EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED.
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA
ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА
PROCEEDINGS OF THE ACADEMY OF SCIENCES OF THE ESTONIAN SSR.
PHYSICS * MATHEMATICS

1989, 38, 1

УДК 537.311.322

А. ПИЩЕВ

О КОГЕРЕНТНОМ МЕХАНИЗМЕ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА УВЛЕЧЕНИЯ

A. PISTSEV. FOTOVOLTAKAASAMISEFEKTI KOHERENTSEST MEHHANISMIST

A. PISHCHEV. ON A COHERENT MECHANISM OF THE PHOTOVOLTAIC DRAG EFFECT

(Представил В. Хижняков)

В настоящем сообщении показано существование когерентного механизма фототока увлечения, связанного с недиагональными элементами матрицы плотности и межзонными скоростями и не зависящего от времен релаксации носителей. Когерентный механизм был предложен впервые в [1–4] для объяснения объемного фотовольтаического эффекта в нецентросимметричных кристаллах.

Согласно [5, 6] фототок увлечения (ФТУ) в нулевом магнитном поле описывается следующим феноменологическим выражением:

$$j_\alpha = I\{T_{\alpha\beta\gamma\delta}q_\beta[(e_\gamma e^*_\delta + e_\delta e^*_\gamma)/2] + R_{\alpha\beta\gamma}i(\mathbf{e}\times\mathbf{e}^*)_\beta q_\gamma\}, \tag{1}$$

где I — интенсивность, $\mathbf{e}$ — вектор поляризации, $\mathbf{q}$ — волновой вектор падающего света. Первое слагаемое в (1) описывает т. н. линейный вклад в ФТУ, второе — циркулярный. Линейный ФТУ полностью определяется «баллистическими» механизмами, т. е. наличием направленной скорости у фотовозбужденных носителей, тогда как ток циркулярного эффекта увлечения вместе с баллистической составляющей [7] содержит и когерентную. Это непосредственно следует из нечетного числа полюсных вкладов, возникающих в схеме Кубо при расчете когерентного фототока. Отказ от дипольного приближения для световой волны в кристалле, естественно, приводит к зависимости когерентного фототока от $\mathbf{q}$, что и обуславливает когерентный вклад в тензор R.

Если циркулярно-поляризованный свет направить вдоль оси z ($\mathbf{q}(0, 0, q_z)$) и электрический вектор волны выбрать в виде

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0[\mathbf{e}_x\cos(\omega t - \mathbf{qr}) + \mathbf{e}_y\sin(\omega t - \mathbf{qr})], \tag{2}$$

то для стационарной части тока короткого замыкания получается

$$j_\alpha = j_{\alpha,\text{л}} + j_{\alpha,\text{ц}}, \tag{3}$$

$$j_{\alpha,\text{л}} = -\frac{CI}{\omega^2}\sum_{n,l}\sum_{\varepsilon=\pm1}\sum_{\beta=x,y}\int d^3\mathbf{k}\frac{[f_n(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})]}{E_n(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q}) + \varepsilon\omega - i\eta}\times$$

$$\times p^\beta_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})F^{\alpha\beta}_{ln}(\mathbf{k}; \varepsilon\mathbf{q}), \tag{4}$$

$$j_{\alpha,\text{ц}} = -\frac{CI}{i\omega^2}\sum_{n,l}\sum_{\varepsilon=\pm1}\varepsilon\int d^3\mathbf{k}\frac{[f_n(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})]}{E_n(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q}) + \varepsilon\omega - i\eta}\times$$

$$\times\{p^y_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})F^{\alpha x}_{ln}(\mathbf{k}; \varepsilon\mathbf{q}) - p^x_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})F^{\alpha y}_{ln}(\mathbf{k}; \varepsilon\mathbf{q})\}, \tag{5}$$

где

$$F^{\alpha\beta}_{nl}=\sum_m\left[\frac{\overset{\beta}{p}_{lm}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})\overset{\alpha}{p}_{mn}(\mathbf{k})}{E_n(\mathbf{k})-E_m(\mathbf{k})-i\eta}-\frac{\overset{\alpha}{p}_{lm}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\overset{\beta}{p}_{mn}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})}{E_m(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})-E_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})-i\eta}\right] \qquad (6)$$

и $C=e^3(4\pi^2cm^3)^{-1}$. Здесь $j_{\alpha,\text{л}}$ описывает линейный вклад в когерентный фототок, $j_{\alpha,\text{ц}}$ — соответственно циркулярный. При $\mathbf{q}=0$ (дипольное приближение) формулы (4)—(6) сводятся к известным результатам [1-4]. Суммирование по m в (6) проводится аналогично [4] так, что

$$F^{\alpha\beta}_{ln}=\frac{1}{(-i\eta)}p^{\beta}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})\left[p^{\alpha}_{nn}(\mathbf{k})-p^{\alpha}_{ll}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\right]+m\times$$

$$\times\left\{\frac{\partial p^{\beta}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}-ip^{\beta}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})\left[\Omega^{\alpha}_{ll}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})-\Omega^{\alpha}_{nn}(\mathbf{k})\right]\right\}. \qquad (7)$$

Внутризонные матричные элементы оператора координаты $\Omega^{\alpha}_{ll}(\mathbf{k})=$ $=i\int u^*_{l\mathbf{k}}\frac{\partial}{\partial k_\alpha}u_{l\mathbf{k}}d\tau_{\mathbf{r}}$ на блоховских амплитудах $u_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ в дальнейшем полагаем равными нулю.

