

С363

В-584

24/2-71

1/11-71

P4 - 5423

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна



И.П. Влахов, В.Д. Караиманов

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

К ТЕОРИИ ПОГЛОЩЕНИЯ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН
СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ ЗАРЯДА
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

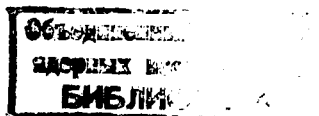
1970

P4 - 5423

Й.П. Влахов, В.Д. Караванов *

К ТЕОРИИ ПОГЛОЩЕНИЯ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН
СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ ЗАРЯДА
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

* Софийский, университет, Болгария



Исходя из общей теории прохождения излучения через вещество, поглощение электромагнитных волн можно описать фактором $e^{-\alpha l}$, где l — толщина поглощающего слоя, а α — коэффициент поглощения. В общем случае α является функцией частоты ω и волнового вектора \vec{k} падающей волны. Из уравнений Максвелла для изотропной среды следует, что

$$\alpha = \frac{4\pi}{c \cdot \sqrt{\epsilon}} \operatorname{Re} \sigma, \quad (I)$$

где c_0 — скорость света в пустоте, σ — комплексная электропроводность системы, а ϵ — диэлектрическая проницаемость среды. Выражение (I) получается в предположении, что частота удовлетворяет неравенству $\omega \gg \frac{4\pi}{\epsilon} \operatorname{Re} \sigma$.

В данной работе будем рассматривать пространственнооднородное электрическое поле ($\vec{k} = 0$). Поглощающей системой является газ свободных носителей заряда в полупроводниках. Тогда ϵ — вещественная часть диэлектрической проницаемости решетки, которую будем считать практически постоянной. Предполагается еще, что ω превышает плазменную частоту газа свободных носителей заряда.

В такой постановке задача о нахождении коэффициента оптического поглощения в полупроводниках рассматривалась в работах ^{/1-3/}.

В этих работах для вычисления σ применяется техника функций Грина и формула Кубо (см. ^{/2, 4/}. Рассеяние свободных носителей заряда происходит на фононах. В ^{/1, 2/} используется приближение высоких частот. В ^{/3/} сделана попытка снять это ограничение специально для случая рассеяния на оптических фононах.

Там же рассматривается рассеяние на примесях и анализируется влияние различных механизмов рассеяния на поглощение свободными носителями заряда. В^{5/} вычислялась добавка к коэффициенту оптического поглощения, получающаяся вследствие рассеяния фононов на изотопических дефектах решетки.

В настоящей работе $\alpha(\omega)$ вычисляется в случае рассеяния на акустических фононах с учетом изменения электрон-фононного взаимодействия из-за наличия примесных дефектов решетки в результате замещения атомов.

§ I. Постановка задачи

Будем рассматривать кристалл из атомов A , образующих простую кубическую решетку. Некоторые из атомов A замещены атомами B . Таким образом в кристалле созданы примесные дефекты. Гамильтониан системы "электроны и фононы" в таком кристалле получен в ^{16/}. Он имеет вид:

$$H = \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) a^{\dagger}(\vec{p}) a(\vec{p}) + \sum_{\vec{k}} \omega(k) b^{\dagger}(\vec{k}) b(\vec{k}) + \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}} B(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}) a^{\dagger}(\vec{p}_1) a(\vec{p}_2) [b(\vec{k}) + b^{\dagger}(-\vec{k})], \quad (2)$$

где $\vec{p} = (\vec{p}, s)$; s - спиновая переменная. Будем использовать приближение изотропной эффективной массы:

$$\varepsilon(p) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \mu.$$

Химический потенциал μ отсчитывается от дна зоны проводимости.

$$B(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}) = A(k) \Delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{k}) + D(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}) C(\vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{k}) \Delta(s_1 - s_2) \quad (3)$$

Здесь Δ - единичная матрица, $C(\vec{K})$ - фурье-компоненты флуктуации концентрации дефектов В /7/. В модели Вигнера-Зейтца (приближение жестких ионов /8/)

$$A(\kappa) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\rho V\omega(\kappa)}} \kappa \left[(1-c) U_A(r.) + c U_B(r.) \right] j \quad (4)$$

$$D(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{K}) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\rho V\omega(\kappa)}} \frac{\vec{K} \cdot (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)}{\kappa} \left[U_B(r.) - U_A(r.) \right] j', \quad (4')$$

где ρ - плотность кристалла, V - фундаментальный объем, c - концентрация дефектов В :

$$c = \frac{N_B}{N_A + N_B} = \frac{N_B}{N}$$

N_A , N_B - соответственно числа атомов А и В в объеме V .

Здесь $U_A(r)$, $U_B(r)$ - потенциальная энергия электрона соответственно в поле узла с атомом А и в поле узла с атомом В ; r_0 - радиус элементарной ячейки; j , j' - безразмерные величины порядка единицы.

