https://doi.org/10.3176/phys.math.1985.4.04

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

1985, 34, 4

УДК 537.226 : 535.21

Н. КРИСТОФЕЛЬ, А. ГУЛБИС

КОГЕРЕНТНЫЙ ТОК СОБСТВЕННОГО АНОМАЛЬНОГО ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПРИ ЦИРКУЛЯРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ВОЗБУЖДАЮЩЕГО СВЕТА

(Представил В. Хижняков)

Приведена общая формула для когерентного стационарного тока собственного аномального фотовольтаического эффекта во втором порядке по взаимодействию циркулярно поляризованного света с кристаллом.

В [1, 2] был предложен когерентный механизм возникновения постоянного тока собственного аномального фотовольтаического эффекта [3]. В нем ток возникает в результате интерференции амплитуд реальных и виртуальных квантовых переходов в нецентросимметричном кристалле во втором порядке по взаимодействию с возбуждающей неравновесной электромагнитной радиацией. Такому процессу отвечает сдвиг носителей в реальном пространстве [4]. Когерентный механизм (относительно развития работ этого направления см., напр., [5–12]) тока связан с недиагональными элементами матрицы плотности и межзонными скоростями, в то время как рассматривавшийся ранее баллистический механизм [13] связан с соответствующими диагональными величинами и основан на учете различной природы асимметричных по волновому вектору $(\vec{k})$ рассеяний носителей. Отмеченные работы рассматривали когерентный ток для линейной поляризации возбуждающего света. В то же время хорошо известно, что наблюдается и «циркулярный ток» для круговой поляризации падающего света [3, 13]. В настоящей заметке приводятся основные формулы для когерентного фотовольтаического тока в этом случае. Предполагается, что свет распространяется в направлении оси z, а электрический вектор падающей волны выбирается в виде *

$$\vec{\mathscr{E}}=\vec{i}\,\mathscr{E}_0\cos\omega t+\vec{j}\,\mathscr{E}_0\sin\omega t, \tag{1}$$

где $\vec{i}$, $\vec{j}$ — единичные векторы по осям x, y. Оператор адиабатически включаемого $(\varepsilon\to+0)$ взаимодействия света с электронной подсистемой кристалла имеет вид $(e<0)$

$$\mathcal{V}(t)=-\frac{e\mathscr{E}_0\hbar}{m\omega}e^{\varepsilon t}\sum_{n,l}[p^y_{nl}\cos\omega t-p^x_{nl}\sin\omega t]\,a_n^+a_l, \tag{2}$$

где p^i — компоненты оператора импульса, его матричные элементы диагональны по $\vec{k}$; индекс n объединяет здесь номер зоны n и $\vec{k}$; a_n^+, a_n — операторы порождения-уничтожения частиц в зонах с энергиями

* Здесь, как и в [1, 2, 8], мы, конечно, имеем дело с неравновесной радиацией, ср. [4].

$E_n(\vec{k})$. В технике Кубо во втором порядке по $\mathfrak{V}$ для среднего значения плотности тока в направлении α имеем

$$j_{\alpha xy} = (-i)^2 \int\limits_{-\infty}^{t} \int\limits_{-\infty}^{t_1} dt_1\, dt_2 \langle [\tilde{j}_\alpha(t), \tilde{\mathfrak{V}}(t_1)], \tilde{\mathfrak{V}}(t_2)] \rangle, \tag{3}$$

где усреднение идет со статистическим оператором невозмущенной светом системы, а операторы взяты в представлении Гейзенберга, так что (V — объем системы)

$$\tilde{j}_\alpha(t) = \frac{e}{mV} \sum_{n,l} p^\alpha_{nl}\, a^+_n a_l e^{i(E_n - E_l)t/\hbar}. \tag{4}$$

