

## 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 этот круг попадают поглощение, отражение и преломление света в полупроводниковых кристаллах и структурах, рассеяние света, люминесценция и лазерная генерация, нелинейные явления, изучать которые можно долгие годы. Практически все эти явления 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 еще уже 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.

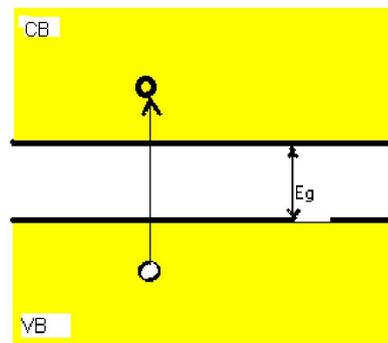
Наши изыскания будут связаны с областью частот, соответствующих низкочастотному краю фундаментальной полосы поглощения. Эта полоса в спектре поглощения обусловлена оптическими переходами между состояниями валентной зоны и зоны проводимости. Для начала будем считать, что валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости пуста. Тогда энергия фотона, вызывающего межзонные 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 электро-

на,  $\vec{A}$  - 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. Это выражение полезно запомнить на всю жизнь. Если ин-



тенсивность света не слишком велика то члены, содержащие вектор потенциал можно рассматривать как малые поправки. Действительно

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

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

Для оценки величины  $Z$  Ансельм предлагает взять интенсивность в  $1\text{вт/см}^{-2}$  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  $10^{15}\text{с}^{-1}$ , что соответствует энергии фотона в  $0.6\text{ев}$ . Этим значениям параметров соответствует характерное значение импульса

$$P_l \approx \frac{e}{\omega} \left(\frac{8\pi S}{c}\right)^{1/2} \approx 410^{-31} \frac{\text{кг м}}{\text{с}}. \text{ В тоже время характерный импульс, соответствующий движению}$$

электрона в атомном потенциале, то есть импульс электрона с энергий порядка  $1\text{ев}$  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. В общем далее при расчете поглощения света в полупроводнике мы будем описывать взаимодействие электрона и световой волны оператором возмущения

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

### 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.

И так, предполагая в будущем воспользоваться «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

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

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

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

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

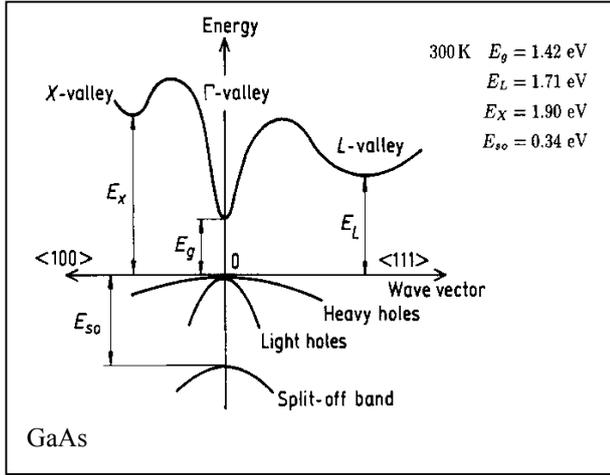
$$\langle C, \vec{k}_C | H' | V, \vec{k}_V \rangle = \frac{e}{mc} A \int_{\Omega} d^3r u_{C,\vec{k}_C}^* (\vec{e}\vec{p}) u_{V,\vec{k}_V} \quad (1.18)$$

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  $\bar{p}_{CV} = -i\hbar \int_{\Omega} d^3 r u_{C,\bar{k}_C}^* \nabla u_{V,\bar{k}_V}$ . 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 худо бедно определен, можно продвинуться дальше в вычислениях коэффициента поглощения или что тоже само (с точностью до коэффициента) вероятности оптического перехода.

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



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 уже завтра вспомним.

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  $N_{ph} v = N_{ph} c/n$ .  $c$  и  $n$  - скорость света в вакууме и коэффициент преломления среды. Тогда с учетом (1.10) коэффициент поглощения

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

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 ужасах будем говорить позже, а пока будем считать что дно зоны проводимости и вершина валентной зоны по спину не вырождены.) Или, скажем, PbSe и PbS у которых дно зоны проводимости и вершина валентной зоны лежат в боковой долине на пересечениях границы зоны Бриллюэна с осями  $\langle 111 \rangle$ .

В окрестности экстремума зоны закон дисперсии описывается законом. Правда в зависимости от симметрии масса такой квазичастицы может оказаться анизотропной

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

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

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

Используя (1.21) находим

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

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

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

Если  $\left(\bar{e}\bar{p}_{\mu,\mu'}(\bar{k}_0)\right) \neq 0$  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.

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

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  $C^{\alpha\beta} = \sum_{\mu,\mu',\bar{k}_0} p_{\mu,\mu'}^{(\alpha)} p_{\mu',\mu}^{(\beta)}$ . 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

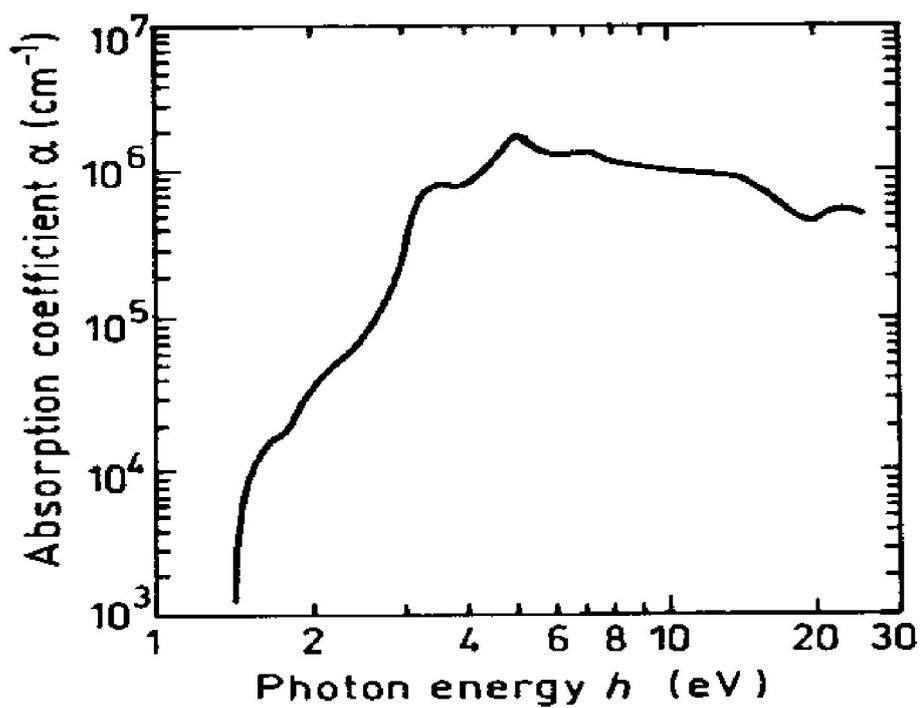
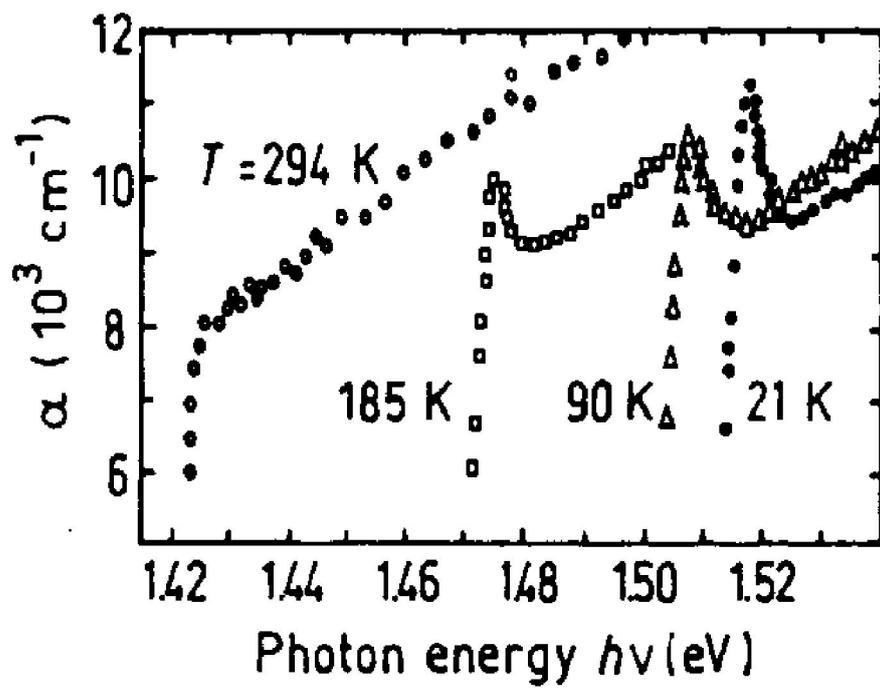
$$\left[ \frac{\partial}{\partial k} \left(\bar{e}\bar{p}_{\mu,\mu'}(k)\right) \right]_{\bar{k}=\bar{k}_0} \bar{k}' = \sum_{\alpha\beta} e_\alpha e_\beta \sum_{\substack{\mu,\mu' \\ \gamma,\lambda}} \frac{\partial}{\partial k'_\gamma} p_{\mu,\mu'}^\alpha \frac{\partial}{\partial k'_\lambda} p_{\mu',\mu}^\beta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

Таким образом, вместо (1.24) мы теперь имеем

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

#### 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 нуль-мерного 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?



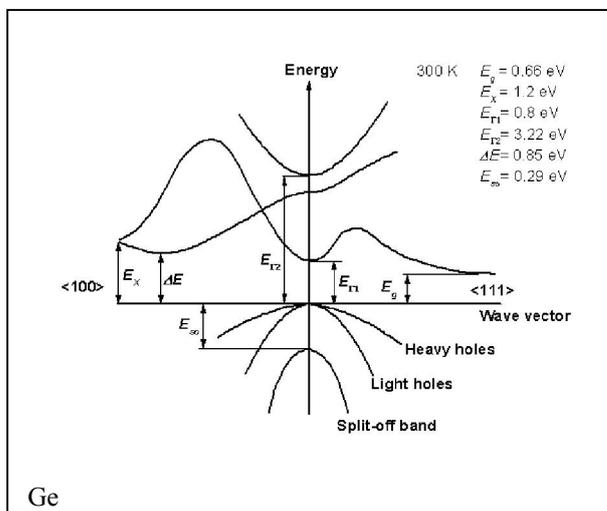
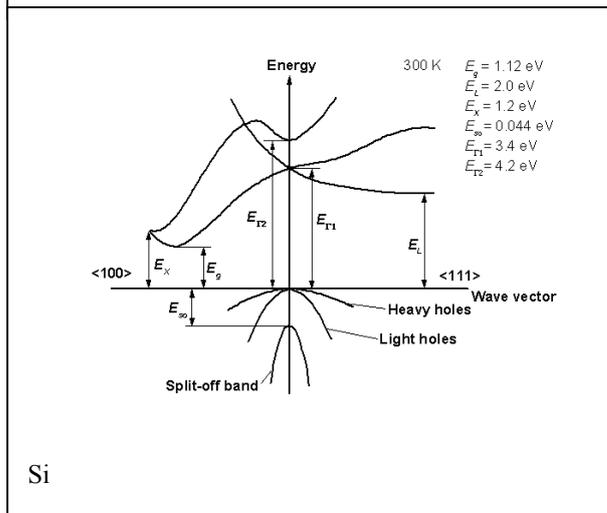
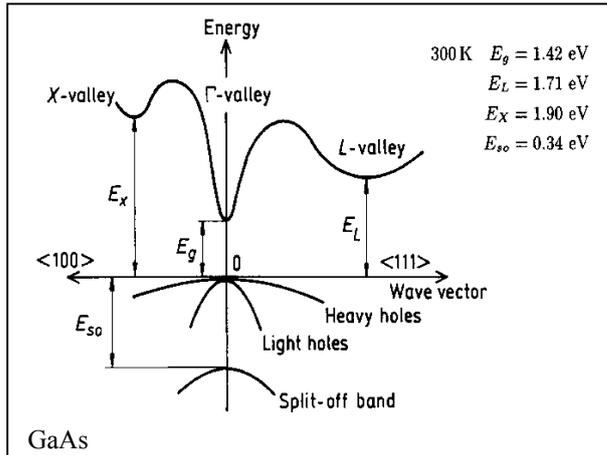
Спектральная зависимость коэффициента поглощения для кристалла GaAs в области фундаментальной полосы поглощения

## ЛЕКЦИЯ 2.

### ФОРМА КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ПОЛОСЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С НЕПРЯМЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ ПЕРЕХОДАМИ.

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. 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 ( $\Gamma$  и  $\Gamma_2$ ), причем у арсенида галлия экстремум  $\Gamma_2$  одновременно является дном зоны проводимости. В тоже время в случае Ge, Si 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 с точностью до неприятностей на самом краю, которые, как мы увидим ниже связаны с существованием экситонов этот край похоже пропорционален  $(\hbar\omega - E_g)^2$

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 вектора, для которых почему-то не выполняется закон сохранения импульса (квазиимпульса). Нарушение этого великого закона обусловлено каким-то нарушение трансляционной симметрии

задачи. Наиболее простой причиной таких нарушений являются тепловые флуктуации плотности кристалла или, иными словами, взаимодействие в ходе поглощения фотона рождающихся электрона и дырки 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. Переход происходит как бы в два этапа. На одном поглощается фотон, а на другом поглощается или испускается

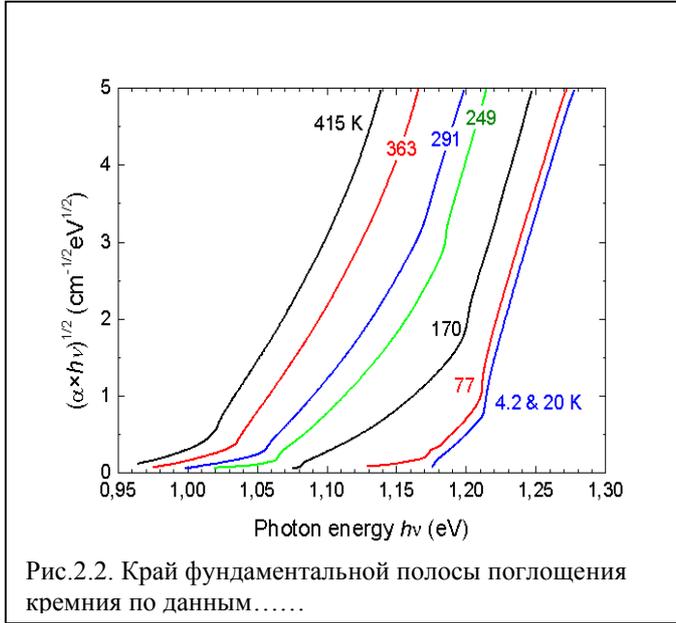


Рис.2.2. Край фундаментальной полосы поглощения кремния по данным.....

зонах 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  $\Gamma_{25}$  в центральный минимум зоны проводимости  $\Gamma_2$  или из состояния на границе зоны Бриллюэна  $L'_3$  на дно боковой долины  $L_1$  (для Ge, в случае кремния ниже лежит X долина). А на втором шаге электрон взаимодействует с фононом и переходит из состояний центра зоны проводимости в боковую долину или из вершины валентной зоны в освободившееся мест, но 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.

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,  $\epsilon_i$  - энергия начального состояния,  $\hbar\omega$  и  $\epsilon_n$  - энергия поглощаемого фотона и промежуточного (виртуального) состояния электрона для процесса в ходе которого сперва поглощается фотон, а  $\hbar\Omega$  и  $\epsilon_m$  - 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. Во втором члене (2.1) интересно попереставлять порядок матричных элементов, чтобы получилось что-нибудь красивое

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 испуска-

фонон. Какой из этих шагов происходит первым а какой – вторым, заранее не известно, но известно, что после первого шага электрон оказывается в некотором виртуальном 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 короче меньше время частица может находиться в виртуальном состоянии. Поэтому наибольший вклад в переход дают виртуальные состояния, для которых закон сохранения энергии выполняется наиболее точно и виртуальные состояния лежащие глубоких одзонах валентной зоны и в высоких под-

ния, 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

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

Ну а в коэффициенты пропорциональности  $C$  зависят от конкретного механизма электрон-фононного взаимодействия.

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 ( $\Gamma_2$ ) 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 десяток-другой meV, когда волновой вектор пробегает всю зоны

Бриллюэна, а  $\vec{k}_i$  и  $\vec{k}_f$  лежат в очень узкой окрестности дна зоны проводимости и вершины валентной зоны, где на десятки и сотни meV меняется кинетическая энергия электрона и дырки. По этим же причинам мы будем игнорировать незначительные изменения энергетического знаменателя.

Тогда для переходов с испусканием фонона

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

Здесь эффективная масса в боковой долине введена довольно специфическим образом  $m_c = N_C^{2/3} \sqrt[3]{m_{C1} m_{C2} m_{C3}}$ , а  $N_C$  - число боковых долин. С его подсчетом надо быть осторожным.

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. То есть 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 зависимостей поглощения от превышения энергии для каждого перехода 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. Фононов то много – акустические, оптические, продольные, поперечные. Для этого надо знать симметрию фононных функций. Как показано в учебнике Ансельма 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 НЕ ПЛОХО 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 учебнике Ансельма «Введение в теорию полупроводников». Эти формулы похожи но не одинаковы. Где разница? Кто прав? (Конечно же я уверен, что прав я, но в чем ошибка у Ансельма)

### ЛЕКЦИЯ 3.

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

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 примесным состояниями.
- 7.

#### СЛОЖНАЯ СТРУКТУРА ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ. ГАМИЛЬТониАН ЛАТТИНЖЕРА.

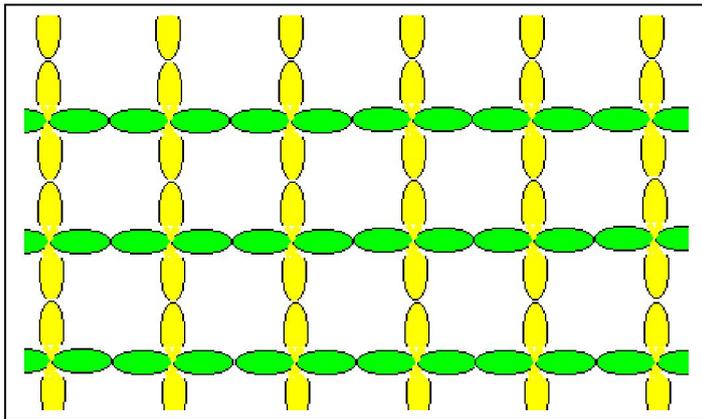
Как вы можете увидеть из имеющихся картинок зонной структуры германия, кремния, арсенида галлия – у всех этих материалов в вершине валентной зоны, расположенной в центре зоны Бриллюэна сходится несколько подзон с разной эффективной массой. Такие удивительные ситуации могут быть описаны в рамках приближения слабой и сильной связи, k-р метода или каким-то иным, более изощренным теоретическим расчетом.

Нашей целью, конечно же, не является проведение подробных точных расчетов из первых принципов. Пожалуй, у нас две задачи –

- 1) понять общие закономерности, определяющие 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 сходится несколько подзон.