$A(\kappa)$ и $D(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{K})$ можно записать в виде:

$$A(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{V}} A \frac{\kappa}{\sqrt{\omega(\kappa)}} \quad (5)$$

$$D(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{K}) = \frac{1}{\sqrt{V}} D \frac{\vec{K} \cdot (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)}{\kappa \sqrt{\omega(\kappa)}}, \quad (5')$$

где A и D - постоянные. A играет роль константы взаимодействия электронов с фононным полем. Из /4/, /4'/ следует, что

$$D^2 = A^2 \frac{\eta^2}{(1+c\eta)^2}, \quad \eta = \frac{U_B(r.) - U_A(r.)}{U_A(r.)}. \quad (6)$$

Второе слагаемое в /3/ описывает дополнительное поле, которое добавляется к синусоидальному поляризованному полю фонона. Это дополнительное поле получается вследствие разности потенциалов $U_B - U_A$ регулярного и дефектного узлов. Фурье-компоненты флуктуации концентрации несут информацию о концентрации и расположении дефектов В.

Имеются в виду только продольные акустические фононы. Поэтому и не пишется индекс ветви колебаний.

Частота и температура T выражаются в энергетических единицах.

Для $\alpha(\omega)$ будем использовать выражение /1/. Из формулы Кубо (см. /2/) получается:

$$R_{\alpha} \sigma_{\alpha\rho}(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3}{3m^2 V \omega} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \vec{p} \cdot \vec{p}' \text{Im} K(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{p}', \vec{p}'; \omega). \quad (7)$$

Здесь

$$K(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}_3, \vec{p}_4; E) = \frac{1}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i \frac{Et}{\hbar}} K(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}_3, \vec{p}_4; t). \quad (8)$$

Функция Грина $K(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}_3, \vec{p}_4; t)$ определяется равенством:

$$K(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}_3, \vec{p}_4; t) = i \Theta(t) \langle [a^{\dagger}(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}_2, t); a^{\dagger}(\vec{p}_3) a(\vec{p}_4)] \rangle. \quad (9)$$

§ 2. Уравнение для функции Грина

дифференцируя /9/ и используя /2/, получаем:

$$i \frac{d}{dt} K(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}'_1, \vec{p}'_2; t) =$$

$$= \delta(t) \Delta(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1) \Delta(\vec{p}_2 - \vec{p}'_2) [n(\vec{p}_2) - n(\vec{p}_1)] + [\varepsilon(\vec{p}_2) - \varepsilon(\vec{p}_1)] K(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}'_1, \vec{p}'_2; t) - \\ - \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} B(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2; \vec{k}) [K_1(\vec{p}'_1, \vec{p}_2, \vec{k}, \vec{p}'_2; t) + K_2(\vec{p}'_1, \vec{p}_2, \vec{k}, \vec{p}'_2; t)] + \\ + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} B(\vec{p}_1, \vec{p}'_2; \vec{k}) [K_1(\vec{p}_1, \vec{p}'_2, \vec{k}, \vec{p}'_2; t) + K_2(\vec{p}_1, \vec{p}'_2, \vec{k}, \vec{p}'_2; t)], \quad (10)$$

где $\eta(\vec{p}) = \langle a^+(\vec{p}) a(\vec{p}) \rangle$ и

$$K_1(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2, t) = i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}_2, t) b(\vec{k}, t); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle \quad (\text{II})$$

$$K_2(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2, t) = i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}_2, t) b^+(\vec{k}, t); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle \quad (\text{II}')$$

(В этом параграфе $\hbar = 1$)

Для K_1 и K_2 из /II/, /II'/ аналогичным образом получаем:

$$\begin{aligned} i \frac{dK_1}{dt} = & -\delta(t) \left\{ \Delta(\vec{p}_2 - \vec{p}'_1) \langle a^+(\vec{p}_1) b(\vec{k}) a(\vec{p}'_2) \rangle - \Delta(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) \langle a^+(\vec{p}'_1) b(\vec{k}) a(\vec{p}'_2) \rangle \right\} + \\ & + \left\{ \varepsilon(p_2) - \varepsilon(p_1) + \omega(k) \right\} K_1 - \\ & - \sum_{\vec{k}', \vec{p}'} B(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, \vec{k}') i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}'_1, t) \{ b(\vec{k}', t) + b^+(\vec{k}', t) \} a(\vec{p}_2, t) b(\vec{k}, t); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle + \\ & + \sum_{\vec{k}', \vec{p}''} B(\vec{p}_2, \vec{p}'_1, \vec{k}') i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}'_1, t) \{ b(\vec{k}', t) + b^+(\vec{k}', t) \} b(\vec{k}, t); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle + \\ & + \sum_{\vec{p}', \vec{p}''} B(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, -\vec{k}) i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}_2, t) a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle \quad (12) \\ i \frac{dK_2}{dt} = & -\delta(t) \left\{ \Delta(\vec{p}_2 - \vec{p}'_1) \langle a^+(\vec{p}_1) b^+(\vec{k}) a(\vec{p}'_2) \rangle - \Delta(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) \langle a^+(\vec{p}'_1) b^+(\vec{k}) a(\vec{p}'_2) \rangle \right\} + \\ & + \left\{ \varepsilon(p_2) - \varepsilon(p_1) - \omega(k) \right\} K_2 - \\ & - \sum_{\vec{k}', \vec{p}'} B(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, \vec{k}') i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}'_1, t) \{ b(\vec{k}', t) + b^+(\vec{k}', t) \} a(\vec{p}_2, t) b^+(\vec{k}, t); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle + \\ & + \sum_{\vec{k}', \vec{p}''} B(\vec{p}_2, \vec{p}'_1, \vec{k}') i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}'_1, t) \{ b(\vec{k}', t) + b^+(\vec{k}', t) \} b^+(\vec{k}, t); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle + \\ & + \sum_{\vec{p}', \vec{p}''} B(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, -\vec{k}) i \Theta(t) \langle [a^+(\vec{p}_1, t) a(\vec{p}_2, t) a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2); a^+(\vec{p}'_1) a(\vec{p}'_2)] \rangle \end{aligned}$$