Пользуясь фермиевскими соотношениями коммутации для операторов a и выполняя интегрирования по временным переменным, получаем аналогично [14] для стационарной части тока короткого замыкания выражение ($D = e^3(4\pi^2 m^3 cn)^{-1}$, n — показатель преломления)

$$j_{\alpha xy} = \frac{DI}{\omega^2} e^{2\varepsilon t} \sum_{n,l,m} \int d^3k [f_n(\vec{k}) - f_l(\vec{k})] \times$$

$$\times \left\{ \frac{p^\alpha_{nm}(\vec{k})}{E_m(\vec{k}) - E_n(\vec{k}) - 2i\varepsilon} \left[\frac{p^+_{pl}(\vec{k})\, p^-_{ml}(\vec{k})}{E_l(\vec{k}) - E_n(\vec{k}) - \hbar\omega - i\varepsilon} + \right.\right. \tag{5}$$

$$\left. + \frac{p^-_{ln}(\vec{k})\, p^+_{lm}(\vec{k})}{E_l(\vec{k}) - E_n(\vec{k}) + \hbar\omega - i\varepsilon} \right] + \frac{p^\alpha_{ml}(\vec{k})}{E_m(\vec{k}) - E_l(\vec{k}) + 2i\varepsilon} \times$$

$$\left.\times \left[\frac{p^+_{ln}(\vec{k})\, p^-_{nm}(\vec{k})}{E_l(\vec{k}) - E_n(\vec{k}) - \hbar\omega - i\varepsilon} + \frac{p^-_{ln}(\vec{k})\, p^+_{nm}(\vec{k})}{E_l(\vec{k}) - E_n(\vec{k}) - \hbar\omega - i\varepsilon} \right] \right\}.$$

В (5) произведен термодинамический предельный переход $V \to \infty$, который, как известно [15], должен быть выполнен до $\varepsilon \to 0$, чтобы мог иметь место макроскопический необратимый диссипативный процесс. Через $I = \frac{cn}{8\pi} \mathcal{E}_0^2$ обозначена интенсивность падающего света, $f_n(\vec{k}) = f(E_n(\vec{k}))$ — равновесные фермиевские числа заполнения, а $p^\pm = p^x \pm i p^y$. Нетрудно убедиться, что ток (5) является действительным ($p_{nl}(\vec{k}) = -p^*_{nl}(-\vec{k})$), а в случае $p^x = 0$ (или $p^y = 0$) переходит в формулу, полученную для линейной поляризации [1, 2, 15]. Выполняя предельный переход $\varepsilon \to 0$ в (5), получаем

$$j_{\alpha xy} = -\frac{2DI}{\omega^2} \sum_{\xi = \pm\hbar\omega} \sum_{\substack{n,l,m \\ n \neq m}} \int d^3k\, \delta[E_n(\vec{k}) - E_l(\vec{k}) + \xi] \times$$

$$\times \frac{f_n(\vec{k}) - f_l(\vec{k})}{E_n(\vec{k}) - E_m(\vec{k})} \operatorname{Im}\{p^\alpha_{mn}(\vec{k})[p^x_{nl}(\vec{k})\, p^x_{lm}(\vec{k}) + p^y_{nl}(\vec{k})\, p^y_{lm}(\vec{k})]\}. \tag{6}$$

В этой формуле содержится суммирование по промежуточным состояниям m, которое может быть проведено аналогично * [7] и которое приводит к результату

$$j_{\alpha xy}=-\frac{DmI}{\hbar\omega^2}\sum_{\xi=\pm\hbar\omega}\sum_{n,l}\int d^3k\delta[E_n(\vec{k})-E_l(\vec{k})+\xi]\times$$

$$\times[f_n(\vec{k})-f_l(\vec{k})]\left\{\mathrm{Im}\left[p^x_{nl}(\vec{k})\frac{\partial p^x_{ln}(\vec{k})}{\partial k_\alpha}+p^y_{nl}(\vec{k})\frac{\partial p^y_{ln}(\vec{k})}{\partial k_\alpha}\right]+\right. \quad (7)$$

$$\left.+[|p^x_{nl}(\vec{k})|^2+|p^y_{nl}(\vec{k})|^2]\,\mathrm{Im}\left[\left\langle u_{l\vec{k}}\left|\frac{\partial}{\partial k_\alpha}\right|u_{l\vec{k}}\right\rangle-\left\langle u_{n\vec{k}}\left|\frac{\partial}{\partial k_\alpha}\right|u_{n\vec{k}}\right\rangle\right]\right\},$$

где $u_{n\vec{k}}$ — периодические амплитуды блоховских функций. В отсутствие магнитного поля $u_{n-\vec{k}}=u^*_{n\vec{k}}$ и обращающиеся с учетом этого свойства в нуль члены в токе здесь не выписываются. Формула (7) обобщает аналогичный по форме результат для линейной поляризации света [7, 16].

