

ЛЕКЦИЯ 1

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ МЕЖЗОННЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДАХ. (во многом это пока свободное переложение нескольких параграфов учебника А.И. Ансельма «Введение в теорию полупроводников»)

1. Вопросы, которые планируется рассмотреть в курсе «Оптика полупроводников».
2. Взаимодействие электромагнитного излучения с электронами твердого тела.
 - 2.1. Оператор взаимодействия электрона с электромагнитным полем.
 - 2.2. Фундаментальная полоса поглощения - оптические переходы между состояниями валентной зоны и зоны проводимости. Матричный элемент перехода и плотность состояний в одоэлектронном приближении.
3. Форма края фундаментальной полосы поглощения в случае прямых разрешенных и запрещенных оптических переходов (объемный материал, квантовые ямы, проволоки и точки).
4. Проблемы одноэлектронного приближения.

1. Вопросы, которые планируется рассмотреть в курсе «Оптика полупроводников».

Оптика полупроводников посвящена исследованию и описанию взаимодействия света с полупроводниковыми кристаллами и структурами. В круг рассматриваемых явлений попадают поглощение, отражение и преломление света в полупроводниковых кристаллах и структурах, рассеяние света, люминесценция и лазерная генерация, нелинейные оптические явления. Изучать эти явления можно долгие годы. Практически все они используются в современных полупроводниковых приборах.

Наш курс носит вводный, обзорный характер. Мы остановимся лишь на наиболее общих явлениях, и постараемся проследить, как в *оптических экспериментах* проявляются физические процессы идущие в полупроводниковом кристалле, как общие правила и законы рассмотренные ранее в курсах Общей и Теоретической Физики находят конкретные приложения в физике полупроводников и в оптике полупроводников.

Воспользовавшись тем, что между преломлением и поглощением в классической оптике существует определенная связь мы для начала будем рассматривать только поглощение света в полупроводниковом кристалле.

Затем рассмотрим рассеяние света, несколько примеров из нелинейной оптики полупроводников и закончим основными характеристиками люминесценции полупроводникового кристалла.

2. Поглощение света в полупроводниковом кристалле.

1. Поглощение света в полупроводнике может быть связано с различными процессами. Поглощение происходит в широком диапазоне частот включающей предельно низкочастотное поглощения свободными носителями заряда, поглощение колебаниями кристаллической решетки и наконец поглощение в инфракрасном, видимом или ультрафиолетовом диапазонах, связанное с переходами между электронными состояниями в различных энергетических зонах. Наконец это поглощение рентгеновского излучения возбуждающее электроны с глубоких, практически локализованных на отдельных атомах оболочек.

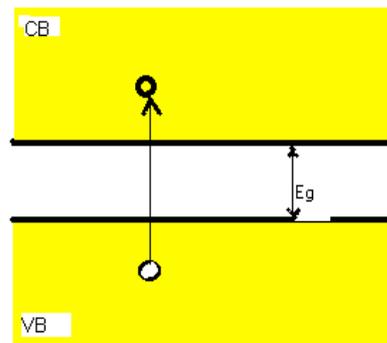
Мы будем интересоваться областью частот, соответствующих низкочастотному краю фундаментальной полосы поглощения. Эта полоса в спектре поглощения обусловлена оптическими переходами между состояниями валентной зоны и зоны проводимости. Для начала будем считать, что валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости пуста. Тогда энергия фотона, вызывающего межзональные переходы не может быть меньше ширины запрещенной зоны E_g

Движение электрона в периодическом потенциале кристалла да еще и во внешнем поле электромагнитной волны удобно описывать Гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (1.1)$$

где $\hat{\vec{p}}$, e и m - оператор импульса, заряд и масса электрона, \vec{A} - вектор потенциал электромагнитной волны

$\left(\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}\right)$, c - скорость света, $V(\vec{r})$ - периодический потенциал кристаллической решетки. Формулу (1.1) полезно запомнить. Если интенсивность света не слишком велика, то члены, содержащие вектор потенциал можно рассматривать как малые поправки. Действительно



$$\left(\hat{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = p^2 \left(1 + 2\frac{e}{c}\frac{\{\vec{p}\vec{A}\}}{p^2} + \left(\frac{e\vec{A}}{cp}\right)^2\right) \quad Z = \frac{eA}{cp} = \frac{eE}{c\omega p} = \frac{e}{\omega p} \left(\frac{8\pi S}{c}\right)^{1/2} \quad (1.2)$$

где ω - частота электромагнитной волны, а $S = |E^2|c/(8\pi)$ - плотность светового потока.

Для оценки величины Z А. И. Ансельм предлагает взять интенсивность в 1 W/cm^2 что примерно в десять раз больше потока солнечного излучения на границе атмосферы. И сравнительно легко может быть получено сейчас в лаборатории. Пусть частота света по порядку величины составляет 10^{15} s^{-1} , что соответствует энергии фотона в 0.6 eV . Этим значениям параметров соответствует характерное значение импульса

$$P_l \approx \frac{e}{\omega} \left(\frac{8\pi S}{c}\right)^{1/2} \approx 410^{-31} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$$

В тоже время характерный импульс, соответствующий движению электрона в атомном потенциале, то есть импульс электрона с энергией порядка 1 eV примерно в миллион раз больше P_l . Даже для предельно малых энергий соответствующих температуре жидкого гелия характерное значение импульса электрона в тысячи раз больше P_l , что оправдывает анализ взаимодействия электрона со световым излучением в рамках теории возмущений. Хотя, конечно, сейчас имеются уже источники столь мощного светового излучения, для которого теория возмущений неприменима. Но далее при расчете поглощения света в полупроводнике мы будем описывать взаимодействие электрона и световой волны оператором возмущения:

$$H' = \frac{e}{mc} (\vec{A}\hat{p}) = -\frac{ie\hbar}{mc} (\vec{A}\nabla) \quad (1.3)$$

3. Связь между амплитудой вектор-потенциала световой волны и плотностью фотонов

Пусть электромагнитное поле описывается идеальной монохроматической плоской волной

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{e} \exp\{i[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t]\} \quad (1.4)$$

Электрическое поле равно

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{i\omega}{c} \vec{A} \quad (1.5)$$

причем, как мы уже знаем электрическое поле световой волны поперечно, т.е. $\vec{e} \perp \vec{k}$. Вещественный вектор - потенциал представляет собой сумму

$$A(\vec{r}, t) = A_0 \exp\{i[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t]\} + A_0^* \exp\{-i[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t]\} = 2|A_0| \cos\{[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t]\} \quad (1.6)$$

Соответственно вещественное значение напряженности электрического поля равно

$$E = 2\frac{\omega}{c} |A_0| \sin[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t] \quad (1.7)$$

а для магнитного поля

$$H = |\text{rot}(\vec{A})| = 2\kappa |A_0| \sin[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t] = 2\frac{\omega n}{c} |A_0| \sin[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t] \quad (1.8)$$

При этом плотность энергии в поле такой волны дается формулой

$$\frac{1}{8\pi} [n^2 \langle E^2 \rangle + \langle H^2 \rangle] = \frac{1}{4\pi} 4 \left(\frac{n\omega}{c}\right)^2 |A_0|^2 \langle \sin^2[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t] \rangle = \frac{1}{2\pi} \kappa^2 |A_0|^2 \quad (1.9)$$

С другой стороны плотность энергии равна $(\hbar\omega N)$, где N - число фотонов в единице объема.

Отсюда

$$|A_0| = \frac{\sqrt{2\pi N \hbar \omega}}{\kappa} \quad (1.10)$$

Эта формула очень полезна и идею ее вывода или ее саму следует запомнить, так она позволяет легко связать классические характеристики электромагнитного поля и квантовую характеристику - число фотонов.

4. Матричный элемент взаимодействия Блоховского электрона с электромагнитной волной.

Воспользуемся «золотым правилом» квантовой механики, позволяющем написать вероятность перехода между некоторым состоянием электрона в валентной зоне и состояниями сплошного спектра зоны проводимости:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |M_v|^2 \delta(\hbar\omega - E_{C,v} + E_{V,i}) d\nu \quad (1.11)$$

Попробуем рассчитать или точнее получить некоторые достаточно общие формулы для матричного элемента возмущения

$$H' = -\frac{i\hbar e}{mc} A_0 \exp\{-i(\omega t) - (\vec{k}\vec{r})\} (\vec{e}\nabla) \quad (1.12)$$

Дело в том, что мы не знаем точного вида волновых функций электрона в состояниях валентной зоны и зоны проводимости. Наша задача обойти эту проблему и найти ответ не зная волновых функций. На удивление для разных конкретных ситуаций по этому пути можно пройти очень далеко. Стартовать будем с общей формулы, следующей из теоремы Блоха. В периодическом потенциале кристаллической решетки волновую функцию электрона можно представить в виде:

$$\psi_{C,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_{C,\vec{k}_C}(\vec{r}) \exp\{i(\vec{k}_C\vec{r})\} \quad (1.13)$$

$$\psi_{V,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_{V,\vec{k}_V}(\vec{r}) \exp\{i(\vec{k}_V\vec{r})\}$$

Здесь $u_{n,\vec{k}_n}(\vec{r})$ - периодическая функция с периодом совпадающим с периодом кристаллической решетки n - тип зоны (валентная, зона проводимости или какая-то иная зона), \vec{k} - волновой вектор электрона, соответствующий его квазиимпульсу $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, N - число элементарных ячеек в кристалла. Каждая зона Бриллюэна имеет свой закон дисперсии $\varepsilon_n(\vec{k})$.

Матричный элемент оптического перехода между состояниями валентной зоны и зоны проводимости имеет вид

$$\begin{aligned} \langle C, \vec{k}_C | H' | V, \vec{k}_V \rangle &= \int d^3r \psi_{C,\vec{k}_C}^* \hat{H} \psi_{V,\vec{k}_V} = \\ &= -\frac{i\hbar e}{mcN} A_0 \int d^3r \left[u_{C,\vec{k}_C}^* \exp\{-i(\vec{k}_C - \vec{k})\vec{r}\} (\vec{e}\nabla u_{V,\vec{k}_V} \exp\{i(\vec{k}_V\vec{r})\}) \right] = \\ &= -\frac{i\hbar e}{mcN} A_0 \int d^3r \left[\exp\{i(\vec{k}_V + \vec{k} - \vec{k}_C)\vec{r}\} \left(u_{C,\vec{k}_C}^* (\vec{e}\nabla u_{V,\vec{k}_V}) + i(\vec{e}\vec{k}_V) u_{C,\vec{k}_C}^* u_{V,\vec{k}_V} \right) \right] = \\ &= -\frac{i\hbar e}{mcN} A \sum_m \exp\{i(\vec{k}_V + \vec{k} - \vec{k}_C)\vec{a}_m\} \times \\ &\times \int_{\Omega} d^3r \left[\exp\{i(\vec{k}_V + \vec{k} - \vec{k}_C)\vec{r}\} \left(u_{C,\vec{k}_C}^* (\vec{e}\nabla u_{V,\vec{k}_V}) + i(\vec{e}\vec{k}_V) u_{C,\vec{k}_C}^* u_{V,\vec{k}_V} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.16)$$

Здесь мы воспользовались периодичностью Блоховских амплитуд и перешли от интегрирования по объему всего кристалла к интегрированию по объему элементарной ячейки и суммированию соответствующей трехмерной геометрической прогрессии по всем элементарным ячейкам кристалла. Такое суммирование, с учетом периодических граничных условий на поверхности дает

$$\sum_m \exp\{i(\vec{k}_V + \vec{k} - \vec{k}_C)\vec{a}_m\} = N \delta_{\vec{k}_C, \vec{k}_V + \vec{k}} \quad (1.17)$$

То есть переход происходит с выполнением ЗАКОНА СОКРАЩЕНИЯ КВАЗИИМПУЛЬСА

$\vec{k}_C = \vec{k}_V + \vec{k}$. Дополнительное облегчение возникает из-за того что длина волны поглощаемого света велика по сравнению постоянной решетки. Благодаря этому разность $\vec{k}_C - \vec{k}_V$ мала и при взятии интеграла по объему одной элементарной ячейки ей можно пренебречь. Тогда блоховские амплитуды в конечном и начальном состояниях практически ортогональны друг к другу и

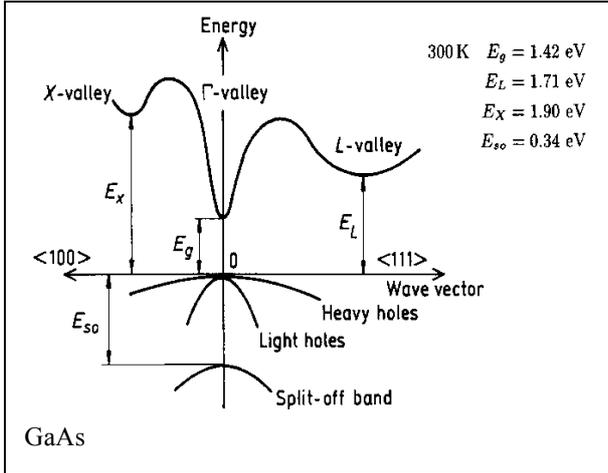
$$\langle C, \vec{k}_C | H' | V, \vec{k}_V \rangle = \frac{e}{mc} A \int_{\Omega} d^3r u_{C,\vec{k}_C}^* (\vec{e}\vec{p}) u_{V,\vec{k}_V} \quad (1.18)$$

То есть после долгих и утомительных рассуждений мы убедились, что матричный элемент перехода прямо пропорционален матричному элементу оператора импульса, вычисленному на блоховских амплитудах состояний валентной зоны и зоны проводимости $\vec{p}_{CV} = -i\hbar \int_{\Omega} d^3 r u_{C,\vec{k}_C}^* \nabla u_{V,\vec{k}_V}$. Интересно отметить,

что, как Вы наверно помните, этот же матричный элемент в рамках модели Кейна определяет массу электрона и легкой дырки. Зная эти массы можно оценить и матричный элемент оптического перехода.

Теперь, когда матричный элемент перехода определен, можно продвинуться дальше в вычислениях коэффициента поглощения или что тоже самое (с точностью до коэффициента) вероятности оптического перехода.

$$W_{CV} = \frac{2\pi V}{\hbar(2\pi)^3} \left(\frac{eA}{mc} \right)^2 \sum_{\mu,\mu'} \int d^3 k \left| \left(\vec{e} \hat{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}) \right) \right|^2 \delta(\varepsilon_C(\vec{k}) - \varepsilon_V(\vec{k}) - \hbar\omega) \quad (1.19)$$



В этой формуле мы от суммирования по безразмерным индексам квантовых состояний в (1.11) перешли к интегрированию по волновому вектору начального (или конечного) состояний. Число этих состояний прямо пропорционально объему кристалла. Кроме того имеется еще и суммирование по спиновым состояниям. Обычно в учебниках о нем не вспоминают, но без него не объяснить такие удивительные явления, как *оптическая ориентация* и *выстраивание импульсов электронов*. Пока мы об этом на короткое время забудем, но в последующих лекциях мы обсудим и спиновые явления.

Вероятность оптического перехода легко связать с коэффициентом поглощения. Для этого заметим, что W равно числу фотонов, поглощаемых

в объеме кристалла в единицу времени. Плотность потока фотонов в плоской световой волне равна $N_{ph} v = N_{ph} c/n$, где c и n - скорость света в вакууме и коэффициент преломления среды. Тогда с учетом (1.10) коэффициент поглощения

$$\alpha = \frac{W_{CV} n}{VN_{ph} c} = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\mu,\mu'} \int d^3 k \left| \left(\vec{e} \hat{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}) \right) \right|^2 \delta(\varepsilon_C(\vec{k}) - \varepsilon_V(\vec{k}) - \hbar\omega) \quad (1.20)$$

Теперь обратимся к конкретным полупроводникам. Вот например арсенид галлия, у которого дно зоны проводимости и вершина валентной зоны расположены в центре зоны Бриллюэна. (Имеется правда одна неприятность – валентная зона состоит из двух подзон каждая из которых двукратно вырождена по спину. В центре зоны Бриллюэна все эти подзоны собираются и получается четырехкратно вырожденное состояние. Но об этих сложностях зонной структуры будем говорить позже, а пока будем считать что дно зоны проводимости и вершина валентной зоны по спину не вырождены).

В окрестности экстремума зоны дисперсия электронов и дырок описывается квадратичным законом. Правда в зависимости от симметрии полупроводника масса такой квазичастицы (электрона или дырки) может оказаться анизотропной

$$\varepsilon_C(\vec{k}) \approx \varepsilon_C(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{(k_1 - k_{01})^2}{m_{c1}} + \frac{(k_2 - k_{02})^2}{m_{c2}} + \frac{(k_3 - k_{03})^2}{m_{c3}} \right) \quad (1.21)$$

$$\varepsilon_V(\vec{k}) \approx \varepsilon_V(\vec{k}_0) - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{(k_1 - k_{01})^2}{m_{v1}} + \frac{(k_2 - k_{02})^2}{m_{v2}} + \frac{(k_3 - k_{03})^2}{m_{v3}} \right)$$

Интересно, а почему это собственные оси тензоров эффективной массы в валентной зоне и зоне проводимости одинаковы?

Используя (1.21) находим

$$\alpha = \frac{W_{CV} n}{VN_{ph} c} = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\mu,\mu'} \int d^3 k \left| \left(\vec{e} \hat{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}) \right) \right|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{(k_i - k_{0,i})^2}{\mu_i} - (\hbar\omega - E_g) \right) \quad (1.22)$$

где $E_g = \varepsilon_C(\vec{k}_0) - \varepsilon_V(\vec{k}_0)$, $\mu_i^{-1} = m_{c1}^{-1} + m_{v1}^{-1}$. Поскольку мы интересуемся областью вблизи экстремума зон, то не только закон дисперсии, но и матричные элементы оператора импульса можно разложить в ряд по $(\vec{k} - \vec{k}_0)$:

$$\left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k})\right) = \left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}_0)\right) + \left[\frac{\partial}{\partial k_\alpha} \left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k})\right)\right]_{\vec{k}=\vec{k}_0} (\vec{k} - \vec{k}_0) \quad (1.23)$$

Если $\left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}_0)\right) \neq 0$ оптические переходы между валентной зоной и зоной проводимости называют разрешенными. Для таких переходов мы пренебрежем зависимостью матричного элемента от квазиимпульса. Тогда интеграл (1.20) сводится просто к расчету плотности состояний уровней между которыми происходят оптические переходы.

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{W_{cv} n}{VN_{ph} c} = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\mu,\mu',\vec{k}_0} \left| \left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}_0)\right) \right|^2 \int d^3 k \delta\left(\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{(k_i - k_{0,i})^2}{\mu_i} - (\hbar\omega - E_g)\right) = \\ &= \frac{4\pi e^2 \sqrt{\mu_1 \mu_2 \mu_3}}{\pi m^2 c n \omega} \sum_{\mu,\mu',\vec{k}_0} \left| \left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}_0)\right) \right|^2 \int k'^2 dk' \delta\left(\frac{\hbar^2}{2} (k')^2 - \hbar\omega - E_g\right) = \\ &= \frac{4e^2 \sqrt{2\mu_1 \mu_2 \mu_3}}{m^2 c n \omega \hbar^3} \sum_{\mu,\mu',\vec{k}_0} \left| \left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(\vec{k}_0)\right) \right|^2 (\hbar\omega - E_g)^{1/2} \end{aligned} \quad (1.24)$$

И так в рассмотренной простейшей модели коэффициент поглощения равен нулю, если энергия поглощаемого фотона меньше ширины запрещенной зоны и прямо пропорционален $\sqrt{\hbar\omega - E_g}$, если энергия фотона превышает E_g .

Неопределенным остался вид тензора $C^{\alpha\beta} = \sum_{\mu,\mu',\vec{k}_0} p_{\mu,\mu'}^{(\alpha)} p_{\mu',m}^{(\beta)}$. Если знать матричные элементы

оператора импульса и просуммировать по всем долинам, определяющим край фундаментальной полосы поглощения, то этот тензор можно было бы и рассчитать, но его общий вид определяется просто симметрией рассматриваемого кристалла. Так, например, для кристаллов кубической симметрии тензор второго ранга вырождается в скаляр: $C^{\alpha\beta} = C \delta_{\alpha,\beta}$.

Обсудим теперь, что изменится в наших расчетах в случае кристалла с запрещенными оптическими переходами. В этом случае квадрат матричного элемента оптического перехода

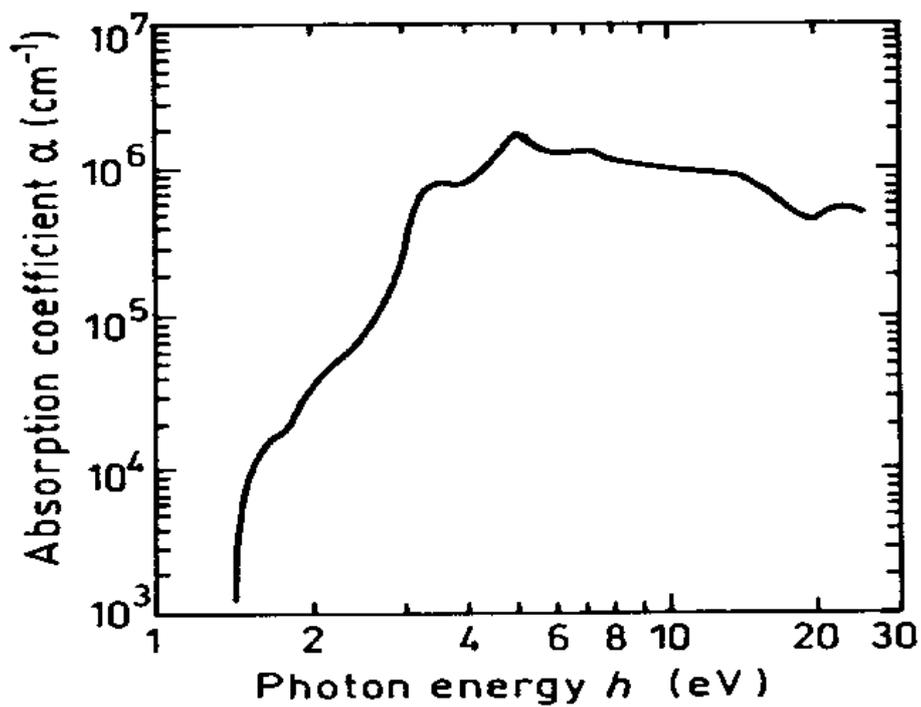
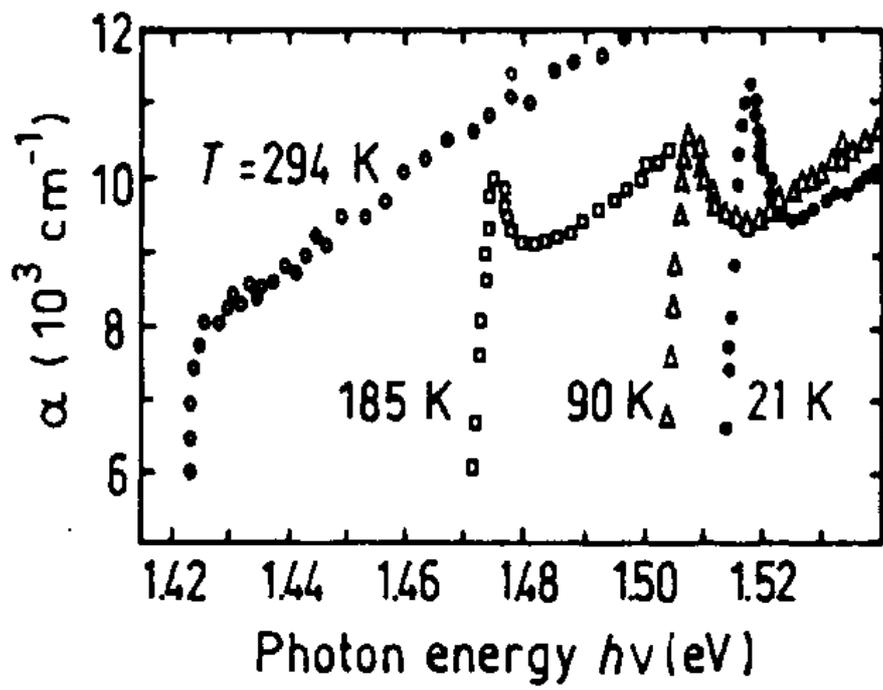
$$\left| \left[\frac{\partial}{\partial k} \left(\vec{e}\vec{p}_{\mu,\mu'}(k)\right) \right]_{\vec{k}=\vec{k}_0} \vec{k}' \right|^2 = \sum_{\alpha\beta} e_\alpha e_\beta \sum_{\substack{\mu,\mu' \\ \gamma,\lambda}} \frac{\partial}{\partial k'_\gamma} p_{\mu,\mu'}^\alpha \frac{\partial}{\partial k'_\lambda} p_{\mu',\mu}^\beta k'_\gamma k'_\lambda$$

Таким образом, вместо (1.24) мы теперь имеем

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{W_{cv} n}{VN_{ph} c} = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\substack{\mu,\mu',\gamma,\lambda \\ k,\alpha,\beta}} e_\alpha e_\beta \frac{\partial}{\partial k_\gamma} p_{\mu,\mu'}^\alpha \bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \frac{\partial}{\partial k_\lambda} p_{\mu',\mu}^\beta \bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \sqrt{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_\gamma \mu_\lambda} \\ &\times \int d^3 k' k'_\gamma k'_\lambda \delta\left(\frac{\hbar^2}{2} k'^2 - (\hbar\omega - E_g)\right) = C (\hbar\omega - E_g)^{3/2} \end{aligned}$$

ЗАДАЧИ НА ДОМ:

1. Докажите, что любой тензор второго ранга, характеризующий свойства кристалла кубической симметрии вырождается в скаляр.
2. Определите характер зависимости величины коэффициента поглощения от энергии фотона для квантовых ям, проволок и квантовых точек (двумерного, одномерного и нульмерного состояний).
3. Проведите подробный вывод коэффициента поглощения для кристалла с запрещенными оптическими переходами. Чему в этом случае равен коэффициент C .
4. Интересно, можно ли высказать какие-либо соображения о соотношении эффективных масс в зоне проводимости и валентной зоны для двух полупроводников, имеющих
 - а) близкие значения ширины запрещенной зоны, но, в одном случае разрешенные, а в другом запрещенные оптические переходы
 - б) Примерно одинаковые матричные элементы оптического перехода но существенно разные ширины запрещенной зоны?



Спектральная зависимость коэффициента поглощения для кристалла GaAs в области фундаментальной полосы поглощения

ЛЕКЦИЯ 2.

ФОРМА КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ПОЛОСЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ПРИ НЕПРЯМЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДАХ

План лекции

1. Зонная структура алмазоподобных полупроводников Si и Ge.
2. Закон сохранения импульса и взаимодействие с фононами
3. Непрямые оптические переходы, расчет матричного элемента перехода во втором порядке теории возмущений.
4. Форма края фундаментальной полосы поглощения в случае не прямых разрешенных оптических переходов.

1. Валентная зона и зона проводимости алмазоподобных полупроводников возникают в результате

sp^3 -гибридизации атомных орбиталей. Поэтому и зонные структуры этих полупроводниковых соединений очень похожи друг на друга. Вершина валентной зона лежит в центре зоны Бриллюэна и трехкратно вырождена по орбитальному моменту образующих ее атомных орбиталей p -типа ($L=1$). В центре зоны Бриллюэна также лежат экстремумы зоны проводимости (Γ и Γ'), причем у арсенида галлия экстремум Γ'_2 одновременно является дном зоны проводимости. В тоже время в полупроводниках Ge, Si и GaAl дну зоны проводимости соответствуют состояния боковых долин, лежащие на или вблизи границы зоны Бриллюэна.

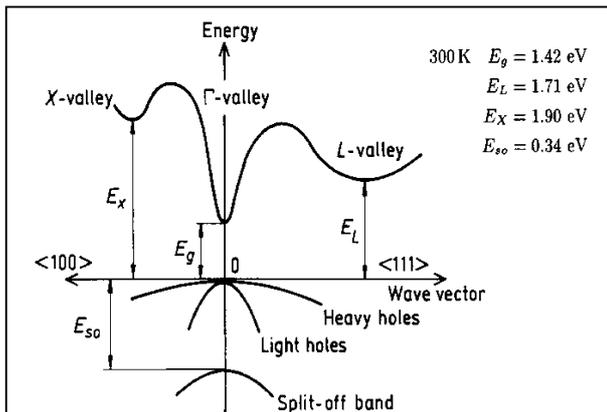
Рассмотренная выше теория прямых оптических переходов не может описывать истинный край фундаментальной полосы поглощения таких материалов, связанный поглощением фотонов с энергией близкой к E_g .

Минимальное расстояние между состояниями валентной зоны и зоны проводимости с одним и тем же значением волнового вектора больше чем разность энергия дна зоны проводимости и вершины валентной зоны. В тоже время эксперимент показывает, что край фундаментальной полосы поглощения в этих, называемых непрямыми, материалах действительно соответствует энергии E_g .

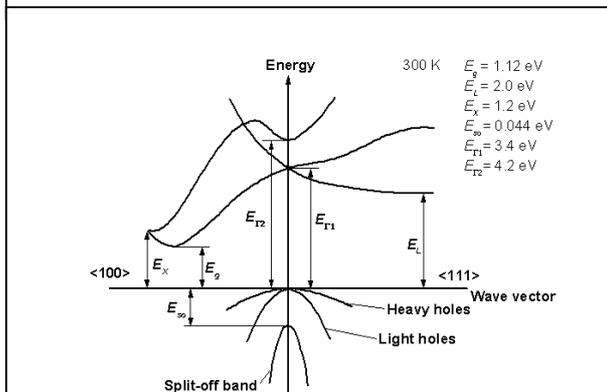
Правда величина коэффициента поглощения в окрестности края гораздо меньше чем у материалов с прямыми оптическими переходами (GaAs) и форма края не описывается выведенной нами в первой

лекции зависимостью (1.24, 1.25). Из рисунков 2.2 и 1.1 видно, что в окрестности края фундаментальной полосы кремния поглощение на несколько порядков меньше чем в случае арсенида галлия. И, если не рассматривать «неприятности» на самом краю полосы поглощения (которые, как мы увидим ниже связаны с существованием экситонов) этот край может быть описан формулой $(\hbar\omega - E_g)^2$

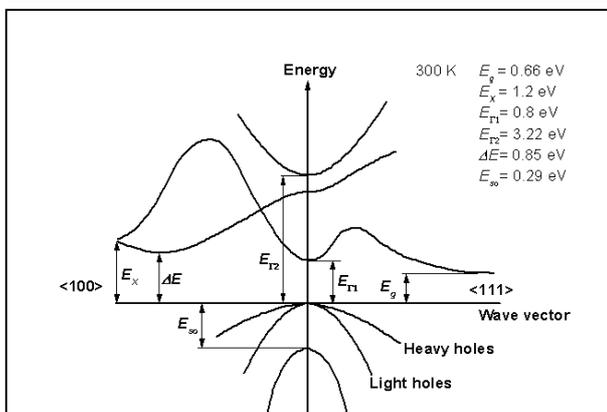
2. Таким образом, край фундаментальной полосы поглощения в Ge и Si связан с какими-то маловероятными оптическими переходами между состояниями валентной зоны и зоны проводимости, с разными значениями волнового век-



GaAs



Si



Ge

тора, для которых не выполняется закон сохранения импульса (квазимпульса). Нарушение этого фундаментального закона может быть обусловлено только каким-то нарушением трансляционной симметрии задачи. Наиболее простой причиной таких нарушений являются тепловые флуктуации плотности кристалла или, иными словами, взаимодействие электрона и дырки, рождающихся в ходе поглощения фотона, с тепловыми фононами.

Как же описать переход в котором одновременно поглощается фотон и поглощается или испускается фотон (то есть в одном переходе участвует и взаимодействие электрона со светом и с фононами)? Расчет такого перехода следует проводить уже во втором порядке теории возмущений. Можно представить себе, что переход происходит в два этапа. На одном поглощается фотон, а на другом поглощается или испускается фотон.

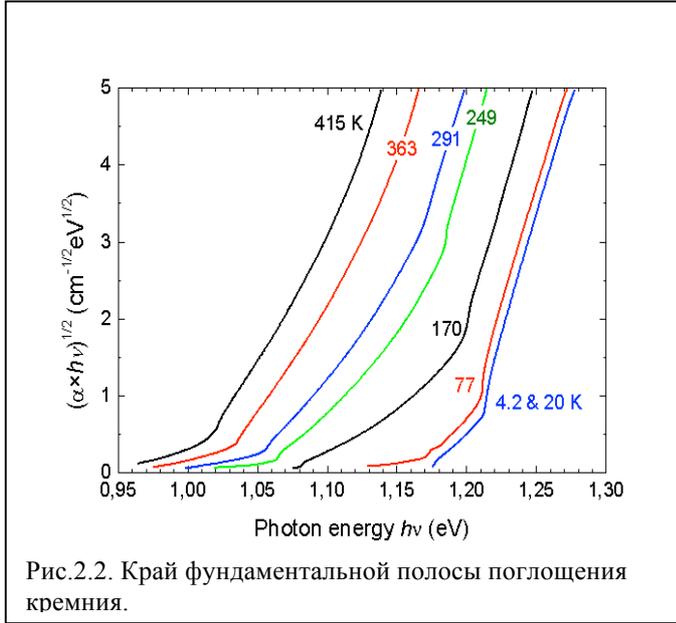


Рис.2.2. Край фундаментальной полосы поглощения кремния.

Какой из этих шагов происходит первым а какой – вторым, заранее не известно, но известно, что после первого шага электрон оказывается в некотором виртуальном (промежуточном) состоянии, для которого, вообще говоря, не выполняется закон сохранения энергии. Мы помним, что в течении короткого промежутка времени этот закон может и не выполняться, так как произведение неопределенности в энергии на время измерений не может быть меньше \hbar .

Правда чем хуже выполняется закон сохранения энергии, тем меньшее время частица может находиться в виртуальном состоянии. Поэтому, наибольший вклад в переход дают виртуальные состояния, для которых закон сохранения энергии выполняется наиболее точно, а виртуальные состояния лежащие в глубоких подзонах

валентной зоны и в высоких подзонах зоны проводимости можно игнорировать.

Мы считаем, что все состояния зоны проводимости пусты, а валентной зоны – заполнены. Поэтому первый шаг оптического перехода может быть связан только с переходом электрона из валентной зоны в зону проводимости. Это может быть вертикальный переход с поглощением фотона из вершины валентной зоны Γ_{25} в центральный минимум зоны проводимости Γ_2 или из состояния на границе зоны Бриллюэна L'_3 на дно боковой долины L_1 (для Ge), или X долины (в случае кремния). А на втором шаге электрон взаимодействует с фононом и переходит из центра зоны проводимости в боковую долину или же из вершины валентной зоны в освободившееся место, расположенное на краю зоны Бриллюэна. Последний путь гораздо удобнее рассматривать не как последовательный переход двух разных электронов, а как движение одной дырки, перескакивающей сперва со дна боковой долины в зоне проводимости в состояние валентной зоны на границе зоны Бриллюэна, а потом из этого виртуального состояния в реальные состояния вблизи вершины валентной зоны.

3. Матричный элемент перехода, рассчитанный во втором порядке теории возмущений имеет вид

$$M_{f,i} = \sum_n \frac{\langle f | V^s | n \rangle \langle n | V^l | i \rangle}{\epsilon_i + \hbar\omega - \epsilon_n} + \sum_m \frac{\langle m | V^s | i \rangle \langle f | V^l | m \rangle}{\epsilon_m + \hbar\omega - \epsilon_f} \quad (2.1)$$

где \hat{V}^l - оператор взаимодействия с электромагнитной волной (1.18), \hat{V}^s - оператор электрон-фононного взаимодействия, ϵ_i - энергия начального состояния, $\hbar\omega$ и ϵ_n - энергия поглощаемого фотона и промежуточного (виртуального) состояния электрона для процесса в ходе которого сперва поглощается фотон, а $\hbar\omega$ и ϵ_m - энергия поглощаемого (+) или испускаемого (-) фонона и промежуточного состояния для процесса, в котором на первом шаге реализуется электрон-фононное взаимодействие.

Некие объяснения, по-видимому, требует второе слагаемое в матричном элементе. Поменяйте во втором члене (2.1) порядок матричных элементов, чтобы придать полученной формуле более симметричный вид.

Вид оператора \hat{V}^s различен для оптических и акустических фононов и более того, зависит от конкретного механизма электрон-фононного взаимодействия. Подробный его анализ выходит за рамки курса оптики полупроводников. Для наших целей достаточно вспомнить, что он связывает состояния

электрона с волновыми векторами, отличающимися на волновой вектор фонона \vec{q} . Так, например, в случае поглощения фонона $\langle m|V^s|i\rangle$ отличен от нуля, только если $\vec{k}_m = \vec{k}_i + \vec{q}$, а в случае испускания, если $\vec{k}_m = \vec{k}_i - \vec{q}$. Далее при поглощении $\langle m|V^s|i\rangle = C_{\vec{q}}^j \sqrt{N_{\vec{q}}^j + 1}$, а при испускании - $\langle m|V^s|i\rangle = C_{\vec{q}}^j \sqrt{N_{\vec{q}}^j}$. Здесь $N_{\vec{q}}^j$ - число фононов типа j с волновым вектором \vec{q} . В термодинамическом равновесии

$$N_{\vec{q}}^j = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\Omega_{\vec{q}}^j}{k_B T}\right\} - 1}. \quad (2.2)$$

Коэффициенты пропорциональности C , естественно, зависят от конкретного механизма электрон-фононного взаимодействия.

4. Для расчета коэффициента поглощения следует подставить квадрат модуля матричного элемента (2.1) в общую формулу для вероятности перехода, которая в данном конкретном случае имеет вид

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum |M_{f,i}^j|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega \mp \hbar\Omega_{\vec{q}}^j) \quad (2.3)$$

Энергетический знаменатель в матричном элементе перехода приводит к быстрому уменьшению вероятности перехода с ростом расстояния до виртуального уровня. Поэтому при расчетах обычно можно ограничиться только ближайшими виртуальными состояниями в центре зоны проводимости (Γ_2) и на границе зоны Бриллюэна (L'_3). Что мы и сделали с самого начала, основываясь на физических рассуждениях.

Теперь, мы готовы к выполнению суммирования по начальным конечным и промежуточным состояниям. При этом замечаем, что в промежуточном состоянии волновой вектор электрона совпадает с его волновым вектором в начальном состоянии (первый переход – оптический, происходящий с выполнением закона сохранения импульса). Таким образом, волновой вектор фонона однозначно связан с волновыми векторами начального и конечного состояний. А именно, в случае поглощения фонона

$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \vec{q}$, а для испускания - $\vec{k}_i - \vec{k}_f = \vec{q}$. Поэтому суммирование нужно проводить только по начальным и конечным состояниям электрона. Более того, малые изменения начального и конечного волновых векторов электрона практически не влияют на энергию участвующего в переходе фонона.