Высшие функции Грина, участвующие в /12/, упрощаются путем спаривания операторов одного момента времени. Например:

$$i\theta(t) \langle [a^+(\tilde{r}'_1, t) \{b(\tilde{u}'_1, t) + b^+(\tilde{u}'_1, t)\} a(\tilde{r}_2, t) b(\tilde{u}_2, t); a^+(\tilde{r}'_1) a(\tilde{r}'_2)]_- \rangle \approx \quad (13)$$

$$\approx \Delta(\tilde{u}'_1 + \tilde{u}'_2) \nu(\omega) K(\tilde{r}'_1, \tilde{r}_2; \tilde{r}'_1, \tilde{r}'_2; t),$$

где $\nu(\omega) = \langle b^+(\tilde{u}) b(\tilde{u}) \rangle$,

$$i\theta(t) \langle [a^+(\tilde{r}_1, t) a(\tilde{r}_2, t) a^+(\tilde{r}'_1, t) a(\tilde{r}'_2, t); a(\tilde{r}'_1) a(\tilde{r}'_2)]_- \rangle \approx \quad (14)$$

$$\approx \Delta(\tilde{r}_1 - \tilde{r}_2) n(\tilde{r}_1) K(\tilde{r}'_1, \tilde{r}'_2; \tilde{r}'_1, \tilde{r}'_2; t) - \Delta(\tilde{r}_1 - \tilde{r}'_1) n(\tilde{r}_1) K(\tilde{r}'_1, \tilde{r}_2; \tilde{r}'_1, \tilde{r}'_2; t) +$$

$$+ \Delta(\tilde{r}_2 - \tilde{r}'_1) [1 - n(\tilde{r}_2)] K(\tilde{r}_1, \tilde{r}'_1; \tilde{r}'_1, \tilde{r}'_2; t) + \Delta(\tilde{r}'_1 - \tilde{r}'_2) n(\tilde{r}'_1) K(\tilde{r}_1, \tilde{r}_2; \tilde{r}'_1, \tilde{r}'_2; t).$$

Вычисление средних $\langle a^+(\tilde{r}_1) b(\tilde{u}) a(\tilde{r}_2) \rangle$, $\langle a^+(\tilde{r}_1) b^+(\tilde{u}) a(\tilde{r}_2) \rangle$ производится таким же образом, как и в /4/. Получаем:

$$\langle a^+(\tilde{r}_1, t) b(\tilde{u}, t) a(\tilde{r}_2, t) \rangle =$$

$$= [-\varepsilon(\rho_1) + \varepsilon(\rho_2) + \omega(\omega)]^{-1} B(\tilde{r}_2, \tilde{r}_1, -\tilde{u}) \{n(\tilde{r}_1) n(\tilde{r}_2) + \nu(\omega) [n(\tilde{r}_2) - n(\tilde{r}_1)] - n(\tilde{r}_1)\} \quad (15)$$

$$\langle a^+(\tilde{r}_1, t) b^+(\tilde{u}, t) a(\tilde{r}_2, t) \rangle =$$

$$= [-\varepsilon(\rho_1) + \varepsilon(\rho_2) - \omega(\omega)]^{-1} B(\tilde{r}_2, \tilde{r}_1, -\tilde{u}) \{-n(\tilde{r}_1) n(\tilde{r}_2) - \nu(\omega) [n(\tilde{r}_1) - n(\tilde{r}_2)] + n(\tilde{r}_2)\}.$$

Применяя фурье-преобразование по времени /8/, из /10/, /12/, /13/, /14/, /15/ получаем для K замкнутое уравнение типа $LK = Q$. Явный вид оператора L и функции Q ввиду их громоздкости не будем выписывать. Они имеют следующую структуру:

$$L = L_0 + L_1, \quad Q = Q_0 + Q_1,$$

где L_0 , Q_0 содержат все члены, происходящие из первого слагаемого в /3/, а L_1 , Q_1 объединяют все члены, содержащие $S(\kappa)$.

