

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ**

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

**С.А. Алексеев, Н.П. Белов,
Н.В. Матвеев,
Ю.Т. Нагибин, В.Т. Прокопенко,
Ю.Ю. Смирнов, В.А. Трофимов
А.С. Шерстобитова, А.Д. Яськов**

**Применение тензоров и матриц для описания
физических свойств кристалла**

**Методические указания по выполнению
расчетных работ**

 **УНИВЕРСИТЕТ ИТМО**

Санкт-Петербург

2016

Алексеев С.А., Белов Н.П., Матвеев Н.В., Нагибин Ю.Т., Прокопенко В.Т., Смирнов Ю.Ю., Трофимов В.А., Шерстобитова А.С., Яськов А.Д., Применение тензоров и матриц для описания физических свойств кристалла. Методические указания по выполнению расчетных работ. – СПб: Университет ИТМО, 2016. – 65 с.

Учебное пособие включает методические указания по выполнению расчетных работ.

Учебное пособие предназначено для студентов ФЛиСИ, обучающихся по направлениям бакалавров: 12.03.05 «Лазерная техника и лазерные технологии», 16.03.01 «Техническая физика».

Рекомендовано к печати решением ученого Совета ФЛиСИ Университета ИТМО, протокол № 12 от 8 декабря 2015 г.



Университет ИТМО – ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров, известной как проект «5 в 100». Цель Университета ИТМО – становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

© Университет ИТМО, 2016

© Алексеев С.А., Белов Н.П., Матвеев Н.В., Нагибин Ю.Т., Прокопенко В.Т., Смирнов Ю.Ю., Трофимов В.А., Шерстобитова А.С., Яськов А.Д., 2016

РАСЧЕТНАЯ РАБОТА № 1.

«Колебания атомов кристаллической решетки и оптические колебательные спектры кристаллов тетраэдрической симметрии».

Цель работы: Определение по оптическим колебательным спектрам характеристических параметров колебательного движения кристаллов, частот колебаний атомов кристаллической решетки, постоянных затухания этих колебаний, высокочастотной и низкочастотной диэлектрических проницаемостей.

Основные теоретические положения

Атомы кристалла связаны между собой силами притяжения и отталкивания и совершают колебательное движение вблизи положений равновесия. Колебательное движение передаётся от атома к атому, образуя волны смещения.

Если трехмерный кристалл содержит N элементарных ячеек, а в каждой из этих ячеек имеется S атомов, с тремя поступательными степенями свободы (т.е. которые могут смещаться в направлении 3-х осей координат), то в таком кристалле существует всего $3SN$ степеней свободы (различных волн). Эти волны отличаются волновым вектором \vec{q} , частотой ω_q и поляризацией. Все различные значения волнового вектора укладываются в пределах зоны Бриллюэна. В пределах зоны Бриллюэна волновой вектор \vec{q} изменяется дискретно, принимая столько различных значений N , сколько в кристалле элементарных ячеек, где $S = 1$, а базисные векторы $\vec{a}_x = \vec{a}_y = \vec{a}_z = a$ (a – постоянная кристаллической решетки) взаимно ортогональны, зона Бриллюэна имеет форму куба в \vec{q} -пространстве, определяемого соотношениями:

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_x \leq \frac{\pi}{a};$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_y \leq \frac{\pi}{a}; \tag{1}$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_z \leq \frac{\pi}{a},$$

где q_x, q_y, q_z – проекции волнового вектора на оси X, Y, Z прямоугольной системы координат.

Проекции волнового вектора q_x, q_y, q_z определяются как:

$$\begin{aligned}
 q_x &= \frac{2\pi}{aN_x} n_1; \\
 q_y &= \frac{2\pi}{aN_y} n_2; \\
 q_z &= \frac{2\pi}{aN_z} n_3,
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

где N_x, N_y, N_z – число элементарных ячеек, укладываемых в направлении осей X, Y, Z прямоугольной системы координат; $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $a_x N_x, a_y N_y, a_z N_z$ – число постоянных кристаллической решетки, укладываемых в направлении этих осей. При каждом значении волнового вектора \vec{q} имеется $3SN/N = 3S$ различных волн (так называемых типов, или ветвей колебаний), отличающихся частотой и поляризацией.