Энергия фонона изменяется на 10...20 meV, когда волновой вектор пробегает всю зону Бриллюэна, а \vec{k}_i и \vec{k}_f лежат в очень узкой окрестности дна зоны проводимости и вершины валентной зоны, где типичное изменение кинетической энергии электрона и дырки составляет 10...100 meV. По этим же причинам мы будем игнорировать незначительные изменения энергетического знаменателя.

Тогда для переходов с испусканием фонона

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{исп}}^{\text{нен}} &\approx \sum_j Q^j (N^j + 1) \int d^3 k_i \int d^3 k_f \frac{\delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega + \hbar\Omega^j)}{(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2} \approx \\ &\sum_j Q^j \frac{(N^j + 1)}{(\varepsilon_0 - \hbar\omega)^2} \int d^3 k_i \int d^3 k_f \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega + \hbar\Omega^j) \\ &= \sum_j Q^j \frac{(N^j + 1)}{(\varepsilon_0 - \hbar\omega)^2} \left((2\pi)^2 \frac{(4m_v m_c)^{3/2}}{\hbar^6} \right) \int d\varepsilon_c d\varepsilon_v \sqrt{\varepsilon_c \varepsilon_v} \delta(\varepsilon_v + \varepsilon_c + E_g - \hbar\omega + \hbar\Omega^j) = \\ &= \sum_j Q^j \frac{(2\pi)^2 \exp\left\{\frac{\hbar\Omega^j}{k_B T}\right\}}{\exp\left\{\frac{\hbar\Omega^j}{k_B T}\right\} + 1} \left(\frac{(4m_v m_c)^{3/2}}{\hbar^6 (\varepsilon_0 - \hbar\omega)^2} \right) \int d\varepsilon_c \sqrt{\varepsilon_c (\hbar\omega - E_g - \hbar\Omega^j - \varepsilon_c)} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Здесь эффективная масса в боковой долине введена довольно специфическим образом $m_c = N_C^{2/3} \sqrt{m_{c1} m_{c2} m_{c3}}$, а N_C - число боковых долин. При его подсчете надо учитывать следующие

щее важное обстоятельство: если дно долины совпадает с границей зоны Бриллюэна то состояния с \vec{k}_f и $-\vec{k}_f$ лежат в одной и той же долине. Поэтому число долин в два раза меньше видимого числа экстремумов.

Интеграл

$$\int_0^b \sqrt{x(x-b)} dx = b^2 \int_0^1 \sqrt{y(y-1)} dy = b^2 \frac{\pi}{8} \quad (2.5)$$

Таким образом окончательно

$$\alpha_{исп}^{раз} = \sum_j Q^j \frac{(2\pi)^2 \exp\left\{\frac{(\hbar\Omega^j)}{k_B T}\right\}}{\left(\exp\left\{\frac{(\hbar\Omega^j)}{k_B T}\right\} + 1\right) (\varepsilon_0 - \hbar\omega)^2} \left(\frac{(4m_v m_c)^{3/2}}{\hbar^6}\right) \frac{\pi}{8} (\hbar\omega - E_g - \hbar\Omega^j)^2 \quad (2.6)$$

Непрямые переходы, связанные с поглощением (а не испусканием) фонона дается похожей формулой

$$\alpha_{погл}^{раз} = \sum_j Q^j \frac{(2\pi)^2}{\left(\exp\left\{\frac{(\hbar\Omega^j)}{k_B T}\right\} + 1\right) (\varepsilon_0 - \hbar\omega)^2} \left(\frac{(4m_v m_c)^{3/2}}{\hbar^6}\right) \frac{\pi}{8} (\hbar\omega - E_g + \hbar\Omega^j)^2 \quad (2.7)$$

Таким образом край фундаментальной полосы поглощения непрямых полупроводников имеет достаточно сложный «многоступенчатый» характер. Кавычки тут связаны с тем, что реально из-за параболического характера зависимости коэффициента поглощения от превышения энергии резких ступенек не видно. С уменьшением температуры переходы с поглощением фононов исчезают.

В этих расчетах мы считали оптические матричные переходы разрешенными. Честно говоря, учитывая наличие нескольких путей перехода мне трудно предположить, что в природе могут реализоваться непрямые запрещенные переходы, у которых надо учитывать увеличение матричного элемента от нуля по мере увеличения кинетической энергии начального или конечного состояний. Тем не менее легко получить, что если точно на краю зоны Бриллюэна оптический матричный элемент равен нулю, то коэффициент поглощения будет пропорционален $(\hbar\omega - E_g + \hbar\Omega^j)^3$.

Гораздо интереснее исследовать вопрос о том, какие фононы могут участвовать в подобных оптических переходах. Фононных мод в полупроводниках много, имеются акустические и оптические, продольные и поперечные моды. Для отбора фононов, участвующих в непрямых переходах, надо знать симметрию фононных функций. Как показано в книге А.И. Ансельма «Введение в теорию полупроводников», для Ge возможны лишь переходы с участием продольных акустических и поперечных оптических фононов. Этот анализ интересен и я рекомендую с ним ознакомиться.

Хотя развитая выше теория прямых и непрямых оптических переходов неплохо описывает зависимость коэффициента поглощения от энергии фотонов не слишком далеко от края фундаментально полосы поглощения, в непосредственной окрестности края результаты расчетов не описывают результаты экспериментов. Это особенно хорошо видно для прямых разрешенных переходов. Как мы увидим, данные расхождения связаны с тем, что мы игнорировали кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой.

ВОПРОСЫ НА ДОМ:

- 1) Почему при расчете матричного элемента перехода были опущены пути, при которых на первом шаге переход электрона из валентной зоны в зону проводимости связан с электрон-фононным взаимодействием, а не с поглощением фотона?
- 2) Выпишите окончательные выражения для коэффициентов пропорциональности в формулах для непрямых разрешенных и запрещенных переходов.
- 3) Сравните полученные нами выше формулы, с аналогичными выражениями, полученными в книге А.И. Ансельма «Введение в теорию полупроводников». Эти формулы похожи но не одинаковы. *Найдите ошибку в книге Ансельма.*

ЛЕКЦИЯ 3.

ОПТИЧЕСКАЯ ОРИЕНТАЦИЯ СПИНОВ И ВЫСТРАИВАНИЕ ИМПУЛЬСОВ ФОТОРОЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ. ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ, СВЯЗАННЫЕ С ПРИМЕСНЫМ СОСТОЯНИЯМИ.

План лекции:

1. Сложная структура валентной зоны алмазоподобного полупроводника.
2. Спин-орбитальное взаимодействие.
3. Правила отбора для оптических переходов вершина валентной зоны – дно зоны проводимости.
4. Правила отбора для переходов между состояниями с отличным от нуля квазиимпульсом.
5. Оптическая ориентация спинов электронов при поглощении циркулярно поляризованного света.
6. Оптические переходы, связанные с примесными состояниями.

СЛОЖНАЯ СТРУКТУРА ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ. ГАМИЛЬТониАН ЛАТТИНЖЕРА.

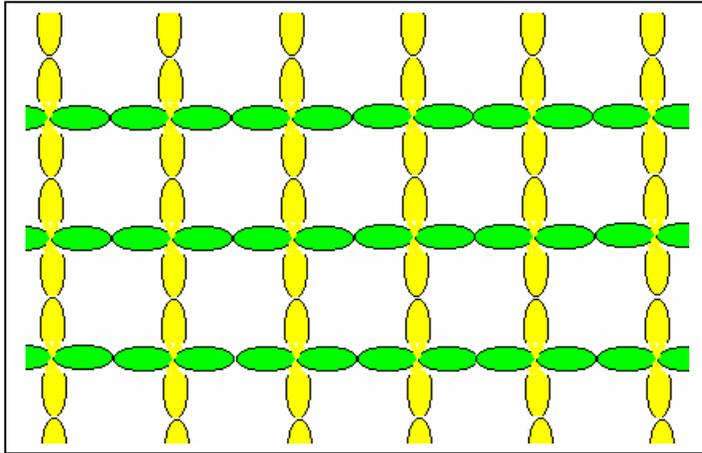
Как вы можете увидеть из приведенных на прошлой лекции схем зонной структуры германия, кремния и арсенида галлия – в вершине валентной зоны этих материалов (которая расположена в центре зоны Бриллюэна) сходятся несколько подзон с разной эффективной массой. Такая нетривиальная ситуация может быть описана в рамках различных приближений: слабой и сильной связи, **k-p** метода или с использованием изощренных теоретических расчетов.

Нашей целью, конечно же, не является проведение подробных точных расчетов из первых принципов. Можно сформулировать две наши задачи:

- 1) понять общие закономерности, определяющие зонную структуру и параметры валентной зоны
- 2) модифицировать метод эффективной массы так, чтобы он оказался применим к описанию поведения носителей в окрестности экстремума валентной зоны, в котором сходятся несколько подзон.

Начнем с метода *сильной связи*.

МЕТОД СИЛЬНОЙ СВЯЗИ



У алмазоподобных полупроводников валентная зона и зона проводимости образуются в результате объединения s и p орбитальных функций атомов (т.н. sp^3 – гибридизация). Для простоты будем считать, что валентная зона возникла из-за перекрытия атомных орбиталей симметрии p . Как мы хорошо знаем таких орбиталей три. Их можно рассматривать как три базисных вектора, направленные вдоль ортов X , Y и Z . Соответствующие этим орбиталам волновые функции можно представить в виде восьмерок (гантелей) вытянутых вдоль соответствующих осей. На рис. 1 зеленым цветом выделены орбитали X а желтым Y .

ВОПРОС: попробуйте понять и научиться рисовать волновые функции в sp^3 – гибриде.

В рамках метода сильной связи ширина образующейся зоны пропорциональна интегралу перекрытия волновых функций соседних атомов. При этом, чем шире зона, тем меньше (по абсолютной величине) эффективная масса на ее дне и в ее вершине. Как легко увидеть из рисунка X орбитали заметно перекрываются между атомами расположенными вдоль оси X и очень слабо перекрываются между атомами, расположенными в цепочках вдоль оси Y . Соответственно и зона, возникающая при перекрытии X орбиталей должна иметь малую массу для движения вдоль оси X и большую массу для квазиимпульса направленного вдоль оси Y . Наоборот, Y -орбитали соответствует большая масса при движении вдоль оси X и малая масса при движении вдоль оси Y . При этом в центре зоны Бриллюэна, когда волновой вектор равен нулю, энергии X , Y и Z состояний одинаковы.

Поскольку вершина валентной зоны находится в центре зоны Бриллюэна, то при малых отступлениях от этой точки (волновой вектор дырки $\vec{k} \neq 0$) изменение энергии дырки пропорциональна квадрату k . Наиболее простое описание дисперсии носителей возможно в рамках метода эффективной массы, которым предпочтительнее всего воспользоваться в нашей ситуации. Но его надо каким-то образом обобщить, чтобы учесть зависимость массы от того, какая комбинация X, Y и Z орбиталей описывает блоховскую амплитуду волновой функции дырки.

Этот вопрос обсуждался многими теоретиками. Очень удачным представляется использование здесь метода инвариантов, являющегося прямым обобщением симметричного подхода к методу эффективной массы. Итак, мы хотим построить гамильтониан, описывающий ситуацию, когда каждому волновому вектору соответствует три состояния, имеющие разные блоховские амплитуды. Такой гамильтониан можно представить в виде матрицы 3×3 , компоненты которой являются функциями от волнового вектора (или квазиимпульса) дырки. Эту матрицу предлагается представить в виде комбинаций матриц компонент углового момента $L=1$. Таких матриц можно набрать 9 штук, т.е. ровно столько, сколько элементов у произвольной матрицы 3×3 . Вот эти матрицы

$$\begin{aligned}
 L_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}; \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}; \quad L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \\
 L_x^2 &= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}; \quad L_y^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}; \quad L_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \\
 L_x L_y + L_y L_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad L_y L_z + L_z L_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 & 0 \\ i/2 & 0 & i/2 \\ 0 & -i/2 & 0 \end{pmatrix}; \\
 L_z L_x + L_x L_z &= \begin{pmatrix} 0 & i/2 & 0 \\ i/2 & 0 & -i/2 \\ 0 & -i/2 & 0 \end{pmatrix};
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Даже единичная матрица прямо выражается через оператор квадрата углового момента

$$\hat{E} = \frac{1}{2} (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

Мы выписали матрицы в базисе функций соответствующих определенной проекции L на ось Z, $M=+1, 0, -1$:

$$\Psi_1 = -(X + iY)/\sqrt{2}, \Psi_0 = Z, \Psi_{-1} = (X - iY)/\sqrt{2}.$$

Здесь надо заметить, что выбор фаз этих функций далеко не однозначен. Разные авторы выбирают фазы по-разному, соответственно меняются и фазы матриц операторов компонент углового момента. Мы взяли эти матрицы из книги «Квантовая механика» Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица, которые используют

сферические функции, определенные следующим образом: $Y_{1,0} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$, $Y_{1,\pm 1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$. В

других книгах вы можете столкнуться с несколько иными матрицами и, соответственно, с иными фазами у волновых функций. Важно всегда использовать согласованные определения матриц и базисных функций.

В чем же польза от введенных матриц L_α ? А в том, что с одной стороны при поворотах системы координат они преобразуются как самые настоящие матрицы, но с другой - они при таких преобразованиях выражаются через матрицы компонент углового момента в старой системе координат по тем же формулам, что и компоненты обычных векторов. Это открывает широкие возможности для построения операторов, инвариантных относительно различных преобразований системы координат. Например, «скалярное»

произведение $(\vec{L}\vec{k}) = \hat{L}_x k_x + \hat{L}_y k_y + \hat{L}_z k_z$ оказывается по своим свойствам аналогичным скаляру, то есть этот оператор не изменяется при повороте системы координат, при котором одновременно изменяются и базисные блововские функции и значения компонент волнового вектора.

Теперь вооружившись этими знаниями постараемся построить общее выражение для гамильтониана частицы, характеризуемой собственным угловым моментом L , справедливый при малых значениях ее импульса. Если пренебречь спином носителя заряда, то исходя из соображений симметрии в базисе функций X, Y, Z квадратичный по квазиимпульсу гамильтониан можно записать в виде

$$H = \begin{pmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_{zy} \\ Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_y^2 + k_x^2) \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

где волновой вектор \mathbf{k} связан с квазиимпульсом известной формулой $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Учет спина носителя и спин-орбитального взаимодействия удобнее провести в базисе сферических функций, выразив матрицу (3.3) через операторы орбитального момента:

$$\hat{H}_h = \frac{1}{2m_0} \left\{ (\gamma_1 + 4\gamma_2) \sum_i \hat{p}_i^2 \hat{E} - 6\gamma_2 (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{L}})^2 - 6(\gamma_3 - \gamma_2) \sum_{i \neq j} \hat{p}_i \hat{p}_j (\hat{L}_i \hat{L}_j + \hat{L}_j \hat{L}_i) \right\} + \frac{1}{3} \Delta_0 (2(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{L}}) - 1), \quad (3.4)$$

где m_0 – масса свободного электрона, Δ_0 – параметр спин-орбитального взаимодействия, а параметры Латтинжера $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ дают значения массы дырки в зависимости от ориентации векторов $\mathbf{L}=(L_x, L_y, L_z)$ и \mathbf{p} относительно друг друга и кристаллографических осей.

$$\gamma_1 = -2m_0 \frac{L+2M}{3}; \quad \gamma_2 = -2m_0 \frac{L-M}{6}; \quad \gamma_3 = -2m_0 \frac{N}{6} \quad (3.5)$$

Согласно (3.4) одному и тому же значению квазиимпульса частицы соответствуют три двукратно-вырожденных спиновых уровня из подзон тяжелых и легких дырок и отщепленной зоны (см. *первый рисунок лекции 2*). Далее мы будем рассматривать только две верхние подзоны легких и тяжелых дырок, соответствующие максимальному по модулю суммарному угловому моменту $\mathbf{I} = \mathbf{L} + \mathbf{s}_h$ ($I=3/2$). Для этого случая зависимость кинетической энергии от \mathbf{p} и \mathbf{I} дается стандартной формой гамильтониана Латтинжера [см. *J.M. Luttinger, Phys. Rev. 102, 1030-1041 (1956)*]

$$\hat{H}_h^{(L)} = \frac{1}{2m_0} \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) \sum_i \hat{p}_i^2 \hat{E} - 2\gamma_2 (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{I}})^2 - 2(\gamma_3 - \gamma_2) \sum_{i \neq j} \hat{p}_i \hat{p}_j (\hat{I}_i \hat{I}_j + \hat{I}_j \hat{I}_i) \right\}. \quad (3.4)$$

Базисные функции четырех вырожденных состояний в вершине валентной зоны имеют вид

$$\begin{aligned} u_{v,3/2} &= -\frac{(X+iY)}{\sqrt{2}} \uparrow; & u_{v,1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left[-\frac{(X+iY)}{\sqrt{2}} \downarrow + \sqrt{2}Z \uparrow \right]; \\ u_{v,-1/2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\frac{(X-iY)}{\sqrt{2}} \uparrow + \sqrt{2}Z \downarrow \right]; & u_{v,-3/2} &= \frac{(X-iY)}{\sqrt{2}} \downarrow, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где \uparrow, \downarrow соответствуют собственным спиновым состояниям дырки.

В сферическом приближении ($\gamma_3 = \gamma_2$) проекция спина дырки на направление ее квазиимпульса (I_p) является «хорошим» квантовым числом. При этом $I_p = \pm 3/2$ соответствует подзоне с тяжелой, а $I_p = \pm 1/2$ - с легкой массами

$$E_{hh} = \frac{p^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2), \quad E_{lh} = \frac{p^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2). \quad (3.6)$$

При рассеянии дырок на неоднородностях, фонах и т.п. возможны как переходы внутри одной подзоны, так и переходы с изменением массы дырки. Изменение направления импульса дырки является одновременно изменением направления оси квантования ее спина. Поэтому уже несколько актов рассеяния приводят к практически полной потере памяти о первоначальном направлении спина дырки.

Для электронов в зоне проводимости в первом приближении эти сложности, связанные со спин-орбитальным взаимодействием, отсутствуют. В окрестности Г-точки кинетическая энергия электрона дается обычным выражением

$$\hat{K}_e = \frac{1}{2m_e} \sum_{\alpha=1,2,3} \hat{p}_\alpha^2, \quad (3.7)$$

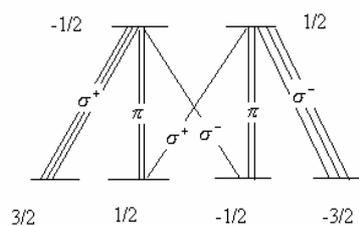
где $\hat{p}_\alpha = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_\alpha}$ - оператор проекции квазиимпульса на одну из трех осей [100], [010] и [001], а m_e -

эффективная масса электрона. По мере удаления от центра зоны Бриллюэна дисперсия электронных состояний перестает описываться простой квадратичной параболой. В рамках этого приближения спин электрона не взаимодействует с импульсом и спиновая релаксация отсутствует.

Можно предположить, что край фундаментальной полосы поглощения в полупроводниках с зонной структурой как у GaAs дается суммой выражений, стоящих в правой части формулы (1.24) из *первой лекции*, и вычисленных для каждого перехода в зону проводимости из различных дырочных подзон. Это предположение оказывается почти правильным (почему почти - см. ниже). Действительно коэффициент поглощения прямо пропорционален приведенным плотностям состояний подзоны тяжелых дырок и зоны проводимости и подзоны легких дырок и зоны проводимости. Поскольку масса легких дырок примерно в 4 – 5 раз меньше массы тяжелых вклад в поглощение подзоны легких дырок меньше, чем вклад зоны тяжелых дырок.

ВОПРОС: Во сколько раз отличаются приведенные плотности состояний в случае переходов в одну и ту же зону проводимости из подзон легких и тяжелых дырок, если масса тяжелой дырки составляет $0.4m_0$, а масса легкой дырки примерно равна массе электрона и составляет $0.07m_0$.

Имеется однако одно обстоятельство, которое мы точно не учли при анализе. Вид волновых функций состояний в подзонах легких и тяжелых дырок зависит от направления волнового вектора. В центре зоны Бриллюэна у нас четыре состояния описываемые функциями (3.5). Из соображений симметрии видно, что отличны от нуля только матричные элементы $\langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle = \langle S | p_z | Z \rangle = p$.



ВОПРОС: докажите это утверждение.

Тогда вероятности оптических переходов различается для различных поляризаций света. Правила отбора для оптических переходов представлены на рисунке 2. Если поглощаемое излучение линейно поляризовано вдоль оси Z то при его поглощении в точности на краю фундаментальной полосы поглощения рождаются электронно-

дырочные пары в состояниях $\left| \pm \frac{1}{2} e, \mp \frac{1}{2} h \right\rangle$. При поглощении света, поляризованного по правому кругу, пары

в состоянии $\left| -\frac{1}{2} e, \frac{3}{2} h \right\rangle$ рождаются в три раза чаще, чем пары в состоянии $\left| \frac{1}{2} e, \frac{1}{2} h \right\rangle$. То же самое

соотношение справедливо для скорости генерации электронно-дырочных пар $\left| \frac{1}{2}e, -\frac{3}{2}\hbar \right\rangle$ и $\left| -\frac{1}{2}e, -\frac{1}{2}\hbar \right\rangle$

при поглощении света, поляризованного по левому кругу.

Легко увидеть что при поглощении циркулярно поляризованного света рождаются электроны поляризованные

по спине. Степень поляризации $\frac{n_{1/2} - n_{-1/2}}{n_{1/2} + n_{-1/2}} = 0.5$. Дырки также рождаются поляризованным. Но как мы

уже отмечали, они после нескольких актов рассеяния эту поляризацию теряют, в то время как электроны релаксируют по спине гораздо медленнее.

Остановимся на интересном вопросе о том, что произойдет, если импульс рождающихся электронов и дырок отличен от нуля?

Эту задачу уже много лет назад решили М.И. Дьяконов и В.И. Перель [см. их статью в сборнике «*Оптическая ориентация*» под редакцией Б.П. Захарчени и Ф. Мейера, Наука, 1989]. Ответ для интегрального (по всем направлениям квазиимпульса) значения поляризации рождающихся фотоэлектронов тот же самый 50%, но получить его уже довольно хлопотно.

Далее идет материал для любознательных.

Попробуем для примера проделать такой расчет для переходов из подзоны тяжелых дырок. В ходе таких переходов электроны из состояний валентной зоны с угловым моментом внутреннего движения направленным

вдоль и против волнового вектора ($I_{\mathbf{k}} = \pm \frac{3}{2}$) переходят в состояния зоны проводимости, у которых спин

также направлен вдоль или против волнового вектора ($s_{\mathbf{k}} = \pm \frac{1}{2}$). Легко считать вероятности переходов для

циркулярно поляризованного света, распространяющегося вдоль волнового вектора электрон-дырочной пары. А что делать если направление распространения света и направление волнового вектора \mathbf{k} не совпадают?

Попробуем разложить электрическое поле световой волны поляризованной по правому кругу и

распространяющегося вдоль оси Z : $\mathbf{e}_+ = (\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$ на составляющие σ^+ , σ^- , π в системе координат, в которой волновой вектор направлен вдоль оси Z' .

Будем для определенности считать, что волновой вектор лежит в плоскости YZ и составляет с осью Z угол ϑ .

Тогда, считая что в повернутой системе координат ось X' совпадает с \mathbf{k} , получаем проекцию вектора \mathbf{e}_+ на \mathbf{k} равной $e_{+,k} = (\mathbf{e}_+ \cdot \mathbf{k}) = i \sin \vartheta/2$, а перпендикулярная к \mathbf{k} круговая (точнее эллиптическая) составляющая

дается формулой $(\mathbf{e}_x + i \cos \vartheta \mathbf{e}_{y'})/\sqrt{2} = (1 + \cos \vartheta)(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_{y'})/(2\sqrt{2}) + (1 - \cos \vartheta)(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_{y'})/(2\sqrt{2})$.

Таким образом круговая компонента σ^+ равна $(1 + \cos \vartheta)/2$, а амплитуда света поляризованного по левому кругу σ^- в \mathbf{k} -системе координат равна $(1 - \cos \vartheta)/2$. Соответственно, относительная вероятность рождения

электрона со спином вдоль волнового вектора равна $3(1 + \cos \vartheta)^2/4$, а для спина против волнового вектора - $3(1 - \cos \vartheta)^2/4$. Суммарная вероятность рождения электронов с импульсом \mathbf{k} равна

$G_{1/2} + G_{-1/2} = 3(1 + \cos^2 \vartheta)/2$. Для рождающихся электронов хорошая ось квантования - это направление волнового вектора. Однако если усреднить по всем направлениям то останется только проекция спина на

ось Z : $G_{1/2,z} - G_{-1/2,z} = 3 \cos \vartheta \cos \vartheta$. Теперь мы можем проинтегрировать результат по всем направлениям волнового вектора и найти среднее значение поляризации рождающихся электронов

$$\rho = \frac{3 \int_{-1}^1 \cos^2 \vartheta d \cos \vartheta}{3 \int_{-1}^1 \frac{(1 + \cos^2 \vartheta)}{2} d \cos \vartheta} = \frac{2}{3 \cdot 1 + 1} = \frac{1}{2}$$

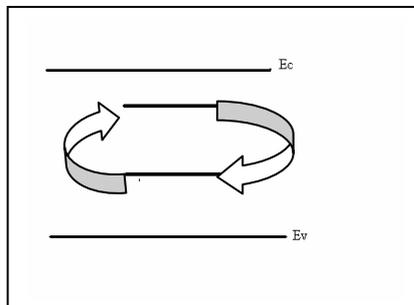
Что и требовалось доказать.

Удивительно, но точно такой же результат получается и для подзоны легких дырок. Подчеркнем, что результат мы получили, не учитывая гофрировку валентной зоны.

ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ , СВЯЗАННЫЕ С ПРИМЕСНЫМ СОСТОЯНИЯМИ.

Итак, мы с вами разобрали важный случай – поглощение света при межзонных оптических переходах. Прежде, чем обратиться к взаимодействию света с колебаниями кристаллической решетки и к поглощению света свободными носителями, рассмотрим испускание фотонов при оптических переходах с участием примесных уровней лежащих в запрещенной зоне.

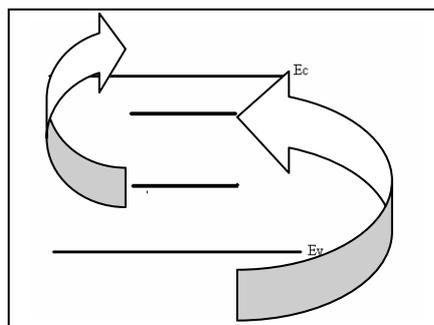
А) Оптические переходы могут носить чисто внутримесный характер – т.е. переходы могут быть между различными уровнями примеси. Например, это могут быть переходы между основным и возбужденным состояниями доноров или акцепторов. Внедрение в широкозонные полупроводники и диэлектрики примесей, с оптическими переходами попадающими в область прозрачности, позволяет создать твердотельный аналог атомной ситуации, когда отдельные излучатели находятся на достаточно большом расстоянии друг от друга. Примером такой оптической среды например является рубин – т.е. корунд окрашенный примесью ионов Cr^{+3} .



К другому часто встречающемуся случаю относятся оптические переходы между локализованными примесными состояниями, и делокализованными состояниями в валентной зоне или зоне проводимости. Здесь обычно выделяют следующие процессы:

Б) Фотоионизация примесей, когда при поглощении света носитель «вырывается» из связанного состояния в сплошной спектр

В) Фотонейтрализация примесей, когда наоборот при поглощении света носитель из сплошного спектра захватывается на примесь



Линии поглощения и испускания внутримесных переходов обычно имеют неоднородное уширение. Примеси находятся в разном окружении, случайные деформации и электрические поля сдвигают и расщепляют их уровни. Существенную роль в уширении играет взаимодействие с фононами, которое определяет температурную зависимость ширины линии. Эти зависимости существенно зависят от типа примесей: уширение линий мелких примесей удобно описывать в модели эффективной массы, а для глубоких уровней волновую функцию электрона или дырки в нулевом приближении можно искать в методе сильной связи.

Энергии переходов между уровнями мелкой примеси составляют $1...10$ meV. Это соответствует частотам порядка $10^{-12} - 10^{-13}$ Гц, т.е. в пограничной между инфракрасной и СВЧ областями частот. С наблюдаемыми в этом диапазоне явлениями и техникой эксперимента можно ознакомиться по обзорным статьям [см, например, Е.М.Гершензон «Субмиллиметровая фотопроводимость в полупроводниках», тезисы докладов IX Зимняя школа по физике полупроводников 1979г].

Весьма интересна оптика переходных и редкоземельных примесей, у которых оптические переходы могут происходить на глубоких оболочках, слабо взаимодействующих с кристаллической решеткой. Здесь следует обратить внимание на то, что даже в случае кубически симметричного (а не сферического) окружения атома в кристалле вырождение атомных уровней с большим орбитальным моментом ($L>1$) снимается. Так например, состояния с орбитальным моментом $L=2$, описываемое d-функциями:

$$\phi_{2,0} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2z^2 - x^2 - y^2), \quad \phi_{2,\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} z(x \pm iy), \quad \phi_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} (x \pm iy)^2$$

в кристаллическом поле кубической симметрии расщепляется на триплет (x, y, z) и дублет ($(2z^2 - x^2 - y^2), (x^2 - y^2)$). Линия атомного спектра соответствующая переходу из этого или в такое

состояние при помещении атома в кристалл должна расщепиться. Или, по крайней мере, у нее должно появиться специфичное уширение.

Отметим, что при низких температурах в кристаллах кубической симметрии может сниматься вырождение даже триплетных ($J=1$) или квартетных ($J=3/2$) состояний в силу эффекта Яна-Теллера. Эти расщепления связаны со спонтанным понижением симметрии окружения центра за счет электрон-фононного взаимодействия.

Б) Спектры фотоионизации примесей лишь очень условно можно представить в виде системы линий. Как правило ширина такой линии оказывается порядка характерной частоты перехода. Вообще-то, если сравнивать ширину этих линий (полос) с шириной зоны в которую или из которой происходят переходы, может показаться, что данные линии удивительно узкие. Их малая ширина, как и узость экситонной линии, связана с ограничениями, накладываемыми на вероятность перехода законом сохранения импульса. Например, для свободного экситона закон сохранения импульса выделяет из всего спектра состояний одно, в котором импульс экситона равен импульсу поглощаемого фотона. Если же электрон и дырка локализованы на примеси, то импульс не является «хорошим» квантовым числом. Поэтому возможными оказываются переходы в зонные состояния с самыми различными значениями волнового вектора

$$0 \leq k \leq 2\pi/a, \text{ где } a \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} - \text{ радиус локализованного состояния с энергией связи } E.$$

Таким образом и кинетическая энергия носителя в конечном состоянии не фиксирована, а имеет распределение от 0 до E .

Вероятность перехода в состояние с тем или иным значением волнового вектора зависит от конкретного вида волновой функции локализованного состояния $\Psi(E, \vec{r})$. Фактически она задается квадратом амплитуды Фурье-разложения волновой функции $|\Psi(E, k)|^2$. Например, для мелкого, водородоподобного донора форма линии фотоионизации дается формулой

$$\alpha = \frac{128\pi e^2 \hbar}{3cmE_B} N_D \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{E_B} - 1\right)^{3/2}}{\left(\frac{\hbar\omega}{E_B}\right)^6}$$

ЗАДАЧА:

В рамках модели Луковского (модели потенциала нулевого радиуса), волновая функция глубокого примесного центра имеет вид $\Psi(E, r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi ar}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$, где характерный радиус локализованного состояния связан

с энергией связи соотношением $a = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$.

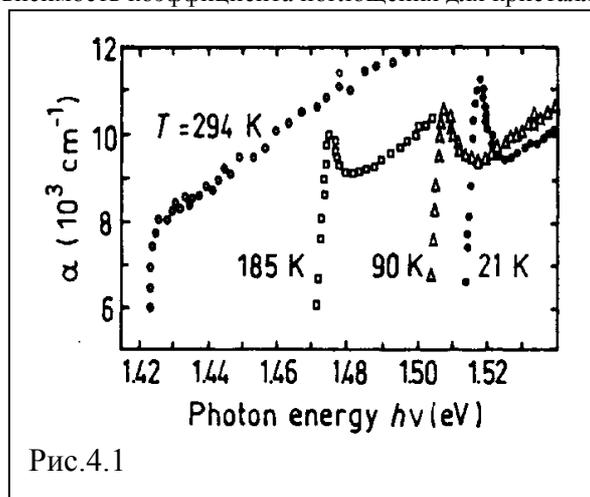
Постройте форму линии фотоионизации такого центра от энергии фотона.

ЛЕКЦИЯ 4.

ЭКСИТОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ПОЛОСЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

1. Экспериментально наблюдаемая форма края фундаментальной полосы поглощения
2. Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой и отступление от модели среднего самосогласованного поля.
3. Экситон Френкеля.
4. Экситоны Ванье-Мотта. Экситонные пики на краю фундаментальной полосы поглощения кристаллов с прямыми разрешенными оптическими переходами
5. Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой и поглощение света при $\hbar\omega > E_g$.
6. Экситоны в кристаллах с прямыми запрещенными переходами
7. Экситонные особенности на краю фундаментальной полосы поглощения при непрямых переходах.

1. Вернемся к описанию края фундаментальной полосы поглощения. Уже знакомая нам картинка дает зависимость коэффициента поглощения для кристаллов GaAs при различных температурах. Первое что бросается в глаза – с увеличением температуры край фундаментальной полосы поглощения сдвигается в длинноволновую сторону, уменьшается E_g . Дей-



ствительно, тепловые колебания влияют на адиабатический потенциал, в котором движется электрон, но это – тема отдельной лекции.

Помимо этого, ясно видно, что край фундаментальной полосы поглощения имеет сложную структуру, совсем не похожую на гладкую корневую зависимость. Глядя на зависимость, снятую при комнатной температуре (первая кривая на рис 4.1), или глядя «с высоты птичьего полета» (фундаментальная полоса поглощения в широком диапазоне частот представлена на рис. 3.б лекции 1) можно абстрагироваться и предположить, что зависимость α от $\hbar\omega - E_g$ дей-

ствительно носит корневой характер. Но при внимательном рассмотрении, это конечно же не так. Из рисунка 4.1 ясно видно, что при низких температурах на краю фундаментальной полосы имеется максимум. Казалось бы, его возникновение можно объяснить наличием какой-то примеси. Однако, максимум (а иногда и целая серия пиков) удивительным образом отслеживает положение края фундаментальной полосы, сохраняется при улучшении качества образца и исчезает в грязных образцах. Все говорит о том, что этот максимум естественным образом связан с краем фундаментальной полосы поглощения.

2. Что же такое мы пропустили при теоретическом анализе поглощения света? Почему в развитой в лекции 1 теории не появляется никаких максимумов, а на эксперименте они есть? Дело в том, что при выводе формулы (1.24 на лекции 1) мы игнорировали взаимодействие между электронами. Точнее говоря, мы стартовали от одноэлектронного приближения в рамках которого взаимодействие с другими электронами моделируется средним потенциалом, который предполагается периодическим с периодом кристаллической решетки. Это приближение очень часто дает хорошие результаты. Во многих задачах можно считать, что электроны, в основном, движутся в регулярном среднем периодическом потенциале и лишь изредка сталкиваются и рассеиваются на неоднородностях, флуктуациях. Но при поглощении фотона (и рекомбинации электрона и дырки с испусканием фотона) ситуация качественно отлична. При поглощении фотона электрон переходит из состояний валентной зоны в зону проводимости. При этом в валентной зоне возникает дырка (отсутствие электрона) которая расположена точно в том же месте (в той же элементарной ячейке, где родился электрон проводимости). Ясно, что ситуация существенно отличается от усредненной по кристаллу.

Впервые на это обстоятельство обратил внимание Я.И.Френкель в 1931 году [J. Frenkel, Phys. Rev. 37, 17 (1931) и J. Frenkel, Phys. Rev. 37, 1276 (1931)]. Интересно обратить внимание на исторический аспект вопроса. В 1921 году А.Эйнштейн получил Нобелевскую премию «За важные физико-математические исследования, особенно за открытие –законов фотоэлектрического эффекта». А Я.И. Френкель в своей работе показал, что поглощение фотона в идеальном кристалле может не приводить к внутреннему фотоэлектрическому эффекту. Сопротивление кристалла при поглощении света может и не уменьшаться, если при поглощении рождаются связанные электронно-дырочные пары,двигающиеся по кристаллу как единая квази-частица. Френкель проводил анализ для диэлектриков и проводил расчеты в рамках приближения сильной

связи. То есть в нулевом приближении он рассматривал рождение электронно-дырочной пары в пространственно скоррелированном состоянии – на атомных оболочках одного из ионов кристаллической решетки, а потом учел, как это элементарное возбуждение (экситон) в соответствии с зонной теорией «размазывается» по всем ионам кристалла. Экситоны использовались Френкелем для объяснения диссипации энергии поглощаемых фотонов, превращения ее в тепло без возникновения фотопроводимости. Экситоны Френкеля наблюдаются в молекулярных кристаллах.

Пики на краю фундаментальной полосы поглощения полупроводника (рис. 4.1) так же связаны с образованием экситонов. Теоретическое описание этих экситонов существенно отличается от модели расчетов Френкеля. В полупроводниках мы обычно имеем дело с экситонами Ванье-Мотта. Дело в том, что в полупроводниках энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой мала (по сравнению с шириной запрещенной зоны) и радиус связанного состояния электрона и дырки во много раз превосходит постоянную решетку. В этих условиях для описания коррелированного движения электрона и дырки можно воспользоваться приближением эффективной массы. Если на время забыть про сложную структуру валентной зоны, то ситуация оказывается очень похожей на коррелированное движение электрона и протона в атоме водорода. Правда в атоме водорода масса ядра во много раз больше массы электрона, а в экситоне масса электрона и дырки по порядку величины близки друг к другу. Но это различие не принципиальное.

И так, при более точном описании поглощения света нам надо учесть кулоновское взаимодействие электрона и дырки рождающихся при поглощении фотона. Впервые для экситона Ванье-Мотта это было сделано в работе Эллиотом [Elliot R.J. Phys.Rev. **108**, 1384 (1957)].

3. Как и в случае атома водорода волновую функцию рождающейся при поглощении фотона электронно-дырочной пары удобно искать в виде

$$\Psi_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \varphi(\mathbf{r}) \exp\{i(\mathbf{K}\mathbf{R})\} \tag{4.1}$$

где $\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h}{m_e + m_h}$ - координаты центра тяжести электронно-дырочной пары, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ радиус вектор относительного движения электрона и дырки, а \mathbf{K} - волновой вектор экситона как целого.

Закон сохранения импульса, естественно, справедлив и в случае коррелированного движения электронно-дырочной пары. Строго это доказано в работе Эллиота, а мы просто воспользуемся этим результатом. Т. о. волновой вектор, родившейся электронно-дырочной пары, равен волновому вектору поглощаемого фотона $\mathbf{K} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h = \mathbf{k} \approx 0$.