При усреднении по конфигурациям дефектов считается, что слагаемые L_1 и Q_1 являются малыми поправками. Тогда с точностью до линейных членов по L_1 и Q_1 имеем:

$$(L_0 + \bar{L}_1) \bar{K} = Q_0 + \bar{Q}_1, \quad (16)$$

где чертой обозначены величины, усредненные по конфигурациям дефектов. Будем предполагать, что имеется равновероятное распределение дефектов по узлам решетки (отсутствует корреляция). Тогда (см. /8/):

$$\overline{C(\vec{k}_1) C(\vec{k}_2)} = \frac{c(1-c)}{N} \Delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2). \quad (I7)$$

Используя /I7/, а также то, что $\overline{C(\vec{k})} = 0$, для \vec{k} получаем уравнение

$$\begin{aligned} & \omega K(\vec{p}, \vec{p}; \vec{p}', \vec{p}'; \omega) = \\ & = \sum_{\vec{u}} \left\{ W_0(\vec{p}, \vec{p} + \vec{u}, \omega) K(\vec{p}, \vec{p}; \vec{p}', \vec{p}'; \omega) - W_0(\vec{p} + \vec{u}, \vec{p}, \omega) K(\vec{p} + \vec{u}, \vec{p} + \vec{u}; \vec{p}', \vec{p}'; \omega) \right\} + \\ & + \frac{c(1-c)}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ W_1(\vec{p}, \vec{q}, \omega) K(\vec{p}, \vec{p}; \vec{p}', \vec{p}'; \omega) - W_1(\vec{q}, \vec{p}, \omega) K(\vec{q}, \vec{q}; \vec{p}', \vec{p}'; \omega) \right\} + \\ & + \frac{1}{2\pi} \sum_{\vec{u}} \left\{ \Delta(\vec{p}' - \vec{p}) - \Delta(\vec{p}' - \vec{p} - \vec{u}) \right\} P_0(\vec{p}, \vec{p} + \vec{u}, \omega) + \frac{1}{2\pi} \frac{c(1-c)}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ \Delta(\vec{p}' - \vec{p}) - \Delta(\vec{p}' - \vec{q}) \right\} P_1(\vec{p}, \vec{q}, \omega), \end{aligned} \quad (I8)$$

где

$$P_0(\vec{p}, \vec{p} + \vec{u}, \omega) = A^2(\kappa) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ \frac{\eta(\vec{p} + \vec{u}) \eta(\vec{p}) - [\nu(\mu) + 1] \eta(\vec{p} + \vec{u}) + \nu(\mu) \eta(\vec{p})}{[\omega - \varepsilon(\rho) + \varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) - \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) + \varepsilon(\rho) + \omega(\mu)]} - \right. \\ & - \frac{\eta(\vec{p} + \vec{u}) \eta(\vec{p}) - [\nu(\mu) + 1] \eta(\vec{p}) + \nu(\mu) \eta(\vec{p} + \vec{u})}{[\omega - \varepsilon(\rho) + \varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) + \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) + \varepsilon(\rho) - \omega(\mu)]} + \\ & + \frac{\eta(\vec{p}) \eta(\vec{p} + \vec{u}) - [\nu(\mu) + 1] \eta(\vec{p}) + \nu(\mu) \eta(\vec{p} + \vec{u})}{[\omega - \varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) + \varepsilon(\rho) - \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(\rho) + \varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) + \omega(\mu)]} - \\ & \left. - \frac{\eta(\vec{p}) \eta(\vec{p} + \vec{u}) - [\nu(\mu) + 1] \eta(\vec{p} + \vec{u}) + \nu(\mu) \eta(\vec{p})}{[\omega - \varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) + \varepsilon(\rho) + \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(\rho) + \varepsilon(\vec{p} + \vec{u}) - \omega(\mu)]} \right\} \end{aligned} \quad (I9)$$

$$P_1(\check{p}, \check{q}, \omega) = \Delta(S_q - S_p) \sum_{\vec{k}} \mathcal{D}^2(\check{q}, \check{p}, \vec{k}) \times$$

$$\times \left\{ \frac{\eta(\check{q})\eta(\check{p}) - [\nu(\mu)+1]\eta(\check{q}) + \nu(\mu)\eta(\check{p})}{[\omega - \varepsilon(p) + \varepsilon(q) - \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(q) + \varepsilon(p) + \omega(\mu)]} - \right.$$

$$- \frac{\eta(\check{q})\eta(\check{p}) - [\nu(\mu)+1]\eta(\check{p}) + \nu(\mu)\eta(\check{q})}{[\omega - \varepsilon(p) + \varepsilon(q) + \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(q) + \varepsilon(p) - \omega(\mu)]} +$$

$$+ \frac{\eta(\check{p})\eta(\check{q}) - [\nu(\mu)+1]\eta(\check{p}) + \nu(\mu)\eta(\check{q})}{[\omega - \varepsilon(q) + \varepsilon(p) - \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(p) + \varepsilon(q) + \omega(\mu)]} -$$

$$\left. - \frac{\eta(\check{p})\eta(\check{q}) - [\nu(\mu)+1]\eta(\check{q}) + \nu(\mu)\eta(\check{p})}{[\omega - \varepsilon(q) + \varepsilon(p) + \omega(\mu)] \cdot [-\varepsilon(p) + \varepsilon(q) - \omega(\mu)]} \right\}$$

