_n,\ \mathbf{q}) = T\sum_{\omega_m}\int \mathrm{Sp}\,\hat{G}(i\omega_n,\ \mathbf{k})\,\hat{G}(i\omega_m+i\omega_n,\ \mathbf{k}+\mathbf{q})\,\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,. \tag{16}$$

В дальнейшем нам понадобятся выражения для запаздывающего эффективного взаимодействия $\Gamma^R(\omega,\ \mathbf{q})$ и опережающего $\Gamma^A(\omega,\ \mathbf{q})$, которые легко находятся с помощью (14). Используя (8), (15) и соотношение Лиддена—Сакса—Теллера $\omega^2_{LO}/\omega^2_{TO}=\varepsilon_0/\varepsilon_\infty$ (ω_{TO} — частота поперечных оптических фононов), получаем

$$\Gamma^R(\omega,\ \mathbf{q}) = U(\omega,\ \mathbf{q})/[1-U(\omega,\ \mathbf{q})\,\Pi^R(\omega,\ \mathbf{q})], \tag{17}$$

где

$$U(\omega,\ \mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty q^2}\,\frac{\omega^2-\omega^2_{TO}}{\omega^2-\omega^2_{LO}}\,. \tag{18}$$

Вычисляя шпур в (16) и выполняя затем суммирование по ω_m, находим после аналитического продолжения $\Pi(i\omega_n,\ \mathbf{q})$ на ось вещественных частот ($i\omega_n \to \omega+i\eta$) следующее выражение для запаздывающего поляризационного оператора:

$$\Pi^R(\omega,\ \mathbf{q}) = \frac{1}{2}\int \frac{n_{\mathbf{k}}-n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\hbar\omega+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+i\eta}\,(1+\zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\,\frac{d^3k}{(2\pi)^3} =$$
$$= \frac{3\varepsilon_\infty}{4\pi}\left(\frac{\omega_p}{eu}\right)^2\left[1-\frac{\omega}{2uq}\ln\left|\frac{\omega+uq}{\omega-uq}\right|\right], \tag{19}$$

где

$$\omega_p^2 = \frac{2}{3\pi}\,\frac{e^2}{\varepsilon_\infty\hbar^3 u}\int_0^\infty\left(-\frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}\right)\varepsilon^2_{\mathbf{k}}\,d\varepsilon_{\mathbf{k}} \tag{20}$$

— квадрат предельной (при $q=0$) частоты плазмонов в БП I рода [7], $n_{\mathbf{k}}$ — фермиевская функция распределения электронов с энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Отметим, что полученная формула для $\Pi^R(\omega,\ \mathbf{q})$ справедлива в области частот $\omega > qu$, в которой мнимая часть интеграла в (19) равна нулю и, следовательно, затухание Ландау плазмонов отсутствует.

Подставляя (19) в (17), находим, что в случае длинных волн ($qu \ll \omega$) функция $\Gamma^{R}(\omega, \mathbf{q})$ имеет полюсы при значениях ω, равных

$$\omega_{\pm}(q) = \omega_{\pm}(0)\left[1 + \frac{3}{10}\,\frac{\omega_{\pm}^2(0) - \omega_{LO}^2}{\omega_{\pm}^2(0) - \omega_{\mp}^2(0)}\,\frac{u^2q^2}{\omega_{\pm}^2(0)}\right], \tag{21}$$

где

$$\omega_{\pm}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\omega_p^2 + \omega_{LO}^2) \pm \sqrt{(\omega_p^2 + \omega_{LO}^2)^2 - 4\omega_p^2\omega_{TO}^2}\right]^{1/2}. \tag{22}$$

Выражение (21) представляет собой дисперсионное соотношение для связанных плазмон-LO-фононных колебаний. Используя (17) и (18), нетрудно убедиться, что функция $\Gamma^{R}(\omega, \mathbf{q})$ вблизи полюсов $\omega_{\pm}(q)$ может быть записана в виде

$$\Gamma^{R}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty q^2}\,\frac{\omega^2(\omega^2 - \omega_{TO}^2)}{[(\omega + i\eta)^2 - \omega_{+}^2(q)]\,[(\omega + i\eta)^2 - \omega_{-}^2(q)]}, \tag{23}$$

позволяющем интерпретировать ее как запаздывающий пропагатор плазмон-фононных мод. Выражение для $\Gamma^{A}(\omega, \mathbf{q})$ в том же приближении отличается от (23) лишь знаком малой мнимой добавки.