Из $3S$ ветвей колебаний 3 ветви являются акустическими, а остальные $(3S-3)$ ветви – оптическими. В акустических ветвях колебаний различные атомы кристалла смещаются в фазе (в случае длинноволновых колебаний), в то время как для оптических колебаний характерно смещение различных атомов в противофазе, так что центр масс колеблющихся атомов остается фиксированным. Вблизи центра зоны ($\vec{q} \rightarrow 0$) зависимость $\omega(\vec{q})$ для акустических ветвей имеют линейный вид $\omega(\vec{q}) = v_{зв} \vec{q}$ ($v_{зв}$ – скорость звука), так же как и для сплошной среды (континиума). При этом фазовая v_ϕ и групповая скорости $v_{гр}$ волн совпадают между собой и равны скорости звука: $v_\phi = v_{гр} = v_{зв}$, а дисперсия акустических волн в этой области отсутствует. Такой характер зависимости $\omega(\vec{q})$ и отсутствие здесь дисперсии акустических волн объясняется тем, что при $\vec{q} \rightarrow 0$ длина акустической волны неограниченно возрастает ($\lambda = 2\pi/\vec{q} \rightarrow \infty$) и охватывает большое число постоянных кристаллической решетки. При этом дискретная структура среды себя не проявляет, и среда ведет себя здесь как сплошной изотропный континиум. В противоположность этому на границе зоны $\vec{q} = \pi/a$ и длина волны составляет удвоенную постоянную кристаллической решетки $\lambda = \lambda_{min} = 2a$. При этом в кристалле образуются стоячие акустические волны. Для этих волн $v_{гр} = 0$, $v_\phi = \sqrt{2/\pi} v_{зв}$.

В длинноволновых оптических ветвях $\vec{q} \rightarrow 0$ закон дисперсии $\omega(\vec{q})$ может быть представлен выражением $\omega(\vec{q}) \cong \omega_0 - Aq^2$, где ω_0 и A – постоянные величины, фазовая скорости здесь $v_{\text{ф}} \rightarrow \infty$; $v_{\text{гр}} \rightarrow 0$.

В зависимости от характера поляризации волны смещения атомов в трехмерном кристалле могут быть продольными и поперечными.

Для продольных волн смещение атомов параллельно направлению распространения колебаний: $\vec{U}_n \parallel \vec{q}$ (рисунок 1, а), таким образом, продольные волны представляют собой волны сжатия и разряжения. В поперечных волнах смещение атомов и волновой вектор направлены перпендикулярно друг другу: $\vec{U}_n \perp \vec{q}$ (рисунок 1, б), и поперечные волны представляют собой волны сдвига.

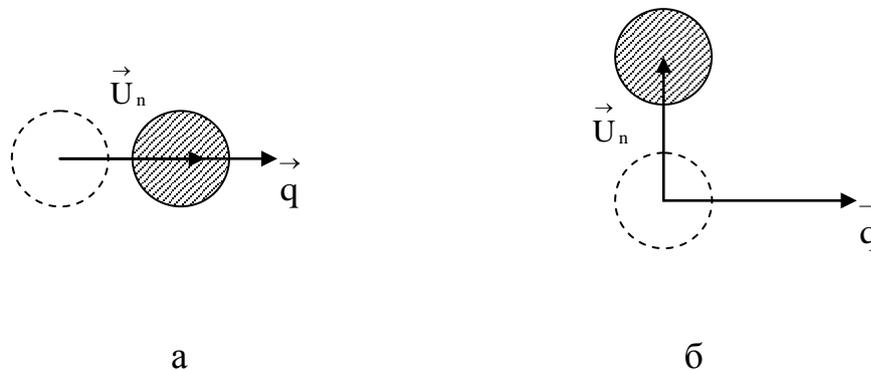


Рисунок 1 – Смещение атомов в кристалле

Из 3S ветвей колебаний атомов в трехмерном кристалле, S ветвей являются продольными, а 2S – поперечными.

Для обозначения различных ветвей колебаний атомов в кристаллах используются следующие символы: T – поперечный, L – продольный, A – акустический, O – оптический, так что в кристалле имеются ТА, LA, ТО, LO дисперсионные ветви $\omega(\vec{q})$.

Рассмотрим вид дисперсионных ветвей $\omega(\vec{q})$ для интересующих нас кристаллов кубической симметрии с тетраэдрической координацией атомов (алмазоподобные кристаллы). Тетраэдрическая координация атомов имеется в кристаллах элементов IV группы (C; Ge; Si) периодической системы элементов, а так же в кристаллах интерметаллических соединений III-V групп (InSb; GaAs;...) и II-VI групп (ZnSe; CdTe;...). Химическая связь в таких кристаллах является ковалентной и ионно-ковалентной. На каждый атом в кристаллической решетке приходится по четыре валентных электрона. Для формирования завершённых устойчивых электронных оболочек здесь требуется еще по

четыре электрона на атом, которые обеспечиваются путем формирования обобществленных электронных пар с четырьмя ближайшими атомами. Для этого ближайшие атомы имеют тетраэдрическую координацию, т.е. располагаются в вершинах правильного тетраэдра, как показано на рисунке 2.

