

О КОГЕРЕНТНОМ МЕХАНИЗМЕ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА УВЛЕЧЕНИЯ

A. PISTSEV. FOTOVOLTAKAASAMISEFEKTI KOHERENTSEST MENHANISMIST

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:

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

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

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}_0 [\mathbf{e}_x \cos(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r}) + \mathbf{e}_y \sin(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r})], \quad (2)$$

то для стационарной части тока короткого замыкания получается

$$j_{\alpha} = j_{\alpha, \pi} + j_{\alpha, \kappa}, \quad (3)$$

$$j_{\alpha, \pi} = -\frac{CI}{\omega^2} \sum_{n,l} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \sum_{\beta=x,y} \int d^3k \frac{[f_n(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q})]}{E_n(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q}) + \varepsilon\omega - i\eta} \times \\ \times p_{nl}^{\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q}) F_{ln}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}; \varepsilon\mathbf{q}), \quad (4)$$

$$j_{\alpha, \kappa} = -\frac{CI}{i\omega^2} \sum_{n,l} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \varepsilon \int d^3k \frac{[f_n(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q})]}{E_n(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q}) + \varepsilon\omega - i\eta} \times \\ \times \{ p_{nl}^y(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q}) F_{ln}^{\alpha x}(\mathbf{k}; \varepsilon\mathbf{q}) - p_{nl}^x(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \varepsilon\mathbf{q}) F_{ln}^{\alpha y}(\mathbf{k}; \varepsilon\mathbf{q}) \}, \quad (5)$$

где

$$F_{nl}^{\alpha\beta} = \sum_m \left[\frac{\rho_{lm}^{\beta}(k+\varepsilon q, k) \rho_{mn}^{\alpha}(k)}{E_n(k) - E_m(k) - i\eta} - \frac{\rho_{lm}^{\alpha}(k+\varepsilon q) \rho_{mn}^{\beta}(k+\varepsilon q, k)}{E_m(k+\varepsilon q) - E_l(k+\varepsilon q) - i\eta} \right] \quad (6)$$

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

$$F_{ln}^{\alpha\beta} = \frac{1}{(-i\eta)} p_{ln}^{\beta}(k+\varepsilon q, k) [p_{nn}^{\alpha}(k) - p_{ll}^{\alpha}(k+\varepsilon q)] + m \times \\ \times \left\{ \frac{\partial p_{ln}^{\beta}(k+\varepsilon q, k)}{\partial k_{\alpha}} - ip_{ln}^{\beta}(k+\varepsilon q, k) [\Omega_{ll}^{\alpha}(k+\varepsilon q) - \Omega_{nn}^{\alpha}(k)] \right\}. \quad (7)$$

Внутризонные матричные элементы оператора координаты $\Omega_{ll}^{\alpha}(k) = i \int u_{lk}^* \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} u_{lk} d\tau_r$ на блоховских амплитудах $u_{lk}(r)$ в дальнейшем полагаем равными нулю.

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

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

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

$$j_{\alpha, \text{л}} = -\frac{i\pi C l m}{\omega^2} \sum_{n, l} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \int d^3k \delta[E_n(k) - E_l(k+\varepsilon q) + \varepsilon\omega] \times \\ \times [f_n(k) - f_l(k+\varepsilon q)] \sum_{\beta=x, y} p_{nl}^{\beta}(k, k+\varepsilon q) \frac{\partial p_{lm}^{\beta}(k+\varepsilon q, k)}{\partial k_{\alpha}}, \quad (9)$$

$$j_{\alpha, \text{ц}} = -\frac{\pi C l m}{\omega^2} \sum_{n, l} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \varepsilon \int d^3k \delta[E_n(k) - E_l(k+\varepsilon q) + \varepsilon\omega] \times \\ \times [f_n(k) - f_l(k+\varepsilon q)] \left\{ p_{nl}^y(k, k+\varepsilon q) \frac{\partial p_{ln}^x(k+\varepsilon q, k)}{\partial k_{\alpha}} - \right. \\ \left. - p_{nl}^x(k, k+\varepsilon q) \frac{\partial p_{ln}^y(k+\varepsilon q, k)}{\partial k_{\alpha}} \right\}, \quad (10)$$

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

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

* В нецентросимметричном кристалле $j_{\alpha, \text{л}}(q=0)$ есть когерентный ток объемного фотовольтаического эффекта. В разложении $j_{\alpha, \text{л}}$ по q , нечетные по q члены выпадают вследствие нечетности подынтегральных выражений по 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:

$$j_{\alpha,\alpha} = j_{\alpha,\alpha}^{(1)} + j_{\alpha,\alpha}^{(2)}, \quad (11)$$

$$j_{\alpha,\alpha}^{(1)} = \frac{i\pi m C l}{2\omega^2} q_z \sum_{n,l} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \int d^3k \delta[E_n(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k}) + \varepsilon\omega] \times \\ \times [f_n(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k})] \left\{ p_{nl}^y(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_\alpha} [x_{nl}^z(\mathbf{k}) (p_{nn}^x + p_{ll}^x)] - p_{nl}^x(\mathbf{k}) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial}{\partial k_\alpha} [x_{nl}^z(\mathbf{k}) (p_{nn}^y + p_{ll}^y)] \right\}, \quad (12)$$

$$j_{\alpha,\alpha}^{(2)} = \frac{i\pi m C l}{2\omega^2} q_z \sum_{n,l} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \int d^3k \delta[E_n(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k}) + \varepsilon\omega] \times \\ \times [f_n(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k})] x_{nl}^z(\mathbf{k}) \left\{ (p_{nn}^y + p_{ll}^y) \frac{\partial p_{nl}^x(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} - (p_{nn}^x + p_{ll}^x) \frac{\partial p_{nl}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} \right\} \quad (13)$$

В (10) межзональные матричные элементы переходов были разложены по \mathbf{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 доплеровский член $\mathbf{v}_l \mathbf{q}$ (\mathbf{v}_l — внутризональная скорость носителя), усреднение которого приводит к исчезновению и этого вклада. Используя детализацию матричного элемента перехода $p_{nl}^\beta(\mathbf{k})$ для centrosymmetric кристалла

$$p_{nl}^\beta(\mathbf{k}) = iA_{nl}^\beta + i \sum_{\sigma,\lambda} D_{nl}^{\beta\sigma\lambda} k_\sigma k_\lambda, \quad \beta \neq \sigma \neq \lambda \quad (14)$$

можно показать, что в рамках сферически-симметричной модели $j_{\alpha,\alpha}^{(2)} = 0$. Ток $j_{\alpha,\alpha}^{(1)}$ 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 межзональному поглощению. Оценивая $j_{\alpha,\alpha}^{(1)}$ в двухзонной аппроксимации, получим $j_{x,\alpha}^{(1)} = -e l k_{zy}(\omega) \delta(1 + 2\Delta/\omega) (6m\omega)^{-1}$, $k_{zy}(\omega)$ — 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 $\omega \sim \varepsilon$ когерентный и баллистический циркулярные ФТУ могут быть сравнимы по величине. Если интенсивность не прямых 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. Кристоффелю 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. Васьо 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