(20)

$$W_0(\check{p}, \check{p} + \vec{k}, \omega) = A^2(\mu) \times$$

$$\times \left\{ \frac{[\omega - \varepsilon(p) + \varepsilon(\check{p} + \vec{k})][2\nu(\mu)+1] + \omega(\mu)[2\eta(\check{p} + \vec{k}) - 1]}{[\omega - \varepsilon(p) + \varepsilon(\check{p} + \vec{k})]^2 - \omega^2(\mu)} + \right.$$

$$\left. + \frac{[\omega - \varepsilon(\check{p} + \vec{k}) + \varepsilon(p)][2\nu(\mu)+1] - \omega(\mu)[2\eta(\check{p} + \vec{k}) - 1]}{[\omega - \varepsilon(\check{p} + \vec{k}) + \varepsilon(p)]^2 - \omega^2(\mu)} \right\}$$

(21)

$$W_1(\check{p}, \check{q}, \omega) = \Delta(S_q - S_p) \sum_{\vec{k}} \mathcal{D}^2(\check{q}, \check{p}, \vec{k}) \times$$

$$\times \left\{ \frac{[\omega - \varepsilon(p) + \varepsilon(q)][2\nu(\mu)+1] + \omega(\mu)[2\eta(\check{q}) - 1]}{[\omega - \varepsilon(p) + \varepsilon(q)]^2 - \omega^2(\mu)} + \right.$$

$$\left. + \frac{[\omega - \varepsilon(q) + \varepsilon(p)][2\nu(\mu)+1] - \omega(\mu)[2\eta(\check{q}) - 1]}{[\omega - \varepsilon(q) + \varepsilon(p)]^2 - \omega^2(\mu)} \right\}.$$

Введем обозначения $m_0(\check{p}, \omega)$ и $m_1(\check{p}, \omega)$:

$$\vec{p} m_0(\check{p}, \omega) = - \sum_{\vec{k}} \vec{k} W_0(\check{p}, \check{p} + \vec{k}, \omega)$$

(22)

$$\check{p} m_1(\check{p}, \omega) = \frac{c(1-c)}{N} \sum_{\check{q}} (\check{p} - \check{q}) W_1(\check{p}, \check{q}, \omega)$$

Из /18/ имеем (см. /9/):

$$2\pi [\omega - m_0(\tilde{p}, \omega) - m_1(\tilde{p}, \omega)] K(\tilde{p}, \tilde{p}; \tilde{p}', \tilde{p}'; \omega) = \\ = \sum_{\tilde{r}} [\Delta(\tilde{p}' - \tilde{p}) - \Delta(\tilde{p}' - \tilde{p} - \tilde{u})] P_c(\tilde{p}, \tilde{p} + \tilde{u}, \omega) + \frac{c(1-c)}{N} \sum_{\tilde{q}} [\Delta(\tilde{p}' - \tilde{p}) - \Delta(\tilde{p}' - \tilde{q})] P_i(\tilde{p}, \tilde{q}, \omega). \quad (24)$$

Этот результат получен как следствие двух приближений:

1). Расщепление функции Грина /13/, /14/ означает, что по отношению гамильтониана электрон-фононного взаимодействия применяется теория возмущений с учетом слагаемых порядка A^2 /см. /2/, /3/, /5/, /6/).

2). При получении уравнения /16/ малым параметром является величина $g = c\eta^2$. Предполагается, что $g \ll 1$ и (16) содержит только члены, пропорциональные нулевой и первой степени g .

На основании этих приближений в выражении для K будем сохранять только слагаемые, пропорциональные A^2 и $A^2 g$. Тогда из /24/ с учетом /19/, /20/, /21/, /22/, /23/ получаем

$$\text{Im } K(\tilde{p}, \tilde{p}; \tilde{p}', \tilde{p}'; \omega) = \\ = \frac{\omega}{2\pi} \frac{\sum [\Delta(\tilde{p}' - \tilde{p}) - \Delta(\tilde{p}' - \tilde{p} - \tilde{u})] P_c'(\tilde{p}, \tilde{p} + \tilde{u}, \omega)}{[\omega - M_0(\tilde{p}, \omega) - M_1(\tilde{p}, \omega)]^2 + [\gamma_0(\tilde{p}, \omega) + \gamma_1(\tilde{p}, \omega)]^2} + \\ + \frac{\omega}{2\pi} \frac{c(1-c)}{N} \frac{\sum [\Delta(\tilde{p}' - \tilde{p}) - \Delta(\tilde{p}' - \tilde{q})] P_i'(\tilde{p}, \tilde{q}, \omega)}{[\omega - M_0(\tilde{p}, \omega) - M_1(\tilde{p}, \omega)]^2 + [\gamma_0(\tilde{p}, \omega) + \gamma_1(\tilde{p}, \omega)]^2}, \quad (25)$$