Формула (4.1) конечно же результат теоремы Блоха, примененной уже не к отдельному электрону (или дырке), а к электронно-дырочной паре. Она описывает и экситон Френкеля и экситон Ванье-Мотта.

Вопрос: что нужно понимать под m_e и m_h в случае экситона Френкеля?

Задача заключается в том, чтобы определить вид волновой функции относительного движения. Общую постановку задачи различные ее частные решения можно найти в [книге А.И. Ансельм «Введение в теорию полупроводников», сборнике «Экситоны» под редакцией Э. Рашба, М. Стержа и во множестве статей]. Мы же разберем только экситон Ванье-Мотта.

И так в рамках приближения эффективной массы мы можем просто переписать результаты из квантово-механической теории атома водорода. Тогда уравнение Шредингера, описывающее относительное движение электрона и дырки, имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r} \varphi(\mathbf{r}) = E_{e-h} \varphi(\mathbf{r}) \tag{4.2}$$

где $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$ - приведенная масса электрона и дырки, а ϵ - диэлектрическая проницаемость. Свя-

занным состояниям электрона и дырки соответствуют отрицательные значения кинетической энергии относительного движения

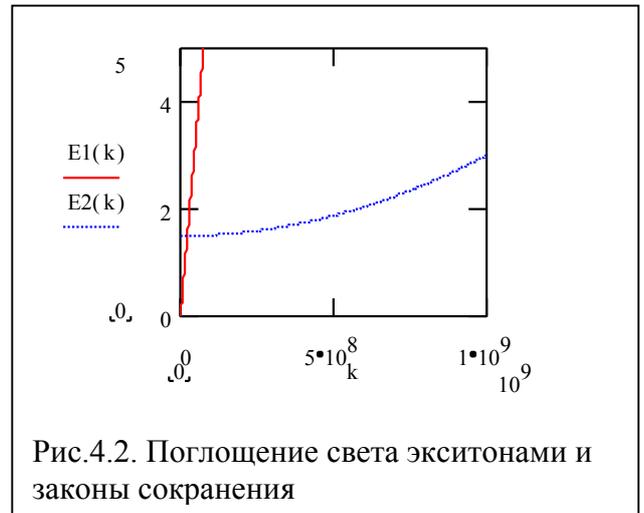


Рис.4.2. Поглощение света экситонами и законы сохранения

$$E_{e-h,n} = -\frac{\varepsilon_{ex}}{n^2} \quad (4.3)$$

где n - главное квантовое число (целая положительная величина), а

$$\varepsilon_{ex} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2} \quad (4.4)$$

Знак "-" в уравнении (4.3) означает, что связанные состояния электрона и дырки имеют энергию меньше, чем ширина запрещенной зоны. Это приводит к возможности поглощения фотонов с энергией $\hbar\omega < E_g$.

Интересно, что для анализа поглощения света (и излучательной рекомбинации) электрона и дырки совсем не нужно знать всю волновую функцию относительного движения. Представляется очевидным, что при поглощении фотона электрон и дырка рождаются в одной и той же точке кристалла и следовательно коэффициент поглощения прямо пропорционален вероятности найти электрон и дырку в одном и том же месте:

$|\varphi(\mathbf{0})|^2$. (Это тоже доказал Эллиот). Точно в центре экситона (т.е. при $\rho=0$) отличны от нуля только волновые функции, соответствующие состояниям s-типа (состояниям с нулевым орбитальным моментом $l = 0$). Для таких связанных состояний экситона (как и для атома водорода)

$$|\varphi_n(0)|^2 \propto \frac{2(n+1)}{n^3} \quad (4.5)$$

Таким образом, в области энергий, меньших ширины запрещенной зоны, возникают пики поглощения фотонов с энергией

$$\hbar\omega_n = E_g - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 n^2} \quad (4.6)$$

В нулевом приближении эти пики имеют дельта-функциональный характер. В реальной ситуации они конечно же уширены

4. И тут надо сделать ремарку об уширении спектральных линий.

Принято выделять два типа уширений: 1) однородное и 2) неоднородное. *Однородное уширение* связано с конечностью времени жизни уровней, между которыми происходит оптический переход. А *неоднородное* - со случайным разбросом уровней между которыми происходит переход, под действием хаотических внешних возмущений. Всяческими уширениями неоднородное уширение можно уменьшить и в идеале устремить к нулю. Однородное уширение непосредственно связано с оптическими переходами. Есть оптические переходы - есть однородное уширение, нет однородного уширения - нет и оптических переходов.

В результате однородного уширения идеализированный δ -пик поглощения превращается в лоренцевский контур [см. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Квантовая электродинамика]:

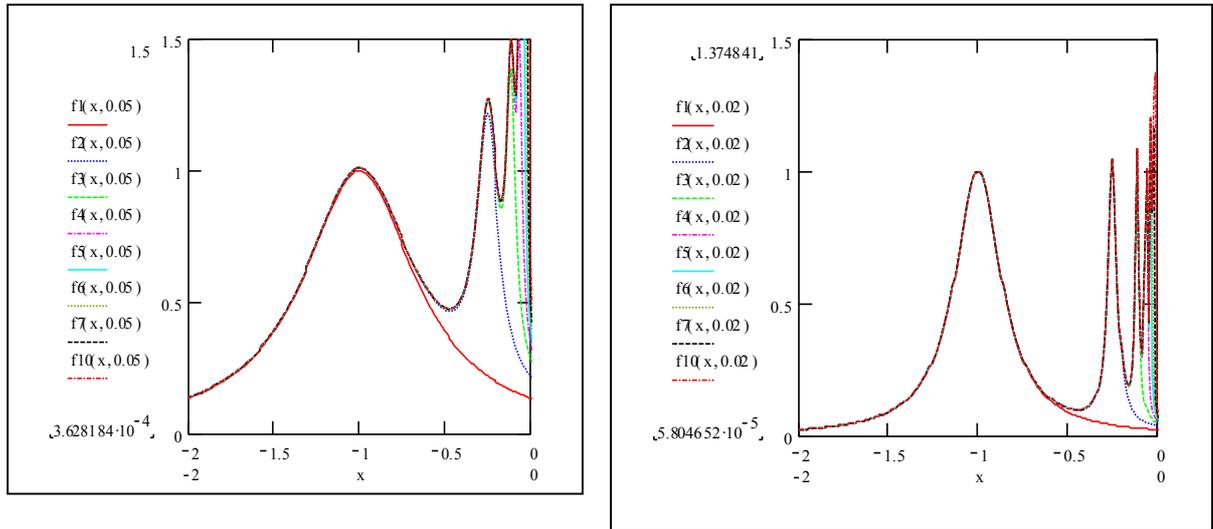


Рис.4.3 Теоретический расчет экситонных пиков на краю фундаментальной полосы поглощения. α - измерен в произвольных единицах, x – энергия фотона отсчитанная от E_g и измеренная в единицах энергии связи экситона. Второй аргумент функции f – параметр γ .

$$\alpha_n(\hbar(\omega - \omega_n)) \propto \frac{(\Gamma_n/2)^2}{(\hbar(\omega - \omega_n))^2 + (\Gamma_n/2)^2} \quad (4.7)$$

Здесь \hbar/Γ_n - время жизни экситона в состоянии n . Если основным каналом распада экситона является радиационная рекомбинация электронно-дырочной пары то $\Gamma_n \propto |\varphi_n(0)|^2$ ¹.

На рисунке 4.3 представлены примеры экситонных спектров поглощения на краю фундаментальной полосы поглощения, рассчитанные по формуле

$$\alpha(x) = \sum_{n=1}^N \frac{\gamma^2 (n+1)^2}{\left[(1 - xn^2)n \right]^2 + \gamma^2 (n+1)^2}. \quad (4.8)$$

Здесь безразмерный параметр $\gamma = \Gamma_1 / (4\epsilon_{ex})$. Параметр x измеряется в единицах ϵ_{ex} .

Получилась картинка похожая на часть рисунка 4.1 с энергией меньшей ширины запрещенной зоны.

Задание: проанализируйте результат при $x \rightarrow 0$. В чем отличия между теорией и экспериментом, с чем это связано?

5. Посмотрим теперь, как изменится форма края фундаментальной полосы для положительных значений кинетической энергии относительного движения электрона и дырки.

Оказывается, что в этой области значений энергий фотона ($\hbar\omega > E_g$) можно просто найти поправку к ответу, полученному ранее в пренебрежении кулоновским притяжением между электроном и дыркой. Для этого удобно воспользоваться формулой Зоммерфельда,

¹ В числителе этой формулы стоит $(\Gamma/2)^2$. Полезно запомнить, что этот квадрат состоит из двух первых степеней, одна из которых соответствует контуру линии, площадь под которой равна 1. Второй сомножитель описывает вероятность оптического перехода, которая, как мы договорились, прямо пропорциональна $\Gamma_n \propto |\varphi_n(0)|^2$.

$$\frac{|\varphi(0)|^2}{|\psi_k|^2} = \frac{\pi\beta \exp\{\pi\beta\}}{sh\{\pi\beta\}} \quad (4.9)$$

где

$$\beta = \sqrt{\frac{2\mu\varepsilon_{ex}}{\hbar^2 k^2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{ex}}{E_{e-h}}} = \frac{1}{ka_B}, \quad (4.10)$$

$a_B = (\hbar^2 \varepsilon) / (\mu e^2)$ - боровский радиус экситона и k - волновой вектор относительного движения.

Таким образом вместо суммирования по все конечным состояниям электронно-дырочной пары (4.1) для расчета коэффициента поглощения надо вычислить интеграл

$$\int \delta\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - (\hbar\omega - E_g)\right] 4\pi k^2 \frac{\pi \exp\left\{\frac{\pi}{a_B k}\right\}}{a_B k sh\left\{\frac{\pi}{a_B k}\right\}} dk = 2\pi^2 \left(\frac{2\mu\varepsilon_{ex}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{e^z}{sh(z)}, \quad (4.11)$$

$$z = \pi \sqrt{\frac{\varepsilon_{ex}}{\hbar\omega - E_g}} = \sqrt{\frac{\pi^2 \varepsilon_{ex}}{\hbar\omega - E_g}} \quad (4.12)$$

По мере увеличения энергии фотона $z \rightarrow 0$, При этом формула (4.11) переходит в

$$\lim_{z \rightarrow 0} 2\pi^2 \left(\frac{2\mu\varepsilon_{ex}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{e^z}{sh(z)} = 2\pi^2 \left(\frac{2\mu\varepsilon_{ex}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\hbar\omega - E_g}{\varepsilon_{ex}}} = 2\pi \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{1/2} \sqrt{\hbar\omega - E_g} \quad (4.13)$$

То есть мы возвращаемся к корневому закону - результату первой лекции, полученному в пренебрежении кулоновским взаимодействием между электроном и дыркой. Когда кинетическая энергия относительного движения электрона и дырки заметно превосходит энергию связи экситона, кулоновское взаимодействие является малой поправкой. Интересно заметить, что хотя параметрически это утверждение совершенно справедливо, реально под корнем в (4.12) стоит энергия экситона, умноженная на π^2 . То есть реально надо сравнивать $\hbar\omega - E_g$ с десятью боровскими энергиями.

Итак, наша уточненная теория в пределе $\hbar\omega - E_g \gg \pi^2 \varepsilon_{ex}$ перешла в развитую на *Лекции 1*. Это хороший признак. Теперь посмотрим, как ведет себя поглощение вблизи края фундаментальной пополюсы поглощения: $\hbar\omega \rightarrow E_g$, $z \rightarrow \infty$.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} 2\pi^2 \left(\frac{2\mu\varepsilon_{ex}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{e^z}{sh(z)} = 4\pi^2 \left(\frac{2\mu\varepsilon_{ex}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \left(1 + \exp\left\{-2\sqrt{\frac{\pi^2 \varepsilon_{ex}}{\hbar\omega - E_g}}\right\}\right) \quad (4.14)$$

При $\hbar\omega = E_g$ коэффициент поглощения отличен от нуля, в то время как без кулоновского взаимодействия он строго обращался в нуль.

Все указанные особенности хорошо видны на рисунке 4.3, где сопоставляются значения коэффициента поглощения для $\hbar\omega > E_g$ найденные с учетом (сплошная линия) и без учета (штриховая линия) кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой.

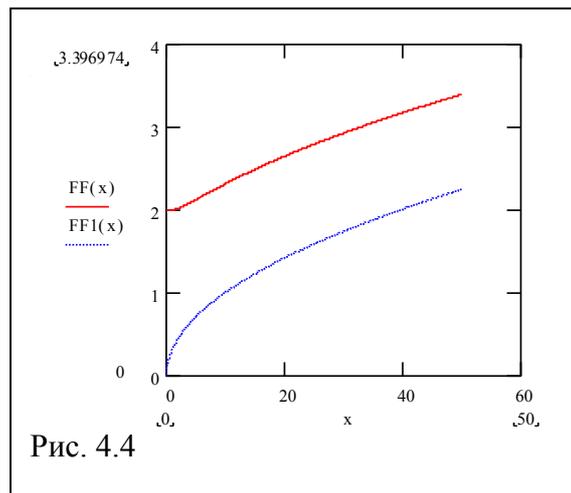


Рис. 4.4

6. До сих пор мы анализировали поглощение света для полупроводников с прямыми разрешенными переходами. Что же произойдет в случае запрещенных переходов?

Можно показать, что в этом случае коэффициент поглощения пропорционален $|\nabla\varphi|_{\mathbf{r}=0}^2$. Соответственно, оптические переходы теперь связаны с рождением электронно-дырочной пары в состоянии с угловым моментом $L = 1$. Наиболее глубокий экситонный уровень с таким угловым моментом соответствует главному квантовому числу $n = 2$. Первое наблюдение экситонов было выполнено Гроссом и Карыевым на кристаллах закиси меди с запрещенными переходами.

7. В случае кристаллов, край фундаментальной полосы поглощения которых связан с непрямыми оптическими переходами электроны и дырки также образуют связанные экситонные состояния. Это может показаться странным лишь на первый взгляд. Конечно электрон и дырка в этих кристаллах находятся в далеко отстоящих друг от друга точках зоны Бриллюэна. Но, не смотря на большие различия в волновых векторах и электрон на дне боковой долины зоны проводимости и дырка в центре валентной зоны имеют нулевую групповую скорость $\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{p}} E$.

Возникают дополнительные трудности с расчетом, так как в боковых долинах масса электрона анизотропна. Тем не менее, связанные состояния электрона и дырки все равно существуют. А вот в спектре поглощения они проявляются существенно иначе, по сравнению со случаем прямых оптических переходов. Дело в том, что в случае непрямых переходов полный импульс экситона не совпадает с импульсом поглощаемого фотона. В результате даже для связанных состояний электронно-дырочной пары поглощение связано с рождением любых экситонных состояний с заданной полной энергией, являющейся суммой кулоновской энергии, энергии относительного движения электрона и дырки и энергии поступательного движения экситона как целого. Сумма первых двух слагаемых квантована, но последнее лежит в сплошном спектре с плотностью состояний

$$\rho(E_{kin}) \propto \sqrt{E_{kin}}$$

Экситонные пики на краю фундаментальной полосы поглощения превращаются в корневые особенности, которые внимательный читатель может попытаться обнаружить на рисунке 2 лекции 2, показывающем экспериментальные зависимости коэффициента поглощения для кристаллов Si.

РЕЗЮМЕ

Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой приводит к существенному изменению края фундаментальной полосы поглощения полупроводника. Для фотонов с энергией меньше E_g поглощение света становится возможным из-за образования связанных экситонных состояний. В случае $\hbar\omega > E_g$ поглощение усиливается, так как кулоновское притяжение делает более вероятным нахождение электрона и дырки в одной и той же точке кристалла.

ЗАДАЧИ НА ДОМ И К РАЗМЫШЛЕНИЮ.

1. В формуле (4.2) стоит диэлектрическая проницаемость. Но мы знаем, что она является функцией частоты. Какое же значение следует брать? Низкочастотную (статическую), высокочастотную? А может быть что-нибудь посередине?.
2. Чему равна энергия ионизации экситона в кристалле арсенида галлия?

ЛЕКЦИЯ 5. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДИКА

1. Что такое деформация.
2. Индуцированное деформацией изменение тензора диэлектрической проницаемости.
3. Оптические характеристики кристаллов пониженной симметрии (самостоятельно)
4. Связанная с деформацией перестройка зонной структуры полупроводников
 - 4.1. Невырожденная зона проводимости
 - 4.2. Боковые долины
 - 4.3. Сдвиг и расщепление подзон валентной зоны алмазоподобных полупроводников
5. Поляризация краевой люминесценции в деформированных алмазоподобных полупроводниках
6. Температурная зависимость ширины запрещенной зоны.

1. Что такое деформация

При приложении к твердому телу внешних сил наблюдается его деформация. В отсутствие этих сил фрагмент тела характеризовался радиусом-вектором \mathbf{r} , а под действие внешних сил он перемещается в точку $\mathbf{r}'(\mathbf{r})$. Если координаты всех точек твердого тела изменились на одну и ту же величину

$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}'(\mathbf{r}) - \mathbf{r} = \text{const}$ все тело сдвигается как единое целое. Однако даже если разные точки испытывают разное смещение, это еще не значит, что изучаемое тело деформируется. Деформация твердого тела характеризуется тензором второго ранга

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial u_l}{\partial r_\alpha} \frac{\partial u_l}{\partial r_\beta} \right) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} \right). \quad (5.1)$$

При записи этого выражения мы воспользовались соглашением о суммировании по повторяющимся индексам (в данном случае по индексу l). А второе (приближенное) равенство в выражении (5.1) связано с тем, что, как правило, деформации малы. Антисимметричная часть тензорной производной

$$\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} - \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} \right) \gamma_{\alpha\beta\gamma} = \Phi_\beta \quad (5.2)$$

описывает локальный поворот выбранного элемента твердого тела на угол Φ (это вектор).

2. Индуцированное деформацией изменение вида тензора диэлектрической проницаемости

К каким изменениям оптических свойств полупроводника кубической симметрии приводит деформация кристалла? Качественный анализ многих результатов можно получить просто из соображений симметрии. Для этого вспомним, что оптические свойства среды характеризуются тензором диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon}$ или тензором «непроницаемости» $\hat{\eta} = \hat{\varepsilon}^{-1}$.

Дальше мы будем рассуждать именно о тензоре $\hat{\eta}$. Нам это будет удобно по двум причинам. Во-первых, потому что этот тензор непосредственно входит в волновое уравнение, а во-вторых, диэлектрическая проницаемость и деформация у нас обозначаются одной и той же буквой.

Из соображений симметрии вытекает, что в кристалле кубической симметрии тензоры второго ранга выражаются в скаляры.

$$\hat{\eta}^{(0)} = \begin{pmatrix} \eta^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & \eta^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & \eta^{(0)} \end{pmatrix}, \quad \eta_{ij}^{(0)} = \delta_{ij} \eta^{(0)} \quad (5.3)$$

ВОПРОС: Докажите это утверждение.

Что же произойдет при деформации такого кристалла?

Считая деформацию малой и раскладывая диэлектрическую непроницаемость в ряд получаем

$$\eta_{ij} = \eta^{(0)} \delta_{ij} + p_{ij\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad (5.4)$$

где тензор четвертого ранга \hat{p} называется *тензором упруго-оптических постоянных*. Наряду с ним часто используется *пьезооптический тензор* $\pi_{ij\alpha\beta}$, связывающий поправки к обратной проницаемости с тензором напряжений $t_{\alpha\beta}$. В свою очередь, связь между деформацией и напряжениями задается модулями упругости

$$\varepsilon_{ij} = S_{ij\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \quad (5.5)$$

где \hat{S} – тензор упругой податливости кристалла.

Зададим себе вопрос: сколько феноменологических параметров надо определить, чтобы задать пьезооптические свойства кристалла кубической симметрии. Иными словами, сколько независимых и отличных от нуля компонент содержит тензор \hat{p} ?

Вообще-то этот тензор задается матрицей, содержащей $3^4 = 81$ коэффициент. Однако в кубическом кристалле остается всего три независимых числа $p_{11}, p_{12}, p_{44}, (S_{11}, S_{12}, S_{44})$.

ВОПРОС: Как это доказать?

Из всех видов деформации имеется одна, выделенная симметрией. Это *гидростатическое сжатие*, при котором тензор деформации вырождается в скаляр:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon \delta_{ij}. \quad (5.6)$$

Такую деформацию, как следует из самого ее названия, проще всего создать, поместив образец в жидкость, которую сдавливают со всех сторон. В силу закона Пуассона в этом случае $t_{ij} = t \delta_{ij}$,

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon \delta_{ij} = (S_{11} + 2S_{12}) t \delta_{ij}, \quad \eta_{ij} = \eta \delta_{ij} = (p_{11} + 2p_{12}) \varepsilon \delta_{ij} \quad (5.7)$$

Итак, при гидростатическом сжатии кристалл кубической симметрии остается кристаллом кубической симметрии. Диэлектрическая проницаемость (и непроницаемость) остаются скалярами. С точки зрения оптических свойств среда остается изотропной. Коэффициент преломления не зависит от направления распространения света и его поляризации, число оптических осей равно бесконечности.

В общем случае анизотропная деформация уничтожает это вырождение. Одноосная деформация, приложенная вдоль оси высокой симметрии (например $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}$) приводит к анизотропии тензора непроницаемости

$$\eta_{xx} = \eta_{yy} = (p_{11} + 2p_{12}) \varepsilon_{xx} + p_{12} (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \neq (p_{11} + 2p_{12}) \varepsilon_{xx} + p_{11} (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) = \eta_{zz} \quad (5.8)$$

У кристалла остается одна оптическая ось (ось Z).

Если теперь рассматривать общий случай деформации, характеризующейся тензором с тремя главными собственными осями, или одноосным тензором деформации, но приложенной в произвольном направлении, то кубический кристалл становится оптически двухосным.

3. Оптические характеристики кристаллов пониженной симметрии (самостоятельно)

3.1. Что такое линейных дихроизм?

3.2. Докажите, что у кристалла, тензор диэлектрической проницаемости которого имеет три разных собственных значения, имеется две оптические оси.

4. Связанная с деформацией перестройка зонной структуры полупроводников.

Итак, мы поняли, как влияет деформация на оптические свойства кристалла и построили феноменологическую теорию.

Давайте теперь попробуем разобраться с влиянием деформации на оптические свойства полупроводника на микроскопическом уровне. В этом разделе тоже не будет расчетов из первых принципов. Мы по-прежнему будем строить феноменологическую теорию, но основанную на понимании процессов, происходящих в кристалле.

Первый вопрос: можно ли хотя бы в принципе пытаться решать задачу по теории возмущений? Рисунок 5.1 демонстрирует причину возможных сомнений. На этом рисунке сопоставлены два самосогласованных потенциала, в которых движется электрон. Формулу для потенциала мы взяли очень простую

$$U(\varepsilon, x) = \sum_{n=0}^{\infty=20} \frac{-1}{|x - \varepsilon n| + 0.025} + 7 \quad (5.9)$$

(Здесь необходим комментарий: Добавка 0.025 в знаменателе сделана исключительно для того, чтобы избежать расходимостей, наличие которых затрудняет расчет на компьютере. Семерка в (5.9) была добавлена по следующей причине: без нее ответ начал уезжать вниз.

ВОПРОС ДЛЯ ЛЮБОЗНАТЕЛЬНЫХ: Почему?)

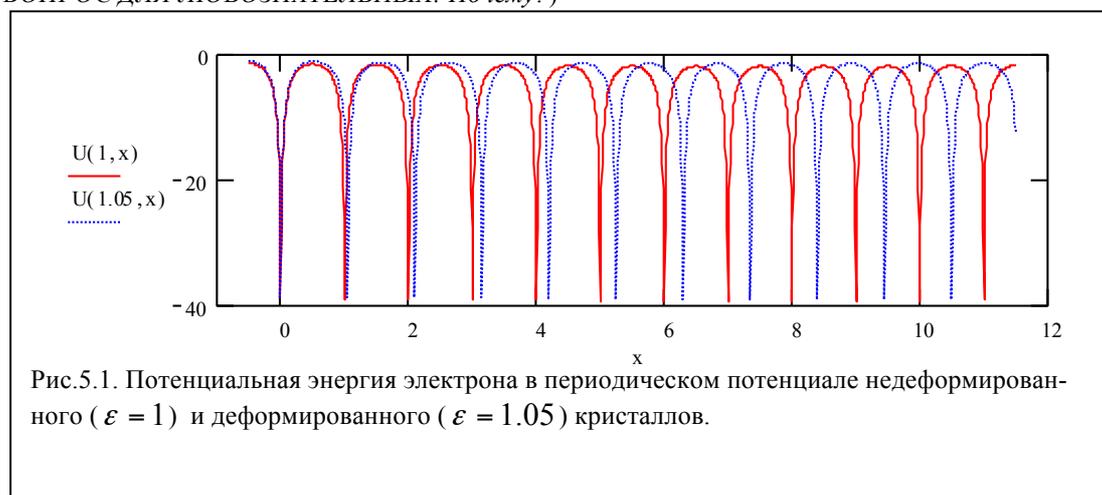


Рис.5.1. Потенциальная энергия электрона в периодическом потенциале недеформированного ($\varepsilon = 1$) и деформированного ($\varepsilon = 1.05$) кристаллов.

Из рис. 5.1 видно, что буквально трактовать деформацию как малое возмущение потенциальной энергии электрона нельзя. В нашем примере на рисунке 5.1. в окрестности $x=0$ потенциал действительно слабо возмущен. А вот в окрестности $x=10$, на минимум потенциала $U(1, x)$ приходится максимум потенциала $U(1.05, x)$ и наоборот. Казалось бы, что применение теории возмущений невозможно. Ведь создать деформацию, которая приведет к изменению положения какой-то элементарной ячейки кристалла величину, порядка размера этой ячейки может даже ребенок. Как же преодолеть эту сложность?

Ответ на этот вопрос был найден основателями теории твердого тела. Дело в том, что «все становится на свои места», если сравнивать зависимость потенциала от расстояния используя естественные для каждого кристалла единицы длины. В недеформированном и деформированном кристалле такой единицей является постоянная кристаллической решетки. Если перейти к новым единицам длины, то в деформированном случае наша модельная функция станет

$$U2(\varepsilon, x) = \sum_{n=0}^{\infty=20} \frac{-1/\varepsilon}{|x - \varepsilon n| + 0.025/\varepsilon} + 7 \quad (5.10)$$

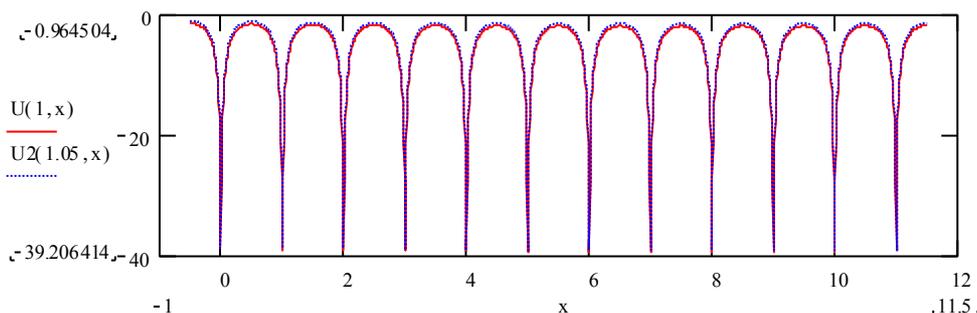


Рис.5.1.б. С «высоты птичьего полета» потенциалы выглядят одинаково

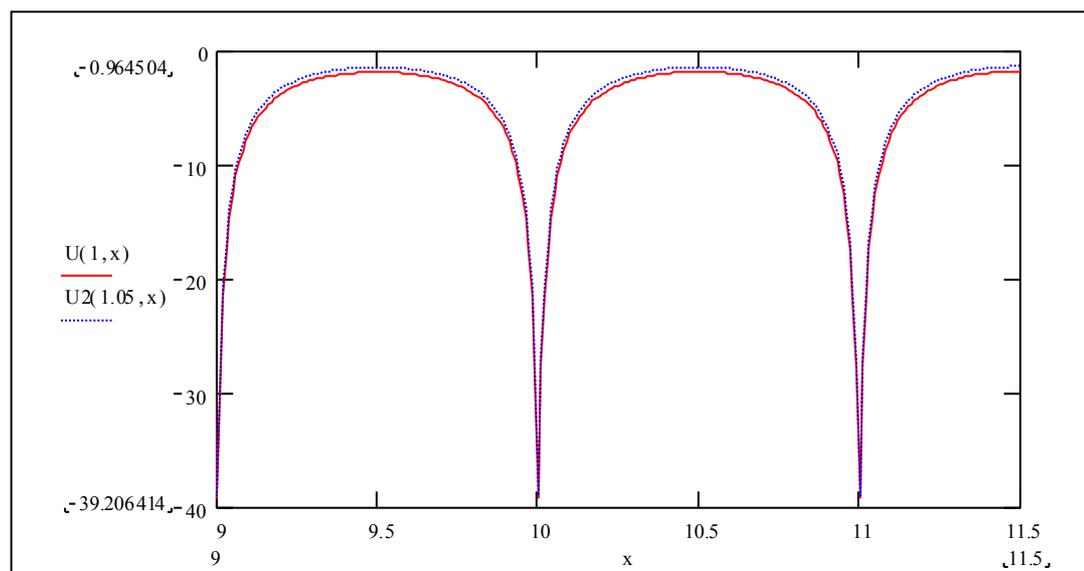


Рис.5.1.в. Под «микроскопом» результаты отличаются, но очень мало.

Таким образом, заменой единицы длины малую деформацию кристалла можно свести к малому возмущению $\hat{V}_{def}(\epsilon)$. Теперь попробуем описать влияние малой деформации на зонную структуру полупроводника.

4.1. Невырожденная зона проводимости

Для начала рассмотрим простейшую ситуацию дна зоны проводимости в кристалле GaAs. Мы помним что дно зоны проводимости в этих кристаллах лежит в центре зоны Бриллюэна. Зона проводимости простая, ее состояния двукратно вырождены по спину.

В первом порядке теории возмущений действие деформации на состояния вблизи дна зоны проводимости в этом случае сводится к сдвигу их энергии на величину

$$\Delta E_c \approx \langle c | V_{def}(\epsilon) | c \rangle$$

Изменение потенциальной энергии электрона при деформации кристалла называется *деформационным потенциалом* (сокращенно: *деформпотенциалом*).

Одновременно происходит и слабое подмешивание к блоховским амплитудам состояний дна зоны проводимости различных состояний других зон

$$\chi_c(\epsilon, \mathbf{r}) \approx \chi_c(0, \mathbf{r}) + \sum \chi_n(0, \mathbf{r}) \frac{\langle n | V_{def} | c \rangle}{E_c - E_n}$$

В результате, деформация приводит как к изменению ширины запрещенной зоны, так и к изменению матричного элемента оптического перехода

$$\langle c | p_\alpha | v \rangle \Rightarrow \int \chi_c^*(0, \mathbf{r}) \hat{p}_\alpha \chi_v(0, \mathbf{r}) d^3 r + \sum_{n \neq c} \frac{\langle c | V_{def} | n \rangle}{E_c - E_n} \int \chi_n^*(0, \mathbf{r}) \hat{p}_\alpha \chi_v(0, \mathbf{r}) d^3 r + \dots$$

В линейном приближении деформационный потенциал прямо пропорционален деформации $\hat{\varepsilon}$. Изменение энергии дна зоны проводимости – несомненно скалярная величина. В среде кубической симметрии имеется только одна комбинация элементов тензора второго ранга, преобразующаяся как скалярная величина. Это след матрицы этого тензора

$$Sp(\hat{\varepsilon}) = Tr(\hat{\varepsilon}) = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha\alpha}$$

Сдвиг дна зоны проводимости прямо пропорционален следу тензора деформации

$$E = aSp\varepsilon,$$

где a – некоторая константа.

Теперь обсудим матричный элемент оптического перехода. Основываясь на соображениях симметрии можно сказать, что примесь состояний других зон приводит к поправке к матричному элементу оптического перехода вида

$$\langle S, \varepsilon | p_\alpha | \beta \rangle \approx p \delta_{\alpha\beta} + A \varepsilon_{\alpha\beta}$$

Таким образом, в кристалле появляется *линейный дихроизм*.

4.2. Боковые долины

Выше мы фактически ограничились анализом ситуации в центре зоны Бриллюэна $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, пренебрегая поправками к энергии вида произведением малостей $(\mathbf{k}\hat{\varepsilon}\mathbf{k})$. Очевидно, что деформация приводит к поправкам к тензору обратной массы электрона в зоне проводимости, которые при малых значениях волнового вектора незначительно изменяют кинетическую энергию частицы. Однако, если дну зоны проводимости соответствуют другие точки зоны Бриллюэна (например, боковые долины лежат ниже центра), то линейные по деформации члены будут разными для разных долин.

Боковые долины обычно лежат недалеко от границы зоны Бриллюэна. Поэтому разлагать в ряд по компонентам волнового вектора и оставлять только первые члены разложения не очень то хорошо. Надо писать более общие формулы. Но в нашу задачу здесь не входит построение совершенно общей теории. Например, уже из вышесказанного видно, что при анизотропной деформации боковые долины будут сдвигаться по-разному. Поэтому при расчете непрямых переходов край фундаментальной полосы поглощения окажется связанным лишь с частью боковых долин, а не со всеми долинами как было в случае недеформированного кристалла.

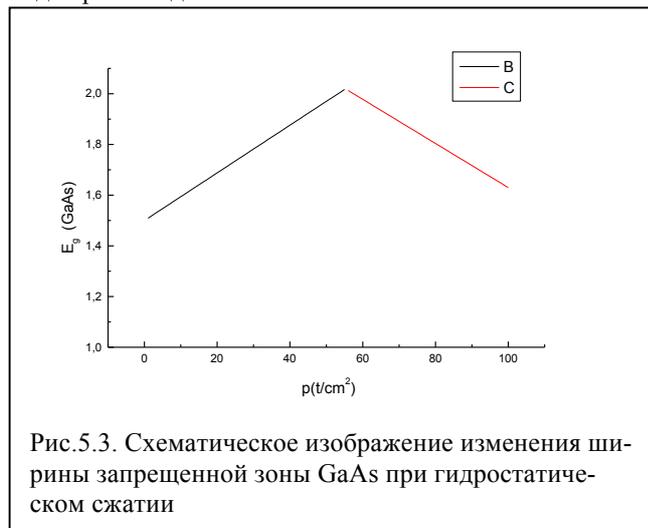


Рис. 5.3. Схематическое изображение изменения ширины запрещенной зоны GaAs при гидростатическом сжатии

На рисунке 5.3. приведены результаты экспериментального измерения зависимости оптически определенной ширины запрещенной зоны от величины гидростатического сжатия кристалла арсенида галлия. При малых давлениях сжатие приводит к увеличению E_g

$$\frac{dE_g}{dp} = 9.8 \cdot 10^{-6} \text{ eV cm}^2 / \text{kG}.$$

Однако, при давлении порядка $6 \cdot 10^4 \text{ kG cm}^{-2}$ зависимость изменяется на противоположную и дальнейшее увеличение давление приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны

$$\frac{dE_g}{dp} = -8.7 \cdot 10^{-6} \text{ eV cm}^2 / \text{kG}.$$

С чем же связан такой резкий переход от одной (практически линейной) зависимости к другой, тоже практически линейной?

Одновременно материал из прямого становится непрямым. Дно зоны проводимости в Г-точке с ростом давления поднимается, а боковые долины – опускаются. Поглощение света при оптических переходах в дно боковой долины при данном типе фонона вообще говоря поляризовано. Но суммирование по конечным состояниям во всех боковых долинах в кубическом материале приводит к поглощению, не зависящему от поляризации света. Анизотропная (негидростатическая) деформация опять приведет к поляризации поглощения света в области края фундаментальной полосы.

4.3. Сдвиг и расщепление подзон валентной доны алмазоподобных полупроводников

Анизотропная деформация понижает симметрию и приводит к снятию 4-х кратного вырождения вершины валентной зоны, аналогично тому, как снятие вырождения происходит для состояний с $\mathbf{k} \neq 0$. Исходя из соображений симметрии легко написать общее выражение для гамильтониана дырки в деформированном кристалле.

$$H = \left(A + \frac{5}{4} B \right) k^2 - B \sum_{\alpha} \hat{J}_{\alpha}^2 k_{\alpha}^2 - \frac{D}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha \neq \beta} \{ \hat{J}_{\alpha} \hat{J}_{\beta} \} k_{\alpha} k_{\beta} + \left(a + \frac{5}{4} b \right) Sp \epsilon - b \sum_{\alpha} \hat{J}_{\alpha}^2 \epsilon_{\alpha\alpha} - \frac{d}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha \neq \beta} \{ \hat{J}_{\alpha} \hat{J}_{\beta} \} \epsilon_{\alpha\beta}; \quad \{ \hat{J}_{\alpha} \hat{J}_{\beta} \} = (\hat{J}_{\alpha} \hat{J}_{\beta} + \hat{J}_{\beta} \hat{J}_{\alpha}) / 2$$

Причем в случае одноосной деформации ее тензор можно представить в виде $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon n_{\alpha} n_{\beta}$, где ϵ - величина деформации, а \vec{n} - единичный вектор вдоль оси деформации.

В сферическом приближении

$(b = d/\sqrt{3}, B = D/\sqrt{3})$ при растяжении кристалла вдоль оси \mathbf{n} , минимальной энергии дырок соответствуют спиновые состояния с максимальной проекцией спина дырки \mathbf{J} на ось \mathbf{n} : $(\mathbf{Jn}) = \pm 3/2$. Учет кубической (а не сферической) симметрии реального кристалла $(b \neq d/\sqrt{3}, B \neq D/\sqrt{3})$ приводит к тому: что это простое соотношение выполняется лишь при векторе \mathbf{n} , направленном вдоль осей высокой симметрии (например, [100] и [111]), а для произвольного направления \mathbf{n} основному состоянию уже не соответствует определенное значение проекции спина дырки на какую-то ось.