Подставляя в (12) функции Грина в форме (13) и вычисляя шпуры по спиновым переменным, после несложных преобразований и суммирования по ω_m получаем

$$\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}'}\tilde{Q}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s) = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha=1}^{3} \tilde{Q}^{(\alpha)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(i\omega_s) = T\,(i\hbar\omega_s)^{-2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} (1 - \zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})(n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \times$$
$$\times \sum_{\omega_n} \Gamma(i\omega_n, \mathbf{q})\left[(i\hbar\omega_n + i\hbar\omega_s + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^{-1} - (i\hbar\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^{-1}\right]. \tag{24}$$

В дальнейшем при вычислении $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ необходимо учитывать лишь первый член в квадратной скобке в (24), поскольку вклад в $\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}'}Q^{R}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega)$, обусловленный вторым членом, является чисто вещественным. Оставшуюся в (24) сумму по ω_n преобразуем, следуя приему Переля и Элиашберга [8], в интеграл по вещественной оси частот, который нетрудно вычислить, используя выражение для $\Gamma^{R(A)}(\omega, \mathbf{q})$ в приближении «плазмон-фононного полюса» (см. формулу (23)). Подставляя результат вычисления в (24) и выполняя затем обычным образом аналитическое продолжение по частоте ω_s в верхнюю полуплоскость, получаем с учетом (10) окончательное выражение для $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) = \mathrm{Re}\,\sigma^{+}(\omega) + \mathrm{Re}\,\sigma^{-}(\omega), \tag{25}$$

$$\mathrm{Re}\,\sigma^{\pm}(\omega) = \pm\frac{e^2u^2}{3\hbar^2\omega^3}\,\frac{\omega_{LO}\omega_{\pm}(\omega_{\pm}^2 - \omega_{TO}^2)}{(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)(\omega_{+}^2 - \omega_{-}^2)}\,\mathrm{Im}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,|C_{\mathbf{q}}|^2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(1 - \zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \times$$
$$\times (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}})\left\{[1 + N(\omega_{\pm}) + N(\omega - \omega_{\pm})]\,(\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\pm} + i\eta)^{-1} + \right.$$
$$\left. + [N(\omega_{\pm}) - N(\omega + \omega_{\pm})]\,(\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\pm} + i\eta)^{-1}\right\}, \tag{26}$$

где $N(\omega)$ — планковская функция распределения. Первое слагаемое в (25) описывает вклад в $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$, обусловленный рассеянием электронов на верхней гибридной моде ω_{+}, которая при высоких концентрациях носителей заряда имеет плазмоноподобный характер; второе слагаемое учитывает вклад в $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ от рассеяния на нижней (фононоподобной) моде ω_{-}.

Как известно, специфика бесщелевого состояния наиболее отчетливо проявляется при температурах, близких к абсолютному нулю. Имея это в виду, рассмотрим предельный случай $T=0$. Подставив в (26) выражение (8) для $|C_{\mathbf{q}}|^2$ и выполнив интегрирование по $\mathbf{k}$ и $\mathbf{q}$, находим

$$\mathrm{Re}\,\sigma^{\pm}(\omega)=\pm\frac{1}{3(2\pi)^2}\frac{\omega_{\pm}(\omega_{\pm}^2-\omega_{T0}^2)}{\varepsilon_{\infty}(\omega_{+}^2-\omega_{-}^2)}\left(\frac{e^2}{\hbar u}\right)^2\left(\frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega}\right)^3F\left(\frac{\hbar\omega-\hbar\omega_{\pm}}{\varepsilon_F}\right)\Theta(\omega-\omega_{\pm}),\quad (27)$$