где

$$M_0 = \text{Re } m_0 \quad \gamma_0 = \text{Im } m_0 \quad P_c' = \text{Im } P_c \quad (26) \\ M_1 = \text{Re } m_1 \quad \gamma_1 = \text{Im } m_1 \quad P_i' = \text{Im } P_i$$

Из первого приближения также следует, что для $n(\tilde{p})$ и $\nu(\tilde{k})$ можно использовать соответствующие выражения при отсутствии электрон-фононного взаимодействия

$$n(\tilde{p}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar^2 p^2}{2mT} - \frac{\mu}{T}} + 1} \quad \nu(\tilde{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\omega(\tilde{k})}{T}} - 1} \quad (27)$$

§ 3. Приближенные выражения для коэффициента поглощения

Дальнейшие вычисления проводятся для случая малой плотности электронного газа, когда $e^{\frac{\mu}{T}} \ll 1$ и, соответственно, можно применять классическую статистику. Тогда из /27/ получаем:

$$n(\tilde{p}) = \frac{n}{2} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\hbar^2 p^2}{2mT}}, \quad (28)$$

где n - число электронов в единице объема.

Слагаемых типа $n(\tilde{p}_1) n(\tilde{p}_2)$ не будем учитывать.

Из /25/ видно, что приближение высоких частот осуществляется, когда

$$\omega \gg M_0, M_1, \gamma_0, \gamma_1. \quad (29)$$

Из-за наличия малого параметра $c\eta^2$ величины $M_1, \gamma_1 \ll M_0, \gamma_0$, поэтому достаточно, чтобы $\omega \gg M_0, \gamma_0$.

Из /26/, /23/, /21/ получается, что M_0 и γ_0 можно представить в виде:

$$M_0 = \beta \frac{1}{\chi^3} I_m, \quad \gamma_0 = \pi \beta \frac{1}{\chi^3} I_\gamma,$$

где I_M, I_χ - безразмерные интегралы порядка единицы, $\chi^2 = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2mT}$,
а

$$\beta = \frac{\pi^4}{16\sqrt{2}} \frac{\hbar A^2}{a^6 m^{\frac{1}{2}} T^{\frac{5}{2}}}. \quad (30)$$

Существенная область интегрирования в /7/ - интервал $\chi \sim 1$.
Следовательно, для высокочастотного приближения необходимо, чтобы

$$\omega \gg \beta. \quad (31)$$

Для оценки порядка положим, например: $\mathcal{U}_A(r) = 5 \cdot 10^{-11}$ эрг,
 $\eta = m_0$, где m_0 - масса свободного электрона, $a = 3 \cdot 10^{-8}$ см,
 $T = 300^\circ$ К. Тогда получаем $\beta \sim 7 \cdot 10^{-11}$ эрг.

Дальше будем работать в приближении высоких частот /29/.
Тогда из /25/, /7/ получаем

$$\mathcal{L}(\omega) = \mathcal{L}_0(\omega) + \mathcal{L}_1(\omega)$$

$$\mathcal{L}_0(\omega) = \frac{4\pi e^2 \hbar^3}{3c \sqrt{\epsilon} m^2 v} \frac{1}{\omega^2} \sum_{\vec{p}, \vec{p}', \vec{k}} [\Delta(\vec{p}' - \vec{p}) - \Delta(\vec{p}' - \vec{p} - \vec{k})] \vec{p} \cdot \vec{p}' P'_0(\vec{p}, \vec{p} + \vec{k}, \omega) \quad (32)$$

$$\mathcal{L}_1(\omega) = \frac{4\pi e^2 \hbar^3}{3c \sqrt{\epsilon} m^2 v} \frac{c(1-c)}{N} \frac{1}{\omega^2} \sum_{\vec{p}, \vec{p}', \vec{q}} [\Delta(\vec{p}' - \vec{p}) - \Delta(\vec{p}' - \vec{q})] \vec{p} \cdot \vec{p}' P'_1(\vec{p}, \vec{q}, \omega). \quad (33)$$

Из /28/, /26/, /19/, /20/ легко получается

$$P'_0(\vec{p}, \vec{p} + \vec{k}, \omega) = -\frac{\pi \eta}{2\omega} \left(\frac{2\pi \hbar}{mT} \right)^{\frac{3}{2}} A^2(k) \times \quad (34)$$

$$\times \left\{ [v(k) e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2mT}} - (v(k)+1) e^{-\frac{\hbar^2(\vec{p}+\vec{k})^2}{2mT}}] \left[\delta\left(\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2(\vec{p}+\vec{k})^2}{2m} - \omega(k)\right) - \delta\left(\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2(\vec{p}+\vec{k})^2}{2m} + \omega(k)\right) \right] + \right. \\ \left. + [v(k) e^{-\frac{\hbar^2(\vec{p}+\vec{k})^2}{2mT}} - (v(k)+1) e^{-\frac{\hbar^2 p^2}{2mT}}] \left[\delta\left(\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2(\vec{p}+\vec{k})^2}{2m} - \omega(k)\right) - \delta\left(\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2(\vec{p}+\vec{k})^2}{2m} + \omega(k)\right) \right] \right\}$$