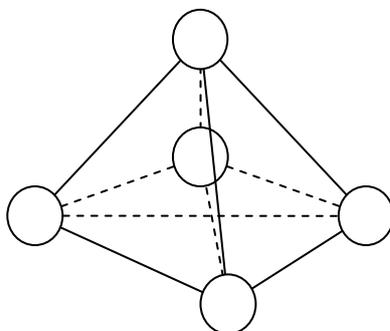


Рисунок 2 – Расположение атомов в вершинах тетраэдра

В кристаллах IV группы все атомы одинаковы, в то время как в кристаллах III-V и II-VI групп атомы в центре тетраэдра и в его вершинах различны (принадлежат различным группам). Кристаллическая структура алмазоподобных кристаллов построена из тетраэдров (рисунок 2). Такую структуру можно образовать двумя кубическими гранецентрированными подрешетками, сдвинутыми по отношению к другой на $1/4$ объемной диагонали куба. В кристаллах элементов IV группы обе подрешетки образованы одними и теми же атомами (структура алмаза), и химическая связь является ковалентной. В кристаллах элементов III-V и II-VI групп каждая из подрешеток образована различными элементами (структура сфалерита), химическая связь является ионно-ковалентной, а «центр тяжести» обобществленной пары электронов сдвинут в сторону аниона: атома V или VI группы.

В элементарной ячейке рассматриваемых кристаллов с тетраэдрической координацией атомов содержится $S = 2$ атома. Таким образом, для каждого значения волнового вектора \vec{q} в таких кристаллах имеется $3S = 3 \cdot 2 = 6$ дисперсионных ветвей $\omega(\vec{q})$. Из этих 6 ветвей 3 являются акустическими, а $(3S - 3) = 3 \cdot 2 - 3 = 3$ – оптическими. В рассматриваемых кристаллах имеется $S = 2$ ветви продольных колебаний, а так же $2 \cdot S = 2 \cdot 2 = 4$ ветви поперечных колебаний.

Вследствие высокой симметрии кристаллов с тетраэдрической координацией атомов (структура алмаза и сфалерита имеют кубическую симметрию и относятся к классам симметрии $m\bar{3}m$, $\bar{4}3m$), частоты поперечных оптических колебаний в них совпадают, и 2 ветви поперечных акустических колебаний и 2 ветви поперечных оптических колебаний являются вырожденными.

Характер зависимостей $\omega(\vec{q})$ изображен на рисунке 3 для структур алмаза (а) и сфалерита (б).