При переходе от (5) к (6) были выделены сингулярные члены с $m=l, n$, которые вместе с интегралом в смысле главного значения, получающегося при предельном переходе $\varepsilon\to 0$, после выполнения суммирования по m, могут быть объединены в

$$i_{\alpha xy}=-\frac{2DmI}{\omega}\sum_{n,l}P\int d^3k[f_n(\vec{k})-f_l(\vec{k})]\frac{\partial}{\partial k_\alpha}\left\{\frac{\mathrm{Im}[p^x_{ln}(\vec{k})p^y_{nl}(\vec{k})]}{[E_n(\vec{k})-E_l(\vec{k})]^2-\hbar^2\omega^2}\right\}, \quad (8)$$

где P — символ главного значения.

Выражение (8) не ограничено спектральной областью реальных межзонных переходов первого порядка. В (8) интегрируется четная по $\vec{k}$ функция и в настоящем подходе, если не распространять правила отбора в точке экстремума на всю зону, вообще говоря, $i_{\alpha,xy}\neq 0$. Проблема с подобного типа токами имеет определенную историю [17–19], в частности в [19] утверждается, что ток типа (8) должен исчезать. Мы не будем здесь решать эту проблему. Отметим лишь, что аналогичная ситуация возникает для фотовольтаического тока при линейной поляризации падающего света в случае нецентросимметричного кристалла, помещенного в магнитное поле [1, 20]. В [20] высказана точка зрения, что генерации «рефрактивного» (в отличие от обычного «абсорбционного») тока отвечает индуцированное полем падающей волны поглощение в области номинальной прозрачности (поглощение I порядка) кристалла.

Вернемся к обсуждению свойств тока (7), используя детализацию матричного элемента перехода. Для нецентросимметричного кристалла межзонный (опуская индексы зон) матричный элемент импульса имеет разложение

$$p^\alpha=iA_\alpha+\sum_\beta B_{\alpha\beta}k_\beta+i\sum_{\beta\gamma}C_{\alpha\beta\gamma}k_\beta k_\gamma, \quad (9)$$

причем $C_{\alpha\beta\gamma}=C_{\alpha\gamma\beta}=C_{\beta\alpha\gamma}$, $C_{\alpha\beta\beta}=0$. Свойства коэффициентов (9) могут быть проанализированы на основе $\vec{k}\vec{p}$-метода [21]. Для переходов с $A_\alpha\neq 0$ при α, отвечающем полярному направлению (z) $B_{\alpha\beta}\neq 0$ при

* Такое суммирование было впервые выполнено в [5], ср. [4].

$\alpha=\beta=z$. Если же направление α не полярное, отличными от нуля могут быть B_{xz} и B_{yz}. Применительно к (7) имеем, например,

$$\operatorname{Im}\left[p^x_{nl}\frac{\partial p^x_{ln}}{\partial k_\alpha}\right]\approx A_x B_{x\alpha}-2\sum_\beta B_{x\beta}k_\beta\sum_\gamma C_{x\alpha\gamma}k_\gamma. \qquad (10)$$

Исследование показывает, что (10) может приводить к типам тока, указанным в таблице, за счет поляризационной компоненты света по оси x,

Ток по	Полярное направление и тип тока по (10)		
	x	y	z
x	$j_{\parallel,\parallel}$	—	—
y	—	$j_{\parallel,\perp}$	$j_{\perp,\perp}$
z	—	$j_{\perp,\perp}$	$j_{\parallel,\perp}$

причем первый индекс у j указывает на ориентацию тока относительно спонтанной поляризации (полярного направления) кристалла, а второй — поляризации компонента света относительно нее. Токи типа $j_{\parallel,\parallel}$ обусловлены членами $\sim AB$ в (10), а $j_{\parallel,\perp}\sim AB$, $j_{\perp,\perp}\sim BC$. В итоге, для циркулярной поляризации при полярном направлении кристалла x: $j_{xxy}=j_{\parallel,\parallel}+j_{\parallel,\perp}$, $j_{yxy}\sim 0$, $j_{zxy}=j_{\perp,\perp}$; а при полярном направлении z: $j_{xxy}=j_{\perp,\perp}$, $j_{yxy}=j_{\perp,\perp}$, $j_{zxy}=2j_{\parallel,\perp}$.