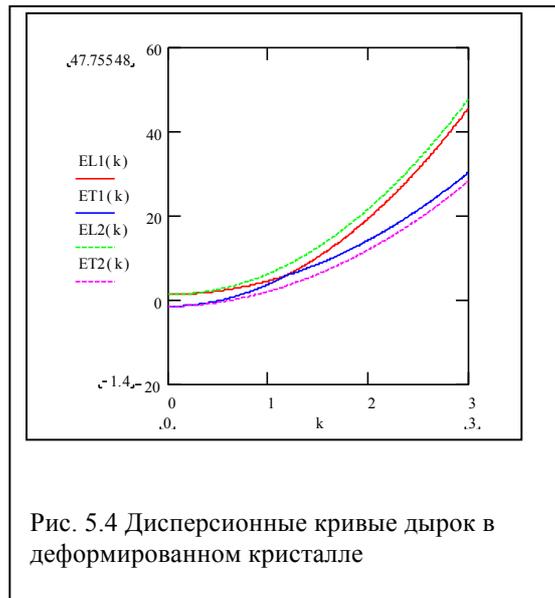


Рис. 5.4 Дисперсионные кривые дырок в деформированном кристалле

Энергетический спектр дается формулой

$$E_{1,2} = Ak^2 + aSp\varepsilon \pm [E_k + E_{\varepsilon,k} + E_\varepsilon]^{1/2}, E_k = B^2k^4 + (D^2 - 3B^2)(k_x^2k_y^2 + k_z^2k_y^2 + k_x^2k_z^2);$$

$$E_\varepsilon = \frac{b}{2} [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2] + d^2(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \varepsilon_{zx}^2)$$

$$E_{\varepsilon,k} = Bb[3(k_x^2\varepsilon_{xx} + k_y^2\varepsilon_{yy} + k_z^2\varepsilon_{zz}) - k^2Sp\varepsilon] + 2Dd[k_xk_y\varepsilon_{xy} + k_zk_y\varepsilon_{zy} + k_xk_z\varepsilon_{zy}]$$

Вырождение в вершине зоны снимается, эффективные массы дырок оказываются анизотропными. См. рисунок 5.4 на котором показаны результаты расчета закона дисперсии для одноосной деформации. Разобраны два случая 1) волновой вектор направлен вдоль оси сжатия и 2) перпендикулярно к этой оси. Легко видеть, что спектр становится непараболическим при умеренных значениях волнового вектора. Зная энергию можно найти и волновые функции. Интересующиеся могут посмотреть как это делается в книге [Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус «Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках», Наука, 1972].

5. Поляризация краевой люминесценции в деформированных алмазоподобных полупроводниках

Воспользовавшись правилами отбора, приведенными на *рисунке в лекции 3* легко увидеть, что в случае одноосного сжатия, когда валентная зона определяется состояниями с проекцией спина на ось деформации $\pm 1/2$, на краю фундаментальной полосы поглощение света с поляризацией вдоль оси деформации идет в 4 раза эффективнее, чем для перпендикулярной линейной поляризации. В случае одноосного растяжения состояния дна характеризуются проекцией $\pm 3/2$ и на краю поглощается исключительно свет линейно поляризованный перпендикулярно к оси деформации.

6. Температурная зависимость ширины запрещенной зоны.

С ростом температуры ширина запрещенной зоны уменьшается (см. *рис. 1 лекции 4*). Причин этому много. Благодаря тепловому расширению увеличивается объем кристалла. Это эквивалентно «гидростатическому растяжению» а при растяжении как видно из *рис. 5.3* ширина запрещенной зоны уменьшается. Кроме того, возникают тепловые флуктуации. Случайным образом деформирующие кристалл и так же уменьшающие запрещенную зону.

ВОПРОС: Оцените роль первого механизма изменения ширины запрещенной зоны.

ЛЕКЦИЯ 6 ИЗМЕНЕНИЯ ФОРМЫ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ПОЛОСЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРИ ПРИЛОЖЕНИИ К КРИСТАЛЛУ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ.

1. Феноменологическое описание влияния электрического поля на оптические свойства полупроводника
 - 1.1. Поправки к тензору диэлектрической проницаемости
 - 1.2. Эффект Погкельса (F. Pockels, 1894)
 - 1.3. Эффект Керра (D. Kerr, 1875)
2. Эффект Келдыша – Франца
 - 2.1. Полупроводники с простой зонной структурой
 - 2.2. Полупроводники типа GaAs, поляризационные зависимости электропоглощения в кристаллах кубической симметрии
- 2.3. Кулоновские поправки к электропоглощению.

1. Во всех предыдущих лекциях предполагалось, что поляризация среды связана с внешним электрическим полем линейным образом, тем самым диэлектрическая проницаемость не зависела от приложенного электрического поля. Мы говорили, что, как правило, электрическое поле световой волны мало по сравнению с атомным полем $E_a = \frac{e}{a_B^2} \approx 10^9 \frac{V}{cm}$. Если свет лазера мощностью в 1 W сфокусировать в пятно

радиусом 1 мм, то, как несложно, оценить $\frac{E_0}{E_a} \approx 4 \cdot 10^{-8}$.

ВОПРОС: *Сделайте эту оценку самостоятельно.*

Налицо малый параметр. Однако к высокоомному полупроводниковому кристаллу без особого труда можно приложить электрическое поле в несколько kV/cm. Конечно и в этом случае отношение внешнего поля к атомному не очень велико, но уже не пренебрежимо мало.

Определим вид поправок к тензору диэлектрической проницаемости, вызванных наложением на кристалл однородного электрического поля. Прежде всего заметим что из компонент электрического поля легко собрать симметричный тензор второго ранга $E_\alpha E_\beta$, ни чем не отличающийся по виду от тензора рассмотренного в прошлой лекции тензора деформации.

Таким образом мы сразу же можем написать общий вид квадратичной по постоянному электрическому полю поправки к тензору обратной диэлектрической проницаемости

$$\eta_{ij} = \eta_{ij}^{(0)} + R_{ijkl} E_k E_l \quad (6.1)$$

Квадратичные по электрическому полю изменения коэффициента преломления среды называется эффектом Керра. Как всегда понижение симметрии кубической среды приводит к появлению *двулучепреломления* или *линейного дихроизма*.

ВОПРОС: *Какие компоненты тензора \hat{R} отличны от нуля у кристаллов кубической симметрии?*

Отметим, что принято разделять «истинный» и «ложный» эффекты Керра. «Ложный» эффект связан с тем, что при приложении однородного электрического поля кристалл деформируется, причем тензор деформации сам по себе пропорционален квадрату электрического поля. А деформация, как мы видели на прошлой лекции, сама приводит к изменению диэлектрической проницаемости $E_\alpha E_\beta \Rightarrow r_{k,l} \Rightarrow \Delta \eta_{ij}$.

ВОПРОС: *Предложите эксперимент, с помощью которого удалось бы разделить вклады от «истинного» и «ложного» эффектов Керра.*

Однако во многих известных нам полупроводниковых кристаллах может иметь место линейный электрооптический эффект (эффект Погкельса). Он может возникать даже в высокосимметричных кубических кристаллах с решеткой типа цинковой обманки. Определяющим условием здесь является отсутствие у среды центра инверсии. Соответствующая поправка к $\hat{\eta}$ описывается тензором третьего ранга \hat{r}

$$\eta_{ij} = \eta_{ij}^{(0)} + r_{ijk} E_k + R_{ijkl} E_k E_l \quad (6.2)$$

Тензор \hat{r} имеет, вообще говоря, 27 компонент, однако в случае среды кубической симметрии отличны от нуля только те компоненты, у которых все три индекса различны $r_{xyz} = r_{yzx} = \dots = r_{yxz}$.

ВОПРОС: *Покажите, что все остальные компоненты этого тензора для кубического кристалла обязательно равны нулю.*

Инвариантность свойств кристалла по отношению к любому из базовых вращений, совмещающих тетраэдр сам с собой (т.е. поворот на 120 градусов вокруг оси [111] или на 180 градусов вокруг осей типа [001]), не позволяет сделать заключения об обращении в нуль компонент $r_{xyz} = r_{yzx} = \dots = r_{yxz}$. Лишь пространственная инверсия, которая должна изменить знак этих компонент тензора третьего ранга, а с другой стороны сохранить тензор неизменным, приведет к условию $r_{xyz} = r_{yzx} = \dots = r_{yxz} = 0$. У алмазоподобных полупроводников (Si, Ge) центр инверсии имеется.

ВОПРОС: *Какой точке кристаллической решетки он соответствует?*

А вот у очень близкого по структуре GaAs этого центра нет. Соответственно, у германия и кремния эффект Поккельса отсутствует, а вот у кристаллов с решеткой цинковой обманки он симметрично разрешен.

Как и эффект Керра, эффект Поккельса может быть первичным («истинным») и вторичным («ложным»). Последний напрямую связан с обратным пьезоэффектом – линейной по электрическому полю деформацией кристалла.

Истинные эффекты Керра и Поккельса обладают очень низкой инерционностью. На их основе можно создавать приборы, переключающие световые потоки за времена в 10^{-9} с. А в последние годы появились оптические схемы, работающие уже с импульсами фемтосекундной длительности.

Примечание: НУМЕРАЦИЯ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРА ВТОРОГО РАНГА.

Во многих случаях компоненты тензора второго ранга A_{ij} удобно нумеровать одним индексом, который пробегает значения от 1 до 9. Делается это сопоставление следующим образом:

$$\begin{pmatrix} xx & xy & xz \\ yx & yy & yz \\ zx & zy & zz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 9 & 2 & 4 \\ 8 & 7 & 3 \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

2. Эффект Келдыша-Франца.

Рассмотрим теперь, как влияет электрическое поле на край фундаментальной полосы поглощения. Забегая вперед отметим, что на этой лекции мы будем вынуждены удивиться тому, насколько могут оказаться обманчивыми стереотипные представления о том, что при наличии малого параметра, поправки к характеристикам кристалла можно искать в виде разложения по степеням малого параметра. Как мы сейчас увидим, имеется и иная возможность, описываемая не привычным разложением в степенной ряд, а асимптотическим разложением.

ВОПРОС: *Объясните, в чем разница между разложением в ряд Тейлора и асимптотическим разложением?*

Итак, забыв на время о кулоновском взаимодействии между электроном и дыркой, начнем с простой физической картины края фундаментальной полосы поглощения. На лекции 1 мы говорили о возникновении края, как такового, потому что при полностью заполненной валентной зоне и пустой зоне проводимости не существует пары из заполненного и пустого электронных уровней, энергетический зазор между которыми меньше E_g .

Однако, даже слабое электрическое поле меняет ситуацию коренным образом. Из рисунка 6.2 видно, что при приложении к диэлектрику сколь угодно слабого электрического поля имеются пары заполненных и свободных уровней, с любым энергетическим зазором.

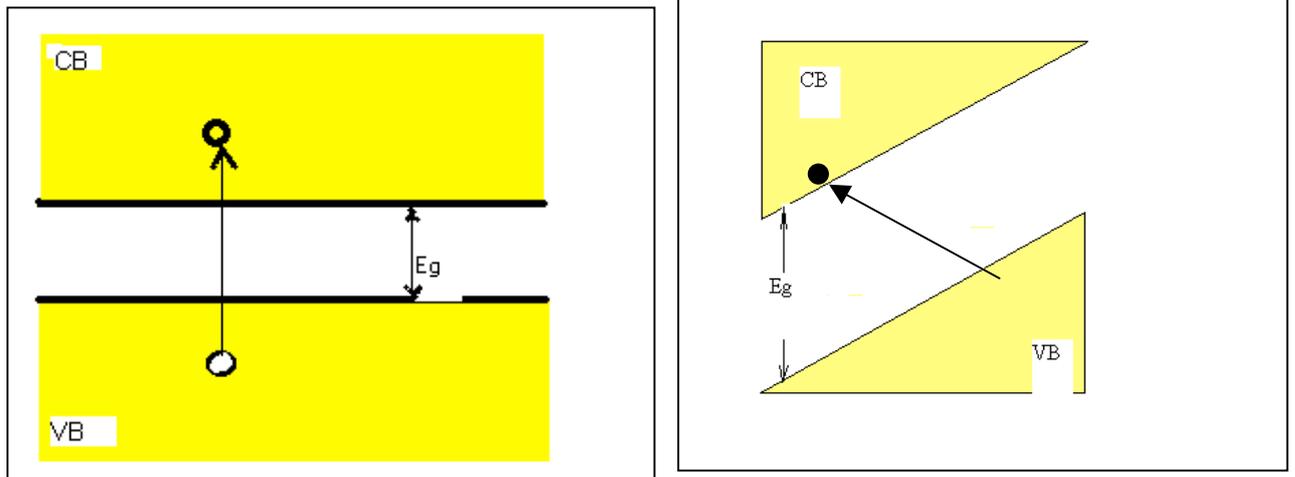
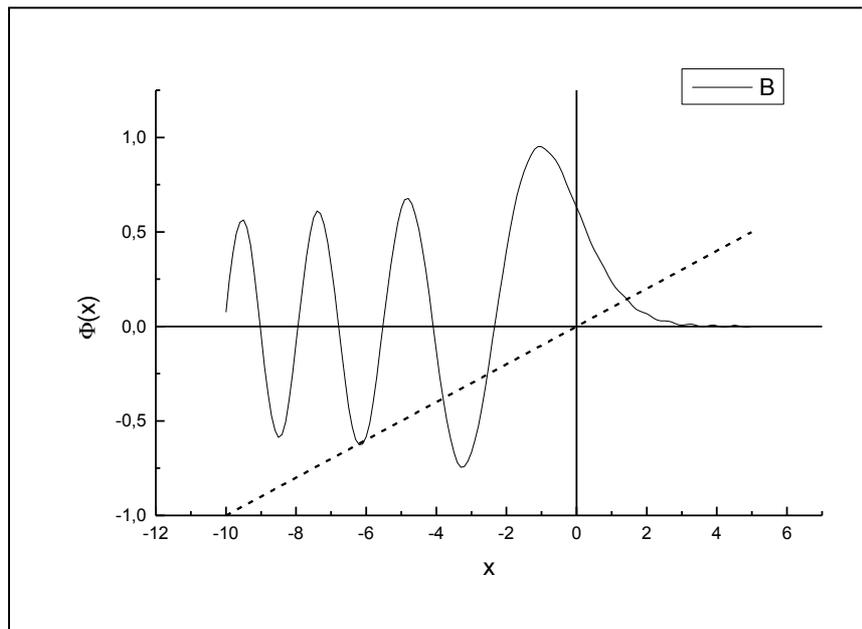


Рис. 6.2

Такое естественное и привычное свойство – наличие запрещенной зоны в плотности состояний исчезает мгновенно при сколь угодно малом поле.¹ В этом смысле однородное электрическое поле никогда не бывает малым. Слабое электрическое поле, умноженное на большое расстояние, приводит к изменению потенциала, большему чем E_g .

Тут самое время заметить, что как мы обсуждали на первых лекциях, при поглощении света электрон и дырка рождаются в одной и той же точке кристалла, а разность потенциалов набегаает лишь по мере увеличения расстояния между ними (т.е. при их пространственном разделении). Однако, квантовая механика (в отличие от классической) допускает нахождение частиц в «классически запрещенной» области пространства, т.е. «под энергетическим барьером». Поэтому электронно-дырочная пара может – родиться в запрещенной зоне (электрон и дырка в одной и той же точке пространства), но с «отрицательной кинетической энергией», а потом разлететься и оказаться в разных точках пространства, но зато уже с положительной кинетической энергией. Таким образом, наша задача сводится к определению волновой функции электрона и дырки в состояниях, разность энергий между которыми $\Delta E = \hbar\omega < E_g$.

Последовательный анализ этой задачи можно найти в книге А.И. Ансельма «Введение в теорию полупроводников». Популярное и подробное ее изложение приведено в [И.А. Меркулов, В.И. Перель «Электропоглощение в полупроводника» Материалы шестой зимней школы по физике полупроводников Л.1974, 220-256]. В качестве подготовки полезно внимательно изучить параграф из книги Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица «Квантовая механика», посвященный описанию состояния электрона в однородном электрическом поле.



Волновая функция

¹ Тут уместна литературная аналогия: это свойство (наличие запрещенной зоны) ведет себя как мед в горшочке Винни-Пуха. Только что оно было и вот его уже совсем нет.

Здесь мы приведем набросок «точного» расчета, основанного на решении уравнения Шредингера в специальных функциях, а на следующей лекции мы рассмотрим квазиклассическое приближение для задачи об электропоглощении.

Уравнение Шредингера для частицы в однородном электрическом поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + Fz\psi(z) + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} = E \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + Fz\psi(z) = \tilde{E} \quad (6.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + F(z - z_0)\psi(z) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(z')}{\partial z'^2} - \frac{2Fm}{\hbar^2} z'\psi(z') = 0 \xrightarrow{\xi = \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} z'} \frac{\partial^2 \psi(\xi)}{\partial \xi^2} - \frac{2Fm}{\hbar^2} \xi\psi(\xi) = 0$$

$$\psi(\xi) = A\Phi(\xi), \quad \Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^2}{3} + u\xi\right) du$$

Здесь мы ввели функцию Эйри

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^2}{3} + u\xi\right) du. \quad (6.5)$$

Опуская подробности, которые можно найти в книге [А.И. Ансельм, «Введение в теорию полупроводников»], приведем конечное выражение для коэффициента поглощения:

$$\alpha_E = R(\hbar\omega_E)^{1/2} \int_{\beta}^{\infty} \Phi^2(x) dx, \quad R = \frac{2e^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2}{m^2 c n \omega} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{3/2}, \quad \beta = \frac{\omega_G - \omega}{\omega_E}. \quad (6.6)$$

В предельном случае $\beta \ll 1$ (поглощение фотонов с энергией, много меньшей, чем ширина запрещенной зоны) имеем

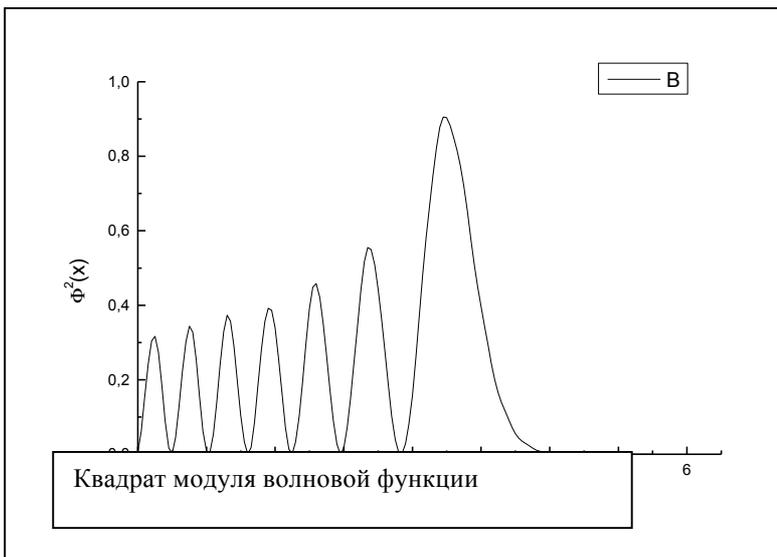
$$\alpha \propto \exp\left[-\gamma \frac{(\omega_G - \omega)^{3/2}}{E}\right], \quad (6.7)$$

где $\gamma = 4\sqrt{2m\hbar}/3e$.

Обратим внимание на то, что функциональную зависимость показателя экспоненты в формуле описывающей эффект Келдыша – Франца можно было бы предсказать без детальных расчетов, основываясь только на общих соображениях размерности. В нашей задаче имеется две характерные величины – энергия, которая задается дефицитом энергии фотона $(E_g - \hbar\omega)$ и электрическое поле E . Вероятность туннелирования определяется действием, которое в квазиклассическом приближении задается интегралом импульса по туннельной траектории. Характерное значение импульса, соответствующего указанной энергии составляет

$p_0 = \sqrt{2m(E_g - \hbar\omega)}$, а характерная длина, на которой в электрическом поле будет набрана данная энергия $l = (E_g - \hbar\omega)/(eE)$. Таким образом получаем характерное значение действия $S \propto p_0 l_0$. А показатель экспоненты в коэффициенте поглощения с точностью

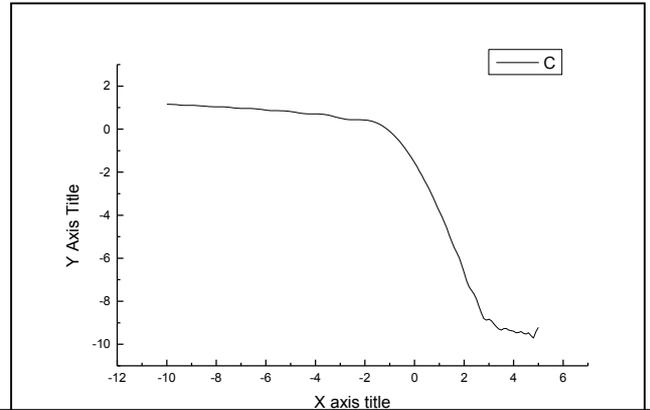
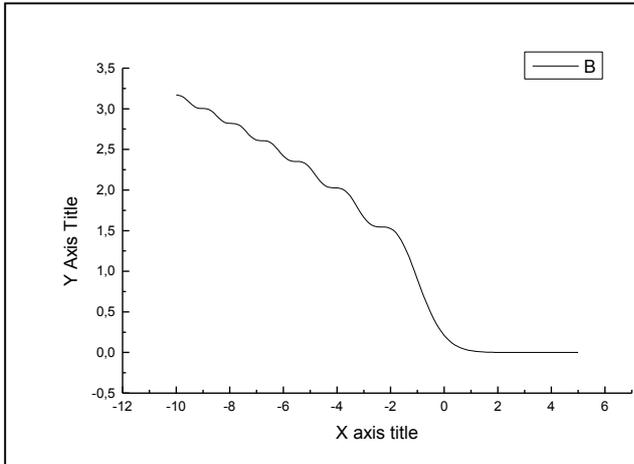
до числа должен быть равен $\sqrt{2m(E_g - \hbar\omega)} \frac{(E_g - \hbar\omega)}{\hbar e E}$. Именно этот ответ мы и получили найдя до-



Квадрат модуля волновой функции

Зачастую электрическое поле нельзя считать постоянным на всем пути тунелирования. Такая ситуация складывается, например, при тунелировании в поле р-п перехода. В этом случае числовой коэффициент изменится, но общая функциональная связь сохранится.

Результат проинтегрирован по перпендикулярным компонентам импульса



Логорифм коэффициента поглощения

ВОПРОС:

К монокристаллическому образцу фосфида галлия прикладывается электрическое поле в направлении [111] Будет ли в этом случае наблюдаться продольный электрооптический эффект? Поперечный электрооптический эффект?

(Продольным электрооптическим эффектом называется двулучепреломление наблюдаемое для света, распространяющегося вдоль электрического поля. Поперечный электрооптический эффект – двулучепреломление для света, распространяющегося поперек электрического поля.)

ЛЕКЦИЯ 7 ПРОДОЛЖЕНИЕ РАЗГОВОРА ОБ ЭЛЕКТРОПОГЛОЩЕНИИ И ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ, СВЯЗАННЫЕ С ПРИМЕСНЫМ СОСТОЯНИЯМИ.

Квазиклассическое описание электропоглощения в полупроводниках с простой зонной структурой

Полупроводники типа GaAs, поляризационные зависимости электропоглощения в кристаллах кубической симметрии

Кулоновские поправки

1. Квазиклассическое описание электропоглощения

На прошлой лекции, при описании эффекта Кельша-Франца, мы использовали точный вид волновой функции электрона (и дырки) в однородном электрическом поле. Волновая функция носителя была выражена через специальную функцию – функцию Эйри. Это позволило нам быстро и «малой кровью» получить ответ. Однако первые же шаги в сторону реальных полупроводников, приводят к тому, что простое математическое описание перестает работать. Учет непараболичности спектра носителей разрушает стандартный вид уравнения Шредингера, учет кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой не позволяет разделить переменные относительного движения электронов и дырок (соответствующее уравнение Шредингера становится дифференциальным уравнением в частных производных), наконец сложная структура валентной зоны приводит к необходимости решения системы дифференциальных уравнений для нескольких взаимодействующих подзон. Ожидать готового решения задачи для всех этих частных случаев не приходится. Хорошо бы воспользоваться каким-то более универсальным методом, хотя, возможно, и приближенным.

Таким подходом оказывается квазиклассическое приближение (метод ВКБ). Как мы сейчас увидим оно позволяет найти асимптотический вид коэффициента поглощения при больших дефицитах энергии фотона, когда прямые расчеты по приведенным в лекции 6 формулам затруднены в силу малости рассматриваемых величин, в самом деле, в интеграле для Φ (уравнение (6.5) лекции 6) подынтегральная функция быстро осциллирует, так что ответ экспоненциально мал.

Итак, квазиклассическое приближение применимо, когда длина волны частицы практически не изменяется на расстояниях порядка ее самой. Формально это означает что можно записать решение уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + F(z - z_0) \psi(z) = 0$$

в виде $\psi(z) = A(z) \exp\left\{i \int^z k(z') dz'\right\}$, где изменения амплитуды $A(z)$ на расстоянии порядка $2\pi/k(z)$

пренебрежимо малы.

Квазиклассическое решение волнового уравнения подробно описано в книге [Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц «Квантовая механика»] (параграф 46). Если вы столкнулись с задачей, в которой потенциал зависит от нескольких компонент радиуса-вектора и переменные в волновом уравнении не разделяются, полезно почитать соответствующий параграф из пособия [«Краткий курс теоретической физики»] тех же авторов¹. Мы же ограничимся утверждением, что если

$$\frac{\mu \hbar \left| \frac{dU}{dz} \right|}{|2\mu(E - U)|^{3/2}} = \frac{2\mu |F|}{|p|^3} \ll 1$$

то решение одномерной задачи можно искать в квазиклассическом виде. В классически доступной области, соответствующей положительной кинетической энергии $E > U$

¹ Математической стороне данного вопроса посвящено громадное число работ и книг. По-видимому, наиболее подробный анализ всех деталей квазиклассического приближения был выполнен академиком Масловым [см., например, Маслов В.П. Федорюк М.В., "Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики"].

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int p dz\right\} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int p dz\right\}$$

где $p = \sqrt{2\mu(E-U)}$. В этой формуле первое слагаемое соответствует набегающей на барьер волне. А второе – волне отраженной от барьера.

В области тунелирования, запрещенной с классической точки зрения, где кинетическая энергия отрицательна $E < U$

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dz\right\} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \int |p| dz\right\}$$

Первое слагаемое в этой формуле описывает тунелирование частиц по барьер слева направо, а второе – справа налево. Если справа классически разрешенная область отсутствует, то и коэффициент при втором решении надо положить равным нулю $C_2 = 0$.

Итак, в нашем случае экспоненциально затухающего под барьер решения, достаточно глубоко под барьером

$$|\psi|^2 = \frac{|C_1|^2}{2\mu(U-E)} \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2\mu(U-E)} dz\right\} = \frac{|C_1|^2}{2\mu F(z-z_0)} \exp\left\{-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2\mu F} (z-z_0)^{3/2}\right\}.$$

Если бы не было поперечного движения электрона и дырки, то из закона сохранения энергии

$$F(z-z_0) = E_g - \hbar\omega$$

коэффициент поглощения в запрещенной зоне давался бы формулой

$$\alpha \propto \frac{|C_1|^2}{2\mu(E_g - \hbar\omega)} \exp\left\{-\frac{4\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar F}\right\}$$

Учитывая наличие перпендикулярных к электрическому полю составляющих импульса, эффективно увеличивающих ширину запрещенной зоны находим

$$\begin{aligned} \alpha &\approx \int dk_{\perp}^2 \frac{|C_1|^2}{2\mu\left(E_g + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu} - \hbar\omega\right)} \exp\left\{-\frac{4\sqrt{2\mu}\left(E_g + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu} - \hbar\omega\right)^{3/2}}{3\hbar F}\right\} \approx \\ &\approx \frac{|C_1|^2}{2\mu(E_g - \hbar\omega)} \exp\left\{-\frac{4\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar F}\right\} \int dk_{\perp}^2 \exp\left\{-\frac{3\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{1/2} \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu}}{3\hbar F}\right\} \propto \\ &\propto \frac{1}{(E_g - \hbar\omega)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{4\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar F}\right\} \end{aligned}$$

Численный расчет по этой формуле уже не сводится к интегрированию быстроосциллирующей функции при больших дефицитах энергии фотона. Подробный расчет позволяет получить и значение числового коэффициента перед этой формулой, который в точности обеспечивает сшивку ответа с формулой содержащей функции Эйри (уравнение (6.6) лекции 6).

Из проведенных вычислений вытекает два очень важных следствия, справедливых при достаточно больших дефицитах энергии фотона:

- 1) Коэффициент поглощения экспоненциально нарастает с уменьшением приведенной массы
- 2) Вклад в поглощение вносят состояния с малыми перпендикулярными импульсами, лежащие в узкой окрестности $k_{\perp} = 0$.

2. Электропоглощение света в полупроводниках со сложной структурой валентной зоны

(Келдыш, Константинов, Перель 1967)

Анализ квазиклассического решения позволяет нам получить ответ и для полупроводников со сложной валентной зоной. Из только что сказанного вытекает, что основной вклад в поглощение будут вносить туннельные состояния подзоны легких дырок, для которых приведенная масса принимает минимальное значение. Далее, наиболее важный вклад вносят состояния с малыми значениями перпендикулярных компонент волнового вектора. Но именно для таких состояний сложная структура валентной зоны практически не важна. Легкая дырка летящая вдоль электрического поля туннелируя под барьер или отражаясь от него остается легкой. При рассеянии превращение одних дырок в другие происходит в меру наличия k_{\perp} . И так при достаточно большом дефиците энергии фотонов основной вклад в электропоглощение вносят переходы с рождением легкой дырки, квазиимпульс которой направлен вдоль электрического поля. Посмотрев на картинку для правил отбора в лекции 3 мы сразу же скажем что для таких переходов коэффициент поглощения света, поляризованного вдоль электрического поля, в четыре раза больше чем для света, поляризованного поперек него:

$$\frac{\alpha_{\parallel}}{\alpha_{\perp}} = 4$$

3. Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой

Поглощение света с энергией фотона, меньшей ширины запрещенной зоны, в полупроводниках, помещенных в электрической поле, было теоретически предсказано Келдышем и Францем (1958). Этот эффект можно было бы так же назвать *зинеровским пробоем*, *облегченным поглощением фотона*.

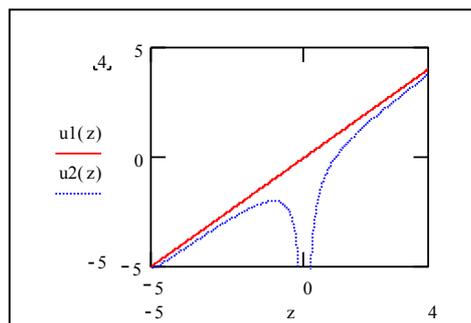
Экспериментальные исследования подтвердили теоретические предсказания. Эффект Келдыша-Франца и обратный ему эффект диагонального туннелирования с испусканием фотона используется в самых различных оптоэлектронных приборах. Однако, даже в предельно чистых и однородных кристаллах величина коэффициента поглощения в области $\hbar\omega < E_g$ оказывается в десятки и сотни раз большей предсказаний развитой теории. Основной, неустранимой причиной этих различий является кулоновское притяжение электрона и дырки. Впервые этот результат был получен Доу и Редфилдом путем численного расчета [John D. Dow, David Redfield, *Electroabsorption in Semiconductors: The Excitonic Absorption Edge*, Phys. Rev. B **1**, 3358 (1970)].

Потенциальная энергия относительного движения электрон-дырочной пары равна сумме энергии в однородном поле и кулоновского притяжения. Как видно из рисунка, кулоновское притяжение приводит к понижению барьера под который надо туннелировать электронно-дырочной паре.

Есть еще один фактор, увеличивающий вероятность поглощения фотона. В кулоновской яме имеются квазисвязанные (квазистационарные) состояния. В отсутствие электрического поля это обычные уровни экситона. При включении поля они оказываются в сплошном спектре и кроме сдвига (эффекта Штарка) испытывают уширение, причиной которого является конечность времени ионизации.

Если энергия рождающейся электроно-дырочной пары близка к энергии связанного состояния, то в волновой функции пары наряду с затухающим под барьер решением возникает и растущая компонента. Точнее, она тоже убывает, но от центра экситона т.е. от точки $z=0$.

Вдали от экситонных резонансов в поглощении основную роль в увеличении поглощения по сравнению с простой теорией Келдыша и Франца играет именно понижение туннельного барьера. Подробнее с расчетом этих поправок, действительно изменяющим ответ в десятки и сотни раз можно ознакомиться в статье [И.А.Меркулов В.И.Перель «Электропоглощение в полупроводниках», опубликованной в материалах шестой зимней школы по физике полупроводников (Л1974 стр. 220-256)].



ЛЕКЦИЯ 8. ХВОСТЫ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ НА КРАЮ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ПОЛОСЫ

1. Неоднородность кристалла – основная причина возникновения хвостов коэффициента поглощения.
2. Правило Урбаха.
3. Флуктуации ширины запрещенной зоны. Основные механизмы возникновения – случайные напряжения, флуктуации ширины квантовой ямы и т.п.
4. Случайные электрические поля в легированных компенсированных полупроводниках
5. Метод оптимальной флуктуации, его сложности и недостатки
6. Оценка для формы хвоста коэффициента поглощения в легированном компенсированном полупроводнике

1. Рассмотренная идеальная теоретическая форма края фундаментальной поглощения, естественно, является лишь некоторым приближением к реальной ситуации. Идеальная периодическая решетка является лишь более или менее хорошим приближением к реальному кристаллу содержащему различные дефекты. Достаточно вспомнить про то, что при конечной температуре электроны рассеиваются на фононах, которые могут передавать им как квазиимпульс так и энергию. В результате оказывается возможным поглощение света с энергией фотонов, меньшей ширины запрещенной зоны. (Это явление мы уже видели, когда рассматривали непрямые оптические переходы. Там анализировался простейший случай – в поглощении участвовал один фонон с очень большим волновым вектором).

На *Лекции 3* мы показали, что фотоны с энергией, меньшей ширины запрещенной зоны, могут поглощаться при фотоионизации, фотонейтрализации различных примесей и при внутрипримесных переходах. Если в одной области кристалла окажется несколько примесей, то они влияют друг на друга. Энергетические уровни сдвигаются. В результате сдвигаются линии и полосы поглощения, кроме того они могут перекрываться.

Ситуация становится совсем сложной в твердых растворах. Во-первых, необходимо оправдать возможность использования понятия квазиимпульса электрона и дырки, если никакой периодичности потенциала заведомо нет¹. Строили теорию, основанную на теореме Блоха, то есть на представлениях об идеальном периодическом потенциале, а потом после некоторых логических рассуждений стали применять ее следствия в случае неперодической среды.

Отступление – задание для самостоятельного размышления:

*Что вы по этому поводу думаете? Такое ли это на самом деле «безобразия» - использовать теорему Блоха для твердого раствора? Или тут есть некоторые количественные критерии?*²

2. Итак, в реальных кристаллах имеется много причин для поглощения света с энергией фотона $\hbar\omega < E_g$. Естественно, величина коэффициента поглощения быстро уменьшается с ростом дефицита энергии фотона ($E_g - \hbar\omega$). Эта область поглощения обычно называется *хвостом фундаментальной полосы поглощения*.

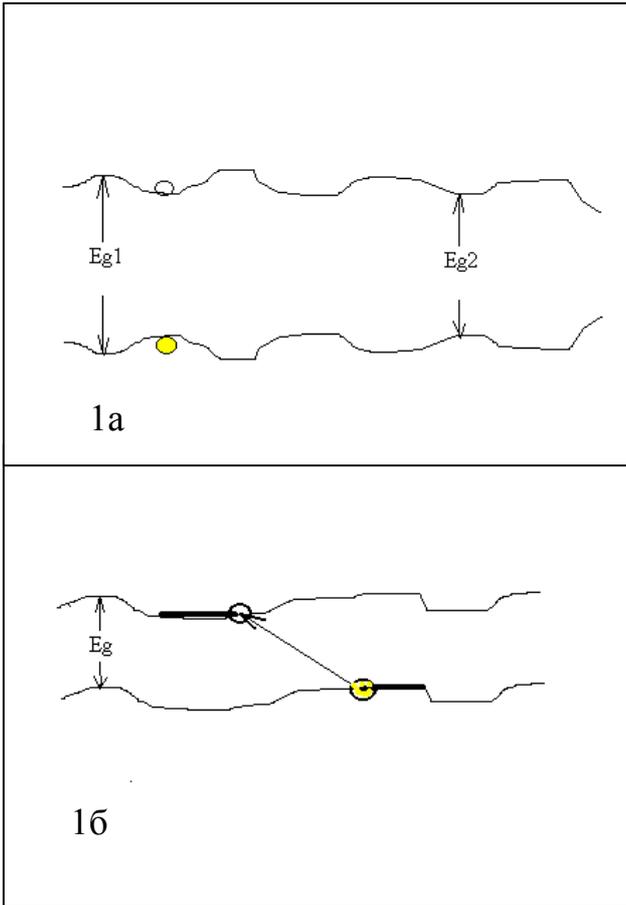
Зависимость коэффициента поглощения от дефицита энергии $E_g - \hbar\omega$ и температуры изменяется от кристалла к кристаллу. Оказывается, что почти всегда можно найти такую область частот, где $\alpha \propto \exp\left\{-\frac{(E_g - \hbar\omega)}{k(T + T_0)}\right\}$, где T_0 - некоторая константа, имеющая размерность температуры. Говорят, что в этой области энергии поглощение описывается *обобщенным правилом Урбаха*. Само по себе (не обобщенное) эмпирически полученное Урбахом правило предлагает, что коэффициент поглощения в области хвоста описывается обычной активационной экспонентой - $\alpha \propto \exp\left\{-\frac{(E_g - \hbar\omega)}{kT}\right\}$. Температурная зависимость хвоста поглощения указывает на то что в поглощении участвует один или несколько фононов. Подчеркнем, что найти область хвоста поглощения, для которой справедливо правило Урбаха, - отдельная задача. Такая область обычно существует где-то при не слишком больших и не слишком малых значениях дефицита энергии фотона.

Строгий и достаточно общий вывод правила Урбаха, несмотря на простоту его формулировки, отсутствует. Имеется несколько сценариев, которые лишь в ряде случаев дают это простое выражение. Расчеты эти достаточно сложны и громоздки (см. например, [В.И.Перель, И.Н.Ясиевич, Б.Л.Гельмонт, ФТТ, **25**, 415 (1983)]). При понижении температуры фононы вымораживаются, но хвосты коэффициента поглощения не исчезают. Их существование связывают с замороженной во времени неоднородностью кристалла.

¹ Очередная литературная аналогия: старая сказка про суп из топора.

² А представляете, как трудно было Галилео Галилею, когда он формулировал первый закон Ньютона. Ведь никто ни до него, ни после него не видел тел, не взаимодействующих с другими телами. То есть ему пришлось придумать закон о том, чего не бывает. И это самый главный, первый закон механики, на основании которого мы описываем движение тел, взаимодействующих друг с другом. Удивительна наука – физика.

3. В общем виде можно выделить два класса неоднородностей. В первом случае это неоднородности вызывающие флуктуации ширины запрещенной зоны (рис. 1а).



Условно такие флуктуации можно трактовать как результат действия случайных деформаций. Однако, реальная деформация конечно необязательна. Флуктуации ширины запрещенной зоны в твердых растворах могут быть связаны с флуктуациями состава кристалла. В квантовых ямах изменения ширины эффективной запрещенной зоны возникает за счет флуктуаций ширины ямы L , и соответственно, с флуктуациями энергии размерного квантования $T_{e,h}^{(n)} \approx \frac{(\hbar\pi)^2}{2m_{e,h}L^2}$

4. Во втором случае ширина запрещенной зоны предполагается постоянной по объему кристалла, хотя положение дна зоны проводимости и, соответственно, вершины валентной зоны меняется от точки к точке (рис. 1б)

Фактически эта модель предполагает наличие в кристалле случайного электрического поля.