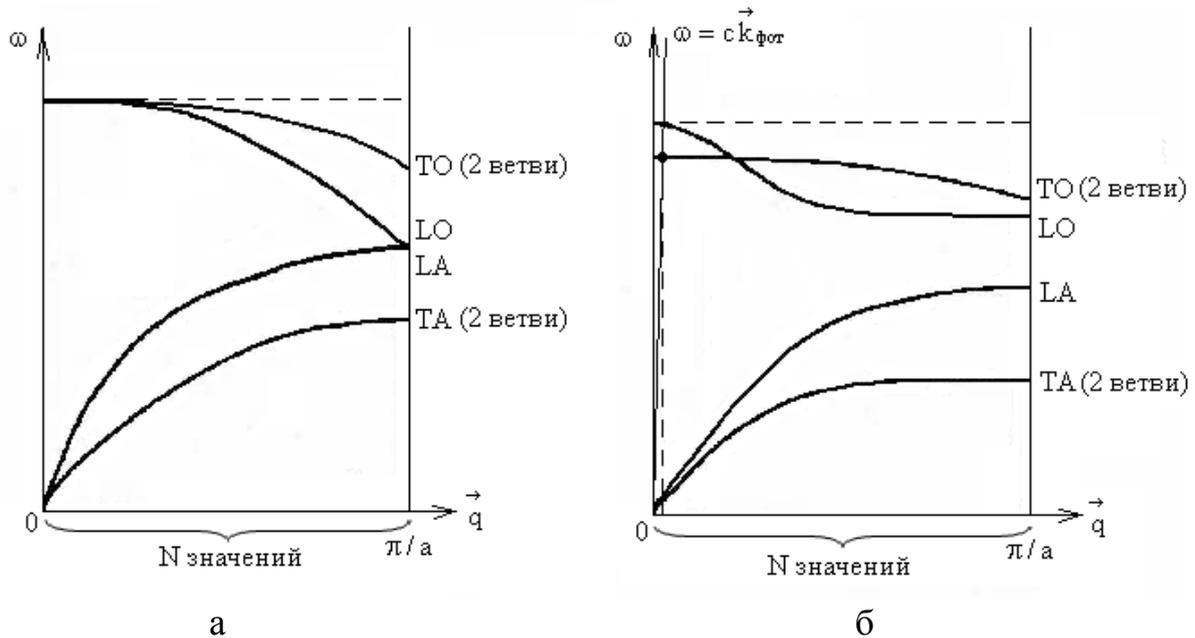


Рисунок 3 – Характер зависимостей $\omega(\vec{q})$ для структур алмаза и сфалерита

Колебания атомов трехмерного кристалла могут быть представлены в виде суперпозиции 3SN нормальных колебаний, рассматриваемых, как линейные гармонические осцилляторы.

Полная энергия колебаний атомов кристаллической решетки при этом определяется суммой энергий невзаимодействующих осцилляторов:

$$E = \sum_{q,j} E_{q,j} = \sum_{q,j} \hbar \omega_j(\vec{q}) \left(n_{qj} + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

где n_{qj} – колебательное квантовое число, а суммирование выполняется по всем волновым векторам \vec{q} и ветвям j колебаний.

Квант энергии $\hbar \omega_j(\vec{q})$ представляет собой фонон. При данном \vec{q} в кристалле существует 3S различных фононов (типов ТА, LA, ТО и LO). Правила отбора по колебательному квантовому числу n_{qj} имеют вид $\Delta n_{qj} = \pm 1$, которые описывают соответственно испускания ($\Delta n_{qj} = +1$) и поглощения ($\Delta n_{qj} = -1$) фонона.

Если при колебаниях атомов кристалла вблизи их положения равновесия образуется осциллирующий дипольный момент, то для частоты излучения, близкой к частотам колебаний атомов кристалла $\omega \approx \omega_j(\vec{q})$, возможно взаимодействие излучения с осциллирующим дипольным моментом. Это взаимодействие приводит к сильной дисперсии оптических

постоянных и особенностям оптических спектров в области частот $\omega \approx \omega_j(\vec{q})$. Сразу отметим, что осциллирующий дипольный момент не может появляться в кристаллах со структурой алмаза, где атомы обеих подрешеток одинаковы. Такие кристаллы не имеют оптической активности в области $\omega \approx \omega_j(\vec{q})$, и особенностей, связанных с колебательным движением атомов в оптических спектрах, здесь не наблюдается. В то же время, в кристаллах со структурой сфалерита, где атомы обеих подрешеток различны и их колебание создает осциллирующий дипольный момент, особенности оптических спектров в области $\omega \approx \omega_j(\vec{q})$ выражены отчетливо (формально появление осциллирующего диполя и особенности оптических спектров в структуре сфалерита могут быть сопоставлены со снятием характерных вырождений ТО и ЛО ветвей при $q = 0$ (рисунок 3)).

Как правило, в ионных кристаллах в области $\omega \approx \omega_j(\vec{q})$ наблюдается характерная полоса отражения, максимум которой близок к $R = 1$, называемая полосой «остаточных лучей». Такое название связано с тем, что эта полоса в большинстве кристаллов находится в дальней инфракрасной области спектра, т.е. в области, где кристалл должен быть прозрачным, а отражение незначительным. «Остаточные лучи», таким образом, нарушают прозрачность кристалла в инфракрасной области спектра.

Для описания частотной зависимости n и k воспользуемся дисперсионными выражениями для классического гармонического осциллятора. В теории Лоренца эти выражения получаются из уравнения движения разноименных ионов в узлах кристаллической решетки, находящихся под действием электрического поля электромагнитной волны, при подстановке получаемого смещения в материальное уравнение для поляризации среды:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \left(1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right)}{\left[1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right]^2 + \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2}, \quad (4)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk = \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right) \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)}{\left[1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right]^2 + \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2}, \quad (5)$$

где ε_1 и ε_2 – вещественная и мнимая части диэлектрической проницаемости; n и k – показатели преломления и поглощения среды, $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$; $\varepsilon_2 = 2nk$; ε_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость среды, определяемая вкладом в поляризуемость кристалла связанных электронов; ε_0 – низкочастотная диэлектрическая проницаемость среды, определяемая суммарным вкладом в поляризуемость кристалла, как связанных электронов, так и колеблющихся ионов; ω_0 – частота колебаний кристаллической решетки, γ – ширина резонансного контура в спектре, связанная с постоянной затухания τ : $\gamma = 1/\tau$; ω – частота колебаний атомов.