$$P_1(\vec{p}, \vec{q}, \omega) = -\frac{\pi n}{2\omega} \left(\frac{2\pi\hbar}{mT}\right)^{\frac{3}{2}} \Delta(S_q - S_p) \sum_{\vec{r}} D^2(\vec{q}, \vec{p}, \vec{r}) \times$$

$$\times \left\{ \left[\nu(u) e^{-\frac{\hbar^2 u^2}{2mT}} - (\nu(u)+1) e^{-\frac{\hbar^2 u^2}{2mT}} \right] \left[\delta\left(\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \omega(u)\right) - \delta\left(\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \omega(u)\right) \right] + \right.$$

$$\left. + \left[\nu(u) e^{-\frac{\hbar^2 u^2}{2mT}} - (\nu(u)+1) e^{-\frac{\hbar^2 u^2}{2mT}} \right] \left[\delta\left(\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \omega(u)\right) - \delta\left(\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \omega(u)\right) \right] \right\} \quad (35)$$

Дальше при вычислении интегралов будем предполагать, что зона Бриллюэна для фононов есть сфера с радиусом K_m , $K_m = \frac{\pi}{a}$. Тогда из /32/, /34/ и /5/ для α_0 получается:

$$\alpha_0(E) = \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}} \frac{\pi e^2 m^{\frac{3}{2}} A^2}{c_s \epsilon^{\frac{1}{2}} \hbar^4 T^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{E^3} \int_0^{z_m} dz \frac{z^3}{\Omega(z)} \times$$

$$\times \left\{ -[E - \Omega(z) + z^2] e^{-\frac{(E - \Omega(z) + z^2)^2}{4z^2}} \left[\nu(z) - (\nu(z)+1) e^{-E - \Omega(z)} \right] - [E + \Omega(z) - z^2] e^{-\frac{(E + \Omega(z) - z^2)^2}{4z^2}} \left[\nu(z) - (\nu(z)+1) e^{-E - \Omega(z)} \right] + \right.$$

$$\left. + [E - \Omega(z) - z^2] e^{-\frac{(E - \Omega(z) - z^2)^2}{4z^2}} \left[\nu(z) e^{-E + \Omega(z)} - (\nu(z)+1) \right] + [E + \Omega(z) + z^2] e^{-\frac{(E + \Omega(z) + z^2)^2}{4z^2}} \left[\nu(z) e^{-E + \Omega(z)} - (\nu(z)+1) \right] \right\} \quad (36)$$

где введены безразмерные переменные

$$z^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2mT}, \quad z_m^2 = \frac{\hbar^2 K_m^2}{2mT}, \quad E = \frac{\omega}{T}, \quad \Omega(z) = \frac{\omega[u(z)]}{T} \quad (37)$$

Рассмотрим случай, когда

$$\omega \gg \omega_m, \quad (38)$$

где ω_m - частота Дебая. Имея в виду, что $\omega_m \sim 10^{13} - 10^{14}$ гц, из /30/ и /31/ видим, что /38/ выполняется хорошо. Оценка для упомянутых значений T , m , K_m дает также, что $\omega > \frac{\hbar^2 K_m^2}{2m}$. Тогда, применяя метод асимптотических оценок Лапласа, из /36/ и /38/ получаем:

$$\alpha_0(\omega) = \frac{\sqrt{2}\pi^2}{3} \frac{\pi e^2}{c_s \sqrt{\epsilon} \sqrt{m} a^4} A \frac{1}{\omega_e} \operatorname{cth} \left(\frac{\omega_e}{2T} \right) \frac{\sqrt{T}}{\omega^3} \operatorname{sh} \left(\frac{\omega}{2T} \right) e^{-\frac{\omega^2 + \omega_e^2}{4\theta T}}, \quad (39)$$

где $\beta = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$, а $\omega_e = \omega(\kappa_m)$.

Для α_1 из /33/, /35/, /5/, /6/ получаем:

$$\alpha_1(E) = \frac{8\sqrt{2\pi}}{9} \frac{\pi e^2 m^{\frac{3}{2}} A^2}{c_0 \varepsilon^{\frac{1}{2}} \hbar^4 \pi^{\frac{1}{2}}} \eta^2 c(1-c) \times$$

$$\times \frac{\text{Sh} \frac{E}{2}}{E^3} \int_0^1 \frac{dz \cdot z^2}{\Omega(z) \text{sh} \frac{\Omega(z)}{2}} \left\{ (E - \Omega(z))^3 K_3 \left(\frac{E - \Omega(z)}{2} \right) + (E + \Omega(z))^3 K_3 \left(\frac{E + \Omega(z)}{2} \right) \right\}, \quad (40)$$

где $z = \frac{\kappa}{\kappa_m}$, E и $\Omega(z)$ определяются в /37/, а $K_3(u)$ обозначает функцию Макдональда третьего порядка (см. /10/).