И так как может образоваться экстремум в котором сходится несколько подзон:

#### МЕТОД СИЛЬНОЙ СВЯЗИ,



У алмазоподобных полупроводников валентная зона и зона проводимости образуются в результате гибридных s и p функций атомов ( $sp^3$  – гибридикация). Но мы для простоты будем считать, что 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 орбиталям волновые функции можно представить в виде восьмерок вытянутых вдоль соответствующих осей. На рис.1 зеленым цветом выделены орбитали X а желтым Y. (Здесь надо научиться рисовать и

обсуждать нормальную  $sp^3$  – гибридикацию)

При расчете методом сильной связи ширина образующейся зоны пропорциональна интегралу перекрытия волновых функций соседних атомов. При этом, чем шире зона тем меньше эффективная масса на ее дне или в ее вершине. Как легко увидеть из рисунка X орбитали хорошо перекрываются между атомами расположенными вдоль оси X и очень плохо 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 при малых отступлениях от этой точки изменение энергии дырки пропорционально квадрату k. Очень хочется воспользоваться методом эффективной массы. Но его надо как-то обобщить, как-то учесть зависимость массы от того, какая комбинация X, Y и Z орбиталей описывает Блоховскую амплитуду волновой функции дырки.

Много мудрых теоретиков изучали этот вопрос. Очень удачным является здесь использование метода инвариантов, являющегося прямым обобщением симметричного подхода к методу эффективной массы. И так мы хотим построить гамильтониан, описывающий ситуацию, когда каждому волновому вектору соответствует три состояния, имеющие разные Блоховские амплитуды. Такой гамильтониан можно представить в виде матрицы  $3 \times 3$ , компоненты которой являются функциями от волнового вектора (или квазиимпульса дырки). Эту мат-

рицу предлагается представить в виде комбинаций матриц компонент углового момента  $L=1$ . Таких матриц можно набрать 9 штук. Ровно столько, сколько компонент у произвольной матрицы  $3 \times 3$ . Это

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

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 списали эти матрицы из Квантовой механики Ландау и

Лифшица которые используют сферические функции  $Y_{1,0} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$ ,  $Y_{1,\pm 1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$ . Но не

надо удивляться, если в какой-то другой книге вы столкнетесь с несколько иными матрицами и, соответственно, с иными фазами у волновых функций. Страшно, если вы выпишите матрицы из одной книги, а волновые функции из другой. Тут открывается громадный простор для предсказания новых паранормальных явлений.

В чем прелесть введенных матриц  $L_\alpha$ ? 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 с помощью точно таких же формул, 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 Блоховские 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

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

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.

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

где  $m_0$  – масса свободного электрона,  $\Delta_0$  – параметр спин-орбитального взаимодействия, а параметры Латтинжера  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  дают значения массы дырки в зависимости от ориентации  $\mathbf{L}$  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. рис.2.1а). Ниже 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 [Luttinger 195??]

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

Базисные функции четырех вырожденных состояний в вершине валентной зоны имеют вид

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

В сферическом приближении ( $\gamma_3 = \gamma_2$ ) проекция спина дырки на направление ее квазиимпульса ( $J_p$ ) 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 электрона в первом приближении эти ужасы отсутствуют. В окрестности  $\Gamma$ -точки кинетическая энергия электрона дается обычным выражением

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

где  $\hat{p}_\alpha = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_\alpha}$  - оператор проекции квазиимпульса на одну из трех осей [100], 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 типа GaAs дается суммой выражений, стоящих в правой части (1.24) вычисленных для каждой из этих подзон. Это предположение оказывается почти правильным. Действительно коэффициент поглощения прямопропорционален 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 о тяжелых.

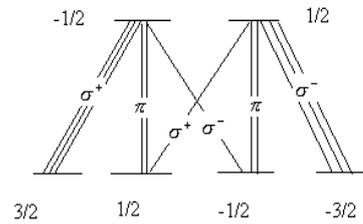
**ВОПРОС:** Во сколько раз отличаются приведенные плотности состояний в случае переходов в одну и ту же зону проводимости из подзон легких и тяжелых дырок, если масса тяжелой дырки составляет  $0.4m_0$ , а масса легкой дырки примерно равна массе электрона и составляет  $0.07m_0$ . (всего 2.2 раза).

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  $\langle S|p_x|X\rangle = \langle S|p_y|Y\rangle = \langle S|p_z|Z\rangle = p$

*Интересно, а как это доказать или показать?*

Тогда вероятности оптических переходов зависит от поляризации света. Правила отбора для оптических переходов представлены на рисунке 3.2.

Если поглощаемое излучение линейно поляризовано вдоль оси Z то при его поглощении в точности на краю фундамен-



тальной полосы поглощения рождаются электронно-дырочные пары в состояниях  $\left| \pm \frac{1}{2}e, \mp \frac{1}{2}h \right\rangle$ . При по-

глощении света, поляризованного по правому кругу пары в состоянии  $\left| -\frac{1}{2}e, \frac{3}{2}h \right\rangle$  рождаются в три раза ча-

ще чем пары в состоянии  $\left| \frac{1}{2}e, \frac{1}{2}h \right\rangle$ . То же самое соотношение справедливо для скорости генерации элек-

тронно-дырочных пар  $\left| \frac{1}{2}e, -\frac{3}{2}h \right\rangle$  и  $\left| -\frac{1}{2}e, -\frac{1}{2}h \right\rangle$  при поглощении света поляризованного по левому кругу.

Легко увидеть что при поглощении циркулярно поляризованного света рождаются электроны поляризованные

по спину. 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 гони после нескольких актов рассеяния эту поляризацию теряют а электроны релаксируют по спину медленно.

Ну а что произойдет, если импульс рождающихся электронов и дырок отличен от нуля. Эту задачу уже много лет назад решили Дьяконов и Перль [Оптическая ориентация под редакцией Захарчени и 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 ля 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 ( $I_k = \pm \frac{3}{2}$ ) переходят в состояния зоны проводимости, у которых спин

также направлен вдоль или против волнового вектора ( $s_k = \pm \frac{1}{2}$ ). Легко считать переходы для циркулярн

поляризованного светораспространяющегося вдоль волнового вектора. А что делать если направление распространения света о  $\mathbf{k}$  не совпадают.

Тогда 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  $\sigma^+, \sigma^-, \pi$  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  $\vartheta$ . Тогда считая что в повернутой системе координат ось  $X'$  совпадает с получаем проекцию вектор  $\mathbf{e}_+$  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  $\sigma^+$  равна  $(1 + \cos \vartheta)/2$ , а амплитуда света поляризованного по левому кругу 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 вдоль  $\mathbf{k}$   $3(1 - \cos \vartheta)^2/4$ . 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  $Z$ .  $G_{1/2,z} - G_{-1/2,z} = 3 \cos \vartheta \cos^2 \vartheta$ . 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.

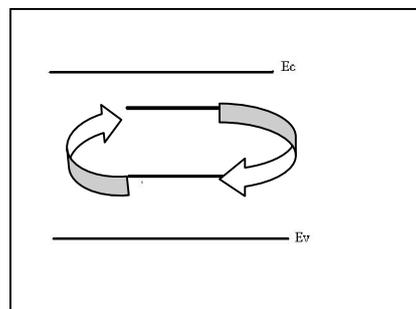
Удивительно но точно такой же результат получается для подзоны легких дырок. Подчеркнем, что результат мы получили не учитывая гофрировку валентной зоны.

## ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ, СВЯЗАННЫЕ С ПРИМЕСНЫМ СОСТОЯНИЯМИ.

1. Оптические переходы, связанные с примесями.

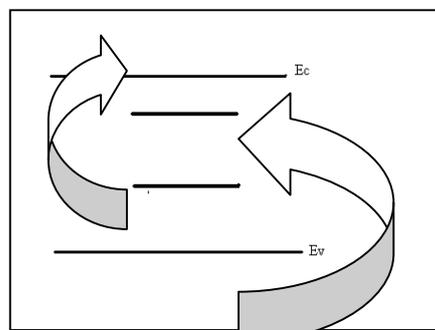
И так мы с вами разобрали два предельных случая – поглощение света при межзонных оптических переходах и поглощение света свободными носителями, так сказать, при внутризонных переходах. Прежде чем обратиться к взаимодействию света с колебаниями кристаллической решетки, заметим, что между этими предельными случаями лежит поглощение и спускание фотонов при оптических переходах с участием примесных уровней лежащих в запрещенной зоне.

А) Оптические переходы могут носить чисто внутрипримесных характер. 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, позволяют создать твердотельный аналог атомной ситуации, когда отдельные излучатели находятся на достаточно большом расстоянии друг от друга. Примером такой оптической среды например является рубин – 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 со связанного состояния в сплошной спектр



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

Ширина линии поглощения и испускания внутрипримесных переходов обычно носит неоднородный характер. 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 уширения. Эти зависимости существенно зависят от типа примесей – 1) мелких, описываемых в модели эффективной массы 2) глубоких, у которых волновую функцию электрона или дырки в нуле приближении естественно описывать методом сильной связи.

Энергии переходов между уровнями мелкой примеси составляют единицы – десятки миллиэлектрон-вольт. Что соответствует частотам порядка  $10^{-12} - 10^{-13}$  Гц. Это странная, пограничная область частот, между инфракрасной спектроскопией и СВЧ – техникой. С наблюдаемыми тут явлениями и техникой эксперимента можно ознакомиться по обзорным статьям [Е.М.Гершензон «Субмиллиметровая фотопроводимость в полупроводниках» IX Зимняя школа по физике полупроводников 1979г.].

Весьма интересна оптика примесей 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  $L=2$  (d-функции):

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

в кристаллическо поле кубической симметрии расщепляется на триплет ( $xy, yz, zx$ ) и дублет

( $(2z^2 - x^2 - y^2)$ ,  $(x^2 - y^2)$ ). Линия атомного спектра соответствующая переходу из или в такое состояние при помещении атома в кристалл должна расщепиться. Или по крайней мере ушириться.

Рис. Спектр Ербия?

Отметим, что при низких температурах в кристаллах кубической симметрии может сниматься вырождение даже триплетных ( $D=1$ ) 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 [ БИР].

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, удивительной становится узость этих полос. Она, как и узость экситонной линии, связана с ограничениями, накладываемыми на вероятность перехода законом сохранения импульса. В случае экситона закон сохранения импульса из всего спектра состояний свободного экситона выделял одно, в котором импульс экситона равен импульсу поглощаемого фотона. Локализованные на примеси электрон или дырки не имеют определенного значения импульса. Поэтому возможными оказываются переходы в зонные состояния с самыми

различными значениями волнового вектора  $0 \leq k \leq 2\pi/a$ , где  $a \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$  радиуса локализованного со-

стояния с энергией связи  $E$ . Таким образом и кинетическая энергия носителя в конечном состоянии оказывается распределенной от нуля 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  $|\Psi(E, k)|^2$ .

Для мелкого, водородоподобного донора

Форма линии фотоионизации дается формулой

$$\alpha = \frac{128\pi e^2 \hbar}{3cnmE_B} N_D \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{E_B} - 1\right)^{3/2}}{\left(\frac{\hbar\omega}{E_B}\right)^{5/2}}, \quad ,?????????$$

ЗАДАЧИ:

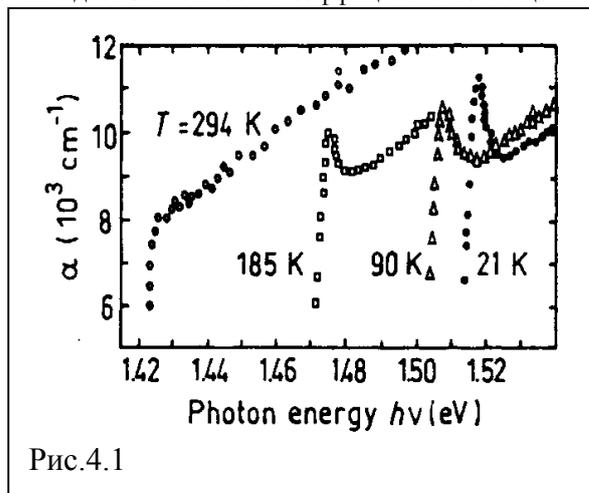
- 1) В рамках модели Луковского (модели потенциала нулевого радиуса), волновая функция глубокого примесного центра имеет вид  $\Psi(E, r) = \frac{?}{\sqrt{4\pi a r}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$ , где характерный радиус локализованного состояния связан с энергией связи соотношением  $a = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$ .

Постройте форму линии фотоинизации такого центра от энергии возбуждающего переход фотона.

## ЛЕКЦИЯ 4. ЭКСИТОН

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 непрямых полупроводников.

1. Пришла пора вернуться 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  $E_g$ . Тепловые колебания влияют на адиабатический потенциал, в котором движется электрон. Это – тема отдельной песни.

Но кроме того ясно видно, что край фундаментальной полосы поглощения имеет сложную структуру, совсем не похожую на гладкую корневую зависимость. При комнатной температуре или с высоты птичьего полета (рис.1.3.б) можно абстрагироваться и предположить, что зависимость  $\alpha$  от  $\hbar\omega - E_g$  действительно носит корневой характер. Но при внимательном рассмотрении, это конечно же не так. На рисунке 4.1. ясно видно, что при низких температурах на краю фундаментальной полосы имеется максимум. Очень соблазнительно объяснить его возникновение наличием какой-то примеси. Однако, максимум (а иногда и целая серия) 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.

Очень соблазнительно объяснить его возникновение наличием какой-то примеси. Однако, максимум (а иногда и целая серия) 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 лекции1 теории не оявляется никаких максимумов, а в жизни они есть? Дело в том, что при выводе формул (1...) мы игнорировали взаимодействие между электронами. Точнее говоря, мы стартовали от одноэлектронного приближения в рамках которого взаимодействие с другими электронами моделируется средним потенциалом, «периодическим с периодом кристаллической решетки». В общем-то это приближение очень часто дает хорошие результаты. Очень часто 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). Похоже ситуация существенно отличается от средней.

Впервые на это обстоятельство обратил внимание Я.И.Френкель (1931г.). В 1921 году А.Эйнштейн получил Нобелевскую премию «За важные физико-математические исследования, особенно за открытие – законов фотоэлектрического эффекта». Так вот Френкель в своей работе показал, что поглощение фотона в идеальном кристалле может и 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 квазичастица. 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. Правда теоретическое описание этих экситонов существенно отличается от первых расчетов Френкеля. В полупроводниках мы обычно имеем дело с экситонами Ванье-Мотта. Фокус в том, что в полупроводниках энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой сравнительно мала и радиус связанного состояния электрона и дырки во много раз превосходит постоянную решетку. В этих условиях для описания скоррелированного движения электрона и дырки можно воспользоваться приближением эффективной массы. Если на время забыть про сложную структуру валентной зоны, то ситуация оказывается очень похожей на скоррелированное 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 различия не принципиальные.

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 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 скоррелированного движения электронно-дырочной пары. Строго это доказано в работе Эллиота, а мы этим просто воспользуемся. То есть волновой вектор, рожившейся 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 в том, что представляет собой волновая функция относительного движения. Общую постановку задачи различные ее частные решения можно найти в книгах [Ансельм; Экситоны ...]. Мы же разберем только экситон Ванье-Мотта.

И так в рамках приближения эффективной массы мы можем спокойно списывать результаты из квантовой 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  $\epsilon$  - диэлектрическая проницаемость. Свя-

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

$$E_{e-h,n} = -\frac{\epsilon_{ex}}{n^2} \tag{4.3}$$

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

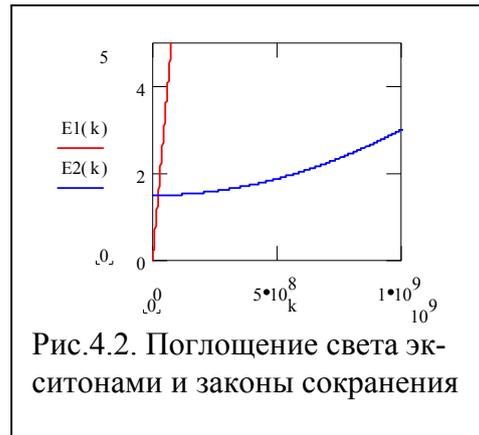


Рис.4.2. Поглощение света экситонами и законы сохранения

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

Интересно, что для анализа поглощения света (и излучательной рекомбинации) электрона и дырки совсем не нужно знать всю волновую функцию относительного движения. Мне лично, представляется очевидным, что при поглощении фотона электрон и дырка рождаются в одной и той же точке кристалла и следовательно коэффициент поглощения прямо пропорционален  $|\varphi(\mathbf{0})|^2$ . (Говорят, что это тоже доказал Эллиот). Так вот точно в центре экситона отличны от нуля только волновые функции, соответствующие состояниям s-типа (состояниям с нулевым орбитальным моментом  $l = 0$ ). Для таких связанных состояний экситона (атома водорода)

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

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 уширины.

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 ухищрениями 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 оптических переходов.

В результате однородного уширения идеализированный  $\delta$ -пик поглощения превращается в Лоренцовский контур [Ландау и Лифшиц? Релятивистская Квантовая механика....]

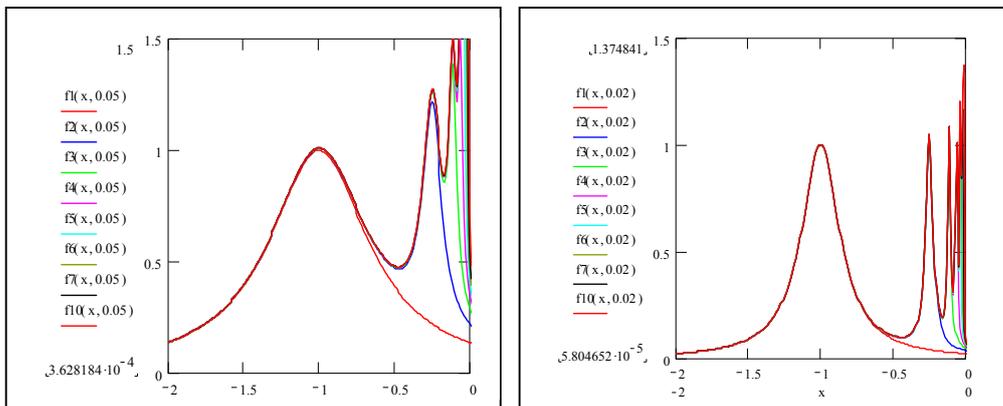


Рис.4.2 Теоретический расчет экситонных пиков на краю фундаментальной полосы поглощения.  $\alpha$  – измерен в произвольных единицах,  $x$  – энергия фотона отсчитанная от  $E_g$  и измеренная в единицах энергии связи экситона. Второй аргумент функции  $f$  – параметр  $\gamma$ .

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

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

На рисунке 4.2 представлены примеры экситонных спектров поглощения на краю фундаментальной полосы поглощения, рассчитанные по формуле

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

Здесь безразмерный параметр  $\gamma = \Gamma_1/(4\varepsilon_{ex})$ .

Получилась картинка похожая на кусочек 4.1 с энергией меньшей ширины запрещенной зоны. Правда для  $x \rightarrow 0$ , при внимательном рассмотрении возникают некоторые вопросы, но их еще надо увидеть.

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,

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

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

$a_B = (\hbar^2 \varepsilon)/(\mu e^2)$  - боровский радиус экситона.

Таким образом вместо простого суммирования по конечным состояниям электронно-дырочной пары (1.) при расчете 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 по параметрически это утверждение совершенно

<sup>1</sup> 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 множитель описывает вероятность оптического перехода, которая, как мы договорились, пропорциональна  $\Gamma_n \propto |\varphi_n(0)|^2$ .

справедливо, однако реально под корнем стоит энергия экситона, умноженная на  $\pi^2$ . То есть реально надо сравнивать  $\hbar\omega - E_g$  с десятью боровскими энергиями экситона.

И так наша уточненная теория в пределе перешла в простую. Это хороший признак. Теперь, посмотрим, как ведет себя поглощение вблизи края фундаментальной полуполосы  $\hbar\omega \rightarrow E_g$ ,  $z \rightarrow \infty$ .