где $\Theta(x)$ — функция Хевисайда,

$$F(x)=\begin{cases}x\left[1+\dfrac{x^2}{3}+\dfrac{x}{2}\ln\left(\dfrac{1-x/2}{1+x/2}\right)-\dfrac{x^2}{4}\ln\left(\dfrac{4}{x^2}-1\right)\right], & 0<x\leqslant 1, \quad (28а)\\ \dfrac{1}{3}+\dfrac{x}{2}+\dfrac{x^2}{2}-\left(1+\dfrac{x}{2}\right)\dfrac{x^2}{2}\ln\left(1+\dfrac{2}{x}\right), & x\geqslant 1. \quad (28б)\end{cases}$$

При относительно низких частотах ($\hbar\omega-\hbar\omega_{\pm}\ll\varepsilon_F$) имеем

$$\mathrm{Re}\,\sigma^{\pm}(\omega)=\pm\frac{1}{(48\pi^2)^{1/3}}\frac{n^{2/3}e^4}{\varepsilon_{\infty}\hbar^2\omega_{\pm}}\frac{\omega_{\pm}^2-\omega_{T0}^2}{\omega_{+}^2-\omega_{-}^2}\left(\frac{\omega_{\pm}}{\omega}\right)^2\left(1-\frac{\omega_{\pm}}{\omega}\right)\Theta(\omega-\omega_{\pm}),\quad (29)$$

а в обратном предельном случае ($\hbar\omega-\hbar\omega_{\pm}\gg\varepsilon_F$) получаем

$$\mathrm{Re}\,\sigma^{\pm}(\omega)=\pm\frac{nue^4}{3\varepsilon_{\infty}\hbar^2\omega_{\pm}^2}\frac{\omega_{\pm}^2-\omega_{T0}^2}{\omega_{+}^2-\omega_{-}^2}\left(\frac{\omega_{\pm}}{\omega}\right)^3\left(1-\frac{\varepsilon_F}{2\hbar\omega_{\pm}}\frac{\omega_{\pm}/\omega}{1-\omega_{\pm}/\omega}\right)\Theta(\omega-\omega_{\pm}).\quad (30)$$

3. Перейдем теперь к вычислению вклада в поглощение света свободными носителями, связанного с их рассеянием на стехиометрических дефектах. Будем пренебрегать для простоты эффектами межэлектронного взаимодействия, приводящими к неупругому характеру этого рассеяния [13, 14]. Тогда в линейном приближении по концентрации хаотически расположенных дефектов n_d рассматриваемый вклад в $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ определяется суммой диаграмм, подобных изображенным на рис. 1, *а*, но отличающихся заменой двойной ломаной линии эффективного взаимодействия на штриховую линию «крестовой» диаграммной техники [12]. Этой линии соответствует множитель $n_d|V_d(\mathbf{q})|^2$, где $V_d(\mathbf{q})=ZV_{\mathbf{q}}$— Фурье-компонента потенциала дефекта. Вычисление и суммирование таких диаграмм проводятся аналогично предыдущему случаю. В результате находим

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)=\frac{n_d u^2e^2}{3\hbar^2\omega^3}\,\mathrm{Im}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}|V_d(\mathbf{q})|^2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(1-\zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k+q}})(n_{\mathbf{k+q}}-n_{\mathbf{k}})\times$$
$$\times(\hbar\omega+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}}+i\eta)^{-1}.\quad (31)$$

Используя выражение (8) для $V_{\mathbf{q}}$ и выполняя интегрирование в (31), в предельном случае $T=0$ получаем

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)=\frac{n_d uZ^2}{3\pi\varepsilon_{\infty}^2k_F^2}\left(\frac{e^2}{\hbar u}\right)^3\left(\frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega}\right)^3 f\left(\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_F}\right),\quad (32)$$

где

$$f(x)=\begin{cases}\ln\left(\dfrac{1+x/2}{1-x/2}\right)+\dfrac{x}{2}\ln\left(\dfrac{4}{x^2}-1\right)-\dfrac{2x(3-x^2)}{4-x^2}, & 0<x\leqslant 1, \quad (33а)\\ \left(1+\dfrac{x}{2}\right)\ln\left(1+\dfrac{2}{x}\right)-\dfrac{3+x}{2+x}, & x\geqslant 1. \quad (33б)\end{cases}$$

4. В заключение обсудим полученные зависимости $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ и проанализируем общую картину поведения коэффициента поглощения света с учетом обоих рассмотренных механизмов рассеяния носителей заряда.