Тензорные свойства фотовольтаического тока, чувствительность к деталям электронной энергетической структуры и матричных элементов квантовых переходов делают его перспективным для изучения этих свойств кристаллов. Актуальны расчеты спектральной зависимости тока с конкретной зонной структурой подобно [10].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кристофель Н., Гулбис А.* Изв. АН ЭССР. Физ. Матем., 28, № 3, 268—271 (1979).
2. *von Baltz, R., Kraut, W.* Phys. Rev., **19B**, № 3, 1548—1554 (1979).
3. *Фридкин В. М.* Фотосегнетоэлектрики. М., «Наука», 1979.
4. *Белиничер В. И., Ивченко Е. Л., Стурман Б. И.* Ж. эксперим. и теор. физ., **83**, вып. 2, 649—661 (1982).
5. *von Baltz, R., Kraut, W.* Phys. Rev., **23B**, № 10, 5590—5596 (1981).
6. *Kristoffel, N., Gulbis, A.* Z. Phys., **39B**, № 1, 143—149 (1980).
7. *Kristoffel, N., von Baltz, R., Hornung, D.* Z. Phys., **47B**, № 2, 293—296 (1982).
8. *Бурсиан Э. В., Гиршберг Я. Г., Трунов Н. Н.* Ж. эксперим. и теор. физ., **83**, вып. 4, 1170—1175 (1982).
9. *Гиршберг Я. Г., Бурсиан Э. В., Трунов Н. Н.* Изв. АН СССР. Сер. физ., **47**, № 3, 541—547 (1983).
10. *Hornung, D., von Baltz, R., Rössler, U.* Solid State Commun., **48**, № 3, 225—229 (1983).
11. *Kristoffel, N., Gulbis, A.* Czechosl. J. Phys., **B32**, № 1, 76—80 (1982).
12. *Ивченко Е. Л., Лянда-Геллер Ю. Б., Пикус Г. Е., Расулов Р. Я.* Физ. твердого тела, **18**, вып. 1, 93—101 (1984).
13. *Белиничер В. И., Стурман Б. И.* Успехи физ. наук, **130**, вып. 3, 415—458 (1980).
14. *Гулбис А. В.* Изв. АН ЛатвССР. Сер. физ. и техн. н., № 4, 20—22 (1979).
15. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М., «Наука», 1971.

16. *Altukhov, V. I., Gulbis, A. V., Konsin, P. I., Kristoffel, N. N., Ord, T. A.* In: Cooperative Phenomena. Tallinn, «Valgus», 1983, 80—95.
17. *Меднис П. М.* Письма в ЖЭТФ, 7, вып. 9, 335—339 (1968).
18. *Соколов Ф. Ф., Энтин М. В.* Препринт 33-78 ИФП, СО АН СССР, Новосибирск, 1978.
19. *Белиничер В. И.* Физ. твердого тела, 23, вып. 4, 1229—1231 (1981).
20. *Kristoffel, N.* Phys. status solidi, **127b**, № 1, 413—418 (1985).
21. *Бир Г. Л., Пикус Г. Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., «Наука», 1972.

Институт физики
Академии наук Эстонской ССР

Институт физики
Академии наук Латвийской ССР

Поступила в редакцию
27/XII 1984

N. KRISTOFFEL, A. GULBIS

RUUMILISE ANOMAALSE FOTOVOLTAEFEKTI KOHERENTNE VOOL ERGASTAVA VALGUSE RINGPOLARISATSIOONI KORRAL

On saadud üldine avaldis ruumilise anomaalse fotovoltaefekti koherentse statsionaarse voolu tarvis ringpolariseeritud ergastava valguse korral ning analüüsitud selle voolu tensoromadusi. On kasutatud teist järku häiritusteooriat elektromagnetkiirguse ja tsentraalsümmeetriata kristalli vastastikmõju kirjeldamiseks.

N. KRISTOFFEL, A. GULBIS

COHERENT CURRENT OF THE ANOMALOUS BULK PHOTOVOLTAIC EFFECT FOR CIRCULAR POLARIZED EXCITING LIGHT

A general expression for the coherent stationary current of the anomalous bulk photovoltaic effect for the circular polarized exciting light is obtained. The second-order perturbation theory for the interaction of the electromagnetic field with the noncentrosymmetric crystal is used. The tensorial properties of this current are analysed.