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

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

6. До сих пор мы анализировали поглощение света для полупроводников с прямыми разрешенными переходами. Что же произойдет в случае запрещенных переходов. В этом случае коэффициент поглощения пропорционален  $|\nabla\varphi|_{r=0}^2$ . 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. В спектрах люминесценции экситонов этого кристалла наблюдалось до ??? линий (гораздо больше чем в арсениде галлия).

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 вдалеке отстоящих друг от друга точек зоны Бриллюэна. Но, не смотря на большие различия в волновых векторах 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 формальные трудности, так как в боковых долинах масса электрона анизотропна. Решение задачи уже не найти в учебнике, но связанные состояния электрона и дырки все равно существуют. А вот в спектре поглощения они проявляются существенно не так как в случае прямых оптических переходов.

Дело в том, что в случае не прямых переходов полный импульс экситона не совпадает с импульсом поглощаемого фотона. В результате даже для связанных состояний электроннодырочной пары поглощение связано с рождением любых экситонных состояний с заданной полной энергией, являющейся суммой кулоновской энергии, энергии относительного движения электрона и дырки, и поступательной энергии 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 коренные особенности, которые дотошный читатель может попытаться обнаружить на рисунке 2.2., дающем на экспериментальные зависимости коэффициента поглощения для кристаллов Si.

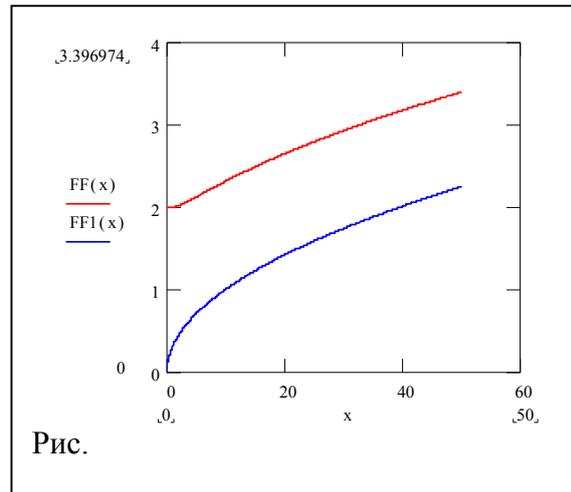


Рис.

## РЕЗЮМЕ.

Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой приводит к существенному изменению края фундаментальной полосы поглощения полупроводника. Для фотонов с энергией меньшей  $E_g$  поглощение света становится возможным из-за образования, связанных с образованием 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?
- 3.

## ЛЕКЦИЯ 5. ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДИКА

1. Что такое деформация.
2. Индуцированное деформацией изменение вида 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 доны 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 оно в той или иной степени деформируется. 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  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}'(\mathbf{r}) - \mathbf{r} = const$  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

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

Последнее упрощение связано с тем, что, как правило, деформации малы. Антисимметричная часть тензорной производной

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

писывает локальный поворот выбранного элемента твердого тела на угол  $\Phi$  (это вектор).

### 2. Индуцированное деформацией изменение вида тензора диэлектрической проницаемости

К каким изменением оптических свойств полупроводника кубической симметрии приводит деформация кристалла? Многие качественные результаты можно получить просто из соображений симметрии. Для этого вспомним, что оптические свойства среды характеризуются тензором диэлектрической проницаемости  $\boldsymbol{\varepsilon}$  или тензором «непроницаемости»  $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\varepsilon}^{-1}$ . Далее мы будем рассуждать именно о тензоре  $\boldsymbol{\eta}$ . Во первых потому что это тензор непосредственно входит в волновое уравнение, а во вторых потому что диэлектрическая проницаемость и деформация у нас обозначаются одной и той же буквой. Из соображений симметрии вытекает, что в кристалле кубической симметрии тензоры второго ранга вырождаются в скаляры.

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

Можем ли мы это доказать?

Что же произойдет при деформации такого кристалла? Считая ее малой и раскладывая диэлектрическую проницаемость в ряд по деформации получаем

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

тензор четвертого ранга  $\mathcal{P}$  называется тензором упруго-оптических постоянных. Наряду с ним часто используется пьезооптический тензор  $\pi_{ij\alpha\beta}$ , связывающий поправки к обратной проницаемости с тензором напряжений  $t_{\alpha\beta}$ . Связь между деформацией и напряжениями задается модулями упругости

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

где  $S$  – тензор упругой податливости кристалл.

Зададим себе вопрос сколько феноменологических параметров надо определить, чтобы задать пьезооптические свойства кристалла кубической симметрии. Сколько независимых, отличных от нуля компонент содержит тензор  $\mathcal{P}$ ?

Вообще-то этот тензор задается матрицей, содержащей  $3^4 = 81$  коэффициентом. Однако в кубическом кристалле остается всего три независимых числа  $p_{11}, p_{12}, p_{44}, S_{11}, S_{12}, S_{44}$ . И т.п. 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 потом сдавливают. В силу закона Пуассона в этом случае  $t_{ij} = t \delta_{ij}$ ,

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

И так при гидростатическом сжатии кристалл кубической симметрии остается кристаллом кубической симметрии. Диэлектрическая проницаемость (и непроницаемость) остаются скалярами. С точки зрения оптика 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 врождение. 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 кристалл становится оптически двухосным.

### **3. Оптические характеристики кристаллов пониженной симметрии (самостоятельно)**

3.1. Что такое линейных дихроизм?

3.2. Давайте-ка докажем ,что у кристалла, тензор диэлектрической проницаемости которого имеет три разных собственных значения, имеется две оптические оси..

### **4. Связанная с деформацией перестройка зонной структуры полупроводников.**

У так мы поняли, как влияет деформация на оптические свойства кристалла. Мы построили феноменологическую теорию

Давайте теперь попробуем разобраться с влиянием деформации на оптические свойства полупроводника на микро-уровне. Здесь тоже не будет расчетов из первых принципов. Будем строить феноменологию но с пониманием процессов, происходящих в кристалле.

Первый вопрос: можно ли хотя бы в принципе пытаться решать задачу по теории возмущений? Рисунок 5.1 демонстрирует причину наших волнений. На нем мы пытаемся сопоставить два самосогласованных потенциала, в которых движется электрон. Формулу для потенциала мы взяли очень простую

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

(Вы конечно понимаете, что 0.025 в знаменатель я вставил исключительно для того чтобы избежать расходимостей, которые очень не нравятся компьютеру. А вот зачем-то мне, при моделировании, понадобилось ввести эту семерку в формулу. Без нее ответ начал уезжать вниз. С чего бы это?)

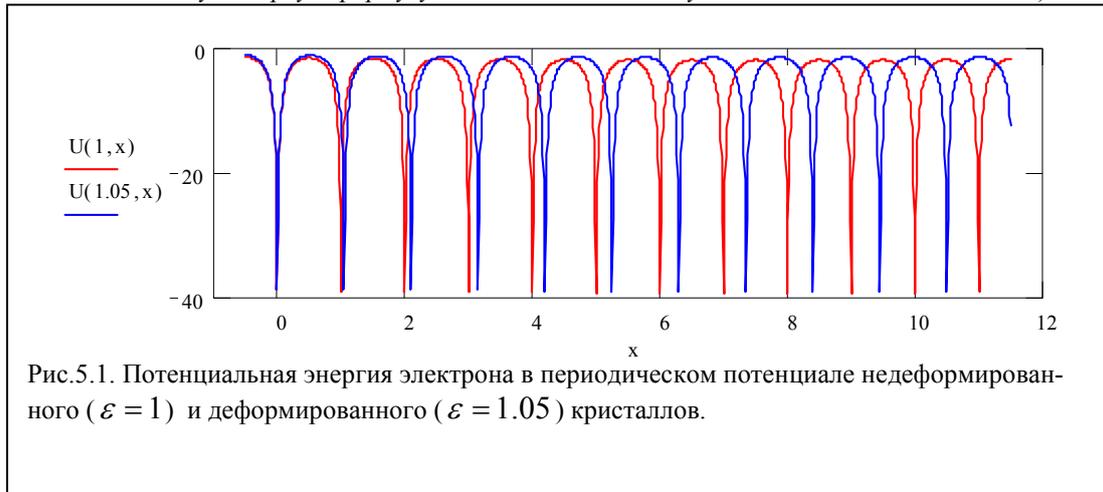


Рис.5.1. Потенциальная энергия электрона в периодическом потенциале недеформированного ( $\varepsilon = 1$ ) и деформированного ( $\varepsilon = 1.05$ ) кристаллов.

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 лишь малость возмущен. А вот в окрестности  $x=10$ , на минимум потенциала  $U(1, x)$  приходится максимум потенциала  $U(1.05, x)$  и наоборот. Какая же это теория возмущений? Так можно ли вообще рассматривать деформацию на микроскопическом уровне, как малое возмущение? Ведь создать деформацию, которая приведет к изменению положения какой-то элементарной ячейки кристалла на размер этой ячейки может даже ребенок? Что-то тут не так.

Мудрые отцы-основатели теории твердого тела ответ на это вопрос нашли. 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, а не абстрактные ангстремы, сантиметры, футы и прочие доли меридиана или части эталона. Ну а если перейти к новым единицам длины, то в деформированном случае наша модельная функция станет

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

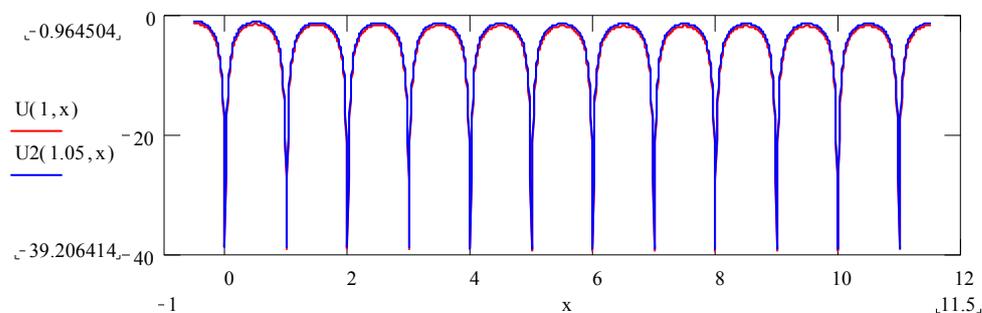


Рис.5.1.б. С птичьего полета потенциалы выглядят одинаково

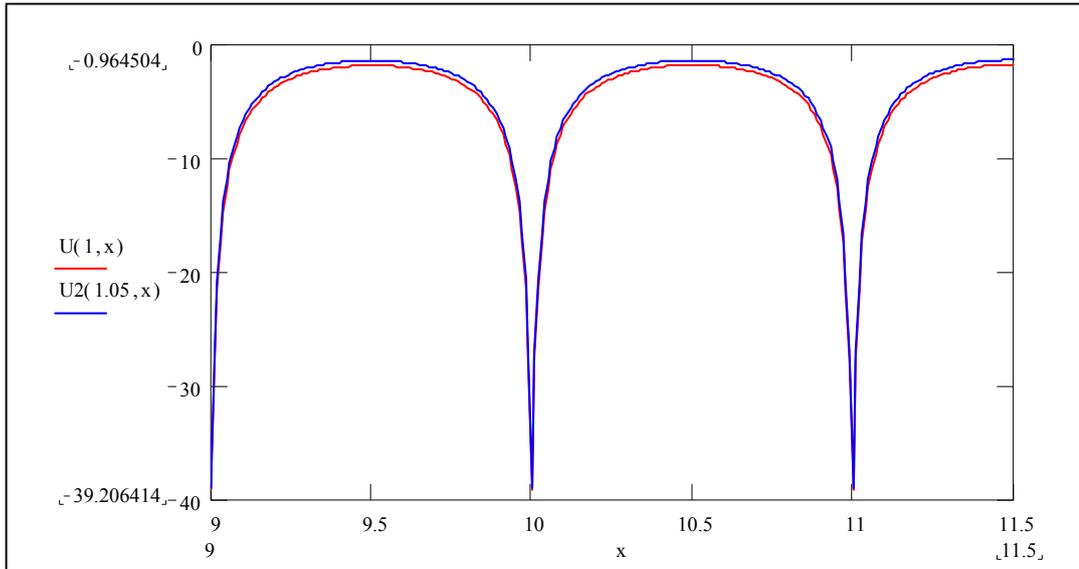


Рис.5.1.в. Под микроскопом результаты отличаются, но очень мало.

И так мы действительно предъявили алгоритм, при использовании которого малую деформацию действительно можно рассматривать, как малое возмущение  $V_{def}(\epsilon)$ . 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 Бриллюэне. 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 (деформ.потенциалом)*.

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

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

В результате, деформация приводит к изменению ширины запрещенной зоны, 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  $\hat{\epsilon}$ . 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

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

Сдвиг дна зоны проводимости прямо пропорционален следу тензора деформации

$$E = aSp\varepsilon$$

Теперь о матричном элементе оптического перехода. По тем же соображениям симметрии можно сказать что примесь состояний других зон приводит к поправке к матричному элементу оптического перехода вида

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

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 типа произведением малостей ( $\mathbf{k}\mathbf{k}$ ). 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 (боковые долины лежат ниже центра) 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 общих формулах. Слава богу 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.

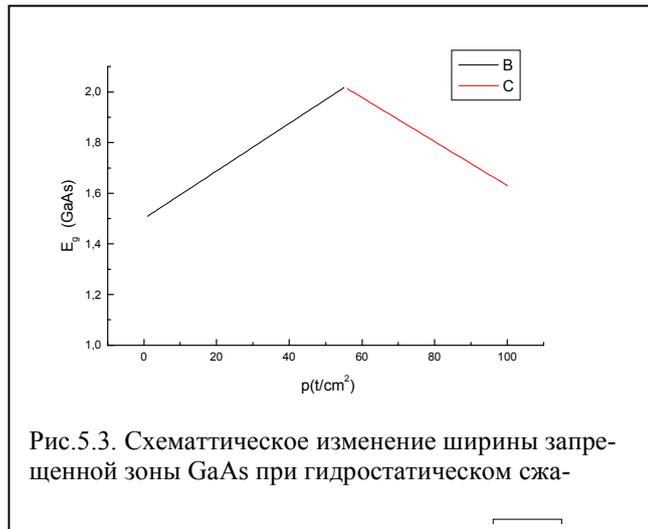


Рис.5.3. Схематическое изменение ширины запрещенной зоны GaAs при гидростатическом сжатии

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  $6 \cdot 10^4 \text{ kGcm}^{-2}$  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 то говоря поляризовано. Но суммирование по всем боковым долинам в кубическом материале приводит к неполяризованному поглощению. 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, как и конечные значения волнового вектора понижает симметрию и приводит к снятию 4-х кратного вырождения вершины валентной зоны. Исходя из соображений симметрии легко написать общее выражение для гамильтониана дырки в деформированном кристалле.

$$H = \left( A + \frac{5}{4} B \right) k^2 - B \sum_{\alpha} \mathcal{F}_{\alpha}^2 k_{\alpha}^2 - \frac{D}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha \neq \beta} \{ \mathcal{F}_{\alpha} \mathcal{F}_{\beta} \} k_{\alpha} k_{\beta} + \left( a + \frac{5}{4} b \right) Sp \varepsilon - b \sum_{\alpha} \mathcal{F}_{\alpha}^2 \varepsilon_{\alpha\alpha} -$$

$$- \frac{d}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha \neq \beta} \{ \mathcal{F}_{\alpha} \mathcal{F}_{\beta} \} \varepsilon_{\alpha\beta}; \quad \{ \mathcal{F}_{\alpha} \mathcal{F}_{\beta} \} = (\mathcal{F}_{\alpha} \mathcal{F}_{\beta} + \mathcal{F}_{\beta} \mathcal{F}_{\alpha}) / 2$$

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

В сферическом приближении ( $b = d/\sqrt{3}$ ,  $B = D/\sqrt{3}$ ) при растяжения кристалла вдоль оси  $n$ , минимальной энергии дырок соответствуют спиновые состояния с максимальной проекцией спина дырки  $\mathbf{J}$  на  $\mathbf{n}$ . ( $\mathbf{Jn} = \pm 3/2$ ). 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  $n$  направленном вдоль осей высокой симметрии ([100] [111]), а для произвольного направления  $n$  основному состоянию уже не соответствует определенной значение проекции спина дырки на какую-то ось.

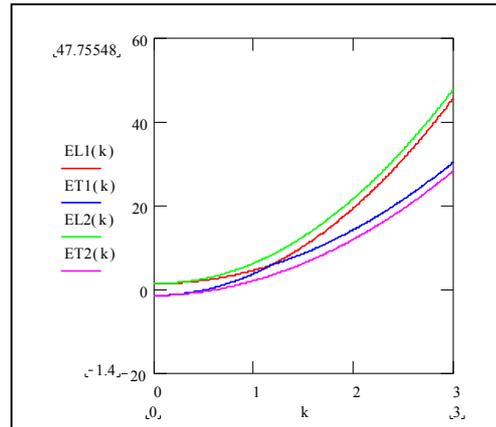
Энергетический спектр дается формулой

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

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

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

Вырождение на вершины зоны снимается, массы оказываются анизотропными. См. рисунок на котором рассчитан закон дисперсии для одноосной деформации. Разобраны два случая 1) волновой вектор направлен вдоль оси сжатия и 2) перпендикулярно к этой оси. Довольно быстро возникает непараболичность спектра. 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 дно зоны проводимости определяется состояниями с проекцией спина на ось деформации  $\pm 1/2$  на краю фундаментальной полосы поглощение света с поляризацией вдоль оси деформации в 4 раза более сильное 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 край ширина запрещенной зоны уменьшается. См. рис. 4.1. К тому причин много. Увеличивается объем кристалла. Это эквивалентно «гидростатическому растяжению» а пр 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.

*Интересно бы оценить роль первого механизма самостоятельно.*

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

1. Феноменологическое описание действия электрического поля на оптические свойства полупроводника
  - 1.1. Поправки к тензору диэлектрической проницаемости
  - 1.2. Эффект Поккельса (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

1. При всех наших рассуждениях раньше предполагалось, что поляризация среды связана с внешним электрическим полем линейным образом и 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  $\frac{E_0}{E_B} \approx 4 \cdot 10^{-8}$ . Эту оценку полезно сделать 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 параметр прямо скажем не очень велик, но и он уже и не так мал.

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, линейного дихроизма.

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

Интересно отметить, что принято выделять «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  $E_\alpha E_\beta \Rightarrow r_{k,l} \Rightarrow \Delta \eta_{ij}$ .

Предложите эксперименты с помощью которого удалось бы разделить вклады от «истинного» и «ложного» эффектов Керра.

Однако во многих из известных нам полупроводниковых кристаллах может реализовываться линейный электрооптический эффект (эффект Поккельса). 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  $\hat{\epsilon}$  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 компоненты у которых все три индекса различны  $r_{xyz} = r_{yxz} = \dots = r_{yxz}$ .

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

Ни одно из базовых вращений, совмещающих тетраэдр сам с собой (Вращение на 120 градусов вокруг оси [111] на 180 градусов вокруг осей [001]) не позволяют сделать заключения об обращении в ноль компонент  $r_{xyz} = r_{yzx} = \dots = r_{yxz}$ . Лишь инверсия, которая должна с одной стороны 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.

Где он расположен? А вот у очень близкого по структуре GaAs этого центра нет. Соответственно у германия и кремния эффект Поккельса не возможен, а вот у кристаллов с решеткой цинковой обманки он должен быть

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 очень быстродействующие. На их основе можно создавать приборы, переключающие световые потоки за времена в  $10^{-9}$ с. А вообще то сейчас создают оптические схемы, работающие уже с импульсами фемто- секундной длительности.