Рассмотрим, какие из описанных выше ЗСН колебаний кристалла могут взаимодействовать с электромагнитными волнами. Мы отмечали выше, что оптической активностью обладают колебания атомов кристалла, которые образуют осциллирующий дипольный момент, т.е. когда движение разнородных атомов происходит в противофазе. Такими колебаниями являются оптические колебания кристалла, и именно они взаимодействуют с электромагнитным излучением. Акустические моды не создают осциллирующего дипольного момента, так как разнородные атомы кристалла (анионная и катионная подрешетки) движутся в фазе, и акустические колебания кристалла не взаимодействуют со световыми волнами.

Электромагнитные волны имеют поперечную поляризацию, поэтому в дисперсионных соотношениях (4) и (5) должны быть использованы частоты поперечных колебаний, а точнее поперечных оптических (ТО) колебаний, т.е. $\omega_0 = \omega_{\text{ТО}}$.

И, наконец, при взаимодействии излучения с колебаниями кристаллической решетки, кроме закона сохранения энергии, должен выполняться так же закон сохранения импульса:

$$\hbar \vec{k}_{\text{фот}} = \hbar \vec{q}, \quad (6)$$

где $\vec{k}_{\text{фот}}$ – импульс фотона, модуль которого связан с длиной волны излучения λ как $|\vec{k}_{\text{фот}}| = 2\pi/\lambda$.

Таким образом, взаимодействие электромагнитного излучения с колебаниями атомов кристалла происходят в тех точках $\omega(\vec{q})$ диаграммы (рисунок 3), где одновременно выполняются законы сохранения энергии и импульса, т.е. в точках пересечения дисперсионных ветвей $\omega(\vec{q})$ для ТО-фононов с прямой $\omega = c \vec{k}_{\text{фот}}$ для фотонов.

Если длина волны излучения $\lambda = 10$ мкм, то импульс фотона $k_{\text{фот}} = 2\pi/\lambda = 0,6 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$. В то же время, импульс фонона измеряется в пределах $q = 0 \dots \pi/a$ и при $a = 30$ нм его максимальное значение составляет $q = 10^8 \text{ см}^{-1}$.

Таким образом, $k_{\text{фот}} \ll q$, и прямая $\omega = c \vec{k}_{\text{фот}}$ проходит почти параллельно оси ординат, а интересующая нас точка пересечения лежит вблизи $q \approx 0$. Таким образом, в качестве резонансных частот ω_0 в выражениях (4) и (5) должны использоваться частоты длинноволновых поперечных оптических колебаний.

Рассмотрим частотную зависимость вещественной ε_1 и мнимой ε_2 частей диэлектрической проницаемости кристалла. В случае кристаллов с тетраэдрической координацией атомов ($S = 2$) имеется 2 вырожденных поперечных оптических фонона. Соотношения (4) и (5) хорошо описывают здесь дисперсию оптических постоянных. В более общем случае, когда имеется несколько различных ТО фононов, выражения (4) и (5) должны быть применены независимо к каждому из фононов, а результирующие значения для ε_1 и ε_2 могут быть определены путем суммирования (4) и (5) по всем ТО фононам.

Зависимости $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$ и $\varepsilon_2 = 2nk$ от приведенной частоты ω/ω_0 , определяемые на основании соотношений (4) и (5), представлены графически на рисунке 4, а, на котором показаны параметры ε_∞ , ε_0 , $\omega_{\text{ТО}}$, γ , входящие в расчетные дисперсионные выражения.

Прямое экспериментальное определение величин n и k (или ε_1 и ε_2) в области резонанса представляет значительные трудности, т.к. коэффициент поглощения в полосе очень велик. Поэтому более предпочтительным здесь является исследование спектров отражения. Используя выражения (4) и (5) нетрудно рассчитать вид спектров отражения в области однофононного резонанса:

$$R = \left| \frac{N^* - 1}{N^* + 1} \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon^*} - 1}{\sqrt{\varepsilon^*} + 1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (7)$$

где $N^* = n - ik$ – комплексный показатель преломления и $\varepsilon^* = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2$ – и комплексная диэлектрическая проницаемость среды.