Отметим прежде всего, что из-за наличия в формуле (27) для $\mathrm{Re}\,\sigma^{\pm}(\omega)$ ступенчатой функции $\Theta(\omega-\omega_{\pm})$ процесс поглощения света, связанный с рассеянием электронов на смешанных плазмон-*LO*-фононных модах, имеет пороговый характер. Физически это обусловлено тем, что при низких температурах поглощение электроном фотона с одновременным испусканием кванта гибридной моды $\hbar\omega_{\pm}$ возможно лишь при условии $\omega \geqslant \omega_{\pm}$. Для случая поглощения света с участием LO-фононов в обычных полупроводниках подобный эффект был впервые рассмотрен в работе [9].

Спецификой обсуждаемого нами процесса поглощения света является существование двух пороговых особенностей в частотной зависимости коэффициента поглощения, связанных с двумя ветвями смешанных колебаний. Детальный анализ формулы для $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ в наиболее реальном случае низких частот ($\hbar\omega-\hbar\omega_{\pm} \ll \varepsilon_F$) позволяет описать эту зависимость следующим образом. При $\omega < \omega_-$ поглощение отсутствует ($\operatorname{Re}\sigma=0$), а затем при $\omega=\omega_-$ включается поглощение, связанное с рассеянием электронов на нижней (фононоподобной) моде ω_-, и $\operatorname{Re}\sigma$ растет с частотой,

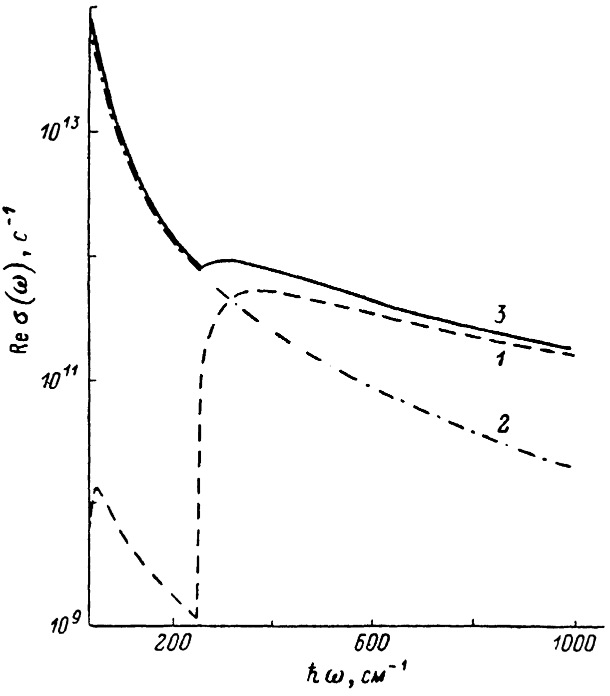

Рис. 2. Частотная зависимость $\operatorname{Re}\sigma$ при $T=0$.

1 — рассеяние на плазмон-LO-фононных модах, *2* — рассеяние на дефектах, *3* — зависимость $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ с учетом обоих механизмов рассеяния.