НУМЕРАЦИЯ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРА ВТОРОГО РАНГА.

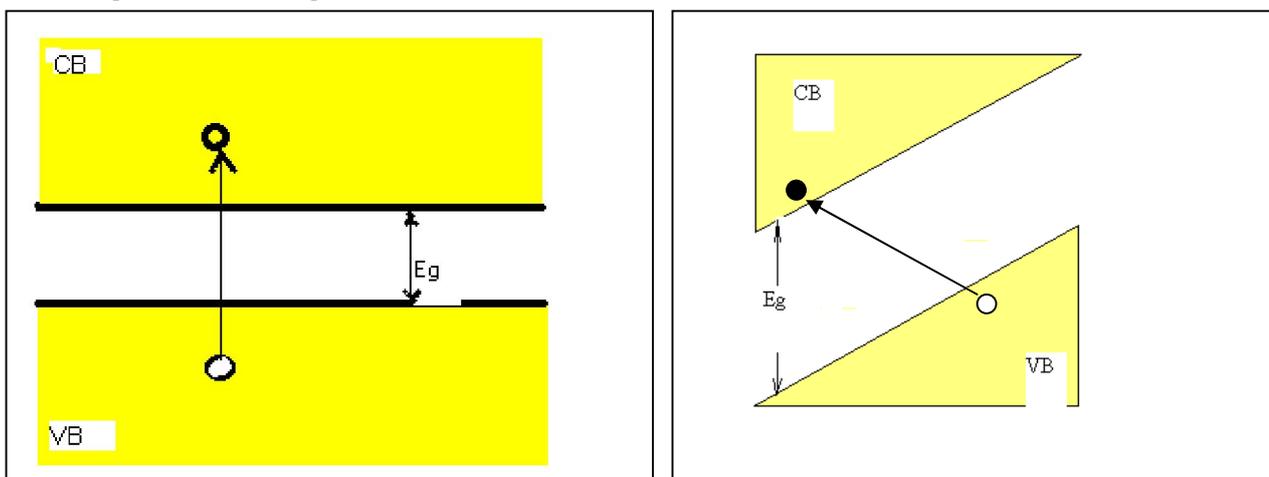
$$\begin{pmatrix} xx & xy & xz \\ yx & yy & yz \\ zx & zy & zz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 9? & 2 & 4 \\ 8? & 7? & 3 \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

## 2. Эффект Келдыша-Франца.

Рассмотрим теперь, как влияет электрическое поле на край фундаментальной полосы поглощения. Как всегда с самого начала мы вынуждены удивиться тому, насколько могут оказаться обманчивыми стереотипные представления о том, что при наличии малого параметра поправки к характеристикам кристалла в отсутствие возмущения 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.

*Интересно, кто из Вас может внятно объяснить, в чем разница между разложением в ряд Тейлора и асимптотическим разложением.*

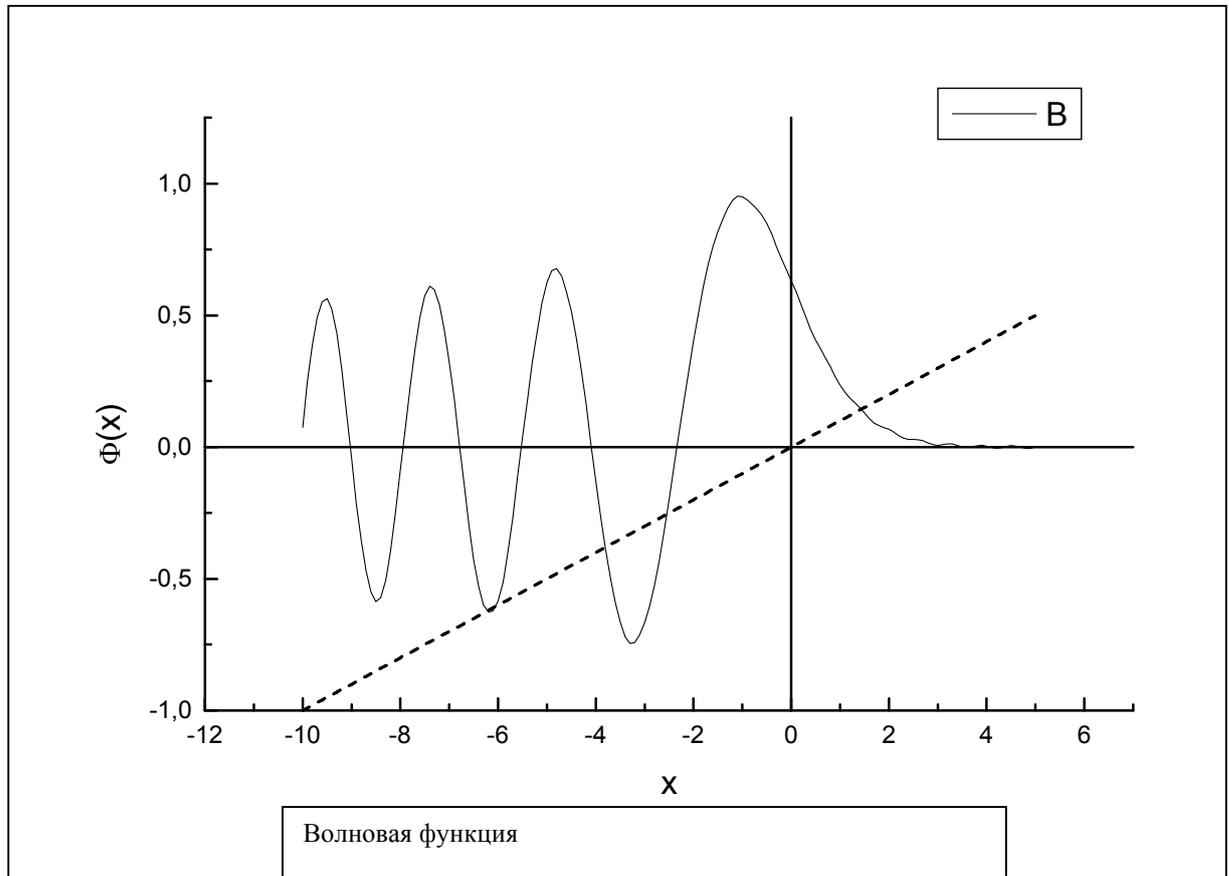
И так, забыв на время о кулоновском взаимодействии между электроном и дыркой, начнем с простой картинке края фундаментальной полосы. Мы говорили о возникновении края, как такового, потому, что при полностью заполненной валентной зоне и пустой зоне проводимости не существует пары из заполненного и пустого электронных уровней, энергетический зазор между которыми меньше  $E_g$ . Даже слабое электрическое поле меняет ситуацию фатальным 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.



Такое естественное и привычное свойство – наличие широкой запрещенной зоны в плотности состояний исчезает мгновенно при сколь угодно малом поле. Это свойство ведет себя как мед в горшочке Винни-Пуха. Только что оно было и вот его уже совсем нет. В это 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 нам долго и упорно объясняли на первых лекциях при поглощении света электрон и дырка рождаются в одной и той же точке кристалла, а разность потенциалов набегает

лишь по меркам пространственной раздвижки. Оно конечно так, но в отличие от классической механики квантовая допускает интересную возможность для электронно-дырочной пары – родиться в запрещенной зоне, в одной и той же точке, но с отрицательной кинетической энергией, а потом разлететься и оказаться в разных точках пространства, но зато уже с положительной кинетической энергией. В общем хорошо бы найти волновую функцию электрона и дырки в состояниях, разность энергий между которыми  $\Delta E = \hbar\omega < E_g$ .



Серьезный, последовательный анализ этой задачи можно найти в учебнике Ансельма и статье Келдыш, Константинов, Перель ЖЭТФ. Популярное и подробное ее изложение в Лекции [И.А.Меркулов, В.И.Перель «Электропоглощение в полупроводника» Материалы шестой зимней школы по физике полупроводников Л.1974, 220-256; Полезно внимательно прочитать параграф из Квантовой механики Ландау и Лифшица, посвященный описанию состояния электрона в однородном электрическом поле].

Мы попробуем разобрать схему теоретического расчета волновой функции носителей в квазиклассическом приближении. *Но явно не успеваем.*

Уравнение Шредингера для частицы в однородном электрическом поле

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

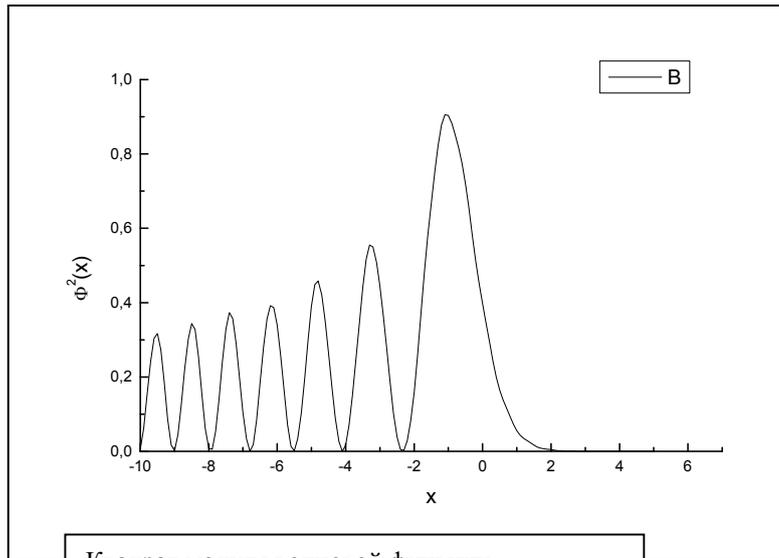
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + F(z - z_0)\psi(z) = 0$$

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

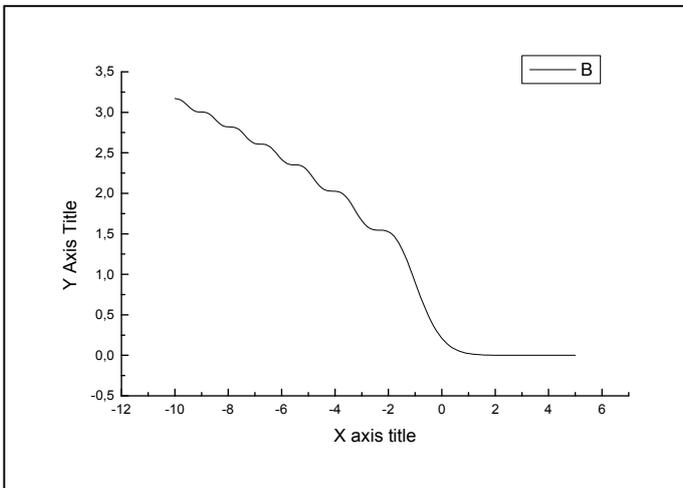
$$\psi(\xi) = A\Phi(\xi), \quad \Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^2}{3} + u\xi\right) du$$

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

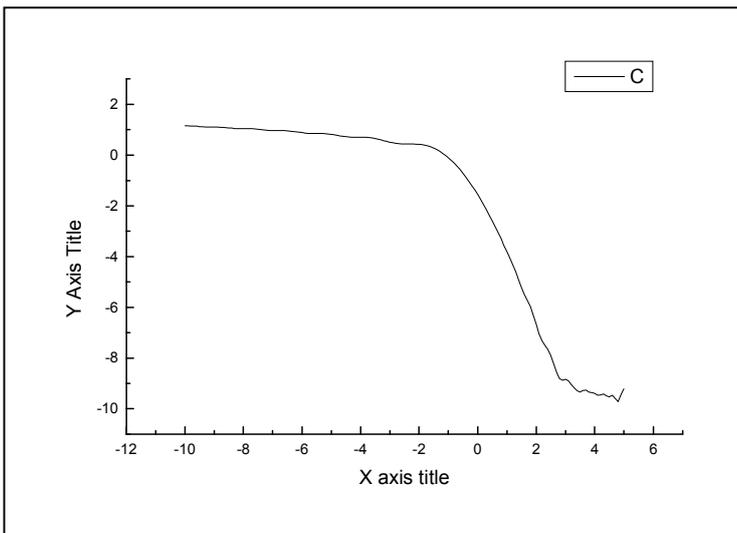
Обратим внимание на то, что функциональную зависимость показателя экспоненты в формуле описывающей эффект Келдыша–Франца можно было бы предсказать без детальных расчетов, основываясь только на



Квадрат модуля волновой функции



Результат проинтегрирован по перпендикулярным компонентам импульса



Логорифм коэффициента поглощения

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 туннельного импульса по туннельной траектории. Характерное значение импульса, соответствующего указанной энергии  $p_0 = \sqrt{2m(E_g - \hbar\omega)}$ , 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 дополнительно и числовой коэффициент. 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 измениться, но общая функциональная связь сохраниться.

#### ВОПРОСЫ

1. 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 искусственное двулучепреломление наблюдаемое для света, распространяющегося вдоль электрического поля. Поперечный электрооптический эффект – для света, распространяющегося поперек электрического поля.

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

Квазиклассическое описание для полупроводников с простой зонной структурой

Полупроводники типа GaAs, поляризационные зависимости электропоглощения в кристаллах кубической симметрии

### Кулоновские поправки

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 спец. функцию – функцию Эйри. Это позволило нам быстро и малой кровью получить ответ. Однако первые же шаги в сторону реальности, сводят нас с колеи, протоптанной великими математиками прошлого. 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 Шредингер становится диф. ур. 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 грубым и более универсальным методом.

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 выше формулам затруднены в силу малости получаемых чисел. В интеграле для  $\Phi$  подынтегральная функция быстро осциллирует так что ответ экспоненциально мал.

Для начала повторим уже полученный ответ. Как вы, надеюсь, помните 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 описано в «Квантовой механике» Ландау и Лифшица (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 «краткого курса теоретической физики» тех же авторов. Вообще математической стороне вопроса посвящено громадное число работ и книг. По видимому продвинутый читатель здесь рано или поздно доберется до трудов академика Маслова. 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  $E > U$

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

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 тут 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  $C_2 = 0$ .

И так 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 то из закона сохранения энергии

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

и коэффициент поглощения в запрещенной зоне давался бы формулой

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

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

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

Расчет по этой формуле уже не дает невообразимых колебаний 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

Из проведенных вычислений вытекает два очень важных с идейной точки зрения следствия, справедливые 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  $k_{\perp} = 0$

## 1.2. Электропоглощение света в полупроводниках со сложной структурой валентной зоны.

(Келдыш, Константинов, Перель ФТП 1967)

Анализ полученного результата 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 тунелируя или отражаясь от барьера 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 практически 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 постоянного электрического поля

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

### 1.3. 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. (Дюу и Редфилд «численный расчет»).

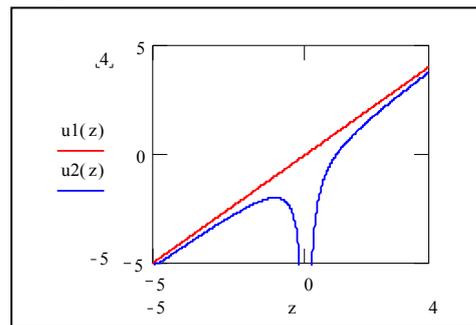
Потенциальная энергия относительного движения электронно-дырочной пары равна сумме энергии в однородном поле и кулоновского притяжения. Как видно из рисунка, кулоновское притяжение приводит к понижению барьера под который надо туннелировать электронно-дырочной паре.

Есть еще один фактор, увеличивающий вероятность поглощения фотона. В кулоновской яме имеются квазисвязанные состояния. В отсутствии электрического поля это обычные экситонные состояния.

При включении поля они оказываются в сплошном спектре и кроме сдвига (эффекта Штарка) испытывают уширение, причиной которого является конечность времени ионизации.

Если энергия рождающейся электронно-дырочной пары близка к энергии связанного состояния, в волновой функции электроннодырочно пары на ряду с затухающим под барьер решением содержится и растущая компонента. На самом деле она тоже убывающая, но убывает от центра экситона т.е. от точки  $z=0$ .

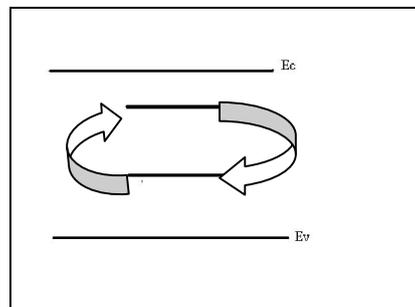
Вдали от экситонных резонансов в поглощении основную роль в увеличении поглощения по сравнению с простой теорией Келдыша и Франца играет именно понижение туннельного барьера. Подробнее с расчетом этих поправок, действительно изменяющим ответ в десятки и сотни раз можно ознакомиться в статье *И.А.Меркулов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



## 2. Оптические переходы, связанные с примесями.

И так мы с вами разобрали два предельных случая – поглощение света при межзонных оптических переходах и поглощение света свободными носителями, так сказать, при внутризонных переходах. Прежде чем обратиться к взаимодействию света с колебаниями кристаллической решетки, заметим, что между этими предельными случаями лежит поглощение и спускание фотонов при оптических переходах с участием примесных уровней лежащих в запрещенной зоне.

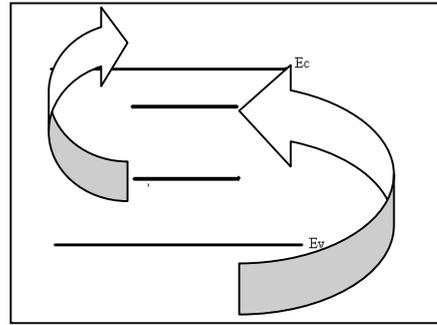
А) Оптические переходы могут носить чисто внутримпресных характер. Это могут быть переходы между основным и возбужденным состояниями доноров или акцепторов. Внедрение в широкозонные полупроводники и диэлектрики примесей, с оптическими переходами попадающими в область прозрачности, позволяют создать твердотельный аналог атомной ситуации, когда отдельные излучатели находятся на достаточно большом расстоянии друг от друга. Примером такой оптической среды например является рубин – 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 со связанного состояния в сплошной спектр

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



Ширина линии поглощения и испускания внутрипримесных переходов обычно носит неоднородный характер. 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 уширения. Эти зависимости существенно зависят от типа примесей – 1) мелких, описываемых в модели эффективной массы 2) глубоких, у которых волновую функцию электрона или дырки в нуле приближении естественно описывать методом сильной связи.

Энергии переходов между уровнями мелкой примеси составляют единицы – десятки миллизэлектронвольт. Что соответствует частотам порядка  $10^{12} - 10^{13}$  Гц. Это странная, пограничная область частот, между инфракрасной спектроскопией и СВЧ – техникой. С наблюдаемыми тут явлениями и техникой эксперимента можно ознакомиться по обзорным статьям [Е.М.Гершензон «Субмиллиметровая фотопроводимость в полупроводниках» IX Зимняя школа по физике полупроводников 1979г.].

Весьма интересна оптика примесей 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  $L=2$  (d-функции):

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

в кристаллическо поле кубической симметрии расщепляется на триплет ( $xy, yz, zx$ ) и дублет

( $(2z^2 - x^2 - y^2), (x^2 - y^2)$ ). Линия атомного спектра соответствующая переходу из или в такое состояние при помещении атома в кристалл должна расщепиться. Или по крайней мере ушириться.

Рис. Спектр эрбия? Пока имеется только люминесценция. Надо искать поглощение.

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 [БИР].

Б) Спектры фотоионизации примесей лишь очень условно можно представить в виде системы линий. Как правило ширина такой линии оказывается порядка характерной частоты перехода.