Результаты расчетов спектров отражения в области однофононного резонанса при трех значениях постоянной затухания: $\gamma = 0,005\omega_0$; $\gamma = 0,02\omega_0$; $\gamma = 0,05\omega_0$ показаны на рисунке 4, б.

Значения коэффициента отражения в коротковолновой ($\omega \rightarrow \infty$) и длинноволновой ($\omega \rightarrow 0$) областях определяются соответственно высокочастотной ε_∞ и низкочастотной ε_0 диэлектрической проницаемостью кристалла. Длинноволновая граница коэффициента отражения соответствует резонансной частоте, и положение этой границы позволяет, таким образом, определить частоту $\omega_{\text{ТО}}$ фонона. Аналогично, в коротковолновой области полоса «остаточных лучей» ограничена частотой продольного фонона $\omega_{\text{ЛО}}$. Постоянная затухания определяет максимум

коэффициента отражения в полосе «остаточных лучей» (заметим, что при возрастании γ происходит размытие полосы «остаточных лучей», так что прямое нахождение границ этой полосы и определение частот длинноволновых ТО и LO фононов становится затруднительным).

Наряду с рассмотренной полосой «остаточных лучей», называемой так же однофононной полосой, в оптических спектрах (спектрах пропускания) проявляются и более слабые полосы, обусловленные взаимодействием излучения одновременно с двумя, тремя и т.д. фонами. Такие полосы поглощения называются многофононными.