достигая первого максимума при $\omega \doteq 3\omega_-/2$, после чего монотонно убывает вплоть до частоты $\omega=\omega_+$. При дальнейшем увеличении ω включается поглощение, связанное с рассеянием на верхней (плазмоноподобной) моде ω_+, и $\operatorname{Re}\sigma$ снова растет, достигая второго максимума при $\omega \approx 3\omega_+/2$, а затем вновь монотонно убывает. Как показывают оценки, для интересующих нас полупроводников величина второго максимума значительно превосходит величину первого. Наглядное представление о зависимости $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ в ИК области дает кривая *1* на рис. 2, рассчитанная по формулам (25), (27) с использованием параметров $Pb_{1-x}Sn_xTe$ ($\varepsilon_0 \doteq 400$, $\varepsilon_\infty \doteq 38$, $\hbar\omega_{LO} \doteq 13.6$ мэВ, $\hbar\omega_{TO} \doteq 4.19$ мэВ, $u \doteq 10^8$ см/с, $n \doteq 10^{18}$ см$^{-3}$).

На этом же рисунке изображена зависимость $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ в случае рассеяния электронов на стехиометрических дефектах (кривая *2*), рассчитанная по формуле (32) при $Z \doteq 1$, $n_d = n$ и указанных выше значениях остальных параметров. Как видно, в этом случае $\operatorname{Re}\sigma$ монотонно убывает с частотой без каких бы то ни было особенностей.

Сравнение кривых *1* и *2* показывает, что в области частот ω, отвечающих энергиям $\hbar\omega \geqslant 300$ см$^{-1}$, доминирует вклад в поглощение, обусловленный рассеянием электронов на гибридных модах, тогда как при меньших частотах преобладает поглощение, связанное с рассеянием на дефектах. Последнее обстоятельство делает, по-видимому, невозможным регистрацию на опыте первого порога в коэффициенте поглощения (на частоте ω_-). Что касается пороговой особенности на частоте ω_+, то, как видно из кривой *3* на рис. 2, она проявляется в виде излома на кривой $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$, имеющего конечные значения производной $d(\mathrm{Re}\,\sigma)/d\omega$ по обе стороны особой точки (слева от нее $d(\mathrm{Re}\,\sigma)/d\omega < 0$, справа — $d(\mathrm{Re}\,\sigma)/d\omega > 0$). Следует отметить, однако, что наблюдение этой особенности связано с определенными экспериментальными трудностями, так как частота ω_+ примыкает к области малой прозрачности кристалла. Тем не менее оно вполне осуществимо в реальном массивном анизотропном кристалле, если надлежащим образом подобрать ориентацию поверхности кристалла относительно оптических осей [15].

Список литературы

[1] Dimmock J. O. // J. Phys. Chem. Sol. 1971. V. 32. Suppl. 1. N 1. P. 319—330.
[2] Абрикосов А. А., Бенеславский С. Д. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 10. С. 1280—1298.
[3] Куликов И. Б. // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. № 6. С. 2316—2322; 1974. Т. 67. № 1. С. 205—207.
[4] Martinez G. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 10. P. 4678—4707.
[5] Петров Ю. В. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 11. С. 3262—3267; 1982. Т. 24. № 11. С. 3413—3418.
[6] Nielsen H. B., Ninomiya M. // Phys. Lett. B. 1983. V. 130. N 6. P. 389—396.
[7] Маргулис А. Д., Маргулис Вл. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 14—20.
[8] Перель В. И., Элиашберг Г. М. // ЖЭТФ. 1961. Т. 41. № 3. С. 886—893.
[9] Гуревич В. Л., Ланг И. Г., Фирсов Ю. А. // ФТТ. 1962. Т. 4. № 5. С. 1252—1262.
[10] Ron A., Tzoar N. // Phys. Rev. 1963. V. 131. N 1. P. 13—20; 1963. V. 132. N 1. P. 202—206.
[11] Sirko R., Mills D. L. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 8. P. 4373—4389.
[12] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., 1962. 443 с.
[13] Mycielski J., Mycielski A. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 4. P. 1859—1867.
[14] Sirko R., Mills D. L. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 10. P. 5637—5643.
[15] Гуревич В. Л., Ланг И. Г., Паршин Д. А. // ФТТ. 1974. Т. 16. № 12. С. 3628—3635.

Мордовский
государственный университет
им. Н. П. Огарева
Саранск

Поступило в Редакцию
6 сентября 1989 г.