Если сравнивать ширину этих линий (полос) с шириной зоны в которую или из которой происходят переходы, удивительной становится узость этих полос. Она, как и узость экситонной линии, связана с ограничениями, накладываемыми на вероятность перехода законом сохранения импульса. В случае экситона закон сохранения импульса из всего спектра состояний свободного экситона выделял одно, в котором импульс экситона равен импульсу поглощаемого фотона. Локализованные на примеси электрон или дырки не имеют определенного значения импульса. Поэтому возможными оказываются переходы в зонные состояния с самыми различным значениями волнового вектора  $0 \leq k \leq 2\pi/a$ , где  $a \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$  радиуса локали-

зованного состояния с энергией связи  $E$ . Таким образом и кинетическая энергия носителя в конечном состоянии оказывается распределенной от нуля 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  $|\Psi(E, k)|^2$ .

Для мелкого, водородоподобного донора  
Форма линии фотоионизации дается формулой

$$\alpha = \frac{128\pi e^2 \hbar}{3c n m E_B} N_D \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{E_B} - 1\right)^{3/2}}{\left(\frac{\hbar\omega}{E_B}\right)^{5???}} \quad ,????????$$

ЗАДАЧИ:

- 1) В рамках модели Луковского (модели потенциала нулевого радиуса), волновая функция глубокого примесного центра имеет вид  $\Psi(E, r) = \frac{?}{\sqrt{4\pi a r}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$ , где характерный радиус локализованного состояния связан с энергией связи соотношением  $a = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$ .

Постройте форму линии фотоинизации такого центра от энергии возбуждающего переход фотона.

## 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, проблемы возникающие при его использовании.
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 не прямые оптические переходы. Там анализировался простейший случай – в поглощении участвовал один фонон с очень большим волновым вектором.)

На прошлой лекции мы показали, что фотоны с энергией, меньшей ширины запрещенной зоны, могут поглощаться при фотоионизации, фотонейтрализации различных примесей и внутримесных 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 которые могут перекрываться.

Ну а про твердые растворы и говорить не приходится. Тут вообще надо сперва объяснить, как это можно пользоваться понятием квазиимпульса электрона и дырки, если ни какой периодичности потенциала заведомо не существует. Самое время вспомнить старую сказку про суп из топора. 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 не периодической среды.

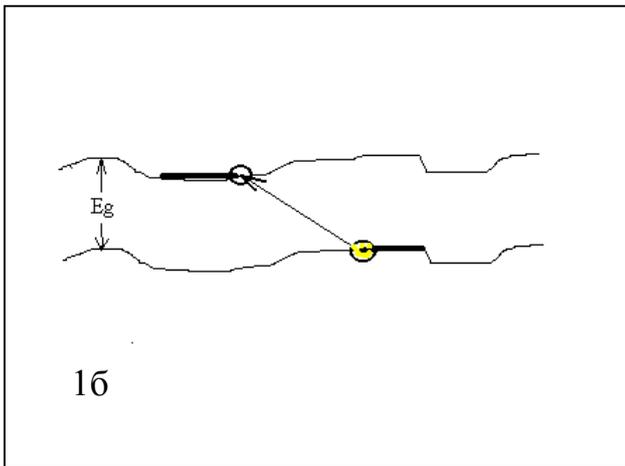
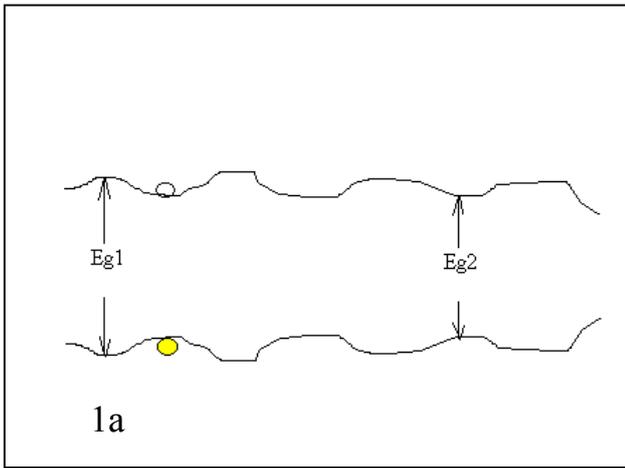
*Что вы по этому поводу думаете? Такое ли это на самом деле безобразия? Или тут есть некоторые количественные критерии? А представляете как трудно было Галилео Галилею, когда он формулировал первый закон Ньютона. Ведь никто ни до него, ни после него не видел тел, взаимодействующих с другими телами. То 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.*

2. И так 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.

Зависимость коэффициента поглощения от ( $E_g - \hbar\omega$ ) 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 характерная температура. Говорят, что в этой области энергий поглощение описывается обобщенным правилом Урбаха. Само по себе (не обобщенное) эмпирически полученное Урбахом правило предлагает для коэффициента поглощения в области хвоста описывает 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.

При всей простоте формулировки правила Урбаха – его строгий и достаточно общий вывод 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.Ясевич, Б.Л.Гельмонт ЖЭТФ 80-е годы). При понижении температуры фононы вымораживаются, но хвосты коэффициента поглощения не исчезают. Их существование связывают с замороженной во времени неоднородностью кристалла.

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. В квантовых ямах - с флуктуациями расстояния между дном двумерной подзоны проводимости и вершиной двумерной валентной зоны могут быть связаны с флуктуациями ширины квантовой ямы ( $L$ ) и, соответственно, с флуктуациями энергии размерного квантования

$$T_{e,h}^{(n)} \approx \frac{(\hbar\pi n)^2}{2m_{e,h}L^2}$$

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.16)

Фактически эта модель предполагает наличие в кристалле случайного электрического поля.

Такие поля действительно возникают в легированных, компенсированных материалах. В которых 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. (К тому же 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 замораживается. В одной микро-области кристалла оказывается несколько больше доноров, в другой акцепторов. Возникают хаотически направленные электрические поля в которых может происходить эффект Келдыша-Франца.

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

Идея метода оптимальных флуктуаций была сформулирована в работах 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, нескоррелированного 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 случайным можно считать пространственное распределение зарядов. Потенциальная энергия носителей при переходе от одной кристаллической ячейке к соседней уже 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 в нашей лекции с Перелем).

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 нескоррелированным 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, как водится, простые и ясные модели допускают аналитическое решение но плохо соответствуют реальной жизни, а хо-

рошее согласие с реальностью дают громоздкие численные расчеты, для которых понять физический смысл результатов – дело самостоятельного исследования. *Наверное поэтому кто-то сказал, что дело физиков – рисковать карикатуры на реальность, а не получать фотографическое изображение.*

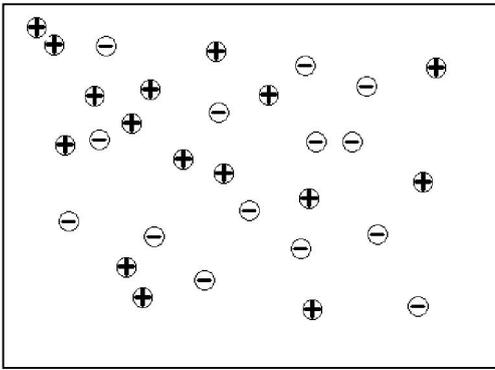
б. Имея в виду все вышесказанное, проведем иллюстративный расчет зависимости коэффициента поглощения на фоне флуктуаций электрического поля в простейшей виде. Мы не будем претендовать на расчет величины коэффициента поглощения. Более того, мы даже не будем претендовать на экспоненциальную точность. Мы 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 характерный 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  $\hbar\omega$  -  $\varphi_t(\hbar\omega, \xi(\vec{r}))$  и после этого подобрать флуктуацию с максимальной полной вероятностью

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

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

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

Хотя никто не сказал, что поле флуктуации однородно. Детальный анализ показывает что оно таки неоднородно. Но в лекции посвященной эффекту Келдыша-Франца мы уже говорили о том, что показатель этой экспоненты может быть найден из соображений размерности. С точностью до 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 тунелирование.

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 исчисления, которым и пользовались Шкловский и Эфрос, проводя соответствующий расчет.

У нас нет ни сил не времени на столь глубокий расчет. Поэтому начнем делать упрощающие предположения, которые снимут наиболее тяжелый груз математики, но сохранят общую схему ответа. Именно так поступили авторы этой работы в ведении к ней. Мы попытаемся получить вид ответа из соображений размерности, но пожием – увидим. И так, 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, однако. 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 экспоненциальной точностью, да еще и с не ясными коэффициентами в показателе экспоненты находим

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

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

И так мы получили функцию, 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 надо бы найти не только наиболее вероятную флуктуацию, но и проинтегрировать по флуктуациям чуть менее вероятным, но такое уточнение дает предэкспоненциальный коэффициент. А у нас даже в показателе экспоненты имеется произвол. В общем-то весь показатель экспоненты написан из соображений размерности.

Ну а теперь встанем в позу честного человека и 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. Как Вы думаете, полученный ответ сильно 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, в случае электропоглощения на фоне хвостов плотности состояний?

## ЛЕКЦИЯ 9. МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ, Гиротропия.

1. Феноменологическое описание, диэлектрическая проницаемость кубического кристалла в магнитном поле/
2. Эффект Фарадея. и естественная оптическая активность
3. Эффект Фарадея на внутрицентровых переходах
4. Влияние магнитного поля на состояния свободных носителей, квантование Ландау.
5. Магнитные и полумагнитные полупроводники. Гинатское 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 инверсии, преобразующем  $x$  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 средах с центром инверсии.

Проще всего вид линейных по магнитному полю поправок к тензору диэлектрической непроницаемости легко найти, если запомнить на всю жизнь, что псевдовектор  $\vec{H} = (H_x, H_y, H_z)$ , при всех преобразованиях симметрии (поворотах, отражении и инверсии) преобразуется как антисимметричный тензор второго ранга

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

*Я не уверен в том, что Вы в свое время изучили и до сих пор помните эти соотношения тензорного исчисления. Тем не менее, каждый из вас знает прекрасный пример, подтверждающий это общее правило: векторное произведение образуется из прямого произведения двух векторов*

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

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

*в соответствии с этим правилом. 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 появление такого антисимметричного тензора должно привести к появлению антисимметричной добавки к тензору диэлектрической проницаемости или непроницаемости

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

где антисимметричный единичный тензор третьего ранга (тензор Леви-Чевитта), 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

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

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

$$\begin{aligned}\tilde{E}_1 &= \frac{(\eta^{(0)} + iA_{4,4}H)}{\sqrt{2}}\tilde{e}_x + \frac{(i\eta^{(0)} - A_{4,4}H)}{\sqrt{2}}\tilde{e}_y = (\eta^{(0)} + iA_{4,4}H)\tilde{e}_1 \\ \tilde{E}_2 &= \frac{(\eta^{(0)} - iA_{4,4}H)}{\sqrt{2}}\tilde{e}_x + \frac{(-i\eta^{(0)} - A_{4,4}H)}{\sqrt{2}}\tilde{e}_y = (\eta^{(0)} - iA_{4,4}H)\tilde{e}_2\end{aligned}\quad (10.4)$$

Ну а во введении мы уже напомнили, что комплексные амплитуды (10.3) соответствуют циркулярной поляризации света.

Вообще-то, выводя эту формулу, мы не делали никаких предположений о числе  $A_{4,4}$ . Наиболее просто понять ситуацию, когда и в отсутствие, и в присутствии магнитного поля отсутствует поглощение света. Тензор  $\tilde{\epsilon}$  эрмитов, так что  $\eta^{(0)}$  - вещественное, а  $A_{4,4}$  - чисто мнимое числа. Свету, поляризованному по правому и левому кругу, соответствуют разные коэффициенты преломления, разные скорости. Это в конечном итоге приводит к эффекту Фарадея.

Если в среде, даже в отсутствие магнитного поля имеется поглощение ( $\eta^{(0)}$  - комплексное), то комплексность  $A_{4,4}$  при малых магнитных полях кроме магнитоиндуцированной разности скоростей распространения света с противоположными знаками циркулярной поляризации, возникает и циркулярный дихроизм. От знака циркулярной поляризации света начинает зависеть поглощение. Для одного знака поляризации он возрастает, а для другого - убывает.

**Интересно, что же случится, если  $\eta^{(0)}$  вещественно, а  $A_{4,4}$  - комплексно? Похоже, что для противоположных знаков циркулярной поляризации противоположным окажется знак коэффициента поглощения???**

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 (см. эффект Керра).

Кстати, в магнитооптике есть свой эффект Керра. Он заключается в том, что в магнитном поле коэффициент отражения зависит от знака циркулярной поляризации света. Надеюсь причины этого эффекта вы можете выявить самостоятельно.

2. И так 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

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

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

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

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 эффект ом 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 для света с длиной волны  $\lambda$

Материал	азот жидкий	Кислород жидкий	вода	NaCl	ZnSl	Y <sub>1,97</sub> Bi <sub>1,03</sub> Fe <sub>3</sub> O <sub>12</sub>		
$\lambda(A)$	5890	5890	5890	5890	5890	6330		
Постоянная Верде Мин./Гс. См	4.15 10 <sup>-3</sup>	7.82 10 <sup>-3</sup>	1.31 10 <sup>-2</sup>	3.28 10 <sup>-2</sup>	2.82 10 <sup>-1</sup>	Фарад.вр. 19300гра д/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 эффект Фарадея можно сделать оптический вентиль, пропускающий свет в одну сторону и непрозрачный в обратном направлении. Для этого надо собрать сборку из двух последовательных линейных поляризаторов, пропускающих прямо – неособенный луч и выводящей вбок – неособенный. 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.

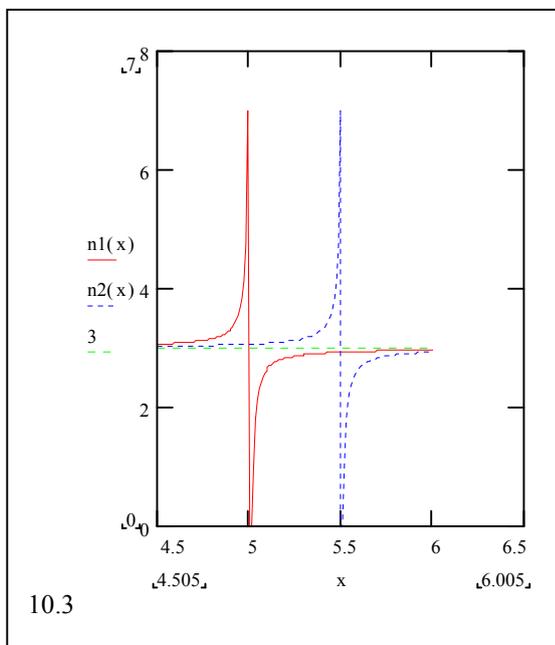
Тут нельзя не упомянуть о средах с естественной оптической активностью, таких как кристаллы теллура, сахар и его раствор и т.п. Эти вещества также вращают плоскость поляризации, проходящего сквозь них света. Однако, в отличие от эффекта Фарадея направление вращения зависит от направления волнового

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 явно 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 (Возникают всяческие правила буравчика, правой и левой руки и т.п.). 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 отсутствии магнитного поля никакого вращения плоскости поляризации не вызывает.

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 (эффект ).



В силу эффекта Зеемана в присутствии магнитного поля такая линия расщепляется на несколько компонент, поляризованных по правому и левому кругу вокруг направления магнитного поля ( $\sigma^+$  и  $\sigma^-$  поляризации), а также линейно поляризованной вдоль магнитного поля ( $\pi$  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

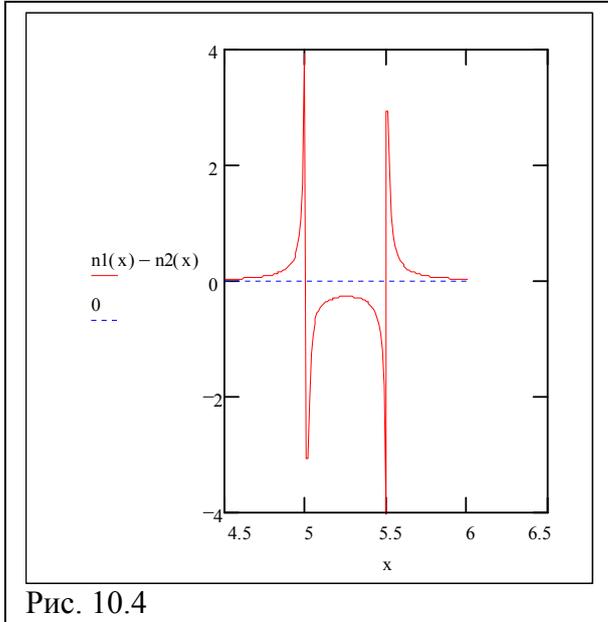


Рис. 10.4

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.

Начиная работу в этой области несомненно надо начать со статьи Латтинжера; Потом вооружиться книгой про диамагнитный экситон (скажем Сейсяна) и углубиться в поиски по электронным базам данных;

Измеряя расстояние между осцилляциями можно оценить приведенную массу электрона и дырки. Интересно, почему эти пики экспериментаторы (да и теоретики) любят называть осцилляциями.

ЧТО ЕЩЕ МОЖНО БЫЛО БЫ УЗНАТЬ о зонной картинке из этих измерений?

Как записать количественный критерий появления осцилляций коэффициента поглощения?

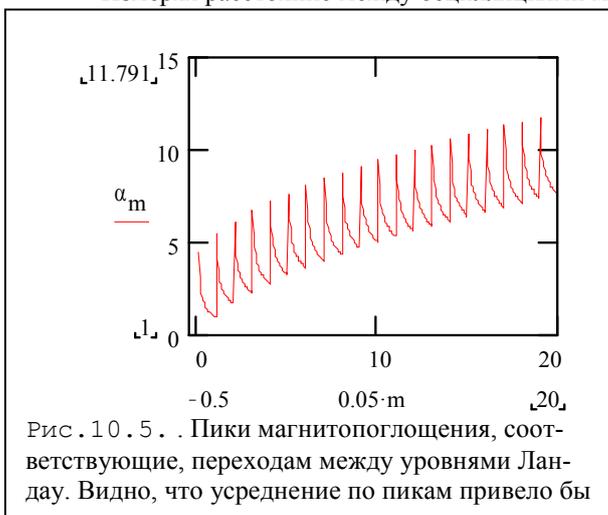


Рис. 10.5. . Пики магнитопоглощения, соответствующие, переходам между уровнями Ландау. Видно, что усреднение по пикам привело бы

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 (СвMn)Te, (HgMn)Te и пр. Все эти соединения содержат ионы с частично заполненными глубокими d- или f-оболочками. Электроны с этих оболочек практически не участвуют 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

$$\hat{H}_{s-d} = -\alpha \left( \vec{s} \vec{\mathcal{F}} \right) \delta(\vec{r} - \vec{R}) \quad (10.10)$$

Энергия обменного взаимодействия прямопропорциональна скалярному произведению спинов носителей заряда ( $\vec{S}$ ) и электронов, локализованных на магнитной оболочке ( $\vec{J}$ ) и вероятности обнаружить носитель в элементарной ячейке, содержащей магнитные ион.

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. 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 электрона проводимости будет составлять около 50meV, а для дырки в валентной зоне аж 200meV. 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 10meV. 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 гетероструктурах, 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 и пр. 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 Коссуа "Полумагнитные полупроводники ["Solid state Electronics 37, 1994].