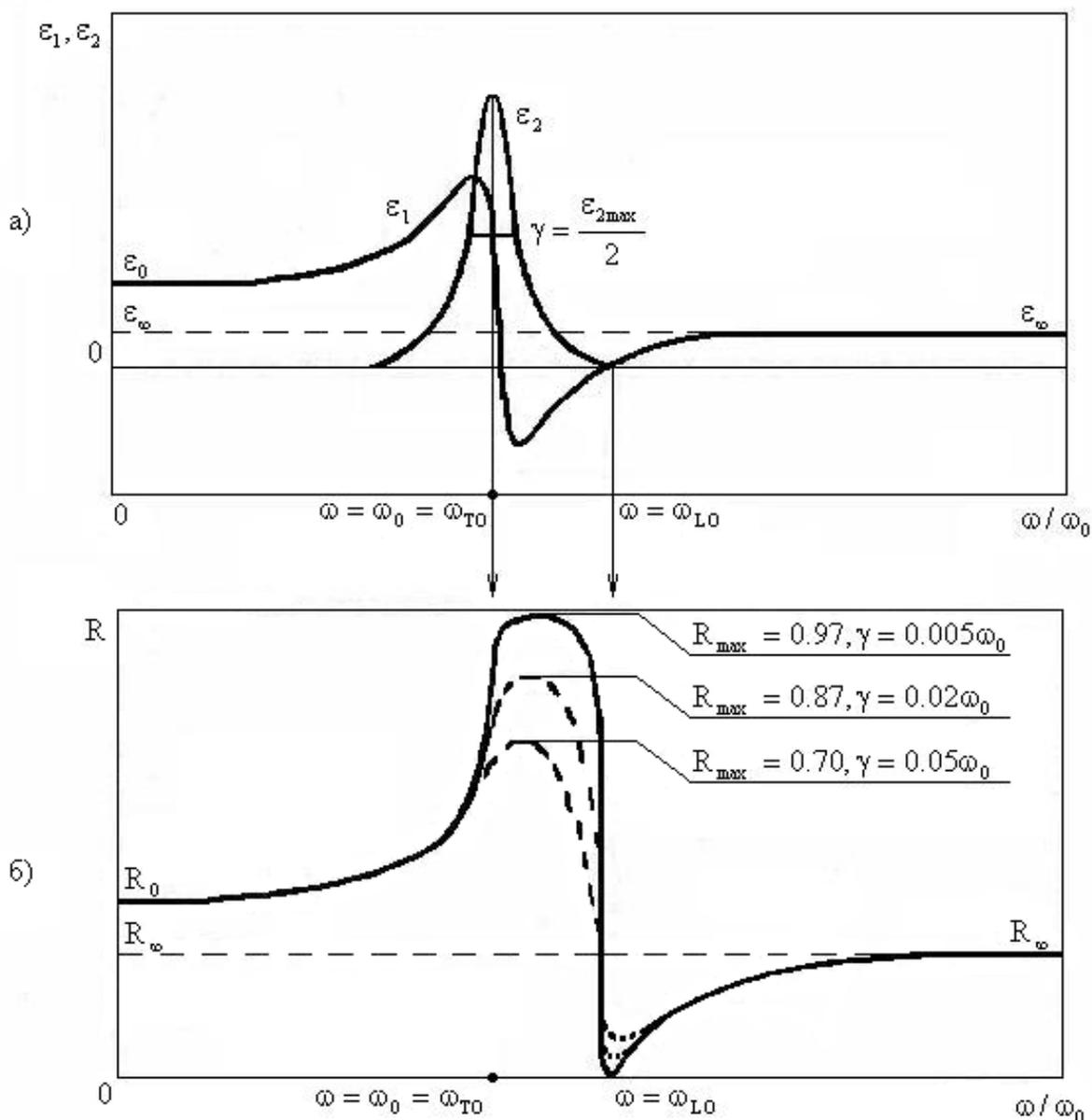


Рисунок 4 – Зависимости ϵ_1 , ϵ_2 и R от приведенной частоты ω/ω_0

Возможные механизмы поглощения здесь связаны со следующими явлениями.

1. Из-за ангармонизма колебаний атомов появляется осциллирующий дипольный момент на удвоенной и других частотах, кратных основным частотам колебаний атомов кристалла.
2. При поглощении двух фонов – один из них создает дипольный момент в кристалле, а второй заставляет этот момент осциллировать.

Спектры многофононного поглощения непрерывны, максимумы в спектрах наблюдаются в точках, которым отвечают максимумы функций двухфононной плотности состояний, т.е. число пар начальных и конечных состояний, принадлежащих одной и той же ветви $\omega(\vec{q})$ (или различным ветвям $\omega(\vec{q})$) и разделенных энергией $\omega(\vec{q}_1) + \omega(\vec{q}_2)$, где $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = 0$.

Вид спектра двухфононного поглощения для кристалла карбида кремния показан на рисунке 5.