Такие поля действительно возникают в легированных, компенсированных материалах. В таких полупроводниках много заряженных примесей и практически нет свободных носителей, способных экранировать электрические поля флуктуаций заряда. В момент кристаллизации температура столь высока, что кулоновское взаимодействие практически не влияет на расположение заряженных примесей в кристалле. (Кроме этого при столь высокой температуре имеется много собственных носителей, которые экранируют эти поля). Поэтому доноры и акцепторы располагаются в решетке абсолютно случайным

образом. Ну а при низких температурах скорость движения примесей по решетке становится пренебрежимо малой. И эта «высокотемпературная» хаотичность расположения примесей замораживается. В одной микро-области кристалла оказывается несколько больше доноров, в другой акцепторов. Возникают хаотически направленные электрические поля, в которых может происходить эффект межзонное туннелирование носителей и наблюдаться Келдыша-Франца.

5. Чем больше флуктуация заряда – тем большее электрическое поле она создает, и тем с большим дефицитом энергии может поглотиться фотон. Однако, вероятность образования такой флуктуации мала. Естественно предположить, что для каждой энергии фотона имеется некоторое оптимальное распределение зарядов, для которого произведение вероятности поглощения фотона в созданном электрическом поле на вероятность образования такой флуктуации максимально. Такие флуктуации называются *оптимальными*.

Идея метода оптимальных флуктуаций была сформулирована в работах И.М. Лифшица. Этот подход используется для описания хвостов плотности состояний в среде со случайным распределением дефектов. Естественно, результат подобных расчетов зависит от вида случайного потенциала и положения энергетических уровней носителей заряда в этом потенциала, от вероятности того или иного пространственного распределения источников этого случайного потенциала. Так, например, в учебнике В.Л.Бонч-Бруевича подробно разбирается случай абсолютно случайного, некоррелированного потенциала, т.е. такого потенциала, у которого значения $U(\mathbf{r})$ в соседних точках образца совершенно независимы. Такой подход представляется естественным для моделирования хвостов у твердых растворов.

В интересующем нас случае поглощения в случайном электрическом поле флуктуаций концентрации примесей можно предполагать, что в пространстве случайными образом распределены заряды. Потенциальная энергия носителей при переходе от одной кристаллической ячейке к соседней при этом не может измениться на произвольную величину. Для создания такого скачка потенциала потребовалась бы очень большая плотность заряда.

Строгий теоретический анализ этой задачи можно найти в работах Шкловского и Эфроса. (См. ссылки, приведенные в [И.А.Меркулов В.И Перель «Электропоглощение в полупроводниках», материалы шестой зимней школы по физике полупроводников (Л1974 стр. 220-256)]).

Использование метода оптимальной флуктуации и богатых возможностей, открываемых развитием вычислительной техники, позволяет глубоко продвинуться в теоретических расчетов хвостов коэффициента поглощения, хвостов плотности состояний и т.п.. При подобных расчетах, однако, следует соблюдать осторожность. Например, при расчете хвостов плотности состояний вызванных случайным некоррелированным потенциалом (белым шумом) оказывается, что уже при сравнительно малых глубинах залегания уровня в случайном поле, глубина

соответствующей потенциальной ямы оказывается сравнимой с шириной запрещенной зоны. Как возможность возникновения столь больших флуктуаций потенциальной энергии, так и описание движения носителя в таком потенциале в рамках приближения эффективной массы вызывают большие сомнения. Таким образом простые и ясные модели допускают аналитическое решение, но плохо соответствуют реальной физической ситуации, а хорошее согласие с реальностью дают громоздкие численные расчеты, для которых понять физический смысл результатов – дело самостоятельного исследования³.

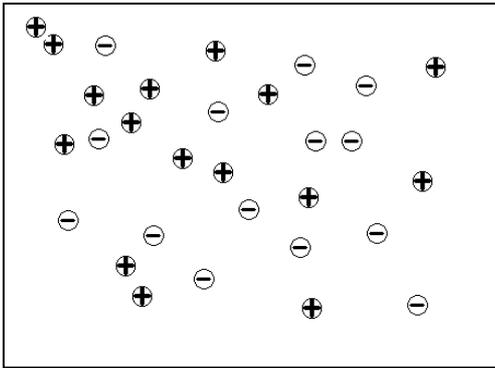
6. Имея в виду все вышесказанное, проведем иллюстративный расчет зависимости коэффициента поглощения на фоне флуктуаций электрического поля в простейшем виде. Мы не будем претендовать на расчет величины коэффициента поглощения. Более того, мы даже не будем претендовать на экспоненциальную точность. Мы оценим (с точностью до числа) функцию стоящую в показателе экспоненты, описывающий коэффициент поглощения при достаточно больших дефицитах энергии фотона.

Исходные положения:

1. Концентрации заряженных доноров и акцепторов велики и одинаковы.
2. Примеси расположены абсолютно случайно.

Тогда имеется конечная вероятность того что в некотором участке образца случайным образом произошла декомпенсация и возник некоторый флуктуационный заряд. Вероятность такой флуктуации дается распределением Гаусса

$$\varphi_Q \propto \exp \left\{ - \int \frac{(N_D(\vec{r}) - N_A(\vec{r}))^2}{(N_D(\vec{r}) + N_A(\vec{r}))} d^3 r \right\} = \exp \left\{ - \int \frac{\xi^2(\vec{r})}{N} d^3 r \right\} \quad (8.1)$$



Показатель этой экспоненты нам неизвестен. Правда его, с точностью, до числа можно выразить через две характерные величины – заряд Q и объем V флуктуации

$$\int \frac{\xi^2(\vec{r})}{N} d^3 r \propto \frac{Q^2}{e^2 N V} \quad (8.2)$$

Эта флуктуация создает пространственное распределение потенциала U и напряженности E электрического поля.

$$U(\vec{R}) = - \int \frac{e \xi(\vec{r})}{|\vec{R} - \vec{r}|} d^3 r \propto \frac{Q}{V^{1/3}} \quad (8.3)$$

$$\vec{E}(\vec{R}) = \int \frac{e(\vec{R} - \vec{r}) \xi(\vec{r})}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} d^3 r \propto \frac{Q}{V^{2/3}}$$

В этом поле надо найти вероятность поглощения фотона с энергией $\hbar\omega - \varphi_i(\hbar\omega, \xi(\vec{r}))$ и после этого подобрать флуктуацию с максимальной полной вероятностью

$$\Phi(\hbar\omega) = \varphi_Q \varphi_i. \quad (8.4)$$

Напомним, что в однородном электрическом поле вероятность поглощения фотона с энергией меньшей E_g дается асимптотической формулой

$$\varphi_i(\hbar\omega, E) \propto \exp \left\{ - \frac{4\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar e E} \right\} \quad (8.5)$$

Использование выражения (8.5) является приближением, поскольку поле примеси не является однородным. Но в лекции посвященной эффекту Келдыша-Франца (Лекция 5) мы уже говорили о том, что показатель этой экспоненты может быть найден из соображений размерности. С точностью до численной константы он равен

$$\frac{\sqrt{\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar e E} \quad (8.6)$$

Где E – характерное электрическое поле в котором происходит туннелирование.

Нам надо найти флуктуацию, для которой вероятность поглощения фотона (8.4) максимальна. Задача сформулирована, но ее решение не выглядит очень уж простым. Тут не обойтись без вариационного метода, которым пользовались Шкловский и Эфрос, проводя соответствующий расчет.

У нас нет ни сил, ни возможности, ни времени на столь глубокий расчет. Поэтому начнем делать упрощающие предположения, которые снимут наиболее тяжелый груз математики, но сохранят общую схему ответа.

³ Наверное поэтому кто-то сказал, что дело физиков – рисовать карикатуры на реальность, а не получать фотографическое изображение.

Именно так поступили Шкловский и Эфрос во введении к своей работе. Мы попытаемся получить вид ответа из соображений размерности. Итак, нам надо уменьшить число независимых параметров и степеней свободы.

Предположим, что флуктуация имеет форму шара и внутри этого шара разность концентраций доноров и акцепторов постоянна. Это одно из решающих упрощений! Мы отказались от «притирки» формы оптимальной флуктуации.

Тогда флуктуация характеризуется всего двумя параметрами – радиусом R_0 и зарядом $Q = -\frac{4\pi}{3} R_0^3 \xi e$. Характерное значение потенциала и электрического поля в такой флуктуации даются формулами

$$U_0 \approx \frac{Q}{\epsilon R_0}; E_0 \approx \frac{Q}{\epsilon R_0^2}.$$

С другой стороны, величину потенциала флуктуации естественно связать с дефицитом энергии поглощаемого фотона $E_g - \hbar\omega \approx -eU_0 \approx \frac{4\pi e^2 \xi R_0^3}{3\epsilon R_0}$, а характерное электрическое поле в задаче $eE = \frac{4\pi e^2 \xi R_0^3}{3\epsilon R_0^2}$. Было два не-

определенных параметров, заряд и объем флуктуации. Одну связь между этими параметрами мы нашли. Воспользовавшись этими соотношениями легко переписать вероятность возникновения флуктуации через характерное электрическое поле и дефицит энергии фотона:

$$\varphi_Q \propto \exp\left\{-\left(\frac{3\epsilon^2}{4\pi e^3}\right) \frac{(E_g - \hbar\omega)E}{N}\right\} \quad (8.7)$$

Поэтому с точностью, меньшей чем экспоненциальная (мы не знаем ни префактора, ни численного коэффициента в показателе экспоненты) имеем

$$\Phi(\hbar\omega) \propto \exp\left\{-C_1 \left(\frac{3\epsilon^2}{4\pi e^3}\right) \frac{(E_g - \hbar\omega)E}{N} - C_2 \frac{4\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar e E}\right\} \quad (8.8)$$

Параметры C_1 и C_2 зависят от формы флуктуации и распределения заряда по ее объему. Для их определения надо строить отдельную теорию.

Итак мы получили функцию (8.8), которую надо максимизировать. Функцию от одного неизвестного параметра – величины характерного электрического поля E . Чем больше это поле – тем меньше вероятность образования такой флуктуации заряда. С другой стороны, чем больше поле тем больше вероятность поглощения фотона.

Конечно, для получения более точного ответа, надо найти не только наиболее вероятную флуктуацию, но и усреднить полученный ответ по флуктуациям чуть менее вероятным. Такое уточнение дает предэкспоненциальный коэффициент. А у нас даже в показателе экспоненты имеется произвол. Фактически весь показатель экспоненты написан из соображений размерности.

Теперь найдем электрическое поле, соответствующее экстремуму показателя экспоненты

$$C_1 \left(\frac{3\epsilon^2}{4\pi e^3}\right) \frac{(E_g - \hbar\omega)}{N} = C_2 \frac{4\sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{3/2}}{3\hbar e E_2^2} \quad (8.9)$$

$$E_2^2 = \frac{C_2 16\pi e^2 N \sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)}{C_1 9\epsilon^2 \hbar} \quad (8.10)$$

Ну а теперь подставим это поле в полную вероятность поглощения фотона и найдем ее зависимость от энергии фотона:

$$\Phi(\hbar\omega) \propto \exp\left\{-\sqrt{C_2 C_1} \left[\frac{\epsilon^4 \sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{5/4}}{\sqrt{N\pi\hbar e^2}} + \frac{\epsilon^4 \sqrt{2\mu}(E_g - \hbar\omega)^{5/4}}{\sqrt{N\pi\hbar e^2}} \right]\right\} \quad (8.11)$$

Точный расчет Шкловского и Эфроса, которые учли форму флуктуации, дает $\sqrt{C_2 C_1} = (2\sqrt{\pi})^{-1} \approx 0.3$. Так что

$$\Phi(\hbar\omega) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{E_g - \hbar\omega}{E_B}\right)^{5/4} \frac{1}{\sqrt{Na_B^3}}\right\} \quad (8.12)$$

где $E_B = \frac{e^4 \mu}{2\epsilon^2 \hbar^2}$, $a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu e^2}$ – боровская энергия и боровский радиус экситона.

ВОПРОСЫ:

1. Насколько полученный ответ отличается от обобщенного правила Урбаха?
(Для ответа на этот вопрос полезно построить обе зависимости в логарифмическом масштабе.)

2. Как изменится ответ в случае двумерной задачи,- компенсированные заряженные примеси находятся только внутри квантовой ямы.
3. Как будет выглядеть функциональная зависимость коэффициента поглощения от величины слабого внешнего электрического поля, т.е. как устроено электропоглощение на фоне хвостов плотности состояний?

ЛЕКЦИЯ 9. МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ, ГИРОТРОПИЯ

1. Феноменологическое описание, диэлектрическая проницаемость кубического кристалла в магнитном поле
2. Эффект Фарадея. естественная оптическая активность
3. Эффект Фарадея на внутрицентровых переходах
4. Влияние магнитного поля на состояния свободных носителей, квантование Ландау.
5. Магнитные и полумагнитные полупроводники. Гигантское спиновое расщепление уровней носителей в поле Вейсса магнитных ионов.
6. Эффект Фарадея в обменном поле магнитных ионов.

1. В отличие от электрического, магнитное поле является псевдовектором. То есть при преобразовании пространственной инверсии, когда x переходит в $-x$, y в $-y$ и z в $-z$, электрическое поле знак изменяет знак, а магнитное - нет. Из-за этого линейные электрооптические эффекты возникают лишь в средах без центра инверсии, а линейные магнитооптические эффекты имеются и в центросимметричных средах.

Вид линейных по магнитному полю поправок к тензору диэлектрической непроницаемости легко найти, если принять во внимание тот факт, что псевдовектор $\vec{H} = (H_x, H_y, H_z)$, при всех преобразованиях симметрии (поворотах, отражении и инверсии) преобразуется как антисимметричный тензор второго ранга

$$\begin{pmatrix} 0 & H_z & -H_y \\ -H_z & 0 & H_x \\ H_y & -H_x & 0 \end{pmatrix}$$

Вспомним простой пример из тензорного исчисления. Векторное произведение образуется из прямого произведения двух векторов следующим образом

$$\begin{pmatrix} a_x b_x & a_x b_y & a_x b_z \\ a_y b_x & a_y b_y & a_y b_z \\ a_z b_x & a_z b_y & a_z b_z \end{pmatrix} = \frac{(\vec{a}\vec{b})}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & [\vec{a} \times \vec{b}]_z & -[\vec{a} \times \vec{b}]_y \\ -[\vec{a} \times \vec{b}]_z & 0 & [\vec{a} \times \vec{b}]_x \\ [\vec{a} \times \vec{b}]_y & -[\vec{a} \times \vec{b}]_x & 0 \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} a_x b_x - \frac{(\vec{a}\vec{b})}{3} & a_x b_y - [\vec{a} \times \vec{b}]_z / 2 & a_x b_z + [\vec{a} \times \vec{b}]_y / 2 \\ a_y b_x + [\vec{a} \times \vec{b}]_z / 2 & a_y b_y - \frac{(\vec{a}\vec{b})}{3} & a_y b_z - [\vec{a} \times \vec{b}]_x / 2 \\ a_z b_x - [\vec{a} \times \vec{b}]_y / 2 & a_z b_y + [\vec{a} \times \vec{b}]_x / 2 & a_z b_z - \frac{(\vec{a}\vec{b})}{3} \end{pmatrix}$$

В приведенном разложении первое слагаемое ведет себя как скаляр, второе - псевдовектор, а третье истинный тензор второго ранга из которого выделен скаляр (его след равен нулю) и вектор (соответствующая матрица симметрична).

Очевидно, что наличие магнитного поля, т.е. антисимметричного тензора второго ранга, должно привести к появлению антисимметричной добавки к тензорам диэлектрической проницаемости и непроницаемости. Последний в магнитном поле имеет вид

$$\eta_{\alpha\beta} = \eta^{(0)} \delta_{\alpha\beta} + A_{4,4} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} H_\gamma \quad (10.1)$$

где мы ввели $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ антисимметричный единичный тензор третьего ранга (тензор Леви-Чевита), имеющий шесть отличных от нуля компонент $\varepsilon_{xyz} = \varepsilon_{yzx} = \varepsilon_{xzy} = -\varepsilon_{yxz} = -\varepsilon_{xxa} = -\varepsilon_{zyx} = 1$.

Пусть свет распространяется вдоль магнитного поля, которое, для определенности, будем считать направленным вдоль оси z . Так что распространение света определяется матрицей

$$\hat{\eta} = \begin{pmatrix} \eta^{(0)} & A_{4,4} H \\ -A_{4,4} H & \eta^{(0)} \end{pmatrix} \quad (10.2)$$

Прямым расчетом легко убедиться в том, что собственные векторы этой матрицы комплексны:

$$\vec{e}_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{i}{\sqrt{2}} \right), \vec{e}_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-i}{\sqrt{2}} \right) \quad (10.3)$$

Действительно,

$$\begin{aligned}\eta^{\Gamma} e_1^{\Gamma} &= \frac{(\eta^{(0)} + iA_{4,4}H)_{\Gamma}}{\sqrt{2}} e_x^{\Gamma} + \frac{(i\eta^{(0)} - A_{4,4}H)_{\Gamma}}{\sqrt{2}} e_y^{\Gamma} = (\eta^{(0)} + iA_{4,4}H)_{\Gamma} e_1^{\Gamma} \\ \eta^{\Gamma} e_2^{\Gamma} &= \frac{(\eta^{(0)} - iA_{4,4}H)_{\Gamma}}{\sqrt{2}} e_x^{\Gamma} + \frac{(-i\eta^{(0)} - A_{4,4}H)_{\Gamma}}{\sqrt{2}} e_y^{\Gamma} = (\eta^{(0)} - iA_{4,4}H)_{\Gamma} e_2^{\Gamma}\end{aligned}\quad (10.4)$$

Вспомним, что комплексные амплитуды (10.3) соответствуют циркулярной поляризации света.

Вообще говоря, при выводе (10.4) мы не делали никаких предположений о числе $A_{4,4}$. Наиболее просто понять ситуацию, когда и в отсутствии, и в присутствии магнитного поля отсутствует поглощение света. Тогда тензор η^{Γ} эрмитов, так что $\eta^{(0)}$ - вещественное число, а $A_{4,4}$ - мнимое. Свету, поляризованному по правому и левому кругу, соответствуют разные коэффициенты преломления, разные скорости. Это в конечном итоге приводит к эффекту Фарадея: *повороту плоскости поляризации в магнитном поле*.

Если в среде даже в отсутствии магнитного поля имеется поглощение ($\eta^{(0)}$ - комплексное), то комплексность $A_{4,4}$ при малых магнитных полях приведет к возникновению как разности скоростей распространения света с противоположными знаками циркулярной поляризации, так и к *циркулярному дихроизму*. Т.е. поглощение среды зависит от знака циркулярной поляризации света. Для одного знака поляризации он возрастает, а для другого - убывает.

ВОПРОС: Что произойдет, если $\eta^{(0)}$ вещественно, а $A_{4,4}$ - комплексно? На первый взгляд кажется, что для противоположных знаков циркулярной поляризации противоположным окажется знак коэффициента поглощения. Так ли это?

Кроме рассмотренной линейной поправки к диэлектрической проницаемости возникают и квадратичные по магнитному полю поправки (*эффект Коттона-Мутона*). Однако по своим симметричным свойствам они уже никак не отличаются от поправок, квадратичных по электрическому полю (т.е. от эффекта Керра).

В магнитооптике есть свой *эффект Керра*. Он заключается в том, что в магнитном поле коэффициент отражения зависит от знака циркулярной поляризации света.

ВОПРОС: В чем причина магнитооптического эффекта Керра?

2. Итак, включение магнитного поля в области прозрачности приводит к различию в значениях коэффициента преломления для световых волн противоположной циркулярной поляризации. Что произойдет, если на перпендикулярную магнитному полю поверхность такого кристалла направить линейно поляризованный монохроматический свет, распространяющийся вдоль магнитного поля. В кристалле будут распространяться две циркулярно поляризованные волны

$$\begin{aligned}\vec{E}_1 &= \text{Re}(\vec{e}_1 \exp\{i(k_1 z - \omega t + \varphi_1)\}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\vec{e}_x \cos(k_1 z - \omega t + \varphi_1) - \vec{e}_y \sin(k_1 z - \omega t + \varphi_1)] \\ \vec{E}_2 &= \text{Re}(\vec{e}_2 \exp\{i(k_2 z - \omega t + \varphi_2)\}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\vec{e}_x \cos(k_2 z - \omega t + \varphi_2) + \vec{e}_y \sin(k_2 z - \omega t + \varphi_2)]\end{aligned}\quad (10.5)$$

Пусть для определенности свет поляризованный вдоль оси x падает на поверхность $z = 0$ ($\varphi_1 = \varphi_2$). Тогда

$$\vec{E}_1 + \vec{E}_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\vec{e}_x \cos\left\{\frac{k_1 - k_2}{2} z\right\} - \vec{e}_y \sin\left\{\frac{k_1 - k_2}{2} z\right\} \right] \cos\left\{\frac{k_1 + k_2}{2} z - \omega t + \varphi\right\}\quad (10.6)$$

По мере продвижения вглубь кристалла плоскость линейной поляризации света поворачивается на угол

$$\alpha = \frac{k_1 - k_2}{2} z = \frac{\omega}{2c} \left(\frac{1}{n_+} - \frac{1}{n_-} \right) z = \frac{\omega}{2c} \left(\frac{n_- - n_+}{n_+ n_-} \right) z \approx \frac{-iA_{4,4}H}{2\eta^{(0)}} kx\quad (10.7)$$

Этот индуцированный магнитным полем поворот плоскости поляризации называется *эффектом Фарадея*.

Величина эффекта Фарадея линейно нарастает по мере увеличения магнитного поля и пройденного светом пути. Коэффициент в линейной зависимости

$$\beta = \frac{kA_{4,4}}{2\eta^{(0)}}\quad (10.8)$$

называется постоянной Верде.

Типичные значения этой постоянной сведены в таблице

Материал	Азот жидкий	Кислород жидкий	Вода	NaCl	ZnSl	$Y_{1.97}Bi_{1.03}Fe_5O_{12}$
$\lambda(A)$	5890	5890	5890	5890	5890	6330
Постоянная Верде Мин./Гс. См	$4.15 \cdot 10^{-3}$	$7.82 \cdot 10^{-3}$	$1.31 \cdot 10^{-2}$	$3.28 \cdot 10^{-2}$	$2.82 \cdot 10^{-1}$	Фарад.вр. 19300 град/см

Подчеркнем, что направление фарадеевского вращения задается магнитным полем и не зависит от знака волнового вектора световой волны. Если поместить сзади пластинки, в которой мы исследуем эффект Фарадея зеркало, так что луч света пробежит через нее два раза: вперед и назад - удвоится путь пройденный в среде и удвоится угол поворота плоскости поляризации.

Любопытно, что на основе эффекта Фарадея можно сделать оптический вентиль, пропускающий свет в одну сторону и непрозрачный в обратном направлении. Для этого надо собрать систему из двух последовательных линейных поляризаторов, пропускающих прямо – неособенный луч и выводящей вбок – особенный. Такие поляризаторы надо ориентировать под 45 градусов друг по отношению к друг-другу а между ними поместить ячейку Фарадея, вращающую плоскость поляризации на 45 градусов.

Вращение плоскости поляризации света в среде помещенной в магнитное поле представляется вполне естественным, если вспомнить о том, что магнитное поле само возникает в результате вращения - циркуляции электрического тока по рамке.

Однако, существуют материалы вращающие плоскость поляризации возникает даже в отсутствии магнитного поля. Не удивительным является возникновение такого эффекта в магнитных средах (ферро- и ферри магнетиках), магнитное упорядочение которых феноменологически связывается с существованием поля Вейсса, аналогичного по своим проявлениям магнитному полю.

Тут нельзя не упомянуть о средах с естественной оптической активностью, таких как кристаллы теллура, сахар и его раствор и т.п. Эти вещества также вращают плоскость поляризации, проходящего сквозь них света. Однако, в отличие от эффекта Фарадея направление вращения зависит от направления волнового вектора световой волны. Для $\vec{k} = \vec{k}_1$ и $\vec{k} = -\vec{k}_1$, прохождение одной и той же пластинки приведет к равным, но противоположным по знаку поворотам плоскости поляризации. Таким образом, помещая сзади исследуемой среды зеркало и измеряя поляризация света после прохождения среды вперед и назад, мы никакого поворота плоскости поляризации не обнаружим.

Эффект этот связан с волновым вектором световой волны, а точнее с *пространственной дисперсией диэлектрической проницаемости*. Дело в том, что на молекулярном уровне (для кристалла - на масштабах элементарной ячейки) в этих соединениях видна винтовая симметрия. Сам по себе винт, конечно, не связан ни с каким вращением. Но при его поступательном движении (или поступательном движении относительно винта) вращение становится совершенно естественным, а его знак зависит от направления движения и того, в какую сторону нанесена винтовая нарезка. Говорят, что фазовый переход в системе органических молекул, при котором на Земле их основная часть стала закрученной в одну сторону (при полном равноправии обоих винтов) следует трактовать как начало жизни.

Интересно то, что при повороте винта на 180 градусов направление его нарезки не изменяется. Поэтому, даже абсолютно хаотически, ориентированный раствор сахара в воде вращает плоскость поляризации проходящего через него света. (Это свойство используется для оптического определения концентрации сахара в растворе). В тоже время парамагнитная среда, содержащая громадное количество случайно ориентированных элементарных магнетиков в отсутствие магнитного поля никакого вращения плоскости поляризации не вызывает.

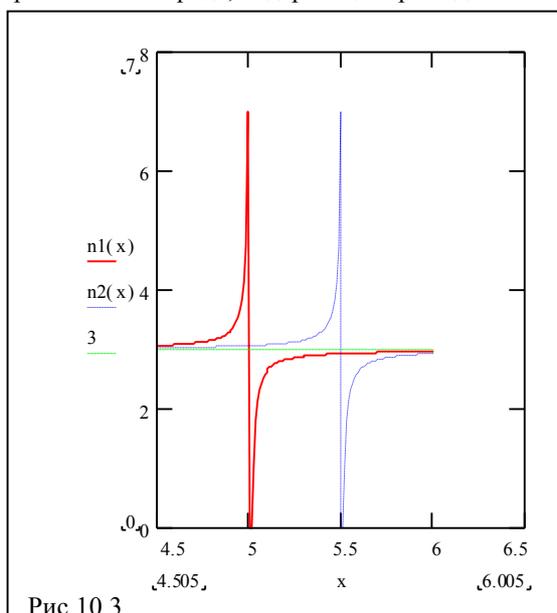
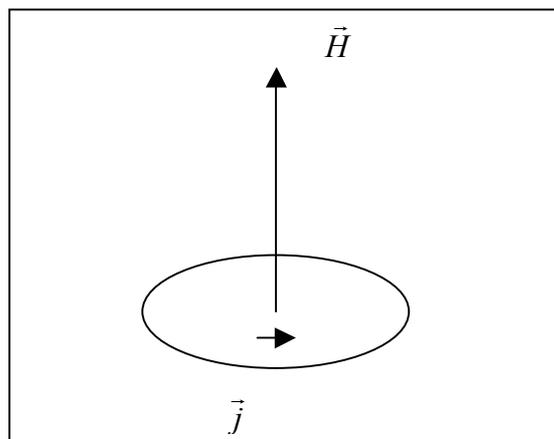


Рис 10.3

3. Магнитооптические эффекты обычно невелики. Однако, в ряде случаев значения константы Верде оказываются аномально большими. Простейшим примером такой аномалии является эффект Фарадея в окрестности узкой спектральной линии.

В силу эффекта Зеемана в присутствии магнитного поля такая линия расщепляется на несколько компонент, поляризованных по правому и левому кругу вокруг направления магнитного поля (σ^+ и σ^- поляризации), а также линейно поляризованной вдоль магнитного поля (π поляризация). Если свет распространяется вдоль магнитного поля, то важны лишь циркулярно поляризованные компоненты поглощения. Зная спектральное положение которых легко найти и частотную зависимость диэлектрической

проницаемости для излучения, поляризованного по правому или левому кругу

$$\varepsilon^+(\omega, H) \approx \tilde{\varepsilon} + \frac{f}{\omega_+ - \omega} = \tilde{\varepsilon} + \frac{f}{(\omega_0 + \mu g H) - \omega}$$

$$\varepsilon^-(\omega, H) \approx \tilde{\varepsilon} + \frac{f}{\omega_- - \omega} = \tilde{\varepsilon} + \frac{f}{(\omega_0 - \mu g H) - \omega}; \quad (10.9)$$

$$\varepsilon^+(\omega, 0) = \varepsilon^-(\omega, 0)$$

На рисунке 10.3 приведена спектральная зависимость коэффициента преломления для света поляризованного по правому и левому кругу в окрестности узкой спектральной линии, испытывающей эффект Зеемана. В окрестности узкой

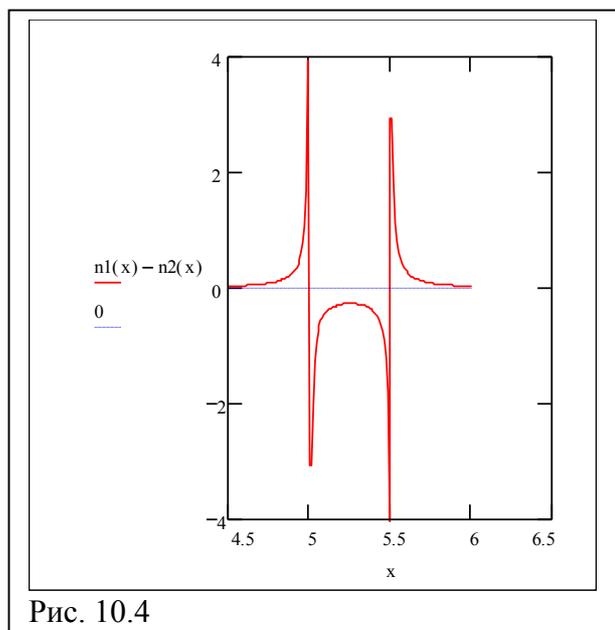


Рис. 10.4

линии поглощения вещественная часть диэлектрической проницаемости испытывает очень сильные изменения. Соответственно сильно изменяется коэффициент преломления. Поскольку в магнитном поле пики поглощения для света поляризованного по правому и левому кругу раздвинуты, появляется область частот, где коэффициенты преломления значительно различаются друг от друга (рис.10.4). В этой области должно возникнуть аномально большое вращение плоскости поляризации проходящего света. Хотя раздвижка линий поглощения линейно зависит от величины магнитного поля, величина угла поворота быстро становится нелинейной функцией H .

4. Изменение формы края фундаментальной полосы поглощения под действием магнитного поля определяется двумя факторами: 1) возникновением уровней Ландау и 2) зеемановским расщеплением спиновых подуровней носителей заряда.

В результате квантования в магнитном поле движение носителей заряда на каждом уровне Ландау одномерно. Поэтому, как мы уже видели ранее, коэффициент поглощения должен быть обратно пропорционален $\sqrt{\omega - \omega_{n,m}}$, где $\omega_{n,m}$ - минимальная частота перехода между уровнями Ландау зоны проводимости (с номером n) и валентной зоны (с номером m).

В случае простой зонной структуры оптические переходы оказываются возможными лишь между уровнями Ландау в зоне проводимости и валентной зоне с одинаковыми номерами. Теоретическая картинка для формы края фундаментальной полосы поглощения представлена на рис.10.5. Экспериментальная карта конечно существенно сложнее. Под каждой полосой поглощения появляются линии диамагнитного экситона, сложная структура валентной зоны приводит к тому что переходы возможны уже между уровнями Ландау с разными номерами, образованными состояниями разных подзон. Да и закон дисперсии на уровне Ландау оказывается не параболическим.

Измеряя расстояние между осцилляциями можно оценить приведенную массу электрона и дырки.

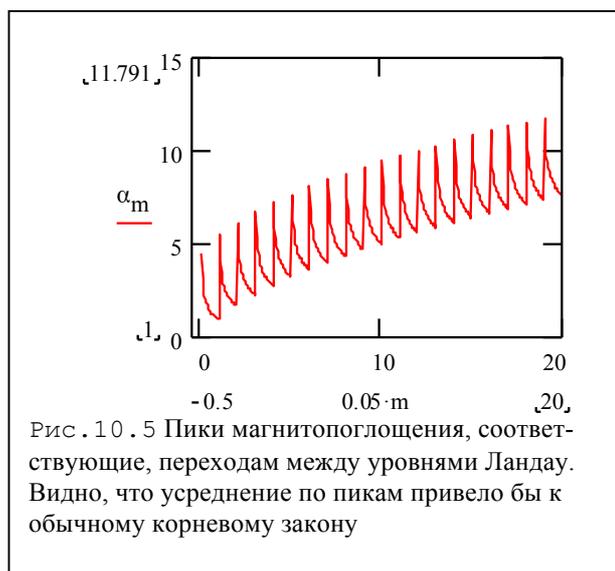


Рис. 10.5 Пики магнитопоглощения, соответствующие, переходам между уровнями Ландау. Видно, что усреднение по пикам привело бы к обычному корневому закону

ВОПРОС: Что еще можно узнать о зонной картинке из этих измерений?

ВОПРОС: Как записать количественный критерий появления осцилляций коэффициента поглощения?

5. Кроме квантования Ландау на оптические спектры полупроводника существенно влияет и зеемановское расщепление спиновых подуровней. Например, для свободного электрона диамагнитный сдвиг нулевого уровня Ландау для одной из проекций спина на магнитное поле полностью компенсируется парамагнитным заглублением уровня. Однако наиболее ярко спиновые расщепления состояний носителей проявляются в магнитных и полумагнитных полупроводниках. Примером таких полупроводников являются халькогениды редкоземельных металлов (EuO, EuS и т.д.) твердые растворы переходных металлов (SvMn)Te, (HgMn)Te и пр. Все эти соединения содержат ионы с частично заполненными глубокими d- или f-оболочками. Электроны с этих оболочек практически не участ-

вуют в проводимости, но обменным образом взаимодействуют с электронами из зоны проводимости и дырками из валентной зоны.

Обменное взаимодействие каждого носителя из зоны проводимости или валентной дырки с электронами локализованными на магнитной оболочке обычно описывается гамильтонианом Кондо

$$H_{s-d} = -\alpha \left(\vec{S} \vec{J} \right) \delta \left(\vec{r} - \vec{R} \right) \quad (10.10)$$

Энергия обменного взаимодействия прямо пропорциональна скалярному произведению спинов носителей заряда \vec{S} и электронов, локализованных на магнитной оболочке, \vec{J} , а также вероятности обнаружить носитель в элементарной ячейке, содержащей магнитные ионы.

Обычно длина волны носителя велика по сравнению с расстоянием между магнитными примесями. Тогда приближенно можно говорить о том, что на спин носителя действует классическое обменное поле $B(\vec{r}) = -\alpha \langle \vec{J} N \rangle(\vec{r})$ где $\langle \vec{J} N \rangle(\vec{r})$ - плотность спина магнитных ионов в точке \vec{r} . Размер этой точки уже велик по сравнению с постоянной решетки но мал или порядка длины волны электрона;

Чтобы понять характерные порядки величин эффектов, о которых идет речь, скажем, что при полной стопроцентной поляризации магнитных ионов в твердом растворе $Cd_{0.9}Mn_{0.1}Te$, расщепление спиновых уровней электронов проводимости будет составлять около 50 meV, а для дырки в валентной зоне это расщепление достигает 200 meV. Достичь таких высоких значений поляризации нелегко, из-за антиферромагнитного взаимодействия между соседними магнитными ионами. Тем не менее даже поляризовав во внешнем магнитном поле систему магнитных ионов всего на 10% мы получим величины зеемановского расщепления спиновых уровней носителя порядка 10 meV. Для получения такого же расщепления в обычном немагнитном полупроводнике пришлось бы прикладывать поля порядка 100 тесл.

Гигантское зеемановское расщепление спиновых уровней носителей приводит к возникновению гигантских магнитооптических эффектов. В настоящее время идет много разговоров о создании на базе полумагнитных и обычных полупроводников устройств, сочетающих в себе в одном интегральном блоке и сильные магнитные свойства и широкий спектр электрических свойств, присущих полупроводниковым устройствам. Накопленный багаж знаний делает создание таких приборов вполне реальным. Даже придумали новое название – спинтроника. Возможно здесь и произойдет новый прорыв, но пока что имеются лишь действующие модели первых спинтронных устройств гетероструктур. комбинирующих магнитные и немагнитные полупроводники;

Флуктуации намагниченности системы магнитных ионов приводят к образованию хвостов на краю фундаментальной полосы поглощения. Однако, насколько мне известно, такой развернутой теории хвостов поглощения на магнитных флуктуациях, как теория Шкловского и Эфроса до сих пор не создано. Подробнее со свойствами полумагнитных и магнитных полупроводников можно ознакомиться по монографиям *Матисс и Метфессель "Магнитные полупроводники"*, а также по сборников обзоров под редакцией *Фурдины и Коссута "Полумагнитные полупроводники" [Solid state Electronics 37, 1994]*.

ВОПРОСЫ,

1. Опишите спектральную зависимость эффекта Фарадея в окрестности края фундаментальной полосы поглощения полумагнитного полупроводника;

(10.11)

$$\begin{aligned} \chi^{+'}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^{+'}(\xi)}{\xi - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi^{+'}(\xi + \omega_g + \gamma H)}{\xi + \omega_g + \gamma H - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{a\sqrt{\xi}}{\xi + \omega_g + \gamma H - \omega} d\xi \approx \\ &\approx -\frac{\gamma Ha}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\xi}}{[\xi + \omega_g - \omega]^2} d\xi = -\frac{\gamma Ha}{\pi\sqrt{\omega_g - \omega}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t}}{[t+1]^2} dt \\ \chi^{-'}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^{-'}(\xi)}{\xi - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi^{-'}(\xi + \omega_g - \gamma H)}{\xi + \omega_g - \gamma H - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{a\sqrt{\xi}}{\xi + \omega_g - \gamma H - \omega} d\xi \approx \\ &\approx \frac{\gamma Ha}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\xi}}{[\xi + \omega_g - \omega]^2} d\xi = \frac{\gamma Ha}{\pi\sqrt{\omega_g - \omega}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t}}{[t+1]^2} dt \\ \chi^{+'}(\omega) - \chi^{-'}(\omega) &= -\frac{2\gamma Ha}{\pi\sqrt{\omega_g - \omega}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t}}{[t+1]^2} dt \end{aligned}$$

ЛЕКЦИЯ 10. ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ ТОКА.

1. Эффект Мосса-Бурштейна
2. Диэлектрическая проницаемость и проводимость среды.
3. Теория Друде
4. Циклотронный резонанс
5. Эффект Фарадея на свободных носителях.
6. Внутризонные оптические переходы.