## ВОПРОСЫ,

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

(10.11)

$$\chi^{+'}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^{+'}(\xi)}{\xi - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi^{+'}(\xi + \omega_g + \gamma H)}{\xi + \omega_g + \gamma H - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{a\sqrt{\xi}}{\xi + \omega_g + \gamma H - \omega} d\xi \approx$$

$$\approx -\frac{\gamma Ha}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\xi}}{[\xi + \omega_g - \omega]^2} d\xi = -\frac{\gamma Ha}{\pi \sqrt{\omega_g - \omega}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t}}{[t+1]^2} dt$$

$$\chi^{-'}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^{-'}(\xi)}{\xi - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi^{-'}(\xi + \omega_g - \gamma H)}{\xi + \omega_g - \gamma H - \omega} d\xi \approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{a\sqrt{\xi}}{\xi + \omega_g - \gamma H - \omega} d\xi \approx$$

$$\approx \frac{\gamma Ha}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\xi}}{[\xi + \omega_g - \omega]^2} d\xi = \frac{\gamma Ha}{\pi \sqrt{\omega_g - \omega}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t}}{[t+1]^2} dt$$

$$\chi^{+'}(\omega) - \chi^{-'}(\omega) = -\frac{2\gamma Ha}{\pi \sqrt{\omega_g - \omega}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t}}{[t+1]^2} dt$$

## 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. Не будем мелочиться и 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  $\mu$  - 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.

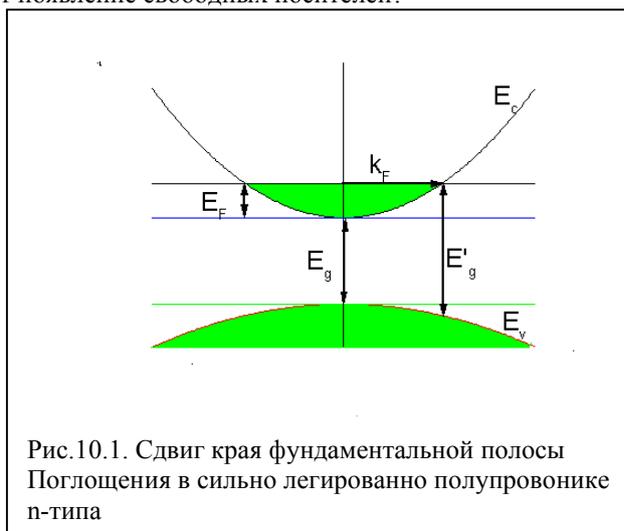


Рис.10.1. Сдвиг края фундаментальной полосы Поглощения в сильно легированно полупроводнике n-типа

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. 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. 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  $\sigma$  аппарат диэлектрической проницаемости оказывается неудобным в области 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 проницаемости 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.

2. Сто лет 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 ско-

рость 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, другими электронами и движется хаотически. Лишь усреднение по всему макроскопически большому ансамблю электронов позволяет ввести вязкое трение для **средней скорости** электронов.

Для начала, положим, что внешнее магнитное поле равным нулю и будем считать, что электрическое поле осциллирует на частоте  $\omega$ . 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

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

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  $\mu$  – подвижность.

На высоких частотах вещественная часть проводимости стремится к нулю как  $\omega^{-2} \tau^{-1}$ . То есть с ростом времени релаксации поглощение среды убывает. **Это - фундаментальное свойство – нет релаксации, нет поглощения.**

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

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

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.

*Интересно обратить 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  $\omega \approx \omega_p$ ).*

*Кто помнит: что такое поверхностные волны? и плазмоны?*

Частотная зависимость коэффициента поглощения на свободных носителях дается формулой

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

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

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/ Ed. By 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 также связан с воздействием магнитного поля на некоторое орбитальное движение электронов. Просто в отсутствие  $H$ , характерная частота этого движения равна нулю.

И так 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  $\gamma$

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

Распишем теперь (10.10) по компонентно:

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

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

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

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

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  $\omega \approx \omega_c$ .

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

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:

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

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

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

$$2nk = \frac{4\pi}{\omega} \text{Re} \sigma$$

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

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

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

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

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

2. Мы в этой лекции упорно следовали учебнику Ансельма, который с самого начала работает с правильными поляризациями, позволяющими получить одно линейное уравнение связывающее амплитуду электрического поля и амплитуду же скорости электрона или тока. С общей точки зрения 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

	X	Y	Z
X			
Y			
Z			

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

ПРИЛОЖЕНИЯ для будущего: поверхностные волны и плазмоны. Вообще-то это должны знать из ЭД.

5. Ну а что же наша родная сложная валентная зона? Какие особенности следует ожидать от алмазоподобного полупроводника р-типа?

По словам Киттеля 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 Кардоны и ??? ФТТ)

Наличие подзон легких и тяжелых дырок открывает возможность для межподзонных переходов. Вообще-то матричный элемент между состояниями вершины валентной зоны равен нулю, так что мы имеем ситуацию с прямыми запрещенным переходом. Только

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

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

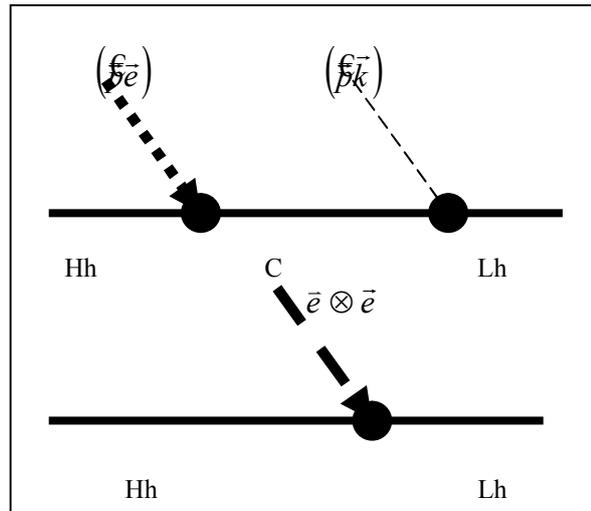
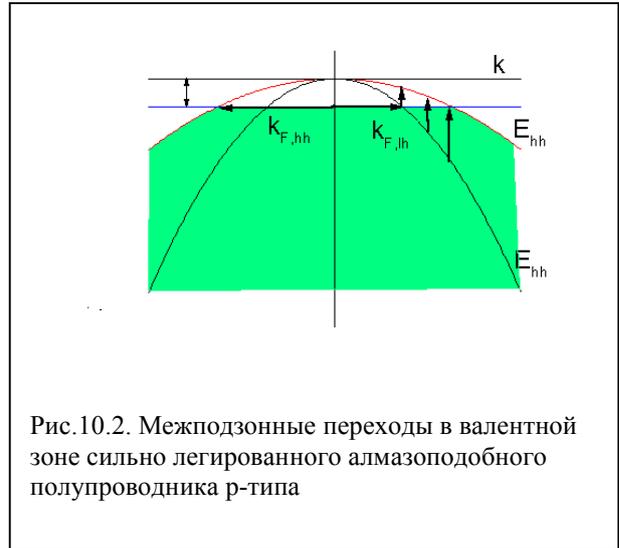
$$E_{\max} = \frac{\hbar^2 k_{F,hh}^2}{2\tilde{\mu}_{lh}}$$

где  $k_{F,lh}$  и  $k_{F,hh}$  - значения волновых векторов легких и тяжелых дырок на поверхности Ферми. Это конечно грубая схема, тем не менее ... 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.

$$u_{lh}(\vec{k}) \approx u_{lh}(0) + u_c(0) \frac{i\hbar \langle c | \left( \frac{\vec{\epsilon} \vec{k} \right) | lh \rangle}{m_0 E_g}$$

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

Но это уже несомненно тема иной лекции и иного Приложения



# 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 ДГУ.
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 электронная составляющая в поглощении может быть существенна в очень широком диапазоне частот, от предельно низких, соответствующих поглощению на свободных носителях, то частот, соответствующих энергии в десятки электрон-вольт. Тем не менее электронными переходами конечно же не исчерпывается все многообразие спектров поглощения твердого тела. Инфракрасной области спектра возникает поглощение света может быть связано с колебаниями ионов кристаллической решетки. Если эти ионы не электро-нейтральны, 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. Таким колебаниям соответствуют колебания плотности дипольного момента которые прекрасно взаимодействуют с электрическим полем световой волны.

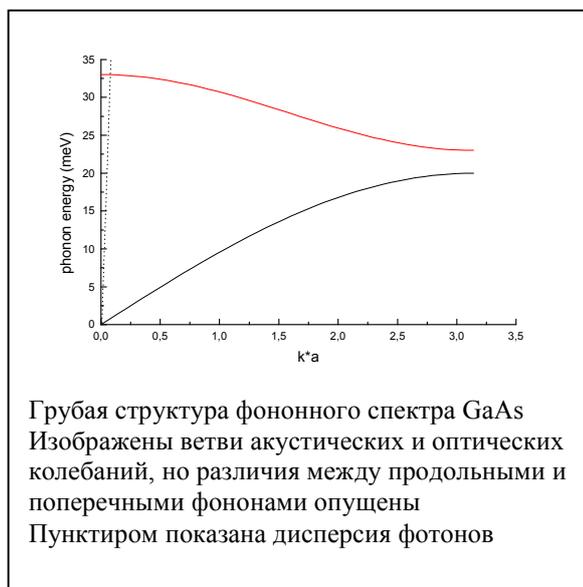
2. До сих пор мы с вами рассматривали только поглощение света, связанное с переходами между электронными уровнями. Как мы электронная составляющая в поглощении может быть существенна в очень широком диапазоне частот, от предельно низких, соответствующих поглощению на свободных носителях, то частот, соответствующих энергии в десятки электрон-вольт. Тем не менее электронными переходами конечно же не исчерпывается все многообразие спектров поглощения твердого тела. Инфракрасной области спектра возникает поглощение света может быть связано с колебаниями ионов кристаллической решетки. Если эти ионы не электро-нейтральны, 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. Таким колебаниям соответствуют колебания



плотности дипольного момента, которые прекрасно взаимодействуют с электрическим полем световой волны. Правда электромагнитная волна поперечна, а фононы бывают и продольные и поперечные. В общем то не трудно сообразить, что со светом напрямую могут взаимодействовать только поперечные фононы.

Если волновой вектор и энергия поперечного фотона и фонона совпадают, то за счет этого взаимодействия оказывается возможным превращение фотона в фонон – поглощение фотонов. Однако на самом деле все обстоит не так просто. Фонон 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, наряду с процессом префвращения фотона в фонон следует рассматривать и обратный процесс, когда фонон превращается в фотон. Или иными словами приходится говорить о том, что часть времени возбуждение живет в кристалле как фотон, а часть времени – как фонон. Этот какой-то не понятный, не стационарный разговор А каковы же будут стационарные состояния такого элементарного возбуждения. В подобной ситуации принято говорить о возникновении смешанной фотонно-фононной моды, называемой поляритоном. Элегантное квантовомеханическое описание поляритонного состояния вы можете найти в «квантовой теории твердого тела» Ч.Киттеля.

Мы же здесь будем следовать квазиклассическому описанию поляритонной ветви, приводимому во многих учебниках, включая и Ансельма. (Хоть оно мне и не симпатично, по причинами которые мы обсудим ниже).

Стартуем с уравнения для классического движения разноименных ионов друг относительно друга в длинноволновой оптической ветви кристалла, содержащего два противоположно заряженных атома в одной элементарной ячейке.

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

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,  $\epsilon_0$  и  $\epsilon_\infty$  статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости,  $\vec{E}$  - среднее электрическое поле в кристалле.

При этом вектор поляризации среды

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

*Как это все можно запомнить? А опустить тут ничего нельзя, потому что дальше многие кусочки будут взаимнокомпенсироваться. Более того из этих формул люди получают 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!!! В общем при выводе уравнения (11.1) явно наделали каких-то предположений и допущений, которые привели в пределе к абсурдному результату. И вот теперь, с помощью поляритонов с этим недоразумением приходится распутываться.*

Теперь говорят, что система (11.1) (11.2) незамкнута. В ней три неизвестных величины на два уравнения. И теперь из уравнений максвелла хорошо бы 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.  $\omega_1 \approx \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} + (kc)^2 \left(1 - \frac{2}{\varepsilon_0}\right)}$

$$\omega_1 \approx \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} + (kc)^2 \left(1 - \frac{2}{\varepsilon_0}\right)}$$

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 месте их решительно 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.

В спектре появилась полоса частот, лежащая между частотой поперечных  $\omega_0$  и продольных

$\omega_L = \omega_0 (\varepsilon_0 / \varepsilon_\infty)^{1/2}$  оптических фононов: в которой вообще не могут распространяться электромагнитные

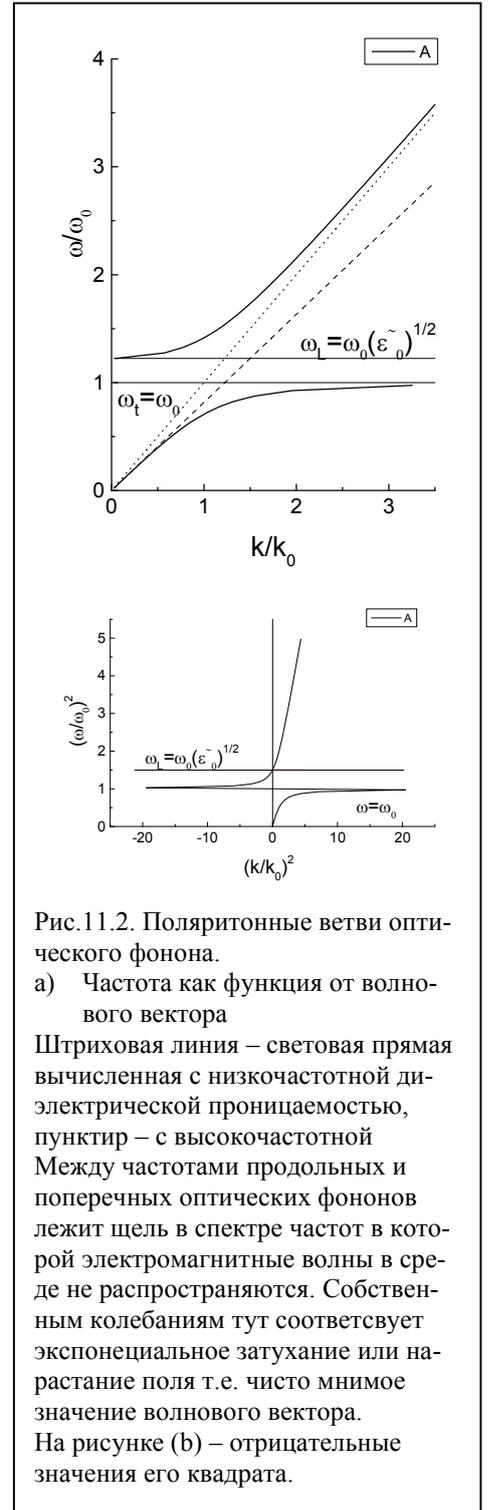


Рис.11.2. Поляритонные ветви оптического фонона.

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.

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 акустическим фононам. Я его пытался запомнить неоднократно и каждый раз забывал, поскольку эта длина 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.

И так 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

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

а для электромагнитного поля, как мы знаем, имеется два уравнения. Условие продольности электромагнитных волн

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

и волновое уравнение

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

Здесь матрица  $\kappa(\vec{k})$  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 заметим, что поляризация связана со смещением  $\vec{P} = d \vec{s}$ , где  $d$  – некоторая константа. Тогда

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

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

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

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

Отсюда для продольных колебаний с малыми волновыми векторами

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

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

а для поперечных колебаний

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

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

Мы, похоже, пришли к тем же самым формулам да еще по

дороге из условия  $\left( \epsilon_\infty + \frac{4\pi d^2}{m(\omega_0^2)} \right) = \epsilon_0$  нашли выражение для параметра  $d = \omega_0 \sqrt{\frac{m(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)}{4\pi}}$

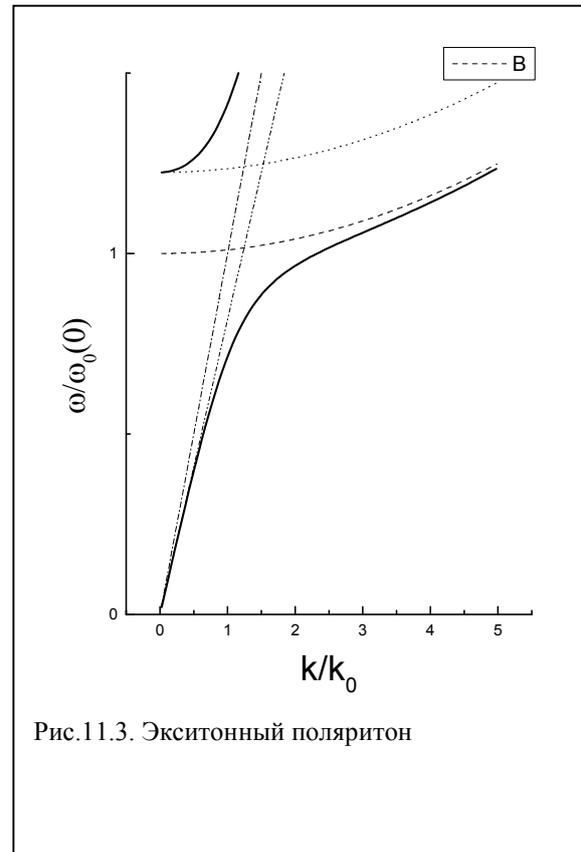


Рис.11.3. Экситонный поляритон

Так что хоть в лоб хоть по лбу. 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, кто сказал что я тут исследовал оптические фононы. А почему не экситоны? В выводе ничего не изменится. Я ведь фактически нигде рассматривал конкретные уравнения для механических колебаний среды.

Вот например экситон. То же самое, только закон дисперсии посильнее чем у оптических фононах

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

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

Ну а так –« Кому что больше нравится».

3. До сих пор мы анализировали поляритоны в бесконечной среде, которой никогда не бывает. 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 ноль.

5. 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 обычной электродинамике пленка превращается в 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 ямах, разделяемых бесконечно высокими барьерами. Найдите зависимость этой энергии от величины двумерного волнового вектора экситона.

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ ВЫВОД изложен у Киттеля «Квантовая теория твердого тела», который списал все из работы Хопфилда (Phys.Rev. **112**, 1555 (1958)) (не кончено).

Плотность гамильтониана дается формулой

$$H = (\vec{M}\vec{A}) + (\vec{\Pi}\vec{P}) - L = 2\pi c^2 M^2 + \frac{1}{8\pi} (\text{rot}\vec{A})^2 + \frac{\chi}{2} \Pi^2 + \left(2\pi + \frac{\omega_0^2}{2\chi}\right) P^2 + 4\pi c (\vec{M}\vec{P})$$

Где  $\vec{M}$  – сопряженный  $\vec{A}$  импульс

$$\vec{M} = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{\vec{A}} - \frac{1}{c} \vec{P}$$

$$\vec{\Pi} = \frac{1}{\chi} \dot{\vec{P}}$$

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \left(\frac{2\pi c}{k}\right)^{1/2} \varepsilon_{\vec{k}\lambda} \left(\mathfrak{A}_{\vec{k}\lambda}^- e^{i(\vec{k}\vec{r})} + \mathfrak{A}_{\vec{k}\lambda}^+ e^{-i(\vec{k}\vec{r})}\right)$$

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \left(\frac{\chi}{2(4\pi\chi + \omega_0^2)^{1/2}}\right)^{1/2} \varepsilon_{\vec{k}\lambda} \left(\mathfrak{B}_{\vec{k}\lambda}^- e^{i(\vec{k}\vec{r})} + \mathfrak{B}_{\vec{k}\lambda}^+ e^{-i(\vec{k}\vec{r})}\right)$$

$$H = \sum_{\vec{k}, \lambda} \left\{ ck \left( a_{\vec{k}\lambda}^+ a_{\vec{k}\lambda}^- + \frac{1}{2} \right) + \omega_0 (1 + 4\beta\pi)^{1/2} \left( b_{\vec{k}\lambda}^+ b_{\vec{k}\lambda}^- + \frac{1}{2} \right) + \right. \\ \left. i \left[ \frac{\pi ck \beta \omega_0}{(1 + 4\beta\pi)^{1/2}} \left( a_{\vec{k}\lambda}^+ b_{\vec{k}\lambda}^- - a_{\vec{k}\lambda}^- b_{\vec{k}\lambda}^+ - a_{-\vec{k}\lambda}^- b_{\vec{k}\lambda}^- + a_{-\vec{k}\lambda}^+ b_{\vec{k}\lambda}^+ \right) \right] \right\}$$

$$\beta = \chi / \omega_0^2$$

Гамильтониан диагонализуется введением операторов уничтожения

$$\alpha_{\vec{k}} = wa_{\vec{k}} + xb_{\vec{k}} + ya_{-\vec{k}}^+ + zb_{-\vec{k}}^+$$

коэффициенты выбирают так, чтобы выполнялось соотношение

$$[\alpha_{\vec{k}}, H] = \omega_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}$$

Первые два члена в этой формуле имеют очень прозрачный смысл – рождение фотона при исчезновении фонона и наоборот. Два последующих члена понять труднее – это одновременно рождение или уничтожение и фотона и фонона. Процесс сам по себе запрещен законом сохранения энергии, то есть может выступать лишь как часть много ступенчатого перехода. В окрестности резонанса им можно пренебречь наверное, но например в области нулевых частот скорость света без этого члена будет не та.