После перехода к адиабатическому пределу $\eta\to 0$ в (4) и (5) члены, содержащие интеграл в смысле главного значения удается свести к полной производной от периодической по $\mathbf{k}$-функции

$$i_\alpha=-\frac{e}{16\pi^3}\sum_n\int d^3\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial k_\alpha}\int_0^{\bar{E}_n}f(\xi)\,d\xi=0, \qquad (8)$$

что, естественно, обращает их в нуль. Здесь $\bar{E}_n$ перенормированные полем энергии, на которых должны вычисляться фигурирующие в (4) и (5) фермиевские функции распределения $f_n(\bar{E})$. Для слагаемых с δ-функцией имеем соответственно

$$j_{\alpha,\text{л}}=-\frac{i\pi CIm}{\omega^2}\sum_{n,l}\sum_{\varepsilon=\pm1}\int d^3\mathbf{k}\,\delta\left[E_n(\mathbf{k})-E_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})+\varepsilon\omega\right]\times$$

$$\times\left[f_n(\mathbf{k})-f_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\right]\sum_{\beta=x,y}p^{\beta}_{nl}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\frac{\partial p^{\beta}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}, \qquad (9)$$

$$j_{\alpha,\text{ц}}=-\frac{\pi CIm}{\omega^2}\sum_{n,l}\sum_{\varepsilon=\pm1}\varepsilon\int d^3\mathbf{k}\,\delta\left[E_n(\mathbf{k})-E_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})+\varepsilon\omega\right]\times$$

$$\times\left[f_n(\mathbf{k})-f_l(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\right]\left\{p^{y}_{nl}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\frac{\partial p^{x}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}-\right.$$

$$\left.-p^{x}_{nl}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})\,\partial p^{y}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})/\partial k_\alpha\right\}, \qquad (10)$$

где $f_{n,l}$ можно считать не зависящими от поля.

В центросимметричном кристалле $p^{\beta}_{nl}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})=-p^{\beta}_{ln}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})$. $p^{\beta}_{nl}(\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q},\mathbf{k})=-p^{\beta}_{ln}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\varepsilon\mathbf{q})$ и линейный вклад (9) в когерентный фототок в согласии с симметрийными требованиями исчезает *. Вклад

* В нецентросимметричном кристалле $j_{\alpha,\text{л}}(\mathbf{q}=0)$ есть когерентный ток объемного фотовольтаического эффекта. В разложении $j_{\alpha,\text{л}}$ по $\mathbf{q}$, нечетные по $\mathbf{q}$ члены выпадают вследствие нечетности подынтегральных выражений по $\mathbf{k}$, приводя тем самым к отсутствию линейного вклада в когерентный ФТУ.

от (10) при $\mathbf{q}=0$ обращается в нуль, а в линейном по $\mathbf{q}$ приближении представляет собой циркулярный когерентный ФТУ:

$$j_{\alpha,\text{ц}}=j^{(1)}_{\alpha,\text{ц}}+j^{(2)}_{\alpha,\text{ц}}, \tag{11}$$

$$j^{(1)}_{\alpha,\text{ц}}=\frac{i\pi mCI}{2\omega^2}q_z\sum_{n,l}\sum_{\varepsilon=\pm1}\int d^3\mathbf{k}\,\delta[E_n(\mathbf{k})-E_l(\mathbf{k})+\varepsilon\omega]\times$$
$$\times[f_n(\mathbf{k})-f_l(\mathbf{k})]\left\{p^y_{nl}(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_\alpha}[x^z_{nl}(\mathbf{k})(p^x_{nn}+p^x_{ll})]-p^x_{nl}(\mathbf{k})\times\right.$$
$$\left.\times\frac{\partial}{\partial k_\alpha}[x^z_{nl}(\mathbf{k})(p^y_{nn}+p^y_{ll})]\right\}, \tag{12}$$

$$j^{(2)}_{\alpha,\text{ц}}=-\frac{i\pi mCI}{2\omega^2}q_z\sum_{n,l}\sum_{\varepsilon=\pm1}\int d^3\mathbf{k}\,\delta[E_n(\mathbf{k})-E_l(\mathbf{k})+\varepsilon\omega]\times$$
$$\times[f_n(\mathbf{k})-f_l(\mathbf{k})]x^z_{nl}(\mathbf{k})\left\{(p^y_{nn}+p^y_{ll})\frac{\partial p^x_{nl}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}-(p^x_{nn}+p^x_{ll})\frac{\partial p_{nl}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}\right\} \tag{13}$$