До сих пор мы рассматривали поглощение света в полупроводнике с полностью заполненной зоной валентной зоной и пустой зоной проводимости. К чему приведет появление свободных носителей?

1. Предположим, что электронов (или дырок) так много, что электронный (дырочный) газ вырожден. Тогда, как видно из рисунка 10.1. Минимальная энергия, с которой может происходить межзонный переход превосходит ширину запрещенной зоны

$$E'_g = E_g + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2\mu} \quad (10.1)$$

где k_F - волновой вектора электрона (дырки) на уровне Ферми, а μ - приведенная масса электрона и дырки. Надеюсь, для обоих случаев (вырожденных идеальных электронного и дырочного газов) вы эту формулу можете вывести без особого труда. Обусловленный легированием сдвиг края фундаментальной полосы поглощения называется *эффектом Мосса-Бурштейна*. Эффект наблюдается экспериментально и имеет простое теоретическое обоснование.

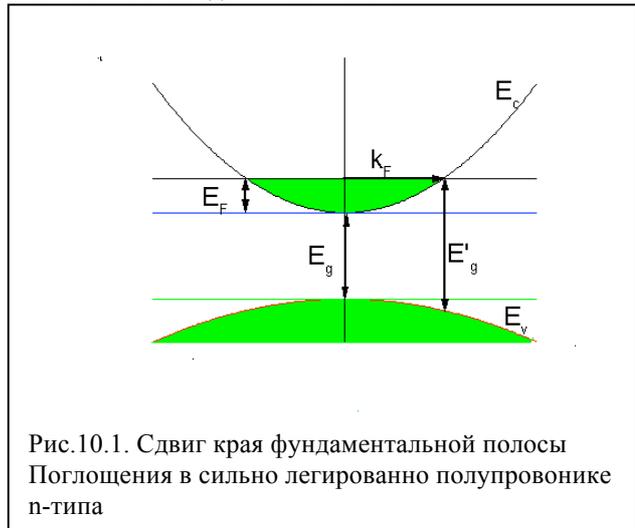


Рис.10.1. Сдвиг края фундаментальной полосы Поглощения в сильно легированно полупроводнике n-типа

Более детальные исследования показали, что все обстоит не так просто. Например, выясняется, что при легировании уменьшается ширина запрещенной зоны. Тем не менее экситонная линия (до тех пор пока ее можно наблюдать) почти не сдвигается.¹

2. Появление свободных носителей проявляется не только в сдвиге края фундаментальной полосы поглощения. Появляется поглощение в области низких частот. Даже постоянное электрическое поле, приложенное к газу свободных электронов и дырок вызывает постоянный электрический ток и, соответственно, поглощение. Поэтому сейчас мы обратимся к области низких частот электромагнитного поля.

До сих пор мы успешно эксплуатировали представления о комплексной диэлектрической проницаемости среды. Вещественная часть этого тензора описывала преломление света, а мнимая – его поглощение. Однако для среды с конечной проводимостью σ аппарат диэлектрической проницаемости оказывается неудобным в обла-

сти низких частот. При $\omega \rightarrow 0$ мнимая часть диэлектрической проницаемости расходится $\text{Im}(\epsilon) = \frac{4\pi\sigma}{\omega}$. У

части ученых, занимавшихся физикой металлов, тут же возникло желание ввести комплексную проводимость

$\sigma = -i \frac{\omega\epsilon}{4\pi}$. Всюду, (кроме области нулевых частот) представления о комплексных диэлектрической прони-

цаемости и проводимости дают одни и те же результаты. Просто в одном из этих подходов базовым является поляризация среды (что удобно для диэлектриков), а в другом – электрический ток (более естественно для проводников).

Ниже мы будем исследовать оптические явления, связанные с присутствием в полупроводнике свободных носителей заряда и их электрических токов. Поэтому сейчас у нас на первый план выйдет комплексный тензор проводимости.

¹ Разобраться во всей этой физике многих тел нелегко. Как часто бывает в физике, сперва не понятно почему должны возникать отличия от имеющейся модели, а через некоторое время – почему столь простая модель что-то описывает. Однако, для начала, пожалуй, достаточно. Дальше вам придется двигаться по мере возникновения к тому необходимости.

2. Более ста лет тому назад (в 1900 году) Друде создал простую и наглядную модель, позволяющую весьма точно описывать поведение в электрическом и магнитном поле проводников. Он предложил описывать среднюю скорость электронов в металле с помощью второго закона Ньютона, содержащего кроме внешнего электрического и магнитного полей, силу вязкого трения, ответственную за электрическое сопротивление.

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{e}{m} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{H}] \right) - \frac{\vec{v}}{\tau} \quad (10.2)$$

Следует ясно отдавать себе отчет в том что даже в рамках подхода классической механики ни какого вязкого трения на каждый отдельный электрон не действует! Он, этот отдельный электрон, непрерывно соударяется с дефектами и другими электронами и движется хаотически. Лишь *усреднение по всему макроскопически большому ансамблю электронов* позволяет ввести вязкое трение в уравнение для *средней скорости* электронов. Для начала положим внешнее магнитное поле равным нулю и будем считать, что электрическое поле осциллирует на частоте ω . Тогда

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \vec{v}(t) = -e\vec{E} \cos(\omega t) \Leftrightarrow \text{Re} m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \vec{v}(t) = -e\vec{E} \text{Re} e^{-i\omega t} \quad (10.3)$$

$$\vec{v}(t) = \vec{v} e^{-i\omega t} \quad (10.4)$$

$$m \left(-i\omega + \frac{1}{\tau} \right) \vec{v} = -e\vec{E} \quad (10.5)$$

$$\vec{v}(\omega) = \frac{-e\vec{E}\tau}{m(1-i\omega\tau)} = \frac{e\vec{E}\tau}{m} \frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2} \quad (10.6)$$

Плотность электрического тока

$$\vec{j}(\omega) = \partial \vec{E} = N_e e \vec{v} \quad (10.7)$$

Отсюда

$$\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m} \frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2} = \sigma_0 \frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2} \quad (10.8)$$

$$\sigma_0 = \frac{N_e e^2 \tau}{m} = N_e e \mu$$

где N_e – концентрация электронов, а μ - подвижность.

На высоких частотах вещественная часть проводимости стремится к нулю как $\omega^{-2} \tau^{-2}$. То есть с ростом времени релаксации поглощение среды убывает. Действительно, если период внешнего поля становится много меньше времени между столкновениями, релаксация в среде становится несущественной. *Это - фундаментальное свойство – нет релаксации, нет поглощения.*

Диэлектрическую проницаемость можно представить как

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{4\pi\sigma_0\tau}{1+(\omega\tau)^2} + i \frac{4\pi\sigma_0}{\omega[1+(\omega\tau)^2]} \quad (10.9)$$

$$\text{Re} \varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 + \omega^2} \right); \quad \text{Im} \varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \frac{\omega_0}{\omega} \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 + \omega^2}$$

где $\omega_0 = 1/\tau$ - характерная частота столкновений с нерегулярностями решетки, а $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi N_e e^2}{\varepsilon m}}$ - плазменная частота.

ВОПРОС: Обратите внимание на то, что для достаточно длинных времен релаксации в области низких частот электромагнитного поля вещественная часть диэлектрической проницаемости становится отрицательной. Что это значит с точки зрения оптики? Какие качественно новые особенности возникают при распространении света в среде с $\varepsilon = 0$? (то есть когда $\omega \approx \omega_p$). Вспомните, что такое поверхностные волны? и плазмоны?

Частотная зависимость коэффициента поглощения на свободных носителях дается формулой

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c} = \frac{4\pi}{nc} \operatorname{Re} \sigma = \frac{4\pi\sigma_0}{nc(1 + (\omega\tau)^2)} \quad (10.10)$$

Для достаточно высоких частот $\tau^{-1} \ll \omega^{-2} \ll \omega_g$ - $\alpha \propto \omega^{-2} \propto \lambda^2$.

Естественно, что модель Друде хорошо работает при достаточно высоких температурах, когда энергия поглощаемого кванта электромагнитного поля $\hbar\omega \ll kT$. Удивительно, но эта классическая модель хорошо описывает и свойства сильно вырожденного электронного газа, когда $\hbar\omega \ll \varepsilon_F$.

Если частота света столь велика, что указанные неравенства не выполняются, расчет поглощения требует уже более детального подхода, базирующегося на квантовомеханической теории возмущений. Об этих исследованиях можно узнать из обзорной статьи. Об этих исследованиях можно узнать из обзорной статьи [Fan H. *In Semiconductors and Semimetals*, под редакцией R.K. Willardson, A.C. Beer. – New York, London, 1967, v.3, chap.9].

3. Посмотрим теперь, к каким изменениям приведет введение дополнительно постоянного магнитного поля. Как мы уже разбирали ранее должен возникнуть эффект Фарадея, который мы рассматривали как проявление эффекта Зеемана. В случае свободных носителей эффект Фарадея связан с воздействием магнитного поля на орбитальное движение электронов. В отсутствие внешнего поля H , характерная частота этого движения равна нулю.

А в присутствии постоянного магнитного поля векторное уравнение (10.2) свести к одному скалярному уравнению не легко

$$m \left(\frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} \right) = -eE\vec{e}e^{-i\omega t} - \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]. \quad (10.11)$$

где вектор \vec{e} - единичный вектор поляризации переменного электрического поля. Мы догадываемся, что самые интересные вещи связаны с тем, что в магнитном поле свободный электрон движется по спирали. Поэтому наиболее интересные явления будут иметь место, когда электрическое поле имеет круговую поляризацию –

вращается вокруг \vec{H} . Поэтому сразу же положим, что магнитное поле направлено вдоль оси z , а $\vec{e} = \vec{e}_x + i\gamma\vec{e}_y$, $\gamma = \pm 1$. Легко убедиться в том, что в зависимости от знака γ

$\operatorname{Re}(\vec{e}e^{-i\omega t}) = \vec{e}_x \cos(\omega t) - \gamma\vec{e}_y \sin(\omega t)$ электрическое поле вращается в плоскости xu по ($\gamma = 1$) или против ($\gamma = -1$) часовой стрелки.

Перепишем теперь (10.10) покомпонентно:

$$\begin{cases} \frac{m}{\tau}(1 - i\omega\tau)v_x = -eE - \frac{e}{c}Hv_y \\ \frac{m}{\tau}(1 - i\omega\tau)v_y = -i\gamma eE + \frac{e}{c}Hv_x \end{cases} \quad (10.12)$$

$$j_x = \sigma_0 \frac{1 - i(\omega + \gamma\omega_c)\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} E = \tilde{\sigma}E \quad (10.13)$$

где

$$\omega_c = \frac{eH}{mc} \quad (10.14)$$

циклотронная частота. Проводимость $\tilde{\sigma}$ является одной из компонент (круговых компонент) тензора проводимости. В ней естественно выделить явно вещественную и мнимую части

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \tilde{\sigma} &= \sigma_0 \frac{1 + (\omega_c \pm \omega)^2 \tau^2}{[1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau^2]^2 + 4\omega^2 \tau^2} \\ \operatorname{Im} \tilde{\sigma} &= \sigma_0 \frac{(\omega \pm \omega_c)(\omega_c^2 - \omega^2) \tau^3 - (\omega \mp \omega_c) \tau}{[1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau^2]^2 + 4\omega^2 \tau^2} \end{aligned} \quad (10.15)$$

Фактически нами получены уравнения *циклотронного резонанса*. Чтобы резонанс был достаточно ярко выражен, необходимо выполнение условия слабого затухания $\omega_c\tau \gg 1$. Тогда, в зависимости от знака циркулярной поляризации электрического поля в резонансе $\omega \approx \omega_c$.

$$\operatorname{Re} \tilde{\sigma} = \begin{cases} \sigma_0 & \gamma = 1 \\ \frac{\sigma_0}{4\omega_c^2 \tau^2} \approx 0 & \gamma = -1 \end{cases}$$

Ну а чем больше реальная часть проводимости, тем больше поглощаемая мощность. Невооруженным взглядом видим что в одном знаке круговой поляризации поглощение есть и сильное, а в другом его нет. Формально можно было бы сказать что для обратного знака поляризации резонанс возникнет на отрицательной частоте. Ситуация начинает формально и по сути напоминать эффект Фарадея на зеемановском дублете. В магнитном поле линии поглощения для право- и лево- циркулярно поляризованного света раздвигаются, и в силу соотношений Крамерса –Кронига возникает разность коэффициентов преломления для этих поляризаций.

4. Теперь перейдем к конкретному расчету эффекта Фарадея.

Угол поворота плоскости линейной поляризации в эффекте Фарадея выражается через разность коэффициентов преломления для света поляризованного по правому и левому кругу:

$$\theta = \frac{\omega d}{2c} (n_+ - n_-)$$

$$(n + i\kappa)^2 = \varepsilon - \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Im} \sigma + i \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Re} \sigma$$

$$\varepsilon - \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Im} \sigma = n^2 - \kappa^2 \approx n^2$$

$$2n\kappa = \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Re} \sigma$$

$$n_\gamma = \sqrt{\varepsilon - \frac{4\pi}{\omega} \sigma_\gamma}$$

$$n_+ - n_- = \frac{4\pi(\operatorname{Im} \sigma_- - \operatorname{Im} \sigma_+)}{\omega(n_+ + n_-)}$$

Эффект Фарадея обычно исследуется в области с малым поглощением. Тогда можно набрать большую оптическую длину и получить заметный угол поворота. То есть $\omega \gg \omega_c$. При этом

$$\operatorname{Im} \sigma_- - \operatorname{Im} \sigma_+ = \sigma_0 \frac{2\omega_c}{\omega^2 \tau^2}$$

Отсюда

$$\theta = \frac{2\pi e^3 N_e H d}{c^2 \bar{n} \omega^2 m^2}$$

$$\bar{n} = \frac{1}{2} (n_+ + n_-)$$

Если Вам удалось измерить концентрацию электронов, длину образца, величину магнитного поля, средний коэффициент преломления, частоту света и конечно же угол поворота, то по этой формуле вы сможете определить эффективную массу носителей.

ЗАДАЧИ

Мы в этой лекции упорно следовали книге А.И. Ансельма "Введение в теорию полупроводников", где с самого начала введены поляризации, позволяющие получить одно линейное уравнение связывающее амплитуду электрического поля и амплитуду скорости электрона или тока. Вообще говоря, это не всегда удобно. Иногда гораздо удобнее иметь дело с недиагональным тензором проводимости электронного газа в магнитном поле.

Найдите выражения для компонент этого тензора в модели Друде

А как это тензор должен бы выглядеть в условиях квантования Ландау?

5. Какие особенности следует ожидать от алмазоподобного полупроводника р-типа со сложной валентной зоной?

Именно исследование циклотронного резонанса в алмазоподобных полупроводниках с дырочной проводимостью показало, что в этих соединениях сосуществуют дырки с совершенно разными массами.

(см. приложение к учебнику М. Кардона "Основы теории полупроводников" M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors* – [проверить название!](#))

Наличие подзон легких и тяжелых дырок открывает возможность для межподзонных переходов. Вообще-то матричный элемент между различными состояниями вершины валентной зоны равен нулю, так что мы имеем ситуацию с прямыми запрещенными переходами. В отличие от лекции 1:

1) расстояние между состояниями подзон легких и тяжелых дырок увеличивается не обратно пропорционально приведенной массе $\mu_{lh} = \frac{m_l m_h}{m_l + m_h}$, а

$$\text{странной величине } \tilde{\mu}_{lh} = \frac{m_l m_h}{m_l - m_h}.$$

2) Минимальная энергия таких переходов

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2 k_{F,lh}^2}{2\tilde{\mu}_{lh}}$$

3) максимальная

$$E_{\max} = \frac{\hbar^2 k_{F,hh}^2}{2\tilde{\mu}_{lh}}$$

где $k_{F,lh}$ и $k_{F,hh}$ - значения волновых векторов легких и тяжелых дырок на поверхности Ферми.

Матричный элемент оптического перехода между состояниями подзон легких и тяжелых дырок можно найти в рамках модели Кейна, в рамках которой при конечных значениях волнового вектора состояния подзоны легких дырок смешиваются с состояниями зоны проводимости.

$$u_{lh}^{\mathbf{r}}(k) \approx u_{lh}(0) + u_c(0) \frac{i\hbar \langle c | \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{r} \\ \mathbf{p} & \mathbf{k} \end{pmatrix} | lh \rangle}{m_0 E_g}$$

Поскольку переход запрещен, то при расчете его вероятности следует вспомнить и о квадратичных поправках по векторному потенциалу световой волны.

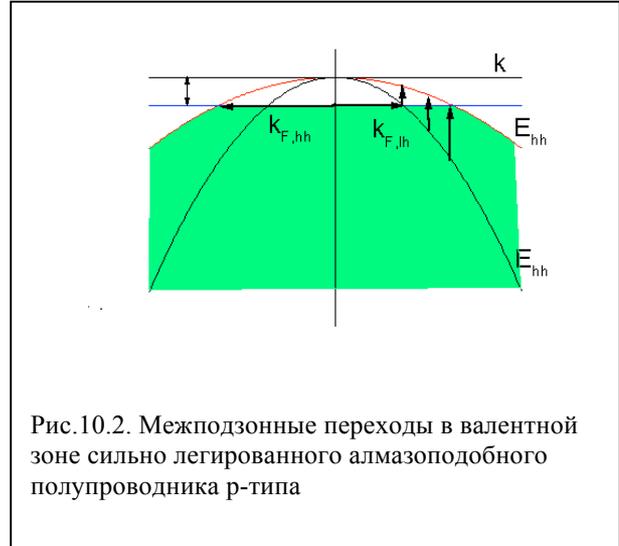
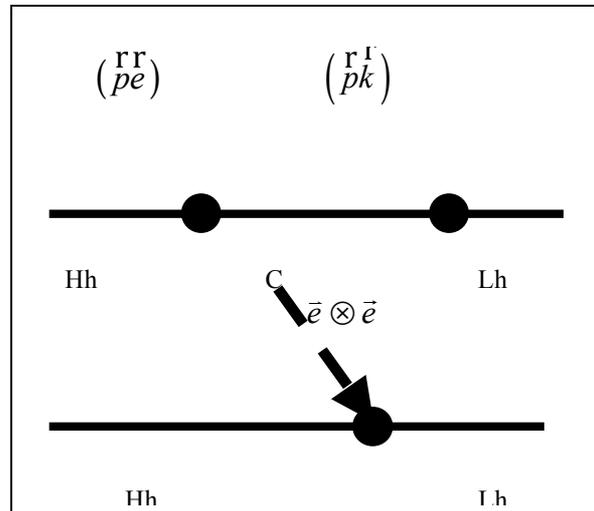


Рис.10.2. Межподзонные переходы в валентной зоне сильно легированного алмазоподобного полупроводника p-типа



ЛЕКЦИЯ 11. ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА КОЛЕБАНИЯМИ РЕШЕТКИ. ПОЛЯРИТОНЫ

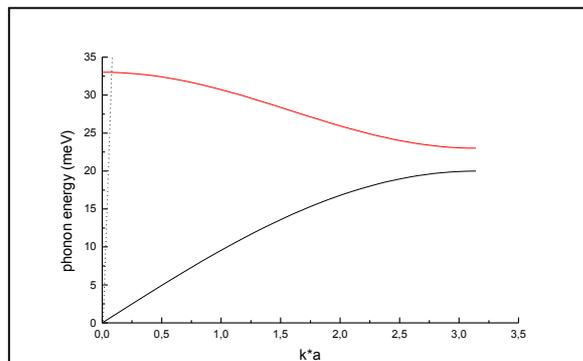
1. Поглощение света колебаниями решетки
 - а) электронный и решеточный вклады в диэлектрическую проницаемость
 - б) поглощение света решеткой
2. Поляритоны в больших, объемных образцах.
3. Проблемы дополнительных граничных условий.
4. Поляритоны в квантоворазмерных структурах и прочие новые веяния.

1. До сих пор мы с вами рассматривали только поглощение света, связанное с переходами между электронными уровнями. Как мы видели, электронная составляющая в поглощении может быть существенна в очень широком диапазоне частот: от предельно низких, соответствующих поглощению на свободных носителях, до частот, соответствующих энергии в десятки электрон-вольт. Тем не менее электронными переходами конечно же не исчерпывается все многообразие спектров поглощения твердого тела. В инфракрасной области спектра поглощение света может быть связано с колебаниями ионов кристаллической решетки. Поскольку ионы не электронейтральны, то тепловые колебания приводят к возникновению колебаний плотности дипольного момента, которая взаимодействует с электрическим полем световой волны. Характерные энергии фононов в полупроводниках не превосходят нескольких десятков meV .

Как вы конечно помните, фононы бывают двух типов – акустические и оптические. Прямое превращение фотона в акустический фонон в идеальном кристалле невозможно. Дело в том, что скорость света (c) много больше скорости звука (v), и одновременно удовлетворить законы сохранения энергии ($\hbar\omega_l = \hbar\omega_s$) и

импульса $k_l = \frac{\omega_l}{c} = k_s = \frac{\omega_s}{v}$ не удастся.

Поэтому в поглощении света на акустических колебаниях играть роль могут лишь многофононные процессы. А вот оптические фононы вполне могут участвовать в поглощении. Как видно из рисунка прямой процесс преобразования фотона в оптический фонон не противоречит обоим законам сохранения. Более того, в полярных кристаллах не возникает проблем и с конкретным механизмом возбуждения оптических фононов. Им соответствуют колебания плотности дипольного момента, которые взаимодействуют с электрическим полем световой волны. Отметим, что электромагнитная волна поперечна, а фононы бывают и продольные и поперечные. Нетрудно сообразить, что со светом напрямую могут взаимодействовать только поперечные фононы.



Грубая структура фононного спектра GaAs
Изображены ветви акустических и оптических колебаний, но различия между продольными и поперечными фононами опущены
Пунктиром показана дисперсия фотонов

2. Если волновой вектор и энергия поперечного фотона и фонона совпадают, то за счет взаимодействия света с дипольными моментами решетки оказывается возможным превращение фотона в фонон – поглощение фотонов. Однако на самом деле все обстоит не так просто. Фотон может взаимодействовать только с фононом с тем же самым волновым вектором. Если по каким-то причинам время жизни такого фонона *мало*, так что за это время вероятность превращения фотона в фонон много меньше единицы, мы можем использовать теорию возмущения и говорить о поглощении фотонов. Если же упругие и неупругие каналы релаксации фононов практически отсутствуют, то есть взаимодействие между фотоном и фононом может происходить *достаточно долго*, то наряду с процессом превращения фотона в фонон следует рассматривать и обратный процесс, когда фонон превращается в фотон. Иными словами приходится говорить о том, что часть времени возбуждение живет в кристалле как фотон, а часть времени – как фонон. Такой подход не является до конца ясным, т.к. описанное состояние не является стационарным. А каковы же будут стационарные состояния в такой системе, т.е. каковы будут элементарные возбуждения? В подобной ситуации принято говорить о возникновении смешанной фотонно-фононной моды, называемой *поляритоном*.

Элегантное квантовомеханическое описание поляритонного состояния вы можете найти в книге «Квантовая теория твердого тела» Ч.Киттеля.

Мы же здесь будем следовать квазиклассическому описанию поляритонной ветви, приводимому во многих учебниках. Подробно с ним можно познакомиться в книге А.И. Ансельма "Введение в теорию полупроводников". Ниже мы обсудим недостатки выбранного подхода.

Давайте начнем с уравнения для длинноволновой оптической ветви колебаний кристалла (с двумя атомами в элементарной ячейке), описывающего классическое движение разноименных ионов друг относительно друга

$$\frac{d^2 \vec{w}}{dt^2} = -\omega_0^2 \vec{w} + \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi}} \vec{E} \quad (11.1)$$

где $\vec{w} = \sqrt{N_0 m_r} \vec{s}$ - «нормальное» смещение ионов, \vec{s} - смещение положительного иона относительно отрицательного, N_0 - число ячеек в единице объема кристалла, m_r - приведенная масса ионов,

$$\omega_0^2 = \frac{\kappa}{m_r} - \frac{4\pi N_0 e^* (\epsilon_\infty + 2)}{9m_r} - \text{частота механических колебаний ионов, } \kappa - \text{коэффициент квазиупругой силы}$$

взаимодействия ионов, e^* - эффективный заряд ионов, ϵ_0 и ϵ_∞ статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости, \vec{E} - среднее электрическое поле в кристалле.

При этом вектор поляризации среды имеет вид

$$\vec{P} = \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi}} \vec{w} + \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \vec{E}. \quad (11.2)$$

Система (11.1) и (11.2) выглядит крайне громоздко. Опустить в этих уравнениях ничего нельзя, потому что все слагаемые одного порядка и в дальнейшем многие части этих выражений будут взаимнокомпенсироваться. Более того из этих формул можно получить удивительный результат. Если волновой вектор фонона устремит к нулю, то продольные и поперечные оптические фононы имеют разную частоту

$$\omega_t = \omega_0, \quad \omega_l = \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}} \quad (11.3)$$

Но ведь каждому здравомыслящему человеку очевидно, что если волновой вектор равен нулю, то отличить продольный фонон от поперечного невозможно! При выводе уравнения (11.1) явно наделали каких-то предположений и допущений, которые привели в пределе к абсурдному результату. ВОПРОС: Каких именно?

Далее, система (11.1) и (11.2) незамкнута. В ней три неизвестные величины, а уравнений всего два. Воспользуемся уравнениями Максвелла, чтобы найти недостающую связь

$$\text{div} \vec{D} = \text{div} (\vec{E} + 4\pi \vec{P}) = 0$$

$$\text{div} \vec{H} = 0$$

$$\text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{H}} \quad (11.4)$$

$$\text{rot} \vec{H} = \frac{1}{c} \dot{\vec{D}} = \frac{1}{c} (\dot{\vec{E}} + 4\pi \dot{\vec{P}})$$

или считая что мы имеем дело с плоской волной $\exp\{i[(\vec{k}\vec{r}) - \omega t]\}$ находим

$$\begin{aligned}
-\omega^2 \vec{w} &= -\omega_0^2 \vec{w} + \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi}} \vec{E} & a \\
(\vec{k}(\vec{E} + 4\pi\vec{P})) &= 0 & b \\
(\vec{k}\vec{H}) &= 0 & c \\
[\vec{k} \times \vec{E}] &= \frac{\omega}{c} \vec{H} & d \\
[\vec{k} \times \vec{H}] &= -\frac{\omega}{c} (\vec{E} + 4\pi\vec{P}) & e
\end{aligned} \tag{11.5}$$

Тогда из (9.7. а)

$$\vec{w} = \frac{\omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi}} \vec{E} \tag{11.6}$$

$$\vec{P} = \left\{ \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi} + \frac{\varepsilon_\infty - 1}{4\pi} \right\} \vec{E} \tag{11.7}$$

$$(\vec{k}\vec{E}) \left(\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi} + \varepsilon_\infty \right) = 0 \tag{11.8}$$

Одно решение очевидно

$$\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{4\pi} + \varepsilon_\infty = 0 \tag{11.9}$$

и

$$\omega^2 = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} \right) \omega_0^2 = \omega_l^2 \tag{11.10}$$

Это продольные фононы.

Ну а для поперечных волн $kE = \frac{\omega}{c} H$ Подставляя эту формулу и

(11.7) в (11.5.е) получаем

$$\frac{c^2 k^2}{\omega^2} = \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) + \varepsilon_\infty \tag{11.11}$$

Откуда

$$\omega^2 = \frac{\varepsilon_0 \omega_0^2 + c^2 k^2 \pm \sqrt{(\varepsilon_0 \omega_0^2 + c^2 k^2)^2 - 4\varepsilon_\infty \omega_0^2 c^2 k^2}}{2\varepsilon_\infty} \tag{11.12}$$

И так возникло два решения. Нетрудно увидеть, что при малых значениях волнового вектора частота одной из ветвей стремится к частоте продольного фонона. $\omega_1 \approx \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} + (kc)^2 \left(1 - \frac{2}{\varepsilon_0}\right)}$

А вторая частота – к частоте фотона с данным волновым вектором в среде (рис.11.2). $\omega_2 \approx \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon_0}}$.

Совпадение частот продольного и поперечного фононов при $k=0$ радует, так как в этом случае их нельзя различить. При больших значениях волнового вектора мы опять имеем фотон с другой скоростью света $\omega_\infty \approx \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon_\infty}}$

и поперечный фонон, но уже с частотой $\omega_l \equiv \omega_0$. Ну а в промежуточной области эти ветви перемешиваются. Фотонная ветвь переходит в фононную, а фононная в фотонную. Такую ситуацию в физике называют антипересечением.

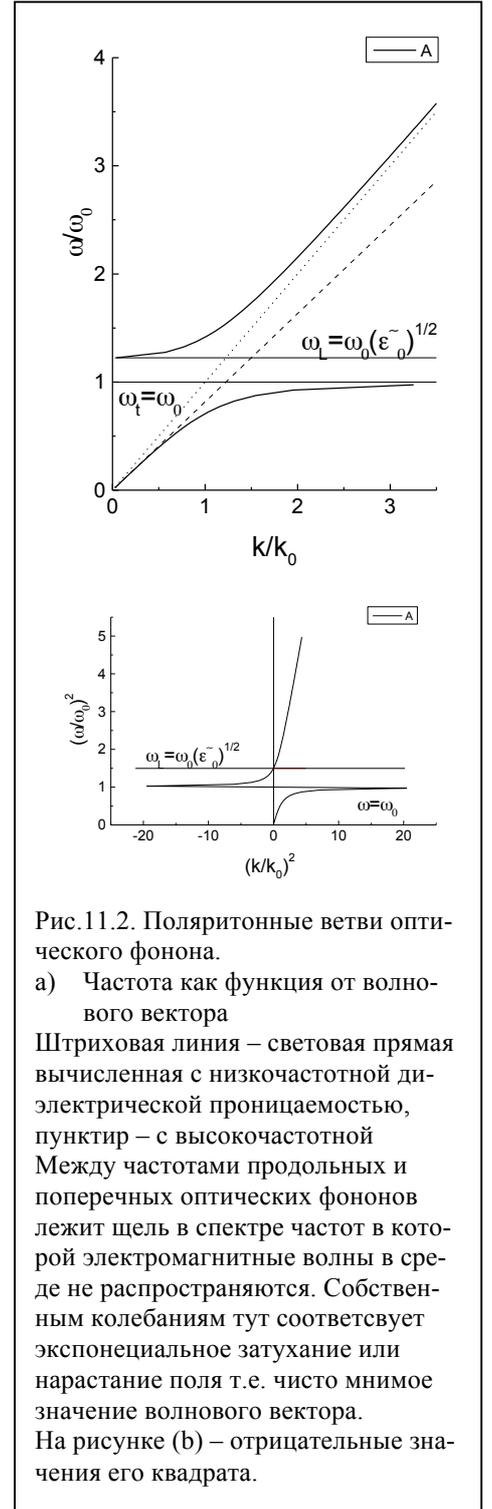


Рис.11.2. Поляритонные ветви оптического фонона.

а) Частота как функция от волнового вектора

Штриховая линия – световая прямая вычисленная с низкочастотной диэлектрической проницаемостью, пунктир – с высокочастотной. Между частотами продольных и поперечных оптических фононов лежит щель в спектре частот в которой электромагнитные волны в среде не распространяются. Собственным колебаниям тут соответствует экспоненциальное затухание или нарастание поля т.е. чисто мнимое значение волнового вектора. На рисунке (b) – отрицательные значения его квадрата.

В спектре появилась полоса частот, лежащая между частотой поперечных ω_0 и продольных

$\omega_L = \omega_0 (\epsilon_0 / \epsilon_\infty)^{1/2}$ оптических фононов: в которой вообще не могут распространяться электромагнитные волны. Как мы уже не раз говорили в этой области диэлектрическая проницаемость, рассчитанная с учетом фоновой особенности отрицательна.

Этот вывод совершенен для человека, который прочитал и запомнил главы учебника, посвященные оптическим фононам. Я его пытался запомнить неоднократно и каждый раз забывал, поскольку эта длинная цепочка мне не была нужна, хотя идею – образование новой квазичастицы в результате взаимодействия колебаний среды и электромагнитных волн запомнил на всю жизнь. Такие квазичастицы образуют не только оптические фононы, но и экситоны. Экситонные поляритоны сейчас особенно интенсивно изучаются в гибридах фотонных кристаллах и квантоворазмерных гетероструктур. Так что лично мне хочется иметь вывод тех же формул, но в более естественном (с моей точки зрения) виде.

2а. Итак для начала рассмотрим чисто умозрительную ситуацию, когда в среде распространяются некоторые волновые колебания, с которыми не связано возникновение плотности дипольного момента и, соответственно, не вносит вклада в диэлектрическую проницаемость. Тогда уравнение для изменения во времени вектора смещения, соответствующего материальным колебаниям имеет вид

$$m \frac{d^2 \vec{s}(t)}{dt^2} = -\hat{\kappa}(\vec{k}) \vec{s}(t) \Rightarrow -m\omega^2 \vec{s} = -\hat{\kappa}(\vec{k}) \vec{s}.$$

Электромагнитное поле будем описывать двумя уравнениями - условием продольности электромагнитных волн

$$\left(\vec{k} \cdot (\epsilon_\infty \vec{E} + 4\pi \vec{P}) \right) = 0$$

и волновым уравнением

$$\left[\vec{k} \times \left[\vec{k} \times \vec{E} \right] \right] = \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \vec{D}}{dt^2} = -\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon_\infty \vec{E}$$

Здесь матрица $\hat{\kappa}(\vec{k})$ описывает жесткость системы (в результате ее действия на вектор смещения мы получаем упругую силу, стремящуюся вернуть систему в несмещенное состояние). При $k=0$ в кубическом кристалле этот тензор вырождается в скаляр и разница между продольными и поперечными колебаниями отсутствует. Из общих соображений можно было бы предположить, что она будет возникать по мере приближения длины волны к размеру элементарной ячейки кристалла. Так бы и было, если бы не взаимодействие между колебаниями электромагнитного поля и среды.

Теперь учтем это взаимодействие. Для этого предполо-

жим, что поляризация связана со смещением $\vec{P} = d\vec{s}$, где d – некоторая константа. Тогда

$$-m\omega^2 \vec{s} = -\hat{\kappa}(\vec{k}) \vec{s} + d\vec{E}$$

$$-k^2 \vec{E}_\perp = -\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 (\epsilon_\infty \vec{E}_\perp + 4\pi d \vec{s}_\perp) =$$

$$= -\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 (\epsilon_\infty \vec{E}_\perp + 4\pi d \vec{s}_\perp)$$

$$\vec{E}_\perp = -4\pi d \vec{s}_\perp = -4\pi d \vec{s}_\perp$$

Отсюда для продольных колебаний с малыми волновыми векторами

$$-m\omega^2 \vec{s} = -(\hat{\kappa}(0) + 4\pi d^2) \vec{s}$$

$$\omega^2 \vec{s} = \frac{\hat{\kappa}(0) + 4\pi d^2}{m}$$

а для поперечных колебаний

$$-k^2 \vec{E}_\perp = -\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \left(\epsilon_\infty + \frac{4\pi d^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) \vec{E}_\perp =$$

$$= -\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \left(\epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)\omega_0^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) \vec{E}_\perp$$

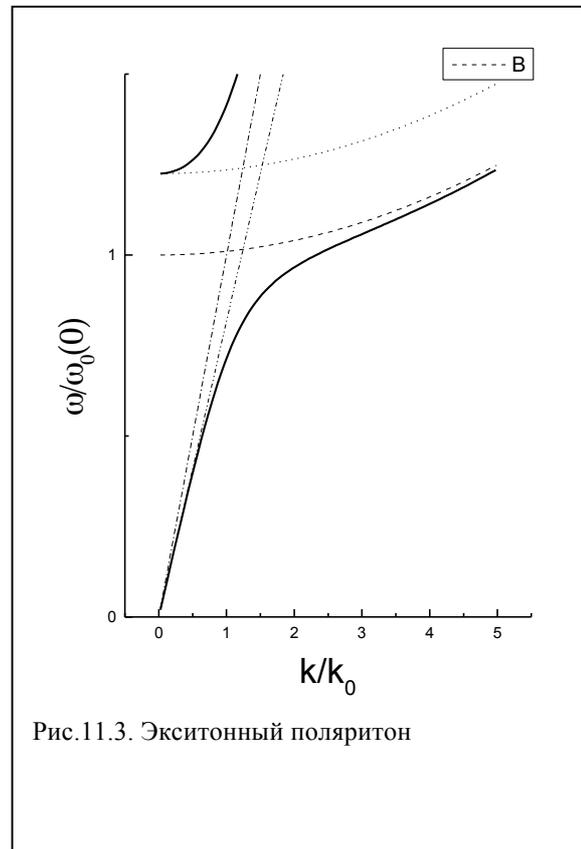


Рис.11.3. Экситонный поляритон

Таким образом мы пришли к тем же самым формулам (11.9), (11.11), кроме того из условия

$$\left(\varepsilon_{\infty} + \frac{4\pi d^2}{m(\omega_0^2)} \right) = \varepsilon_0 \text{ нашли выражение для параметра } d = \omega_0 \sqrt{\frac{m(\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty})}{4\pi}}.$$

Мне такой вывод ближе. Во всяком случае с самого начала не надо удивляться тому что в пределе бесконечных длин волн продольные и поперечные волны не различимы. Разница возникает после прохождения поляритонного антипересечения. Да и вообще, в этом выводе нигде не использовалось то, что я изучать оптические фононы. Я ведь фактически нигде рассматривал конкретные уравнения для механических колебаний среды. Вот например экситон. Можно придти к тем же выводам, только закон дисперсии у него будет иной, нежели

$$\text{у оптических фононах } (\omega_0 \Rightarrow \omega_0(0) + \frac{\hbar k^2}{2M})$$

При этом есть продольный и поперечный экситоны, в зависимости от того как у них осциллирует дипольный момент при рекомбинации.

3. До сих пор мы анализировали поляритоны в бесконечной среде, которая является лишь некоторой моделью. Обычно свет из воздуха или вакуума попадает в кристалл, в котором его движение описывается поляритонными уравнениями, а потом выходит из кристалла и опять становится чистым фотоном. Как же в таком эксперименте проявится наличие поляритонов?

Если рассеяние и иные каналы релаксации поляритонов отсутствуют, то сумма интенсивностей прошедшего через пластину и отраженного от нее излучений равна интенсивности падающего света. Появление щели в спектре частот электромагнитных волн проявится в 100%-отражении электромагнитных волн.

Как легко увидеть, в поляритонной области скорость распространения электромагнитной волны сильно уменьшается. Соответственно, в законе преломления возникает появляется очень большой коэффициент преломления. Но закон преломления выводится исключительно из кинематических соображений. Компонета волнового вектора в плоскости раздела сред в виду трансляционной симметрии сохраняется. Тогда перпендикулярная к этой плоскости составляющая преломленного луча однозначно вычисляется из частоты падающего света.