## ЛЕКЦИЯ 12. РАССЕЙЯНИЕ СВЕТА.

1. Введение
2. Классическое описание рассеяния света (Ландау и Лифшиц Электродинамика сплошных сред 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. 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 списано из учебника Ландау и Лифшица, но как всегда 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, либо 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 отелить 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 антистоксовским. В первом случае часть энергии рассеиваемого света диссипируется средой. Во втором - наоборот, при рассеянии энергия забирается от рассеивающей среды.

### 1. 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 "Электродинамике сплошных сред" Ландау и Лифшица. Этой книге мы будем следовать при классическом описании рассеяния. Пусть падающая на среду световая волна монохроматична (имеет частоту  $\omega$ ) 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  $\omega'$  описывается диэлектрической проницаемостью  $\epsilon'$ , то есть  $\epsilon'$ . Причем  $\epsilon = 1 + 4\pi\chi$ , где  $\chi$  - 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, в 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. Ландау и Лифшиц предлагают характеризовать эти локальные неоднородности поляризуемости среды тензорами  $\hat{\alpha}$  и  $\hat{\beta}$ , зависящими от частот рассеиваемого и рассеянного света, 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

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

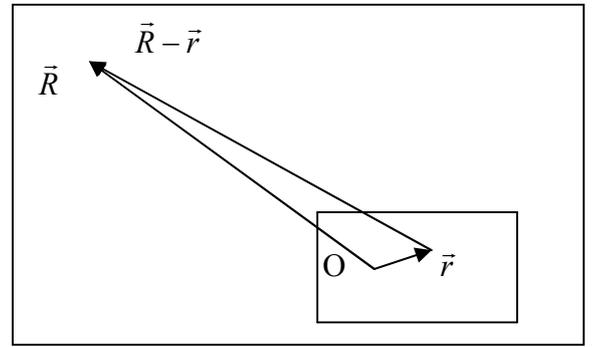
$$\Delta \bar{D}' + k'^2 \bar{D}' = -\text{rot}(\text{rot}(\alpha \bar{E}')) \quad (2)$$

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.

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

Согласно электродинамике формальное решение (2) можно записать с помощью запаздывающего потенциала

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



ЗДЕСЬ НАДО РАЗОБРАТЬСЯ, но ясно видно, что рассеивающие свойства среды характеризуются вектором

$$\vec{G} = \int (\alpha \bar{e}) \exp\{-i(\vec{q}\vec{r})\} d^3 r, \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (4)$$

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

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. Что же надо рассчитывать, чтобы описать рассеяние света? Наверное, имеется много объектов, которые можно было бы рассчитать для такого описания. Но самое естественное, начать с расчета интенсивности, ведь именно интенсивность рассеянного излучения обычно измеряют в экспериментах по рассеянию. Интенсивность вроде бы скаляр. Но для ее теоретического описания естественно ввести тензор второго ранга, шпур 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

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

Усреднять надо с экспонентой. То есть угловые скобки содержат функцию двух переменных и являются функцией двух переменных

Здесь, усреднение проводится по случайным изменениям поляризуемости среды. О формулах (6,7) уже можно разговаривать долго.

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, чем меньше длина волны, тем чувствительнее световые волны к неоднородностям рассеивающей среды. Этот результат основан исключительно на свойствах волнового уравнения и не учитывает никаких специфических особенностей рассеивающих неоднородностей.

2) 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.

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

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  $V^{1/3}$ ?



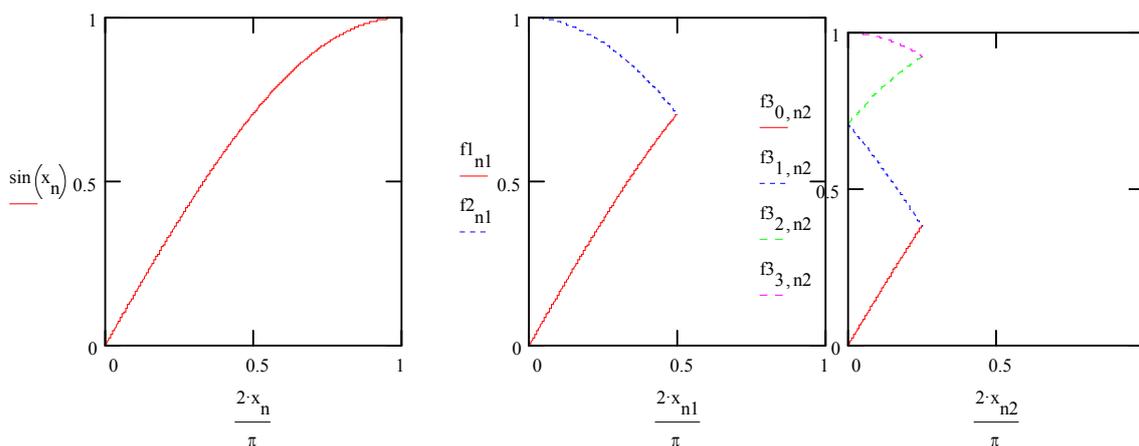
та стремится к частоте рассеиваемого излучения.

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 из фотона и фонона (фотона). Геометрическая картинка кинетики такого процесса представлена на рисунке.

## 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 Мандельштама–Бриллюэна, если вспомнить что последнее возбуждает колебания среды как целого и комбинационное рассеяние – внутри молекулярные переходы. В кристалле одну большую молекулу качественные отличия между этими процессами размываются совсем) В общем, комбинационное рассеяние позволяет пощупать громадное число внутренних степеней свободы. Поэтому за его открытие индийскому физика Раману присудили Нобелевскую премию 1930 года.

Следует тут вспомнить о том, что впервые комбинационное рассеяние наблюдали Ландсберг с Мандельштамом раньше Рамана, но они углубились в изучение и проверку полученных результатов, а Раман тут же опубликовал статью. Это - еерьзная 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  $0.5 \pm 0.5$ . 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. Ну и как же себя после этого вести?



Вообще то и рассеяние Мандельштама-Бриллюэна является комбинационным, потому что частоты акустических фононов ни чем не лучше частот оптических фононов. Да и вообще 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) акустических фононов. Так что акустический или оптический фонон - различить трудно, вот сильная угловая зависимость частоты рассеянного света - действительно главное отличие рассеяния Мандельштама - Бриллюэна от комбинационного рассеяния.

Здесь нужны картинки разных экспериментов по комбинационному рассеянию

## Квантово-механическое описание задачи о рассеянии света.

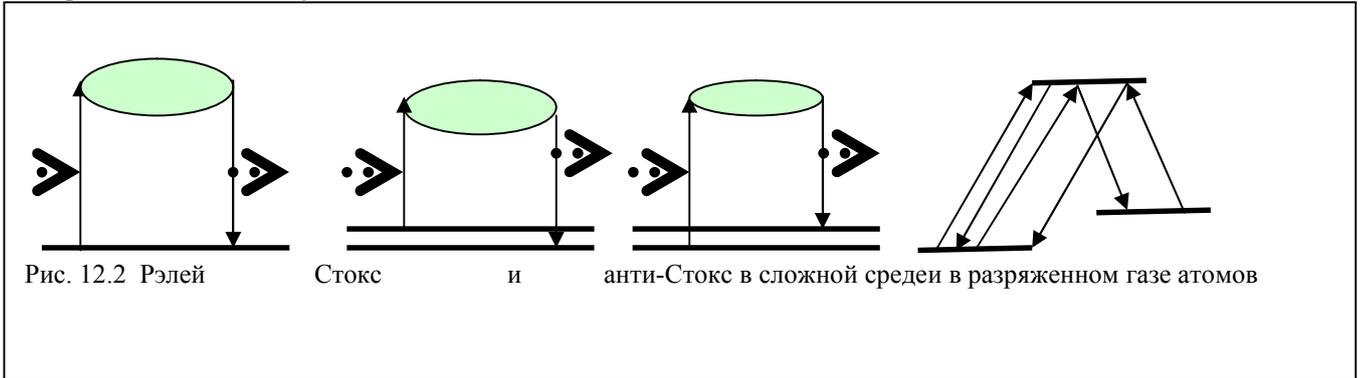
Изучение рассеяния различных элементарных частиц – любимое занятие квантовых механиков. Достаточно вспомнить, что именно опытов Резерфорда спровоцировали теорию Бора.

Поскольку взаимодействие вещества со светом как правило можно рассматривать как малое возмущение, квантово-механическое описание задачи о рассеянии проводится во втором порядке теории возмущений. Процесс состоит из двух этапов - поглощение исходного фотона ( $\hat{V}_1$ ) и испускание фотона рассеянного излучения ( $\hat{V}_2$ ).

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

где  $i$  и  $f$  - начальное и конечное состояния рассеивающей среды и электромагнитного поля. Промежуточное состояние системы ( $n$ ) как правило, является виртуальным. Иногда в этой сумме, которая, собственно говоря, и описывает поляризуемость среды (см. Ландау и Лифшиц Статистическая физика ФДТ и поляризуемость)

можно выделить главный член, знаменатель у которого во много раз 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.



Вы даже не можете представить себе, насколько богата выписанная формула. Ведь в ней начальное, конечное и промежуточные состояния это, вообще-то говоря, 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.

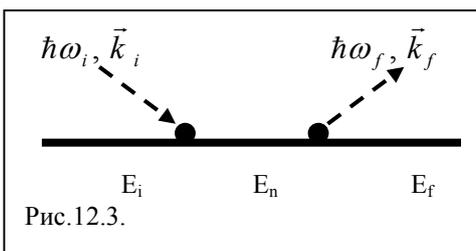
При расчетах мы лишь в очень редких случаях знаем эти точные состояния. Пожалуй, в голову приходит только разряженный газ, не содержащий многоатомных молекул. (Лучше всего газ атомарного водорода). Часто состояния рассеивающей среды удастся найти лишь в некотором приближении, а потом уточнять их по теории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

*Тут уместна ссылка на приложение в котором будет лекция Переля из 3 Зимней школы.*

Для того чтобы яснее представить себе, что и как считается - удобно использовать диаграммы. Это такие картинки – иероглифы, дающие наглядное представление о том, что считается. В результате удастся 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. 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. Но считать, конечно же, считать все равно придется.

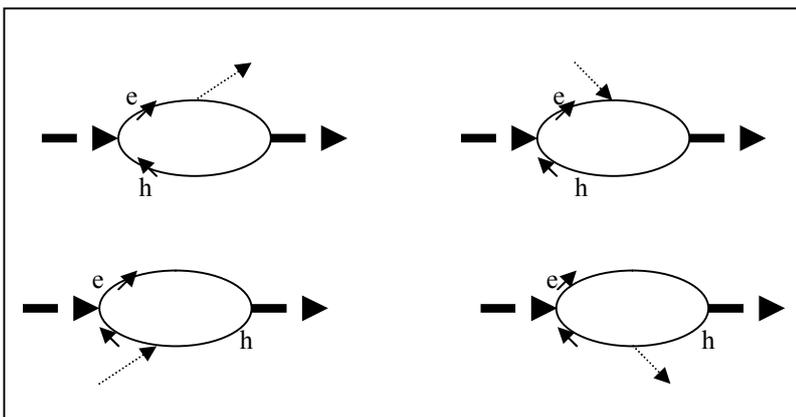
Например, приведенные выше диаграммы наглядно представляют Рэлеевскую, Стоксову и анти-Стоксову компоненты рассеяния. Заштрихованный эллипс это множество промежуточных виртуальных состояний, взаимодействие которых друг с другом. Их точный вид надо еще найти.

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



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-



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. Великие их изобретатели не только придумали эти наглядные картинку но и разработали правила. Позволяющие некоторую часть рутинных вычислений проводить рисуя картинку. Но все равно от расчетов никуда не деться.

## ЛЕКЦИЯ 13. НЕЛИНЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ.

Условия возникновения нелинейных оптических эффектов  
 Генерация гармоник и условие фазового синхронизма  
 Параметрическое преобразование и параметрическая генерация света  
 Другие нелинейные  
 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  $E_a \dots$ ” (А.П.Сухоруков из “Квантовая электроника” Маленькая энциклопедия М. 1969)

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

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

Оптическое детектирование.

Генерация гармоник.

Изменение показателя преломления среды. Самофокусировка. Самоканалирование

Многофотонное поглощение.

Многофотонный фотоэффект.

Параметрическая генерация света, Плавное изменение частоты лазера.

Вынужденное рассеяние света.

### Общая математика

Линейный режим

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

Если электрическое поле не велико, то 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 нелинейные среды без центра инверсии? в которых нелинейность возникает уже во второй степени по электрическому полю  $\vec{P}^{(2)} = \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} E_\beta E_\gamma$

(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

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

$$P(2\omega_1)_\alpha = \frac{1}{2} \chi_{\alpha,\beta,\gamma}^{(2)} E_\beta^{(1)} E_\gamma^{(1)} \cos[2\omega_1 t - 2(\vec{k}_1 \vec{r})]$$

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

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 совсем классическим способом<sup>1</sup>. Но пока это все происходит локально, мы не учитываем как интерferируют 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.

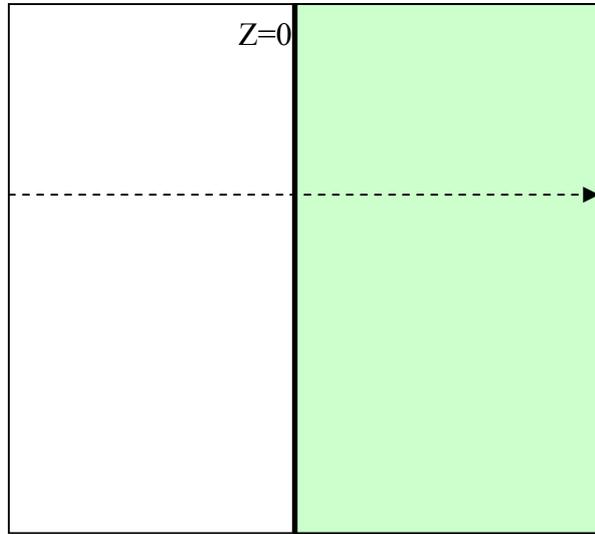
## ГЕНЕРАЦИЯ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ И УСЛОВИЕ ФАЗОВОГО СИНХРОНИЗМА.

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

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

Будем считать что нелинейная среда занимает полпространства  $z > 0$ . Из вакуума ( $Z < 0$ ) нормально к поверхности раздела на нее падает электромагнитная волна частоты  $\omega$ , 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. В это можно поверить пока нет второй границы. Тогда

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

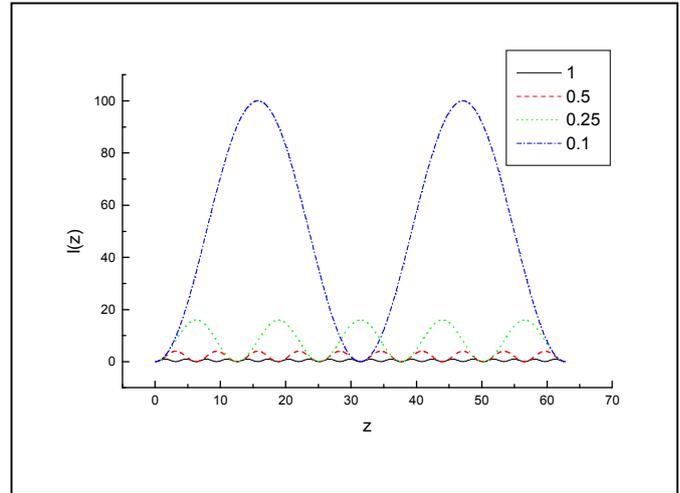
$$E_0 = \frac{4\pi(2\omega)^2 P^{(2)}}{k(2\omega)^2 - (2k(\omega))^2} = \frac{4\pi P^{(2)}}{n(2\omega)^2 - (n(\omega))^2} \approx \frac{2\pi P^{(2)}}{\bar{n}[n(2\omega) - n(\omega)]} = \frac{2\pi P^{(2)}}{\bar{n}\Delta n} \tag{10}$$

Подставляя это выражение в (8) получаем окончательно

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

<sup>1</sup> Восприимчивость третьего порядка приведет к еще большей куче феноменов

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 спадает., 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



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

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

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 ( $\Delta n = 0$ )

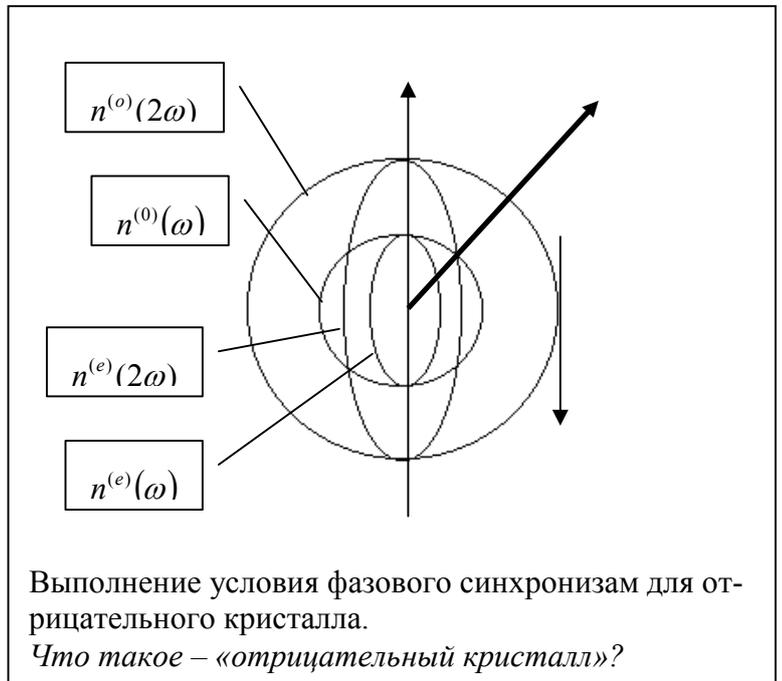
$$I(\vec{r}, t) \Big|_{\Delta n=0} \propto 4 \frac{|P^{(2)}|^2 (\omega z)^2}{(c)^2} \tag{13}$$

Интенсивность излучения на двойной частоте нарастает прямопропорционально квадрату толщины образца.