В (10) межзонные матричные элементы переходов были разложены по q. Зависимость $f_l=f_l(\mathbf{q})$ пропадает вследствие наличия δ-функции с той же зависимостью от $\mathbf{q}$; разложение δ-функции по $\mathbf{q}$ содержит допплеровский член $\mathbf{v}_{ll}\mathbf{q}$ ($\mathbf{v}_{ll}$ — внутризонная скорость носителя), усреднение которого приводит к исчезновению и этого вклада. Используя детализацию матричного элемента перехода $p^\beta_{nl}(\mathbf{k})$ для центросимметричного кристалла

$$p^\beta_{nl}(k)=iA^\beta_{nl}+i\sum_{\sigma,\lambda}D^{\beta\sigma\lambda}_{nl}k_\sigma k_\lambda,\qquad \beta\neq\sigma\neq\lambda \tag{14}$$

можно показать, что в рамках сферически-симметричной модели $j^{(2)}_{\alpha,\text{ц}}=0$. Ток $j^{(1)}_{\alpha,\text{ц}}$ отличен от нуля только при $\alpha=x,y$, т. е. носит поперечный к волновому вектору света $\mathbf{q}$ характер.

Как и обычный когерентный ток объемного фотовольтаического эффекта, аналогичный ФТУ возникает в результате интерференции амплитуд реальных и виртуальных квантовых переходов, причем выделенное импульсом фотона направление приводит к нецентросимметричности. Он не зависит от времен релаксации носителей (эффективный сдвиг последних генерируется в самом квантовом процессе второго порядка) и спектрально отвечает межзонному поглощению. Оценивая $j^{(1)}_{\alpha,\text{ц}}$ в двухзонной аппроксимации, получим $j^{(1)}_{x,\text{ц}}=-eIk_{zy}(\omega)\delta(1+2\Delta/\omega)(6mc\omega)^{-1}$, $k_{zy}(\omega)$ — анизотропный коэффициент поглощения, $\delta=m(m_2^{-1}-m_1^{-1})$, Δ — щель между зонами с эффективными массами m_1 и m_2. Сравнивая это выражение с типичной формулой для линейного ФТУ [6], получим оценку сверху для циркулярного когерентного ФТУ: он будет меньше линейного по параметру $(\omega\tau\beta)^{-1}$, где τ время релаксации носителя по импульсу и β характеризует часть импульса фотона, переданного носителю. Однако, если теперь принять во внимание оценку малости для циркулярного баллистического вклада [8] по параметру $(\bar{\varepsilon}\tau)^{-1}$, где $\bar{\varepsilon}$ — средняя энергия носителя в зоне, то при $\omega\sim\bar{\varepsilon}$ когерентный и баллистический циркулярные ФТУ могут быть сравнимы по величине. Если интенсивность непрямых межзонных переходов достаточно велика, или прямые межзонные переходы в рамках конкретной зонной структуры запрещены законом сохранения квазиимпульса носителя, то исходную схему следует дополнить учетом когерентного тока, связанного с рассеиванием носителей на фононной подсистеме [9], что выходит за пределы настоящего сообщения.

Автор благодарен Н. Кристофелю за полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кристофель Н., Гулбис А.* // Изв. АН ЭССР. Физ. Матем., 1979, **28**, № 3, 268—271.
2. *Kristoffel, N., Gulbis. A.* // Z. Phys., 1980, **B39**, № 1, 143—149. (1980).
3. *Baltz, R. von, Kraut, W.* // Phys. Rev. B, 1979, **19**, № 3, 1548—1554; **23**, 1981, № 10, 5590—5596.
4. *Kristoffel, N., Baltz, R. von, Hornung, D.* // Z. Phys., 1982, **B47**, № 2, 293—296.
5. *Ивченко Е. Л., Пикус Г. Е.* // Проблемы современной физики. Л., Наука, 1980, 275—293.
6. *Рывкин С. М., Ярошецкий И. Д.* // Проблемы современной физики. Л., Наука, 1980, 173—185.
7. *Белиничер В. И.* // Физ. твердого тела, 1981, **23**, вып. 11, 3461—3463.
8. *Васько Ф. Т.* // Физ. и техн. полупровод., 1984, **18**, вып. 1, 86—92.
9. *Белиничер В. И., Ивченко Е. Л., Стурман Б. И.* // Ж. эксперим. и теор. физ., 1982, **83**, вып. 2(8), 649—661.

Институт физики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
11/II 1988