А вот для расчета коэффициента отражения и интенсивности прошедшего света надо знать граничные условия. И здесь мы подходим к проблеме *дополнительных граничных условий* (ДГУ). Поскольку к условиям на электрическое и магнитное поле надо дописывать условия на колебания среды. Эти условия уже зависят от типа поляритонов, и в каждом отдельном случае их вывод требует анализа поведения этих самых колебаний среды. Например, граница кристалла представляется бесконечно высокой стенкой для экситонов. Поэтому волновая функция экситона на границе должна обращаться в нуль.

4. В квантоворазмерных структурах условия образования поляритонов существенно упрощаются. Локализация экситонов или фононов в одном или нескольких измерениях упрощает согласование колебаний среды и электромагнитного поля. Например, в трехмерной задаче точному резонансу соответствует строго определенное значение частоты и волнового вектора, когда волновые векторы и частоты фотона и колебания среды совпадают. Ну а в двумерном случае, экситон в квантовой яме образует поляритонные состояния при самых разных значениях двумерного волнового вектора.

При нормальном падении света на такую тонкую пленку в ней будет возбуждаться экситоны с нулевым значением двумерного волнового вектора. По мере увеличения угла падения у экситона возникнет малый волновой вектор в плоскости квантовой ямы. События будут развиваться вплоть до ситуации касательно падения света на образ (нормальная составляющая волнового вектора равна нулю), Затем в рамках классической электродинамике пленка можно рассматривать как волновод. Т.е. распространяющийся в ней свет падает на границу раздела с вакуумом под углом, превосходящим угол полного внутреннего отражения. В случае поляритонов внутри пленки энергия запасена в поляризации среды в экситонах, а снаружи – в экспоненциально спадающей по мере удаления от пленки электромагнитной волне.

Таким путем экситоны могут просачиваться из одной квантовой ямы в другую, отделенную высоким и достаточно широким барьером, таким, что вероятность тунелирования через него пренебрежимо мала. Переход будет осуществляться через электромагнитное поле. Тут возникает куча разных названий одного и того же. Например, этот же эффект называют обменным взаимодействием между экситонами в соседних ямах.

Интересно, что в атомной физике уже давно известны поправки к энергии атомных уровней за счет взаимодействия с электромагнитным полем (*лэмбовский сдвиг*).

ЗАДАЧИ

1. Получите выражения для коэффициента отражения и пропускания света квантовой ямой в окрестности экситонной линии поглощения
2. Оцените долю энергии, запасенной электромагнитной составляющей поляритона, связанного с экситоном, волновой вектор которого в плоскости квантовой ямы больше волнового вектора фотона той же энергии. Как спадает вероятность детектировать такой поляритон по мере увеличения расстояния до плоскости квантовой ямы.

3. Оцените величину энергии обменного взаимодействия между двумя экситонами находящимися в двух близко расположенных квантовых яма, разделяемых бесконечно высокими барьерами. Найдите зависимость этой энергии от величины двумерного волнового вектора экситона.

ЛЕКЦИЯ 12. РАССЕЙЯНИЕ СВЕТА.

1. Введение
2. Классическое описание рассеяния света (Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, "Электродинамика сплошных сред" стр. 582, 1982)
3. Рэлеевское рассеяние
4. Рассеяние Мандельштама-Бриллюэна
5. Комбинационное рассеяние или эффект Рамана-Мандельштама-Бриллюэна
6. Комбинационное рассеяние и теория возмущений

1. "Явление рассеяния заключается в возникновении слабых рассеянных волн с частотами и направлениями, отличающимися от частоты и направления распространяющейся в среде исходной волны. Происхождение рассеяния сводится к изменению движения входящих в состав среды зарядов под влиянием поля падающей волны. Это изменение приводит к излучению новых - рассеянных волн" Хотя это определение и заимствовано из [Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, "Электродинамика сплошных сред"], но постичь его, как мне кажется, может лишь тот, кто уже знает, что такое рассеяние. Для такого человека за каждым словом предложения встают страницы текстов. Ну а для тех, кто этих текстов еще не прочитал - все как всегда мутно и тавтологично. Однако главное сказано - при рассеянии изменяется либо частота, либо волновой вектор, световой волны, либо и то и другое вместе; Мне бы очень не хотелось тут ввязываться в лингвистические споры. На тему: "Является ли отражение света рассеянием или его надо выделять в отдельный эффект" или "что означает слово - слабые рассеянные волны" и пр. Тут либо с самого начала легко отделить одно от другого, либо мы попали в переходную область, в которой можно спорить о том, что есть что до посинения и без особого толку.

Рассеяния всегда можно представить как поглощение первоначального кванта с энергией $\hbar\omega_i$ и волновым вектором \vec{k}_i с одновременным испусканием другого фотона с энергией и волновым вектором $\hbar\omega_f$ и \vec{k}_f . Если частота рассеянного света меньше частоты падающего, то говорят о *стоксовой компоненте* рассеяния, если же $\omega_f > \omega_i$, то рассеянное излучение называется *антисксовским*. В первом случае часть энергии рассеиваемого света диссипируется средой. Во втором - наоборот, при рассеянии энергия забирается от рассеивающей среды.

2. МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЙЯНИЯ

Макроскопическая электродинамика характеризуется двумя усреднениями: 1) усреднение по малому объему при заданном расположении атомов и 2) усреднение по движению взаимодействующих со светом атомов. Пространственная неоднородность среды приводит к несохранению импульса фотона, к изменению направления распространения света. В результате изменения свойств среды во времени частота рассеянного света не совпадает с частотой падающего излучения.

Классическая теория рассеяния света подробно рассматривается в томе 8 курса теоретической физики Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица "Электродинамике сплошных сред". Этой книге мы будем следовать при классическом описании рассеяния.

Пусть падающая на среду световая волна монохроматична (имеет частоту ω) и ее распространение описывается диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\omega)$

$$\vec{D} = \epsilon(\omega) \vec{E}$$

Для простоты ниже мы будем считать диэлектрическую проницаемость скаляром.

Распространение рассеянной волны на изменившейся частоте ω' описывается диэлектрической проницаемостью ϵ' , то есть ϵ' . Причем $\epsilon = 1 + 4\pi\chi$, где χ - средняя поляризуемость среды. Однако, по самым различным причинам поляризуемость среды неоднородна в пространстве и непостоянна во времени. Например, в газе флуктуирует концентрация атомов и их энергия, а конвекционные потоки перемещают пылинки. В твердом теле встречаются различные замороженные дефекты, примеси. С ростом температуры все сильнее и сильнее флуктуирует ширина запрещенной зоны, акустические фононы взаимодействуют с носителями заряда посредством деформационного потенциала. Возникают флуктуирующие во времени электрические поля, связанные с оптическими фононами, а в кристаллах без центра инверсии и с акустическими фононами. Эти локальные неоднородности поляризуемости среды принято в макроскопической электродинамике описывать тензорами $\hat{\alpha}$ и $\hat{\beta}$, зависящими от частот рассеиваемого и рассеянного света и конкретных механизмов рассеяния. Они обусловлены флуктуациями и, следовательно, кристаллическая симметрия не помогает особо в определении их вида. Тем не менее, индукция в рассеянной электромагнитной волне описывается общей формулой

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} + \hat{\alpha} \vec{E} + \hat{\beta} \vec{E}^* \quad (1)$$

Последнее слагаемое в правой части описывает вынужденные переходы. Они важны при больших интенсивностях световой волны. Мы их будем рассматривать в нелинейной оптике, а пока что игнорируем. Подставим это выражение для индукции в уравнения Максвелла

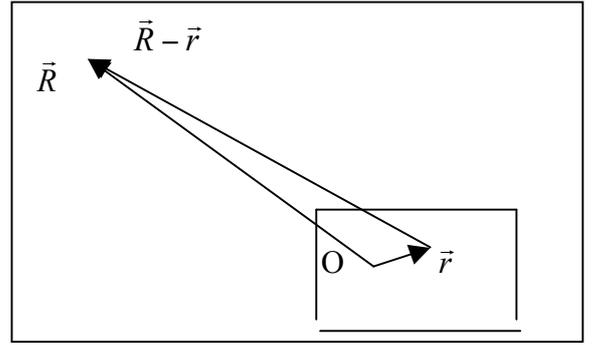
$$\text{rot}(\text{rot}(\vec{E}')) = \left(\frac{\omega'}{c}\right)^2 \vec{D}' = \text{rot}(\text{rot}(\eta' \vec{D}' - \eta'(\partial \vec{E}')))$$

$$\Delta \vec{D}' + k'^2 \vec{D}' = -\text{rot}(\text{rot}(\alpha \vec{E}')) \quad (2)$$

где $k' = \omega' \sqrt{\epsilon'}/c$.

Уравнение (2) - очень важное для нас. Это волновое уравнение с правой частью, с вынуждающей силой. Все, кроме собственных колебаний сводится к этому уравнению.

ВОПРОС: Что случится, если в правой части уравнения маятника появиться вынуждающая сила? Что будет в случае, когда ее частота совпадет с резонансной частотой? А если сила будет осциллировать на резонансной частоте, но фаза ее изменяется во времени случайным образом?



Формальное решение (2) можно записать с помощью запаздывающего потенциала (функции Грина)

$$\begin{aligned} \vec{D}' &= \frac{1}{4\pi} \text{rot} \left(\text{rot} \left[\int \partial \vec{E}(\vec{r}') \frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{R} - \vec{r}')}}{|\vec{R} - \vec{r}'|} d^3 r' \right] \right) \approx \\ &\approx -\frac{e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{R})}}{4\pi R} \left[\vec{k}' \times \left[\vec{k}' \times \int \partial(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r}')} d^3 r' \right] \right] = -\frac{e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{R})}}{4\pi R} \left[\vec{k}' \times \left[\vec{k}' \times \int \partial(\vec{r}') \vec{E} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r}')} d^3 r' \right] \right] \end{aligned} \quad (3)$$

ВОПРОС: Какие приближения были сделаны при переходе от верхней строки к нижней?

Видно, что рассеивающие свойства среды характеризуются вектором

$$\vec{G} = \int (\partial \vec{E}) \exp\{-i(\vec{q} \cdot \vec{r})\} d^3 r, \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (4)$$

$$\vec{E}' = -e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{R})} \frac{E_0}{4\pi R \epsilon'} \left[\vec{k}' \times \left[\vec{k}' \times \vec{G} \right] \right] = e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{R})} \frac{E_0 k'^2}{4\pi R \epsilon'} \vec{G}_\perp \quad (5)$$

На всех этапах расчетов мы держали в памяти то, что, обычно, рассеяние связано со случайными отклонениями поляризуемости среды от ее среднего значения. Как только мы попытаемся в полученных формулах провести усреднение - результат станет равным нулю, хотя рассеяние, несомненно, существует. Какую же величину необходимо вычислить, чтобы описать рассеяние света? Самое естественное начать с расчета *интенсивности*, ведь именно интенсивность рассеянного излучения обычно измеряют в экспериментах по рассеянию. Интенсивность света, на первый взгляд, является скаляром. Но для ее описания необходимо ввести тензор второго ранга, след которого дает полную интенсивность излучения, а собственные числа - значения интенсивности для "чистых" состояний с определенной поляризацией

$$I_{ik} = \langle E'_i E'^*_k \rangle = \frac{|E_0|^2 (k')^4}{(4\pi R \epsilon')^2} \langle G_i G_k^* \rangle \quad (6)$$

Поскольку такой тензор квадратичен по электрическому полю усреднение по случайному распределению флуктуаций уже не зануляет результат. Характеристикой, определяющей рассеяние света в среде, является коррелятор

$$\langle G_i G_k^* \rangle = e_i e_m^* \iint \langle \alpha_{il}(\vec{r}_1) \alpha_{km}^*(\vec{r}_2) \exp\{-i(\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2))\} \rangle d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (7)$$

Усреднять надо с учетом экспоненты - то есть угловые скобки являются функцией двух переменных

Здесь, усреднение проводится по случайным изменениям поляризуемости среды. О формулах (6) и (7) нужно сделать ряд замечаний.

1) Во-первых, уже из (6) видно, что интенсивность рассеяния очень сильно зависит от волнового вектора или от частоты рассеиваемого света: $I \propto \omega^4$. Чем выше частота, тем чувствительнее световые волны к неоднородностям рассеивающей среды. Этот результат основан исключительно на свойствах волнового уравнения и не учитывает никаких специфических особенностей рассеивающих неоднородностей.

Интенсивность рассеяния, вообще говоря, быстро нарастает с увеличением частоты рассеиваемого света. С этим связана голубизна небес в ясную погоду. По этой же причине запрещающий сигнал светофора выбран с красным, а разрешающий - зеленым. В плохих погодных условиях, в условиях сильного рассеяния, рассеяние вырезает в наблюдаемом свете высокочастотную часть. Свет краснеет. Ну а при анализе сигнала светофора лучше принять разрешающий сигнал за запрещающий, чем наоборот.

2) Во-вторых, обратим внимание, на то, что в задаче имеется как минимум три масштаба длины.

Первый масштаб - это характерный размер области корреляций флуктуаций. Как правило, можно указать такое расстояние a , что если $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \ll a$, то среднее по флуктуациям значение $\langle \alpha_{il}(\vec{r}_1) \alpha_{km}^*(\vec{r}_2) \rangle$ отлично от нуля, в то время как при $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \gg a - \langle \alpha_{il}(\vec{r}_1) \alpha_{km}^*(\vec{r}_2) \rangle$ экспоненциально быстро стремится к нулю.

Второй масштаб - $b = \frac{2\pi}{q} \propto \frac{2\pi}{k_1 - k_2}$. На расстояниях, много меньших b - различия между длинами волн

рассеянного и рассеиваемого света теряют смысл. Только изменения поляризуемости среды на расстояниях больших b могут быть выявлены в распределении рассеянных волн.

Наконец, имеется и третий масштаб - размер рассеивающей среды $V^{1/3}$.

Предположим, что $a \ll b, V^{1/3}$ (предел коротких длин корреляции). Тогда в подинтегральном выражении (7) можно положить $\exp\{-i(\vec{q}, \vec{r}_1 - \vec{r}_2)\} \approx 1$ и интенсивность рассеяния оказывается прямо пропорциональной произведению характерного объема неоднородности на объем рассеивающей среды $a^3 V = a^6 \frac{V}{a^3} = a^6 * N$. Таким образом, интенсивность рассеяния прямо пропорциональна квадрату объему области рассеивающей свет скоррелировано (когерентно) и первой степени объема области некогерентного рассеяния (числу областей, рассеивающих когерентно).

Если $a \geq V^{1/3} < b$ то весь объем выступает как один когерентный источник рассеянного света.

Если же самый малый масштаб длины оказывается b , то максимальным окажется рассеяние света, если коррелятор $\langle \alpha_{il}(\vec{r}_1) \alpha_{km}^*(\vec{r}_2) \rangle$ содержит соответствующую Фурье гармонику. То есть от точки к точке области рассеивающей когерентно должны еще и выполняться определенные соотношения между отклонениями от средней величины локальных значений поляризуемости.

Интенсивность рассеянного света содержит три очевидных зависимости: она

- 1) прямо пропорциональна квадрату модуля электрического поля рассеиваемой волны
- 2) пропорциональна объему рассеивающей области в степени не меньшей единицы
- 3) обратно пропорциональна квадрату расстояния от рассеивающей области до измерительного прибора

Поэтому для характеристики рассеивающей среды используют коэффициент экстинкции

$$h = \frac{1}{V|E|^2} \int \langle |E'|^2 \rangle R_o^2 d^2 \Omega, \quad (8)$$

где интегрирование проводится по полному телесному углу.

3. Рэлеевское рассеяние света.

Определение, которое мне удалось найти, содержит слова – *рассеяние света без существенного изменения частоты*. Что считать существенным? Наверное, можно сказать так. В экспериментально измеренном спектре рассеянного света всегда имеется максимум на частоте рассеиваемого света. Так вот рассеянный свет на частоте падающего и соответствующие крылья линии рассеяния относят к Рэлеевскому рассеянию. Например, дефекты поверхности и объема кристалла, пылинки малого размера, медленно движущиеся в конвекционных потоках воздуха, флуктуации плотности газа, связанные с флуктуациями средней ориентации молекул в пространстве, и т.п. являются примерами неоднородностей, вызывающих *рэлеевское рассеяние*.

Сам Рэлей исследовал рассеяние в газах и в 1871 году вывел формулу для интенсивности рассеяния без изменения частоты, согласно которой

$$h = \frac{2\omega^4 (n-1)^2}{3\pi^4 N} \quad (9)$$

n - коэффициент преломления, а N - концентрация рассеивающих атомов. Поскольку для газов $n - 1 \propto N$, коэффициент экстинкции прямо пропорционален концентрации атомов.

Формула Рэрея учитывает флуктуации плотности атомов, связанные с наличием хаотического поле звуковых колебаний. У такого поля значение поляризуемости в соседних точках и во времени скоррелированы. В результате у Рэлеевской линии рассеяния в газах появляется тонкая структура, а в физике возникает новый тип рассеяния –

4. Рассеяние Манделъштама (1918) - Бриллюэна (1922)

Итак, в силу волнового характера акустических колебаний плотности фурье-образ коррелятора

$$\int \langle \alpha_{il}(\Delta\omega, \vec{r}_1) \alpha_{km}^*(\Delta\omega, \vec{r}_2) \exp\{-i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\} \rangle d^3r_1 d^3r_2$$

имеет максимум, когда $\pm \Delta\omega = qv$, где v - скорость звука. То есть при рассеянии на звуковых колебаниях

$$\pm \Delta\omega / v = q = |\vec{k}_i - \vec{k}_f| \approx 2n \frac{\omega}{c} \sin \frac{\vartheta}{2}$$

где ϑ - угол рассеяния. (При выводе этой формулы мы воспользовались тем, что скорость звука много меньше скорости света, так что $\Delta\omega \ll \omega$, $k_i \approx k_f$).

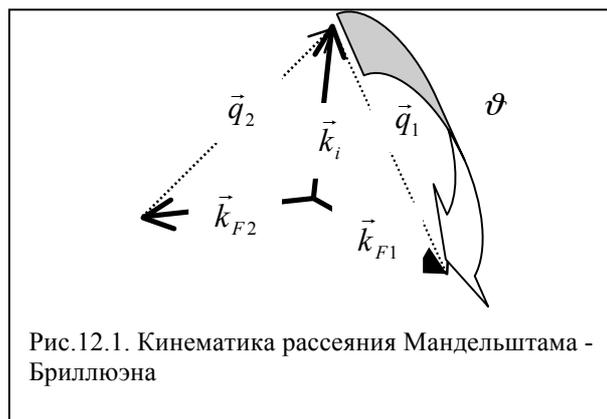


Рис.12.1. Кинематика рассеяния Манделъштама - Бриллюэна

И так рядом с линией рассеяния на несдвинутой частоте возникает дублет рассеянных волн, отличие частот которых от частоты рассеиваемого света связано с углом рассеяния соотношением

$$\Delta\omega \approx \pm 2n \frac{v}{c} \omega \sin \frac{\vartheta}{2}$$

Чем больше угол рассеяния, тем больше сдвиг частоты. По мере уменьшения угла рассеяния частота рассеянного света стремится к частоте рассеиваемого излучения.

В квантовой механике этот же результат получается из тех же законов сохранения энергии и импульса для перехода между начальным состоянием, содержащим фотон (фотон+фонон) и конечным состоянием состоящем их фотона и фонона (фотона). Геометрическая картинка кинетики такого процесса представлена на рисунке.

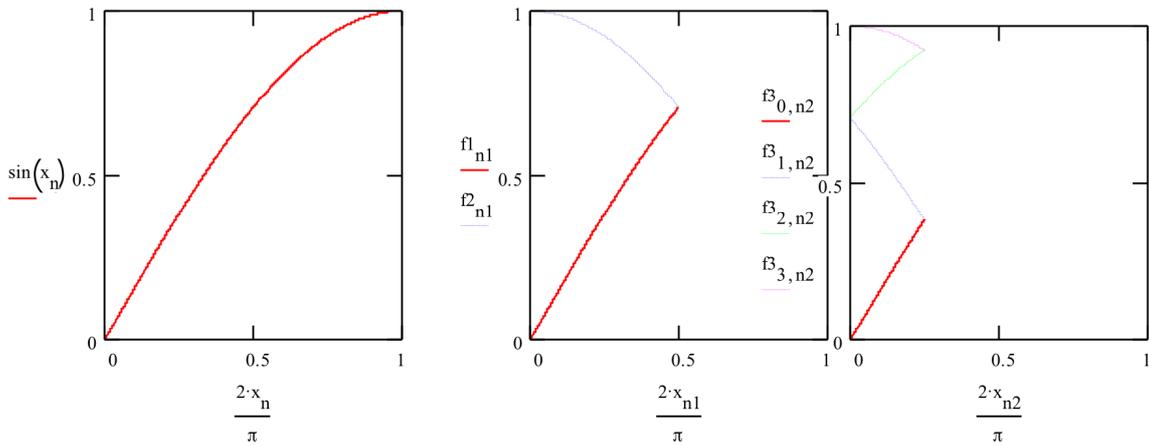
5. Комбинационное рассеяние света

Кроме рассмотренных выше акустических колебаний в рассеивающей среде могут существовать и иные колебания самой разной природы, появляющиеся в спектрах рассеяния. Частота рассеянного света в этом случае является некоторой комбинацией частоты исходного излучения и частот внутренних, характерных для данной среды колебаний. Это могут быть частоты оптических фононов или магнонов (в магнитных материалах); вращательные и колебательные частоты молекул, частоты внутри атомных переходов электронов.

В газах комбинационное рассеяние можно формально отличить от рассеяния Манделъштама - Бриллюэна, если вспомнить что последнее возбуждает колебания среды как целого, а комбинационное рассеяние - внутримолекулярные переходы. Кристалл можно представлять как одну большую молекулу, поэтому качественные отличия между процессами комбинационного рассеяния и рассеяния Манделъштама-Бриллюэна размываются.

Комбинационное рассеяние света позволяет пощупать громадное число внутренних степеней свободы. Поэтому за его открытие индийскому физику Раману присудили Нобелевскую премию 1930 года.¹

¹ Следует тут вспомнить о том, что впервые комбинационное рассеяние наблюдали Ландсберг с Л.И. Манделъштамом раньше Рамана, но они углубились в изучение и проверку полученных результатов, а Раман тут же опубликовал статью. Это - серьезная проблема. Публикацию неверных результатов не прощают. За такое просто перестают читать и ссылаться. Но и затягивать с публикацией горячих результатов нельзя. Вот совсем недавно Евгений Борисович Александров мне рассказал, что в первых опубликованных результатах Майкельсона коэффициент увлечения эфира движущейся Землей был оценен в 0.5 ± 0.5 . То есть с равной вероятностью скорость света изменялась на величину, скорости движения Земли, или не зависела от нее. Тем не менее, уже по этим результатам Майкельсон сделал вывод о постоянстве скорости света.



Вообще-то рассеяние Мандельштама-Бриллюэна является комбинационным, потому что частоты акустических фононы также обладают некоторой частотой. Кроме того, оптические фононы получаются из акустических при удвоении (утроении, учетверении и т.п.) элементарной ячейки. В сверхрешетках, в которых зона Бриллюэна по одному направлению уменьшается во много раз в спектрах рассеяния появляются так называемые *сложенные (folded) акустические фононы*. Так что акустический или оптический фонон - различить трудно, вот сильная угловая зависимость частоты рассеянного света - действительно главное отличие рассеяния Мандельштама - Бриллюэна от комбинационного рассеяния.

6. Квантово-механическое описание задачи о рассеянии света.

Изучение рассеяния различных частиц – одна из основных задач квантовой механики. Достаточно вспомнить, что именно опыты Резерфорда лежали в основе теории Бора.

Поскольку взаимодействие вещества со светом как правило можно рассматривать как малое возмущение, квантово-механическое описание задачи о рассеянии проводится во втором порядке теории возмущений.

ВОПРОС: Почему первого порядка теории возмущений недостаточно для описания рассеяния света?

Процесс состоит из двух этапов - поглощение исходного фотона (\hat{V}_1) и испускание фотона рассеянного излучения (\hat{V}_2).

$$\langle f | \hat{H}_{scat} | i \rangle = \sum_n \frac{\langle f | \hat{V}_1 + \hat{V}_2 | n \rangle \langle n | \hat{V}_1 + \hat{V}_2 | i \rangle}{E_i - E_n} = \sum_\eta \frac{\langle f | \hat{V}_2 | \eta \rangle \langle \eta | \hat{V}_1 | i \rangle}{\epsilon_i + \hbar\omega_{in} - \epsilon_n} + \frac{\langle f | \hat{V}_1 | \eta \rangle \langle \eta | \hat{V}_2 | i \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_n - \hbar\omega_{sc}}$$

где i и f - начальное и конечное состояния рассеивающей среды и электромагнитного поля. Промежуточное состояние системы (n), как правило, является виртуальным. Сумма, стоящая в правой части этой формулы описывает поляризуемость среды (см. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц "Статистическая физика", параграфы, посвященные флуктуационно-диссипационной теореме). Иногда в этой сумме можно выделить главный член, знаменатель у которого во много раз

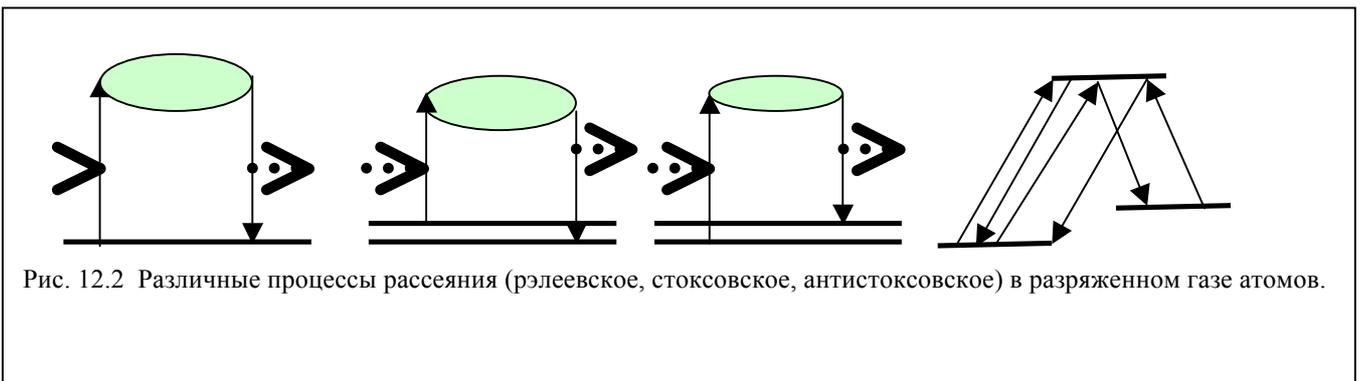


Рис. 12.2 Различные процессы рассеяния (рэлеевское, стоксовское, антистоксовское) в разреженном газе атомов.

меньше чем у остальных. Следует иметь в виду, что совсем не обязательно поглощению исходного фотона предшествует испусканию рассеянного. Наряду с таким очевидным процессом сосуществует процесс, в котором сперва испускается рассеянный фотон, а потом уже поглощается фотон исходного излучения.

В выписанную формулу в качестве начальных, конечных и промежуточных состояний выступают точные собственные состояния рассеивающей среды. В них уже включены все взаимодействия, связывающие электроны и ионы, ибо в этой формуле возмущением считалось только взаимодействие со светом.

При расчетах мы лишь в очень редких случаях знаем эти точные состояния. Пожалуй, в голову приходит только разреженный газ, не содержащий многоатомных молекул. (Лучше всего газ атомарного водорода). Часто состояния рассеивающей среды удастся найти лишь в некотором приближении, а потом уточнять их по теории возмущений.

Например, для твердого тела таким нулевым приближением обычно является адиабатическое приближение, в рамках

которого со светом взаимодействуют только электроны. А электрон-фононное взаимодействие выступает в роли слабого возмущения. Рассеяние на акустических или оптических фононах может быть рассчитано только при учете этого возмущения. Таким образом, порядок используемой теории возмущений начинает нарастать. Подробности подобных расчетов можно найти в лекции В.И. Переля "Рассеяние света в твердых телах", опубликованной в трудах 3-ей зимней школы по физике полупроводников.

Для того чтобы яснее представить себе, что и как вычисляется - удобно использовать диаграммы. Это такие картинки – иероглифы, дающие наглядное представление о том, что считается. В результате удается с высоты птичьего полета увидеть общие свойства у формул, необъятных для взгляда в обычном виде. В чем-то они похожи на блок-схемы, используемые в программировании. Упрощается приведение подобных членов, можно последовательно обработать разные части выражений, увидеть и доказать общие свойства. Первым в теоретическую физику диаграммы ввел Фейнман.² Но, несмотря на то, что в ряде случаев диаграммы нарисовать сравнительно легко, проводить расчет, конечно же, все равно придется.

Например, приведенные выше диаграммы наглядно представляют рэлеевскую, стоксову и анти-стоксову компоненты рассеяния. Заштрихованный эллипс это множество промежуточных виртуальных состояний, взаимодействие которых друг с другом. Их точный вид надо еще найти.

Эти картинки - диаграммы выросли из схемы, изображающей комбинационное рассеяние света на чисто электронных переходах какого-то атома.

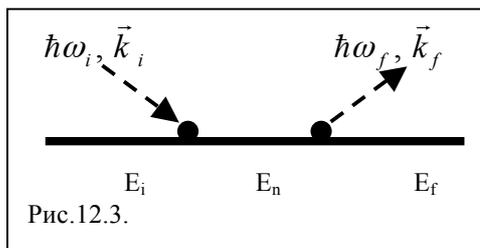


Рис.12.3.

На рисунке 12.3. изображена другая диаграмма, прямо изображающая формулу второго порядка. Сплошная стрелка изображает состояние электрона, Пунктир - фотон, точка - взаимодействие (матричный элемент поглощения или испускания фотона). При этом участок сплошной линии между двумя точками соответствует энергетическому знаменателю.

На этой диаграмме. изображен переход с уровня на уровень электрона.

В полупроводниках как мы уж неоднократно видели, поглощение фотона приводит к рождению электронно-дырочной пары. При этом в промежу-

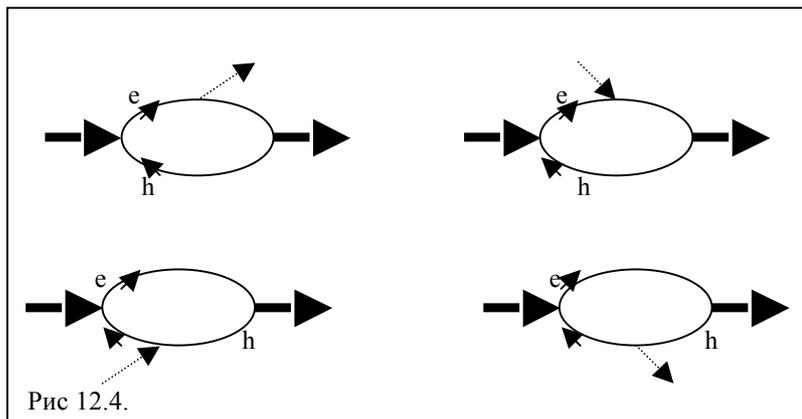


Рис 12.4.

точном состоянии и электрон и дырка могут взаимодействовать с фононов. Варианты этих процессов представлены на диаграммах 12.4. Жирные штриховые стрелки изображают фотоны на входе и выходе, тонкие пунктирные – фононы, поглощаемые или испускаемые электроном или дыркой.

Для разных задач удобны разные диаграммы. Были придуманы не только эти наглядные картинку, но и разработаны правила, позволяющие некоторую часть рутинных вычислений проводить рисуя картинку.

² В воспоминаниях он рассказывает о том, как посетил какую-то теоретическую лабораторию в Европе, где ему рассказали о большой задаче, над которой сейчас трудится коллектив. Нужно было провести расчет в сравнительно высоком порядке теории возмущений. С помощью своих диаграмм Фейнман решил задачу в электричке, по пути в гостиницу и на утро потряс коллег готовым ответом.

ЛЕКЦИЯ 13. НЕЛИНЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ.

1. Условия возникновения нелинейных оптических эффектов
2. Генерация гармоник и условие фазового синхронизма
3. Параметрическое преобразование и параметрическая генерация света
4. Другие нелинейные эффекты
5. Четырехволновое смешивание

“НЕЛИНЕЙНАЯ СРЕДА - среда, в которой распространение света зависит от интенсивности (амплитуды) световой волны. В нелинейной среде не выполняется принцип суперпозиции : волны распространяются не независимо, а взаимодействуют между собой. Вследствие этого в нелинейной среде возбуждаются волны отличающиеся частотами и направлением распространения от падающей волны. Среда, линейная в обычных условиях, т.е. при обычных интенсивностях света, становится нелинейной, когда напряженность электрического поля световой волны сравнима с внутриатомным электрическим полем E_a .”

(А.П.Сухоруков, “Квантовая электроника” Маленькая энциклопедия М. 1969)

В лазерном луче напряженность электрического поля световой волны достигает 10^8 В/см, что сравнимо с внутриатомными полями. Для атома водорода $E_a \approx 10^9$ В / см. В полупроводниках характерное поле может быть на один или два порядка меньше.

Горелик в 1946-1948 году открыл смещение двух световых волн на фотокатоде. Вавилов и Левшин в 1925 году наблюдали оптически индуцированное просветление среды. Но, по большому счету, все началось с работы П. Франкена (США), который в 1961 году осуществил генерацию в кварце второй гармоники излучения рубинового лазера.

Перечислим основные нелинейные явления:

Оптическое детектирование.

Генерация гармоник.

Изменение показателя преломления среды. Самофокусировка. Самоканалирование

Многофотонное поглощение.

Многофотонный фотоэффект.

Параметрическая генерация света, плавное изменение частоты лазера.

Вынужденное рассеяние света.

Общий формализм

В линейном режиме индукция электрического поля имеет вид

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}, \quad \vec{P} = \chi\vec{E}, \quad \varepsilon = 1 + 4\pi\chi \quad (1)$$

Если электрическое поле не велико, то уравнение (1) сохраняет вид, и поляризацию среду можно разложить в ряд

$$\vec{P} = \hat{\chi}^{(1)} \otimes \vec{E} + \hat{\chi}^{(2)} \otimes \vec{E} \otimes \vec{E} + \hat{\chi}^{(3)} \otimes \vec{E} \otimes \vec{E} \otimes \vec{E} + \dots$$

$$P_\alpha = \chi_{\alpha,\beta}^{(1)} E_\beta + \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} E_\beta E_\gamma + \chi_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}^{(3)} E_\beta E_\gamma E_\delta + \dots \quad (2)$$

$$\vec{P} = \vec{P}^{(lin)} + \vec{P}^{(nlin)}$$

У кристалла с центром инверсии $\vec{P}(-\vec{E}) = -\vec{P}(\vec{E})$, $\hat{\chi}^{(2n)} = 0$ и первая поправка кубична по электрическому полю. Поэтому используются среды без центра инверсии, в которых нелинейность возникает уже во второй степени по электрическому полю

$$\vec{P}^{(2)} = \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} E_\beta E_\gamma \quad (3)$$

Пусть в среде распространяется две волны

$$\begin{aligned} \vec{E}^{(1)}(\vec{r}, t) &= \vec{E}^{(1)} \cos(\omega_1 t - (\vec{k}_1 \vec{r})) \\ \vec{E}^{(2)}(\vec{r}, t) &= \vec{E}^{(2)} \cos(\omega_2 t - (\vec{k}_2 \vec{r})) \end{aligned} \quad (4)$$

$$P_\alpha^{(2)}(\vec{r}, t) = \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} \left[E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(1)} \cos^2(\omega_1 t - (\vec{k}_1 \vec{r})) + E_\beta^{(2)} E_\gamma^{(2)} \cos^2(\omega_2 t - (\vec{k}_2 \vec{r})) + \right. \\ \left. + (E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(2)} + E_\beta^{(2)} E_\gamma^{(1)}) \cos(\omega_1 t - (\vec{k}_1 \vec{r})) \cos(\omega_2 t - (\vec{k}_2 \vec{r})) \right]$$

Воспользовавшись известными тригонометрическими равенствами

$$\cos^2 \alpha = [1 + \cos(2\alpha)]/2, \quad \cos \alpha \cos \beta = [\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)]/2 \quad \text{находим}$$

$$\begin{aligned}
P(2\omega_1)_\alpha &= \frac{1}{2} \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(1)} \cos[2\omega_1 t - 2(\vec{k}_1 \vec{r})] \\
P(2\omega_2)_\alpha &= \frac{1}{2} \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} E_\beta^{(2)} E_\gamma^{(2)} \cos[2\omega_2 t - 2(\vec{k}_2 \vec{r})] \\
P(\omega_1 + \omega_2)_\alpha &= \frac{1}{2} \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} (E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(2)} + E_\beta^{(2)} E_\gamma^{(1)}) \cos[(\omega_1 + \omega_2)t - ((\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \vec{r})] \\
P(\omega_1 - \omega_2)_\alpha &= \frac{1}{2} \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} (E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(2)} + E_\beta^{(2)} E_\gamma^{(1)}) \cos[(\omega_1 - \omega_2)t - ((\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \vec{r})] \\
P(0)_\alpha &= \frac{1}{2} \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} (E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(1)} + E_\beta^{(2)} E_\gamma^{(2)})
\end{aligned} \tag{5}$$

Ну и как в задаче о рассеянии эта поляризация должна привести к появлению электромагнитных волн на двойных частотах, суммарной и разностной частоте и даже постоянного электрического поля. Два фотона сливаются в один, фотон распадается на два и все это описывается в рамках классической электродинамики¹. Но пока это все происходит локально, и мы не учитываем как интерферируют поля, создаваемыми разными участками нелинейной среды. А ведь именно эта интерференция в конечном итоге проявляется в законе сохранения импульса. Чтобы действительно разобраться в том, что происходит надо решать волновое уравнение.