*К стати, тут, похоже, возникает вечный двигатель первого рода – начиная с некоторого расстояния интенсивность света на двойной частоте неумолимо 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 начиная с некоторого расстояния начинают работать в противофазе, мешая друг другу.

о как добиться выполнения условия фазового синхронизма. Вероятность того что нам удастся найти нелинейную среду у которой для данной частоты коэффициент преломления окажется равным  $n(2\omega)$  равна нулю. Изящный способ решения этой проблемы придумали в 1962 году Дж. Джолдэйн и Р. Терхьюн. Они предложили использовать для удвоения частоты анизотропные кристаллы (KDP<sup>2</sup>). 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 независит от направления его волнового вектора, в то время как коэффициент преломления обыкновенного луча зависит от направления его распространения.



<sup>2</sup> KDP – дигилрофосфат калия (KH<sub>2</sub>PO<sub>6</sub>), кристаллизуется в тетрагональный кристалл. Имеет одну оптическую ось. Прозрачен в области длин волн от 0.3 до 1.2 мкм

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 удается 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 толщины пластины).

## Параметрическое преобразование и параметрические генераторы света.

Когда изобрели первые лазеры, число линий, на которых получалась 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 двух мощных волн.

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, когда опять 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  $\omega$ . Если в среде уже имеется волна на частоте  $\omega_1$ , то мощная волна и затравочная преобразуются в излучение на частоте  $\omega_2$ . И наоборот слабая волна на частоте  $\omega_2$  совместно с мощной исходной волной преобразуются в свет на частоте  $\omega_1$ . Так они друг друга раскачивают и раскачивают. Если к тому же систему поместить в резонатор – то при удачном раскладе (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.

Вообщем то встают те же вопросы о вечном двигателе первого рода. Кроме того не совсем понятно с чего все начинается, если в начальный момент вторичное излучение отсутствует. Говорят, что все равно есть флуктуации.

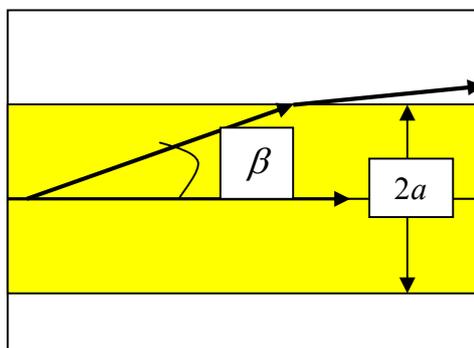
## Самофокусировка.

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. В простейшем случае 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, уже невозможно понять что такое угол падения и надо решать стандартную задачу теории поля.

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 привести используя представления об угле ПВО  $\beta_0 = \arccos(n_0 / (n_0 + n_2 E^2))$ . Лучи,  $\beta > \beta_0$  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  $\beta$  определяется дифракцией  $\beta_d = (0.61\lambda) / (n_0 2a)$ . 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.

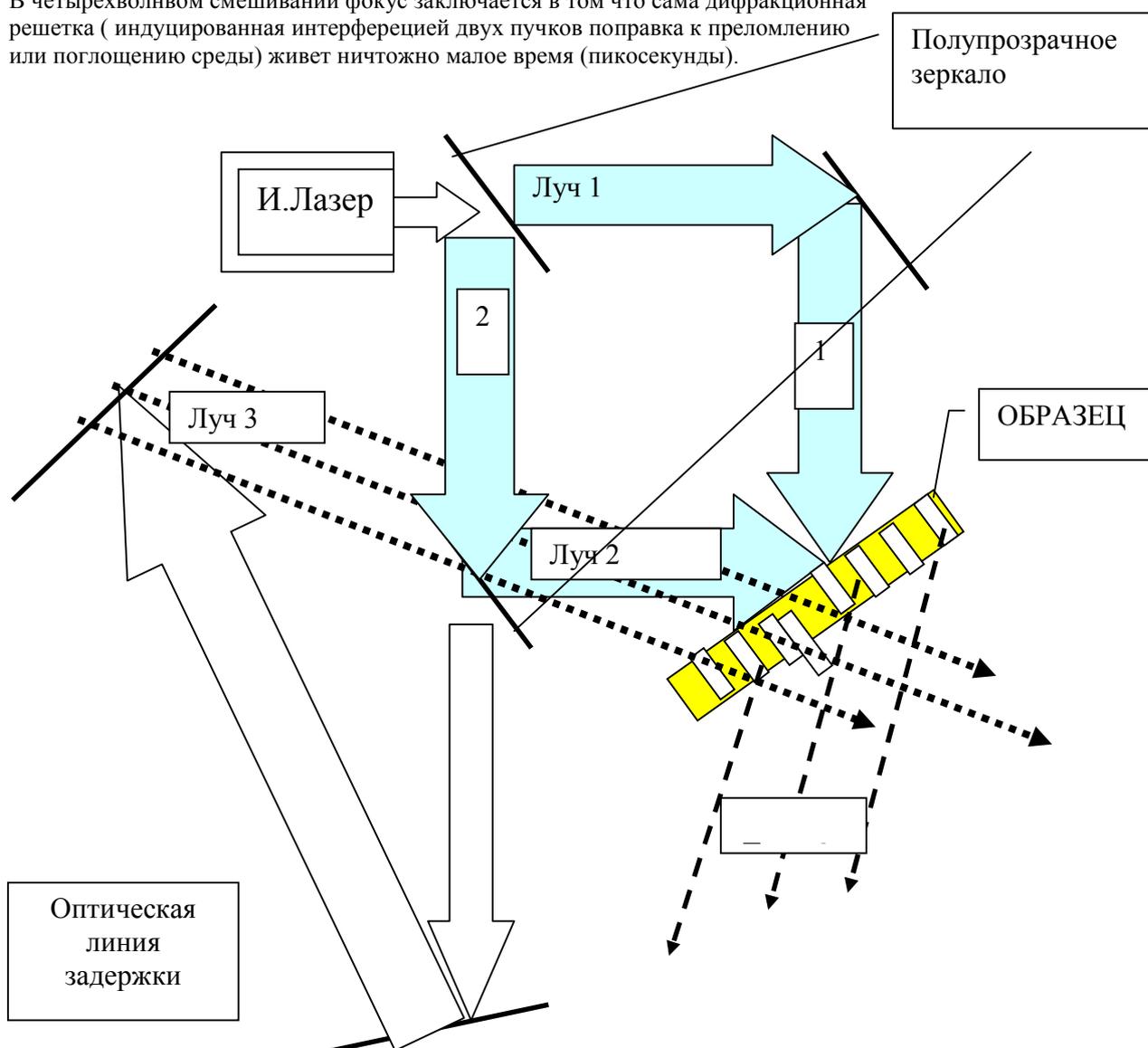


## Четырехволновое смешивание

Последним пиком моды в в 90-х годах прошлого века ( То есть лет пять – десять тому назад ) было исследование сверхбыстрых процессов методом четырехволнового смешивания. Идея такого эксперимента довольно проста, но его реализация требует весьма сложного оборудования.

И так идея в том, чтобы записать в среде интерференционную картинку от двух когерентных световых волн, и посмотреть сколь долго она живет, 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. Голлография была изобретена Габором в 1947 году (Нобелевская премия 1971 г).

В четырехволновом смешивании фокус заключается в том что сама дифракционная решетка ( индуцированная интерференцией двух пучков поправка к преломлению или поглощению среды) живет ничтожно малое время (пикосекунды).



И вот за это время надо посмотреть как изменится дифракция третьего пучка на фотоиндуцированной решетке. В общем надо научиться работать с пикосекундными световыми импульсами. Время прихода которых на объект и длительность надо контролировать с такой сумасшедшей точностью.

Но теперь научились делать очень короткие лазерные импульсы. Говорят, такие короткие, что в них помещается одно колебание. Фемтосекунда. Так что десять пикосекунд - десять тысяч периодов не мало

Чтобы третий импульс пришел с запозданием в 10nsec, 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. Как вы думаете, если бы размеры установки по порядку величины совпадали бы с размерами нашего рисунка?

Нелегко понять, что же мы в конце концов измерили. Что происходило внутри образца. Тут надо работать не только руками но и головой. Не только головой, но и руками.

## ЛЕКЦИЯ 14.

### ЛЮМИНЕСЦЕНИЯ

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

#### **Проверить положение картинки!!!**

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 отделиться 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  $\alpha$  – люминесценция);
  - c) Электр люминесценция (электрическое поле)
  - d) Кандоллюминесценция (механическое воздействие, например, при разрушении кристалла);
  - e) Хемиллюминесценция (химические реакции)
  - f) Триболлюминесценция (*tribo* – греч. растираю) – люминесценция возникающая при трении, разломе, раздавлении некоторых кристаллов. *Чем отличается от Кандоллюминесценции мне не ясно. Кандоллюминесценция взята из физической энциклопедии, а триболлюминесценция из какого-то учебника и словаря иностранных слов.*
  - g) Радикалорекombинационная люминесценция
  - h) Лиоллюминесценция (при растворении)

Быстро затухает – **флуорисценция**, долго незатухает – **фосфорисценция**.

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. Экситоны связанные на заряженных и нейтральных примесях, межпримесная 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, электронов и дырок, 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.

### 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

$$I_{\vec{k},\vec{e}} d\omega d^2\Omega = \frac{c V k^2 dk d^2\Omega}{(2\pi)^3} N_{\vec{k},\vec{e}} \hbar\omega = \frac{\hbar\omega^3}{8\pi^3 c^2} d\omega d^2\Omega \quad (2)$$

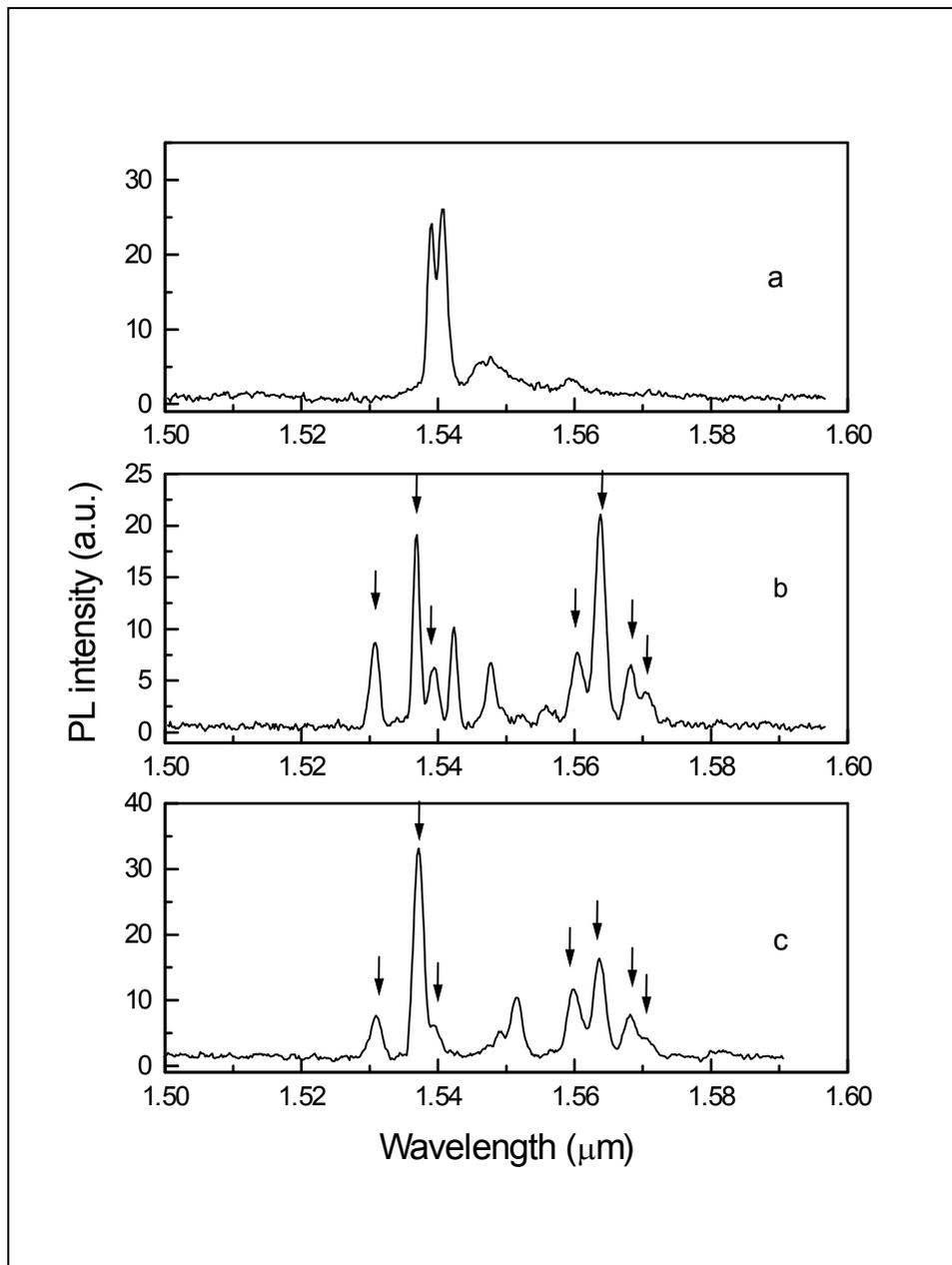


Рис. 2. Спектры люминесценции ионов Er внедренных в решетку GaAs (по данным Гусева, Бреслера и др. ФТП 1998??). Люминесценция связана с переходами внутри f-оболочки. Такие переходы в разреженной атмосфере эрбия запрещены несколькими правилами отбора. Однако понижения симметрии окружения разрешает оптические переходы.

- a. Эрбий ( $4 \cdot 10^{18}$ ) в чистом арсениде галлия
- b. GaAs:Er в квантовой яме, толщиной 100Å ( $n_{Er} = 910^{18} \text{ cm}^{-3}$ ). Спектр отвечает кластерам GaAlAs:Er. Алюминий диффундировал из барьеров.
- c. Объемный образец AlGaAs:Er  $n_{Er} = 910^{18} \text{ cm}^{-3}$

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

$$dw_{\vec{k},\vec{\epsilon}}^{ab} = dw_{\vec{k},\vec{\epsilon}}^{ind} = dw_{\vec{k},\vec{\epsilon}}^{sp} \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar\omega^3} I_{\vec{k},\vec{\epsilon}} \quad (4)$$

Это очень важное соотношение, пользуясь которым можно получить кучу 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.

Не смотря 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. Связан ширна линии называется естественной или одноорс  $\Gamma_{1 \rightarrow 2}$ . Как показали в 1930 году Weisskopf и Wigner учет конечности времени жизни возбужденного состояния приводит к Лоренцевской спектральной зависимости интенсивности люминесценции

$$dw = \frac{\Gamma_{1 \rightarrow 2}}{2\pi} \frac{d\omega}{(\omega_{12} - \omega)^2 + (\Gamma_1/4)^2} \quad (7)$$

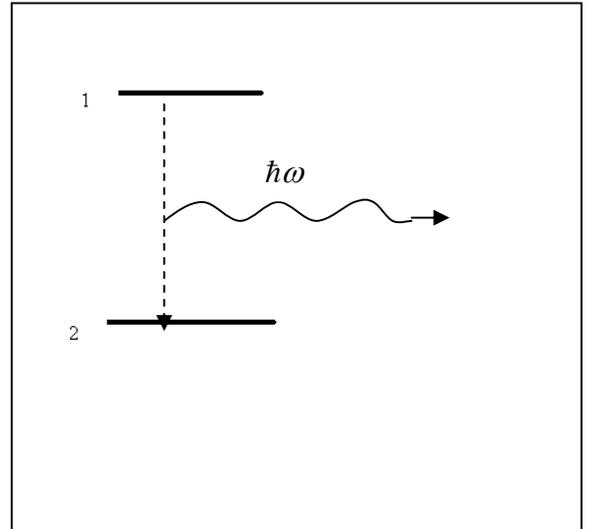
где  $\omega_{12}$  - частота фотона с энергией, равной разности энергий между возбужденным и основным уровнями излучающей системы,  $\Gamma_{1 \rightarrow 2}$  - полная вероятность излучательного перехода (Она рассчитывается по золотому правилу, в которое в качестве плотности конечных состояний входит плотность состояний для фотонов с энергией  $\hbar\omega_{12}$ ), а  $\Gamma_1$  - 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 Васкопф 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

$$a_1(t) = \exp\left(-\frac{\Gamma_1}{2} t\right).$$

Ландау и Лифшиц предлагают следующий самосогласованный путь получения формулы (7). Подставив зависящую от времени волновую функцию возбужденного состояния в уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi \text{ получаем}$$



$$i \frac{da_{\omega 2}}{dt} = \frac{\langle \omega 2 | V | 1 \rangle}{\hbar} \exp \left\{ i(\omega - \omega_{12})t - \frac{\Gamma_1}{2} t \right\} \quad (8)$$

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).

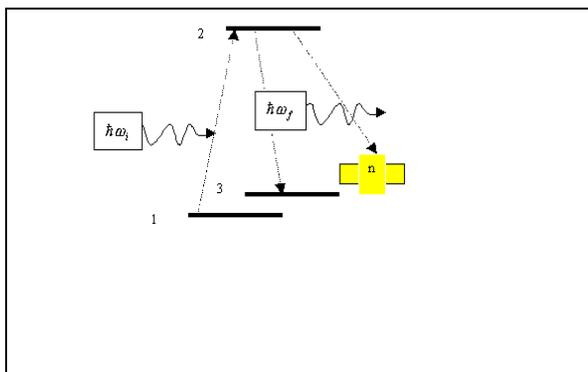
Однако в реальной жизни существует еще “тысяча и одна причина” уширения уровня. В газах – это эффект Доплера, приводящий к сдвигу частоты, в твердом теле случайные деформации, электрические поля создаваемые дефектами и просто фотонами. Говорят, что все эти механизмы приводят к неоднородному уширению линии.

Как вы думаете – “Почему так назвали- однородное и неоднородное уширение?”

### РЕЗОНАНСНАЯ ФЛУОРИСЦЕНЦИЯ.

Все что мы только что сказали про естественную ширину спектральной линии вам надеюсь так или иначе было уже известно. Вы знали соотношение неопределенности для энергии и т.п.. 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 флуорисценции, 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. Как он туда попал, мы не знали. Попал и все. За то какой получился простой и общеизвестный ответ. Теперь мы считаем что в начальном состоянии имеется фотон с практически точно определенной энергией. Это фотон поглощается и переводит электрон в возбужденное состояние, 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 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 лучем, а светом широкого спектрального состава, превышающего естественную ширину линии то спектральная ширина рассеянного света оказывается равной естественной ширине уровня 2.

*Интересно подумать, как это все логически связано - Широкий спектральный состав в задаче о рассеянии и единичная вероятность найти электрон в возбужденном состоянии в задаче о люминесценции.*

### ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОРИЕНТИРОВАННЫХ ПО СПИНУ ЭЛЕКТРОНОВ

В лекции 3 мы выяснили, что при поглощении циркулярно поляризованного света в алмазоводобных 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 3.2 правила отбора легко получить.

Что при рекомбинации электронов и дырок в  $\Gamma$ -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 наименьшему 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 свет и измерив поляризацию люминесценции нетрудно найти отношение времени жизни фотоэлектронов к времени их спиновой релаксации  $(\tau/\tau_s)$

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 магнитом поле (эффект Ханле), то можно определить оба времени  $\tau$  и  $\tau_s$ . Подробно о результатах теоретического и экспериментального исследования оптической ориентации в полупроводниках можно прочитать в книге “Оптическая ориентация” изданной в 1989 году.

В последние годы в этой области физики полупроводников наблюдается ренесанс.