Снова будем использовать приближение /38/. Тогда в случае линейной аппроксимации для $\omega(\kappa)$

$$\omega(\kappa) = \hbar S \kappa,$$

где S - скорость звука, из /40/ получаем:

$$\alpha_1(E) = \frac{2^6 \sqrt{2\pi}}{9} \frac{\pi e^2 m^{\frac{3}{2}} A^2}{c_0 \varepsilon^{\frac{1}{2}} \hbar^4 \omega_m^3} \eta^2 c(1-c) \pi^{\frac{3}{2}} \text{Sh} \frac{E}{2} \int_0^{\frac{\omega_m}{2\pi}} \frac{dx \cdot x}{\text{sh} x}. \quad (41)$$

Для низких температур $\omega_m \gg T$ из /41/ получаем:

$$\alpha_1(\omega) = \frac{16\sqrt{2}\pi^3}{9} \frac{\pi e^2 m^{\frac{3}{2}} A^2}{c_0 \varepsilon^{\frac{1}{2}} \hbar^4 \omega_m^3} \eta^2 c(1-c) \frac{T^2}{\omega^{\frac{1}{2}}}. \quad (42)$$

Для высоких температур $\omega_m \ll T$ соответственно имеем:

$$\alpha_1(\omega) = \frac{16\sqrt{2\pi}}{9} \frac{\pi e^2 m^{\frac{3}{2}} A^2}{c_0 \varepsilon^{\frac{1}{2}} \hbar^4 \omega_m^2} \eta^2 c(1-c) \pi^{\frac{1}{2}} \text{sh} \frac{\omega}{2\pi} K_3 \left(\frac{\omega}{2\pi} \right). \quad (43)$$

Когда осуществляются оба неравенства $\omega_m \ll T \ll \omega$, из /43/ получаем:

$$\alpha_1(\omega) = \frac{8\sqrt{2\pi}}{9} \frac{\pi e^2 m^{\frac{3}{2}} A^2}{c_0 \varepsilon^{\frac{1}{2}} \hbar^4 \omega_m^2} \eta^2 c(1-c) \frac{T}{\omega^{\frac{1}{2}}}. \quad (44)$$

Ввиду наличия большого параметра $\frac{b}{T} \sim 10^2$ ($T \sim 300^\circ\text{K}$) из /39/ следует, что $\alpha_0(\omega)$ практически равно нулю. Следовательно, поглощение в рассматриваемой модели происходит только вследствие изменения электрон-фононного взаимодействия из-за примесных дефектов. Коэффициент поглощения тогда определяется соответственно выражениями /41/, /42/, /43/, /44/. Его измерение дает возможность оценить параметр η , определяющий потенциальную разность примесного и дефектного узлов.

Для оценки порядка $\alpha(\omega)$ воспользуемся следующими значениями: $n = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $\epsilon = 16$, $\omega_m = 200^0 \text{ К}$, $\eta = 0,1$, $C = 0,1$, $\omega = 10^{18} \text{ гц}$. Тогда из /44/ получаем $\alpha(\omega) \sim 8 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$.

Оценки, сделанные на основании выражений, приводящихся в /3/, показывают, что при рассеянии на примесях $\alpha(\omega) \sim 3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^{-1}$, а на оптических фононах $\alpha(\omega) \sim 3 \cdot 10^{-7} \text{ см}^{-1}$. Эти величины пренебрежимо малы по сравнению с указанным значением для $\alpha(\omega)$. Однако следует заметить, что рассмотренное изменение электрон-фононного взаимодействия, возможно, дает вклад в коэффициент поглощения в том случае, когда рассеяние электронов происходит на оптических фононах. Оценка его, однако, составляет особую задачу.

Литература

1. В.Л. Гуревич, И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ФТТ, 4, 1252, 1962.
2. W.L. Bonch-Bruевич, Fundamentals of Solid State Optics, Proc. International School "Enrico Fermi", Bologna, 1966.
3. И.З. Костадинов, Я.Г. Пройкива. Вестник Московского университета, сер. физ., астрон., № 2, 61, 1967.
4. Д.Н. Зубарев, УФН, 71, 71, 1960.
5. В.Д. Караиванов, Вестник Московского университета, сер. физ., астрон., № 6, 78, 1968.
6. М.А. Иванов, М.А. Кривоглаз. ФТТ, 6, 200, 1964.
7. М.А. Кривоглаз. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами, Москва, "Наука", 1967.
8. J.M. Ziman, Electrons and Phonons, Oxford at the Clarendon Press, 1966.
9. Н.М. Плакида. ДАН СССР, 147, 1067, 1962.
10. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Москва, ГИФМЛ, 1962.

Рукопись поступила в издательский отдел

26 октября 1970 года.