ГЕНЕРАЦИЯ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ И УСЛОВИЕ ФАЗОВОГО СИНХРОНИЗМА

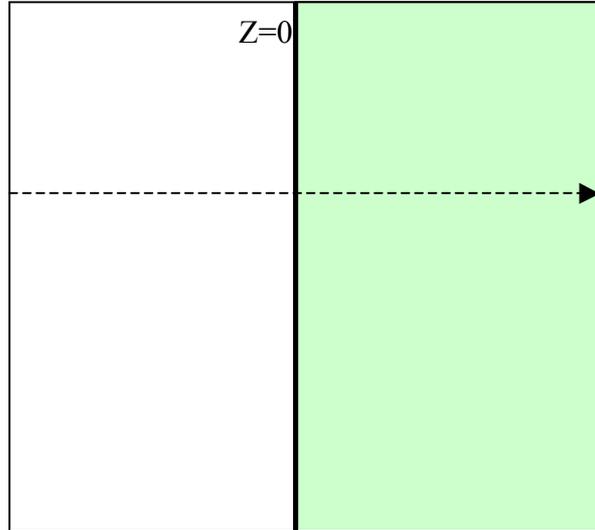
Итак, за счет нелинейной восприимчивости в среде возникает дополнительная волна поляризации на двойной временной и пространственной частоте

$$\begin{aligned}
P^{(2)}(\vec{r}, t) &= \vec{P}^{(2)} \cos(2(kz - \omega t)) = \\
&= \vec{P}^{(2)} [\exp\{2i(kz - \omega t)\} + \exp\{-2i(kz - \omega t)\}] \tag{6}
\end{aligned}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \omega \frac{n(\omega)}{c}$$

Будем считать что нелинейная среда занимает полпространства $z > 0$. Из вакуума ($z < 0$) нормально к поверхности раздела на нее падает электромагнитная волна частоты ω , которая, попав в нелинейную среду и генерирует волну на второй гармонике. Волновое уравнение, описывающее это процесс имеет вид

$$\begin{aligned}
c^2 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial z^2} - \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} &= 4\pi \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}, \\
\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial z^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} &= \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}
\end{aligned} \tag{7}$$



Решение этого уравнения для второй гармоники ищем в виде суммы частного решения с правой частью и решения однородного уравнения

$$E(z, t) = E_0 \exp\{i2(k(\omega)z - \omega t)\} + E_1 \exp\{i(k(2\omega)z - 2\omega t)\} \tag{8}$$

где $k(\omega) = n(\omega)\omega/c$, $k(2\omega) = n(2\omega)2\omega/c$, вообще говоря $2k(\omega) \neq k(2\omega)$.

На поверхности, в плоскости $z=0$, амплитуда второй гармоники равна нулю. Это так, пока нет второй границы. Тогда

$$E_0 = -E_1, \quad E_0 \left[-(2k(\omega))^2 + \frac{(2\omega)^2}{v^2} \right] = 4\pi \frac{(2\omega)^2}{c^2} P^{(2)} \tag{9}$$

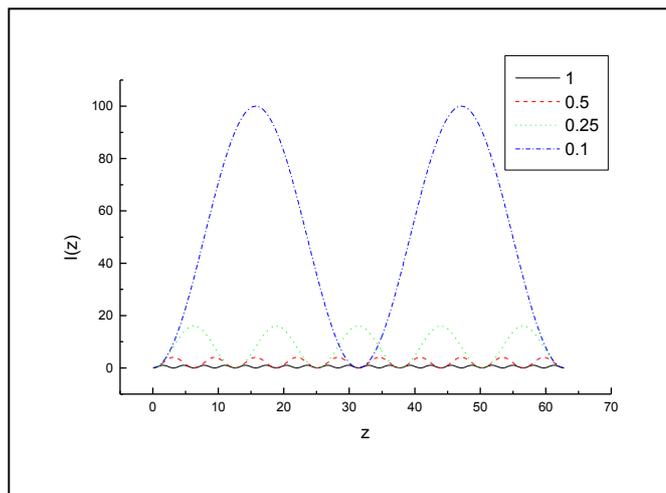
$$E_0 = \frac{4\pi(2\omega)^2 P^{(2)}}{k(2\omega)^2 - (2k(\omega))^2} = \frac{4\pi P^{(2)}}{n(2\omega)^2 - (n(\omega))^2} \approx \frac{2\pi P^{(2)}}{\bar{n}[n(2\omega) - n(\omega)]} = \frac{2\pi P^{(2)}}{\bar{n} \Delta n} \tag{10}$$

Подставляя это выражение в (8) получаем

¹ Восприимчивость третьего порядка приведет к еще большему числу физических явлений.

$$E(\vec{r}, t) = \frac{2\pi P^{(2)}}{n \Delta n} e^{i2(kz - \omega t)} \left[1 - \exp\left\{i\left[k(2\omega) - 2k(\omega)\right]z\right\} \right] = \frac{2\pi P^{(2)}}{n \Delta n} e^{i2(kz - \omega t)} \left[1 - \exp\left\{i \frac{2\omega \Delta n}{c} z\right\} \right] \quad (11)$$

Если мы находимся не слишком близко к линиям поглощения, то коэффициент преломления изменяется не очень сильно, т.е. $\Delta n \ll n$. Тогда формула (11) очень похожа на амплитудную модуляцию – амплитуда колебаний зависит от расстояния до поверхности кристалла. (см. рис.13.1). Интенсивность излучения на двойной частоте то нарастает то падает, причем чем меньше различия значений коэффициента преломления на основной и удвоенной частотах тем длиннее период этих колебаний, тем больше интенсивность света на двойной частоте в максимуме этой зависимости. Поскольку интенсивность светового излучения пропорциональна квадрату модуля электрического поля световой волны имеем



$$I(\vec{r}, t) \propto \frac{|P^{(2)}|^2}{(\Delta n)^2} \left[\left(1 - \cos\left(\frac{2\omega \Delta n z}{c}\right) \right)^2 + \sin^2\left(\frac{2\omega \Delta n z}{c}\right) \right] = \quad (12)$$

$$= 2 \frac{|P^{(2)}|^2}{(\Delta n)^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\omega \Delta n z}{c}\right) \right] = 4 \frac{|P^{(2)}|^2}{(\Delta n)^2} \sin^2\left(\frac{\omega \Delta n z}{c}\right)$$

Таким образом, чем меньше различие в коэффициентах поглощения, тем эффективнее можно преобразовывать излучение, соответствующим образом подбирая длину образца. Совсем здорово было бы, если бы различия в коэффициентах поглощения вообще отсутствовали ($\Delta n = 0$)

$$I(\vec{r}, t)|_{\Delta n=0} \propto 4 \frac{|P^{(2)}|^2 (\omega z)^2}{(c)^2} \quad (13)$$

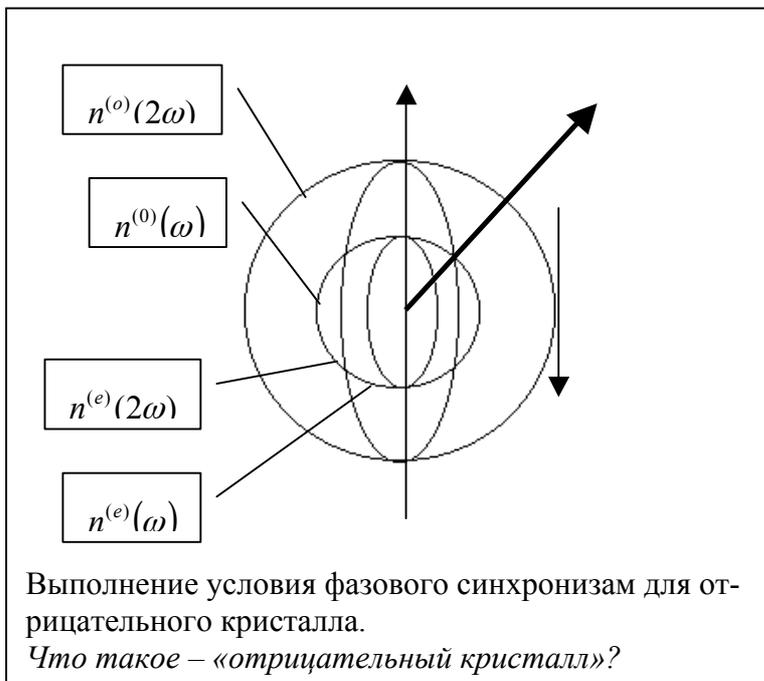
Интенсивность излучения на двойной частоте нарастает прямо пропорционально квадрату толщины образца.

ВОПРОС: Не возникает ли тут возникает вечный двигатель первого рода – начиная с некоторого расстояния интенсивность света на двойной частоте становится больше интенсивности света на одинарной. Что бы это значило?

Условие
 $n(2\omega) = n(\omega)$

- называется условием фазового или волнового синхронизма. При его выполнении все точки среды преобразуют излучение, т.е. их вклады в интенсивность света на удвоенной частоте складываются. В противном случае начиная с какого-то расстояния осциллирующие на двойной частоте диполи будут работать в противофазе, "мешая друг другу".

Как добиться выполнения условия фазового синхронизма. Вероятность того что нам удастся найти нелинейную среду у которой для данной частоты коэффициент преломления окажется равным $n(2\omega)$ очень мала.



Изящный способ решения этой проблемы придумали в 1962 году Дж. Джолдэйн и Р. Терхьюн. Они предложили использовать для удвоения частоты анизотропные кристаллы (KDP²). На рисунке 3 построены сечения поверхностей показателя преломления для одноосного кристалла. Как вы помните в этом случае в среде распространяется два луча – обыкновенный и необыкновенный. Коэффициент преломления для обыкновенного луча не зависит от направления его волнового вектора, в то время как коэффициент преломления обыкновенного луча зависит от направления его распространения.

В области нормальной дисперсии коэффициент преломления увеличивается с ростом частоты. Если при этом для необыкновенной волны коэффициент преломления уменьшается по мере увеличения угла между волновым вектором и оптической осью, то вполне может оказаться, что существует такое направление, для которого коэффициент преломления для необыкновенного луча на двойной частоте и для обыкновенно – на одинарной окажутся одинаковыми.

Условие фазового синхронизма удастся получить просто вращая такой двулучепреломляющий, нелинейный кристалл.

С точки зрения квантовой механики при эффекте удвоения два фотона сливаются в один, При этом энергия удваивается. А если к тому же выполняется и условие фазового синхронизма, то выполняется и закон сохранения импульса (с точностью до соотношения неопределенности из-за конечной толщины пластины).

Параметрическое преобразование и параметрические генераторы света.

Когда изобрели первые лазеры, число линий, на которых наблюдалась генерация было очень ограничено, а хотелось иметь источники мощного когерентного излучения с плавно перестраиваемой длиной волны. Это удалось сделать с помощью *параметрического преобразования* – эффекта обратного сложению частот.

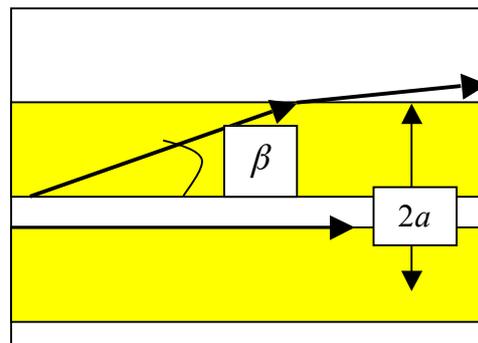
При параметрическом преобразовании один фотон с энергией $\hbar\omega$ превращается в два фотона, энергии которых удовлетворяют закону сохранения $\hbar\omega = \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$. Преобразование происходит наиболее эффективно, если выполняется условие фазового синхронизма $\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$. Описать парамагнитное преобразование на классическом языке не очень то легко. Исходно имеется мощная световая волна от лазера на частоте ω . Если в среде уже имеется волна на частоте ω_1 , то мощная волна и затравочная преобразуются в излучение на частоте ω_2 . И наоборот слабая волна на частоте ω_2 совместно с мощной исходной волной преобразуются в свет на частоте ω_1 . Так эти волны друг-друга «раскачивают». Если такую нелинейную систему поместить в резонатор, то при правильном подборе параметров (большая мощность накачки, хорошие зеркала и т.п.) то получим параметрический генератор. Причем частоты вторичных волн можно изменять вращая нелинейный кристалл таким образом, что условие фазового синхронизма будет выполняться для несколько различных частот.

ВОПРОС: Рассмотрим ситуацию, когда в начальный момент вторичное излучение отсутствует. Какова физическая причина возникновения волн на частотах ω_1 , ω_2 . Обсудите роль флуктуаций электромагнитного поля.

Самофокусировка

Самофокусировка интенсивных пучков света возникает в меру зависимости от электрического поля световой волны коэффициента преломления. $n = n_0 + n_2 E^2$. Это, конечно же, эффект Керра, но в поле световой волны (*высокочастотный эффект Керра*).

В линейной оптике световой пучок конечной ширины неотвратимо размывается по мере распространения. Но световой пучок помещенный внутрь цилиндра с коэффициентом преломления, большим, чем коэффициент окружающей среды, при определенных условиях оказывается захваченным таким волноводом. Поле световой волны экспоненциально спадает по мере удаления от волновода. На языке геометрической оптики такое происходит, когда световая волна падает на границу раздела двух сред под углом, большим угла полного внутреннего отражения. Но когда длина волны сравнима с толщиной волновода, угол падения корректно определить невозможно, и надо решать задачу теории поля.



² KDP – дигидрофосфат калия (KH₂PO₆), кристаллизуется в тетрагональный кристалл. Имеет одну оптическую ось. Прозрачен в области длин волн от 0.3 до 1.2 мкм

В нелинейном режиме световая волна большой интенсивности сама увеличивает коэффициент преломления в области пучка и тем самым создает канал по которому сама и распространяется. Ну а если ширина канала самопроизвольно сужается – мы имеем дело с самофокусировкой.

Оценки можно провести используя представления об угле полного внутреннего отражения

$$\beta_0 = \arccos(n_0 / (n_0 + n_2 E^2)).$$

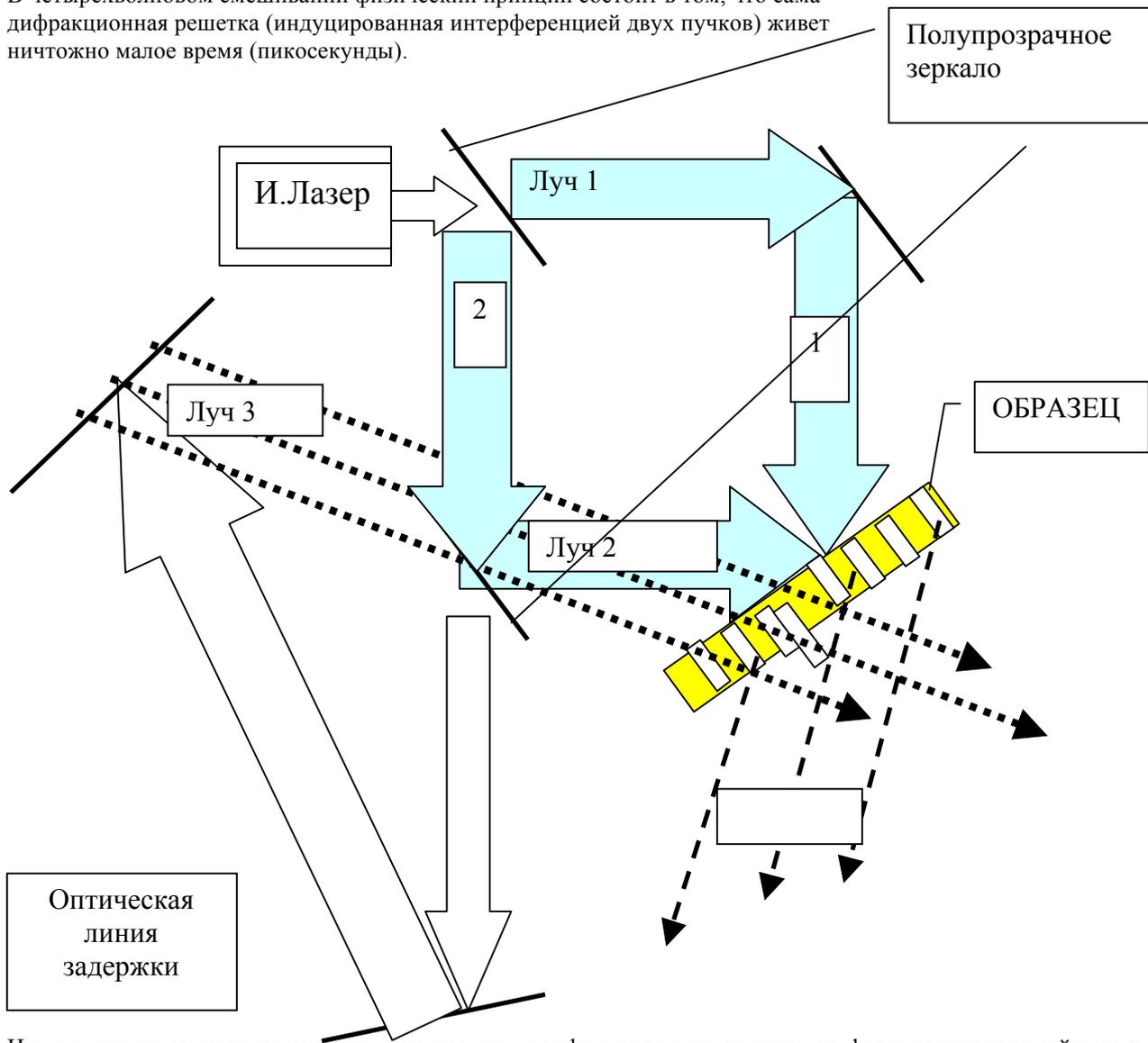
Лучи, падающие под углом $\beta > \beta_0$, отклоняются от оси пучка и в конце концов уходят из канала. Если же $\beta < \beta_0$, то такие лучи отражаются и уходят в пучок. Для пучка угол β определяется дифракционным пределом $\beta_d = (0.61\lambda)/(n_0 2a)$. Если $\beta_0 < \beta_d$ пучок расплывается. Если $\beta_0 = \beta_d$ размер пучка сохраняется. – этот режим называется самоканализированием. Наконец при $\beta_0 > \beta_d$ пучок начинается стягиваться. Происходит самофокусировка. нелинейная среда действует как линза.

Четырехволновое смешивание

В 90-х годах прошлого века (то есть лет пять – десять тому назад) очень активно исследовались сверхбыстрые процессы методом *четырёхволнового смешивания*. Идея такого эксперимента довольно проста, но его реализация требует весьма сложного оборудования.

Основания идея заключается в том, чтобы записать интерференционную картинку от двух когерентных световых волн, и посмотреть сколь долго она сохраняется, измеряя интенсивность четвертого светового луча, получающегося из пробного третьего при его дифракции на этой решетке. Записывать интерференционную картину от двух пучков на фотопластинке, а потом, после ее проявления и закрепления изображения исследовать дифракцию на этой решетке умели давно. Такая методика называется *голографией*, она была изобретена Габором в 1947 году (Нобелевская премия 1971 г).

В четырехволновом смешивании физический принцип состоит в том, что сама дифракционная решетка (индуцированная интерференцией двух пучков) живет ничтожно малое время (пикосекунды).



И вот за это время надо посмотреть, как изменится дифракция третьего пучка на фотоиндуцированной решетке. Таким образом, необходимо работать с пикосекундными световыми импульсами, время прихода которых на объект и длительность надо контролировать с такой субпикосекундной точностью.

Но теперь научились делать очень короткие лазерные импульсы, что в них «помещается» одно колебание. Типичная длительность такого импульса - фемтосекунда. Так что десять пикосекунд - десять тысяч периодов - с точки зрения фемтосекундной оптики не так и мало.

Чтобы третий импульс пришел с задержкой в 10 нс, его оптический путь должен быть длиннее всего на 3 миллиметра. Изменяя зависимость интенсивности четвертого (дифрагированного) пучка от длин линии задержки мы можем узнать, как затухает во времени дифракционная решетка, записанная в виде изменения пространственного изменения коэффициента преломления или коэффициента поглощения.

Сделать такой эксперимент нелегко. Кроме того, такие эксперименты требуют крайне серьезной теоретической работы для их интерпретации.

ЛЕКЦИЯ 14. ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ

1. Виды люминесценции
2. Соотношения Эйнштейна
3. Однородная и неоднородная ширина линии люминесценции
4. Фотолюминесценция и резонансное рассеяние света
5. Циркулярная поляризация люминесценции ориентированных по спину электронов

1. *Люминесценция* (lumen escent) – слабое свечение. Представляет собой избыток над тепловым излучением тела и продолжается в течении времени, значительно превышающего период световых колебаний. В видимой области спектра тепловое излучение становится заметным примерно при 1000К. При комнатной температуре практически всякое свечение – люминесценция (холодное свечение). Вторая часть определения введена С.И. Вавиловым, чтобы отделить эффект от различного вида рассеяний, параметрического преобразования света, тормозного излучения, и т.п.. Но, как мы увидим, разделить различные процессы все равно трудно.

Как почти всякое исторически сложившееся понятие имеет много разных значений:

- a) *Фотолюминесценция* (возбуждается светом)
- b) *Радиолюминесценция* (возбуждается проникающей радиацией: рентгено-, катодо-, ионо- и α – люминесценция);
- c) *Электролюминесценция* (люминесценция, вызванная электрическим полем)
- d) *Кандоллюминесценция* (механическое воздействие, например, при разрушении кристалла);
- e) *Хемилюминесценция* (химические реакции)
- f) *Триболюминесценция* (tribo – греч. растираю) – люминесценция возникающая при трении, разломе, раздавлении некоторых кристаллов.¹
- g) *Радикалорекombинационная люминесценция*
- h) *Лиолюминесценция* (при растворении)

Принято называть быстрозатухающую люминесценцию – *флуорисценцией*, а долго незатухающую – *фосфорисценцией*.

Неорганические кристаллы-люминофоры (специально синтезируемые вещества, способность которых к люминесценции используется для практических целей) называются *кристаллофосфорами*.

Люминесценция, как один из возможных каналов энергетической релаксации в полупроводнике, конкурирует с безизлучательными каналами рекомбинации электронов и дырок. Квантовый выход люминесценции – измеренное в процентах отношение количества актов рекомбинации с испусканием фотона к полному числу рекомбинировавших электронно-дырочных пар. Для современных материалов оптоэлектроники квантовый выход приближается к 100%.

При комнатной температуре краевая люминесценция связана с рекомбинацией свободных электронов и дырок. Однако при понижении температуры краевая люминесценция имеет интересную сложную структуру. В ней появляются экситонные линии. Можно идентифицировать люминесценцию, вызванную экситонами, связанными на заряженных и нейтральных примесях, межпримесную рекомбинация и т.п.

Как следует из определения – люминесценция не является тепловым свечением. Но электроны и дырки, рекомбинирующие при рождении фотона, вполне могут быть (и как правило являются) термализованными. То есть распределение электронов по состояниям зоны проводимости и дырок по состояниям валентной зоны описывается температурой равной или несколько большей температуры кристаллической решетки. Однако для люминесценции само количество электронно-дырочных пар заметно превышает равновесное количество. Это фоторожденные электронно-дырочные пары, электроны и дырки, инжектируемые в электрическом поле и т.п..

Часто люминесценцию удается активировать, введение в кристалл специальных примесей. Такие центры люминесценции напоминают разряженный газ ионов, но на них влияет взаимодействие с колебаниями решетки, асимметрия окружения. В результате для подобных примесей оказываются разрешенными многие оптические переходы, запрещенные в разряженной плазме.

¹ Чем она отличается от кандоллюминесценции, мне не ясно. Термин *кандоллюминесценция* взят из «Физической энциклопедии», а *триболюминесценция* присутствует в ряде учебников и словарей иностранных слов.

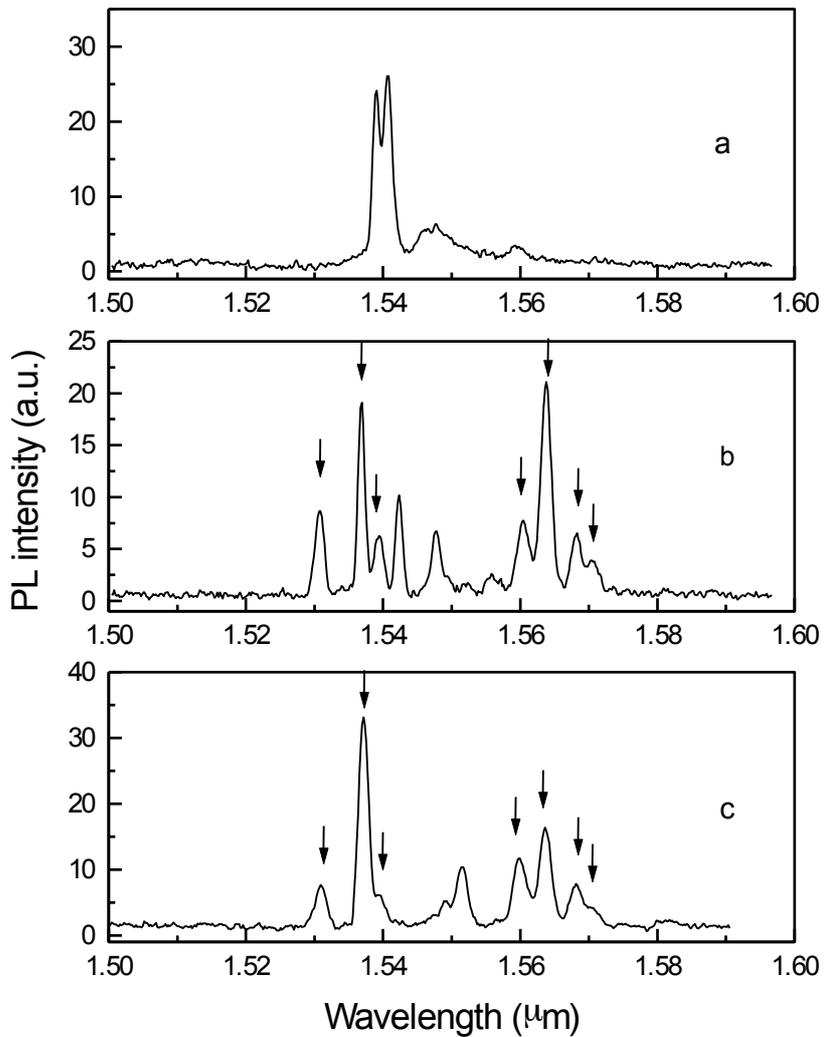


Рис. 1.

Спектры люминесценции ионов Er внедренных в решетку GaAs (по данным Гусева, Бреслера и др. ФТП 1998). Люминесценция связана с переходами внутри f-оболочки. Такие переходы в разреженной атмосфере эрбия запрещены несколькими правилами отбора. Однако понижения симметрии окружения разрешает оптические переходы.

- a. Эрбий ($4 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$) в чистом арсениде галлия
- b. GaAs:Er в квантовой яме, толщиной 100Å ($n_{Er} = 9 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Спектр отвечает кластерам GaAlAs:Er. Алюминий диффундировал из барьеров.
- c. Объемный образец Al-GaAs:Er $n_{Er} = 9 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$

СООТНОШЕНИЯ ЭЙНШТЕЙНА

Позволяют найти вероятность спонтанного испускания фотона если мы знаем вероятность его поглощения

$$\frac{W_{\text{ИЗЛ}}}{W_{\text{ПОГЛ}}} = \frac{N + 1}{N} \quad (1)$$

Свяжем число фотонов с интенсивностью света

$$I_{\vec{k}\vec{e}} d\omega d^2\Omega = \frac{c}{V} \frac{V k^2 dk d^2\Omega}{(2\pi)^3} N_{\vec{k}\vec{e}} \hbar\omega = \frac{\hbar\omega^3}{8\pi^3 c^2} d\omega d^2\Omega \quad (2)$$

Отсюда соотношение

$$N_{\vec{k}\vec{e}} = \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar\omega^3} I_{\vec{k}\vec{e}} \quad (3)$$

Пусть $dW_{\vec{k},\vec{e}}^{sp}$ вероятность спонтанного испускания фотона с поляризацией \vec{e} в телесном угле $d\Omega$ вокруг волнового вектора \vec{k} . Тогда согласно (1) вероятности индуцированного испускания и поглощения фотонов в том же телесном угле связаны с $dW_{\vec{k},\vec{e}}^{sp}$ очевидным соотношением

$$dW_{\vec{k},\vec{e}}^{ab} = dW_{\vec{k},\vec{e}}^{ind} = dW_{\vec{k},\vec{e}}^{sp} \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar\omega^3} I_{\vec{k},\vec{e}} \quad (4)$$

Это очень важное соотношение, пользуясь которым можно получить множество средних величин. Например, если падающее излучение изотропно и неполяризовано, то

$$dW^{ab} = dW^{ind} = dW^{sp} \frac{\pi^2 c^2}{\hbar\omega^3} I \quad (5)$$

Полученные формулы справедливы для переходов между любой парой невырожденных уровней. В случае вырождения вероятность увеличивается в меру вырожденности конечного состояния

$$g_f dW^{ab} = g_i dW^{ind} = g_i dW^{sp} \frac{\pi^2 c^2}{\hbar\omega^3} I \quad (6)$$

При этом мы все время неявно предполагали что конечное состояние пустое, и принцип Паули не накладывает запрета на оптический переход.

Несмотря на кажущуюся симметрию поглощения и люминесценции, последняя зачастую оказывается гораздо более информативной. Дело в том, что при низких температурах практически все электроны и дырки оказываются локализованным и громадная плотность состояний выше края фундаментальной полосы поглощения при низких температурах для люминесценции не важна.

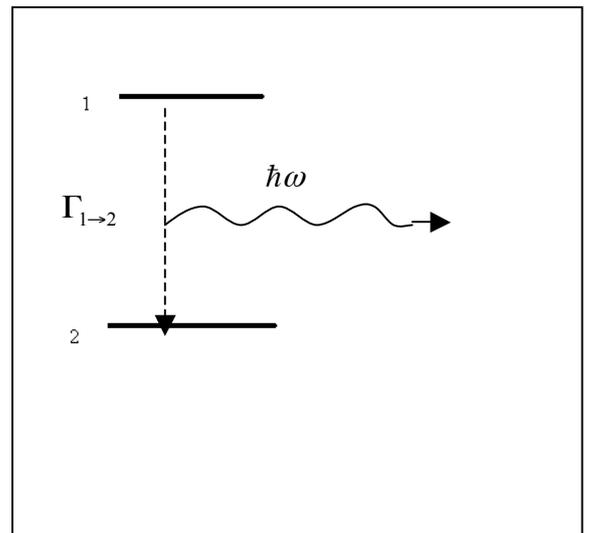
ОДНОРОДНАЯ (ЕСТЕСТВЕННАЯ) И НЕОДНОРОДНАЯ ШИРИНА СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ

При простейшей оценке ширины линии люминесценции, основанной на использовании «золотого» правила квантовой механики создается впечатление, что эта ширина равна нулю. Реально это конечно не так. Всегда существует как минимум один механизм уширения. Это сам факт спонтанного оптического перехода, приводящий к конечности времени жизни возбужденного состояния. Связанная с ним ширина линии называется естественной или однородной. Как показали в 1930 году Вайскопф и Вигнер (Weisskopf, Wigner) учет конечности времени жизни возбужденного состояния приводит к лоренцевской спектральной зависимости интенсивности люминесценции

$$dW = \frac{\Gamma_{1 \rightarrow 2}}{2\pi} \frac{d\omega}{(\omega_{12} - \omega)^2 + (\Gamma_1^2/4)} \quad (7)$$

где ω_{12} - частота фотона с энергией, равной разности энергий между возбужденным и основным уровнями излу-

чающей системы, $\Gamma_{1 \rightarrow 2}$ - полная вероятность излучательного перехода (Она рассчитывается по золотому пра-



вилу, в которое в качестве плотности конечных состояний входит плотность состояний для фотонов с энергией $\hbar\omega_{12}$, а Γ_1 – обратное время жизни возбужденного состояния относительно всех, не обязательно оптических, каналов релаксации.

Такое спектральное распределение легко получить для излучения, состоящего из цугов монохроматических волн у которых случайным образом сбивается фаза. Такую классическую картинку рассматривал Лоренц. Вигнер и Вайскопф рассматривали квантовомеханическую систему, у которой в начальный момент времени вероятность найти электрон в возбужденном состоянии равна 1, а затем спадает во времени по закону $\exp(-\Gamma_1 t)$, которому соответствует временная зависимость коэффициента у волновой функции возбужденного состояния $a_1(t) = \exp\left(-\frac{\Gamma_1}{2} t\right)$.

В томе 3 курса теоретической физики Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица («Квантовая механика») предлагается следующий самосогласованный путь получения формулы (7). Подставив зависящую от времени волновую функцию возбужденного состояния в уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi,$$

получаем

$$i \frac{da_{\omega_2}}{dt} = \frac{\langle \omega_2 | V | 1 \rangle}{\hbar} \exp\left\{i(\omega - \omega_{12})t - \frac{\Gamma_1}{2} t\right\} \quad (8)$$

Причем в нулевой момент времени $a_{\omega_2}(0) = 0$. Тогда

$$a_{\omega_2} = \frac{\langle \omega_2 | V | 1 \rangle}{\hbar} \frac{1 - \exp\left\{i(\omega - \omega_{12})t - \frac{\Gamma_1}{2} t\right\}}{(\omega - \omega_{12}) - i\frac{\Gamma_1}{2}} \quad (9)$$

И вероятность того, что за все время жизни ($t \rightarrow \infty$) система перейдет в основное состояние испустив фотон частоты $\omega \lim_{t \rightarrow \infty} |a_{\omega_2}(t)|^2$ дается формулой (7).

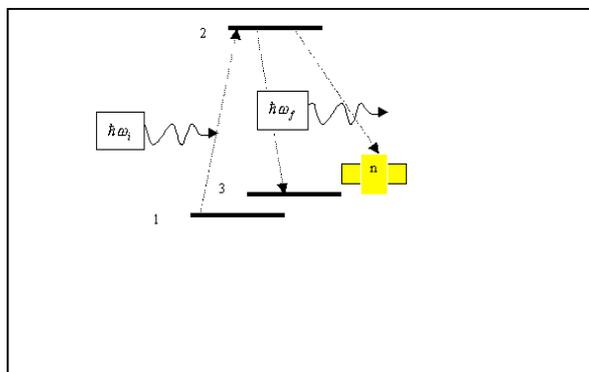
Однако в реальной жизни существует еще “тысяча и одна причина” уширения уровня. В газах – это эффект Доплера, приводящий к сдвигу частоты, в твердом теле случайные деформации, электрические поля создаваемые дефектами и просто фотонами. Говорят, что все эти механизмы приводят к неоднородному уширению линии.

ВОПРОС: Почему так назвали- однородное и неоднородное уширение?

РЕЗОНАНСНАЯ ФЛУОРИСЦЕНЦИЯ.

Все, что мы только что сказали про естественную ширину спектральной линии, вам так или иначе было уже известно. Вы знали соотношение неопределенности энергия-время. Однако вопрос о естественной ширине линии фотолюминесценции далеко не так тривиален.

Для того, чтобы осознать сколь условна граница, отделяющая фотолюминесценцию от рассеяния света, проанализируем модельную задачу о резонансной флуоресценции, возникающей при рассеянии света частота которого близка (практически совпадает) с характерной частотой оптических переходов.



Что изменилось по сравнению с только что рассмотренным случаем? Раньше мы считали что с вероятностью 1 в начальный момент времени электрон оказался в возбужденном состоянии с плохо определенной энергией. Физическая причина заселения этого состояния была нам неважна. При этом мы получили простой и общеизвестный ответ.

Здесь же мы предположим, что в начальном состоянии имеется фотон с точно определенной энергией. Это фотон поглощается и переводит электрон в возбужденное состояние (переход 1->2), а затем электрон сваливается в состояние 3 испустив новый фотон. Таким образом в конечном состоянии опять имеется фотон с хорошо определенной энергией и электрон в основном состоянии, так же с хорошо определенной энергией. Из промежуточного состояния 2 возможны и переходы в другие состояния "n". Поэтому время жизни промежуточного состояния очень мало. Какова будет ширина хорошо выделенной линии резонансной флуорисценции, связанной с переходом 2->3.

Имеется соблазн воспользоваться только что выведенной формулой и сказать, что эта ширина порядка обратного времени жизни в состоянии 2. Но если хорошо подумать, то нетрудно сообразить, что поскольку постановка задачи иная, то иной и ответ. Из закона сохранения энергии однозначно следует, что

$$\hbar\omega_f = \hbar\omega_i - E_1 + E_3 \quad (10)$$

Всяческие характеристики промежуточного состояния из этой великой формулы выпали напрочь. Закон сохранения энергии и все.

А вот интенсивность процесса (сечение рассеяния) будет очень сильно зависеть от соотношения между энергией начального фотона и энергетическим зазором $E_2 - E_1$.

$$d\sigma \propto \left| \frac{\langle f|V|2\rangle\langle 2|V|1\rangle}{\hbar\omega - \left(E_2 - i\frac{\Gamma_2}{2} - E_1\right)} \right|^2 d^3k_f \quad (11)$$

И так, естественная ширина уровня входит только в зависимость сечения рассеяния от энергии рассеиваемого фотона.

Интересно отметить, что если возбуждение осуществляется не монохроматическим лучом, а светом широкого спектрального состава, превышающего естественную ширину линии, то спектральная ширина рассеянного света оказывается равной естественной ширине уровня 2.

ВОПРОС: Почему это так?

ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОРИЕНТИРОВАННЫХ ПО СПИНУ ЭЛЕКТРОНОВ

В Лекции 3 мы выяснили, что при поглощении циркулярно поляризованного света в алмазоподобных полупроводниках рождаются ориентированные по спину электроны. Имеет место и обратный процесс – при рекомбинации ориентированных по спину электронов и неполяризованных дырок также рождаются циркулярно поляризованные фотоны. Используя изображенные на рисунке 2 лекции 3 правила отбора легко получить, что при рекомбинации электронов и дырок в Г-точке зоны Бриллюэна, циркулярная поляризация света численно равна проекции среднего спина электронов на направление наблюдения

$$\rho_c = (\vec{s}\vec{n})$$

В квантовых ямах, где низшему энергетическому состоянию соответствуют проекции спина дырки на нормаль к плоскости квантовой ямы $J_z = \pm 3/2$, поляризация люминесценции, в направлении нормали к плоскости квантовой ямы равна удвоенной проекции среднего спина электронов на это направление.

Зная среднее значение спина электронов рождающихся при поглощении циркулярно поляризованного света, и измерив поляризацию люминесценции, нетрудно найти отношение времени жизни фотоэлектронов к времени их спиновой релаксации τ/τ_s

Для объемного материала

$$\rho_c = \frac{0.25}{1 + \tau/\tau_s}$$

Этот ответ легко получить из стандартных уравнений баланса для электронов со спином вдоль и против оси z

$$\frac{dn_{1/2}}{dt} = 3G - \frac{n_{1/2} - n_{-1/2}}{\tau_s} - \frac{n_{1/2}}{\tau} = 0$$

$$\frac{dn_{-1/2}}{dt} = G - \frac{n_{-1/2} - n_{1/2}}{\tau_s} - \frac{n_{-1/2}}{\tau} = 0$$

$$n = n_{1/2} + n_{-1/2} = 4G\tau \quad n_{1/2} - n_{-1/2} = 2G \frac{\tau_s \tau}{\tau_s + \tau}, \quad \rho_c = \frac{s_z}{2} = \frac{n_{1/2} - n_{-1/2}}{4(n_{1/2} + n_{-1/2})} = \frac{0.25\tau_s}{\tau_s + \tau}$$

Оказывается, что если одновременно измерить деполяризацию люминесценции в поперечном магнитном поле (эффект Ханле), то можно определить оба времени τ и τ_s . Подробно о результатах теоретического и экспериментального исследования оптической ориентации в полупроводниках можно прочитать в сборнике “*Оптическая ориентация*” под редакцией Б.П. Захарчени и Ф. Мейера, изданном в 1989 году.