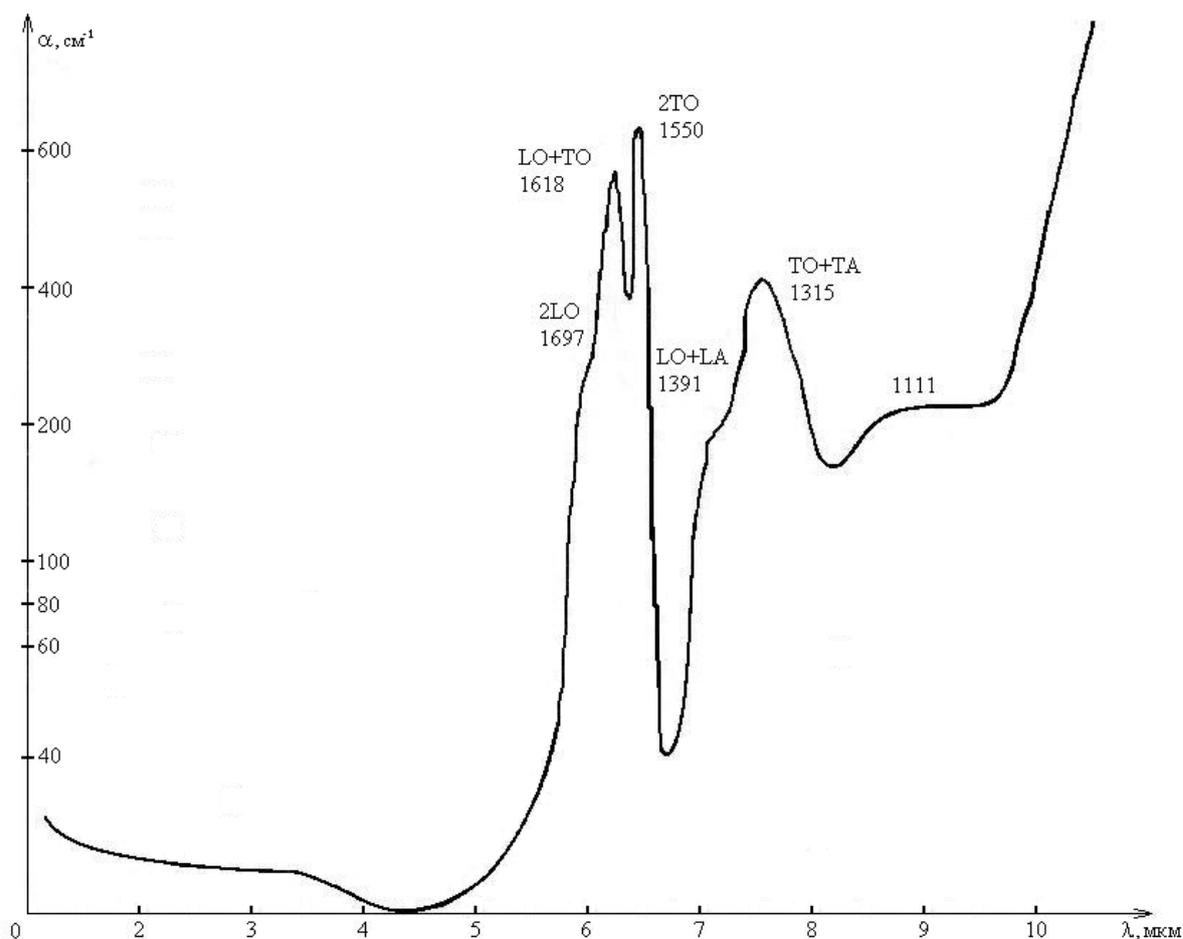


Рисунок 5 – Вид спектра двухфононного поглощения для кристалла карбида кремния

На поле рисунка отмечены волновые числа, отвечающие максимумам поглощения, и даны комбинации фононов, отвечающие этим максимумам. Как видно, в двухфононных спектрах поглощения проявляются не только оптические, но и акустические фононы, и, таким образом, исследование этих спектров позволяет находить акустические колебания кристаллической решетки, не наблюдаемых в спектре однофононного поглощения.

Содержание расчетной части

Необходимо получить у инженеров учебной лаборатории экспериментально измеренный спектр отражения. Для обработки данных целесообразно использовать математический пакет MATLAB.

- 1) По спектру отражения определить коэффициенты отражения в области коротких R_∞ и длинных R_0 волн.
- 2) Используя формулы, связывающие коэффициент отражения и диэлектрическую проницаемость, найти по значениям R_∞ и R_0 высокочастотную ϵ_∞ и низкочастотную ϵ_0 диэлектрические проницаемости.
- 3) По формулам, связывающим диэлектрическую проницаемость и показатель преломления, вычислить высокочастотное n_∞ и низкочастотное n_0 значения показателей преломления.
- 4) По спектру отражения определить коротковолновую и длинноволновую границы полосы «остаточных лучей», по этим границам найти частоты оптических фононов: ω_{LO} и ω_{TO} .

Найденные значения диэлектрических проницаемостей и частот оптических фононов должны удовлетворять соотношению Лиддена-Сакса-Теллера:

$$\left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{TO}} \right)^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}. \quad (8)$$

Произвести проверку найденных значений ϵ_∞ , ϵ_0 , ω_{LO} и ω_{TO} при помощи соотношения (8).

- 5) Принять постоянную затухания γ из диапазона: $(1.00 \div 9.99) \cdot 10^{-11}$.
- 6) По формулам (4) – (6) рассчитать спектры ϵ_1 и ϵ_2 , а также R . Полученные результаты представить графически, аналогично рисунку 4.
- 7) Вычислить среднеквадратическое расхождение расчетных и экспериментальных спектров отражения.

РАСЧЕТНАЯ РАБОТА № 2.

«Твердотельная плазма и оптический плазменный резонанс в кристаллах».

Цель работы: Определение характеристических параметров кристаллов, частоты плазменных колебаний, времени релаксации этих колебаний, высокочастотной и низкочастотной диэлектрических проницаемостей.

Основные теоретические положения

Оптический плазменный резонанс в кристаллах определяется влиянием свободных электронов, которые не связаны с атомами кристалла и не имеют определенной пространственной локализации. Вместе с локализованными вблизи положений равновесия собственными или примесными ионами такие свободные носители заряда образуют электрически нейтральную твердотельную плазму.

Вид оптических спектров металлов в широком диапазоне длин волн, начиная от ультрафиолетовой области, определяется, в основном, взаимодействием излучения с твердотельной плазмой, которая в металлах образована свободными электронами и собственными положительно заряженными ионами, колеблющимися вблизи положений равновесия. В полупроводниках также существенным может быть влияние свободных электронов и дырок на оптические спектры. Однако это влияние здесь проявляется в инфракрасной и дальней инфракрасной областях спектра, так как концентрации свободных носителей заряда в полупроводниках (даже при сильном легировании) на несколько порядков ниже, чем в металлах.

Для описания влияния свободных электронов и (или) дырок на спектры оптических постоянных кристаллов воспользуемся дисперсионными выражениями, полученными в теории Лоренца. В уравнении движения, описывающем смещение электронов под действием электрического поля световой волны, в применении к свободным электронам необходимо принять возвращающую квазиупругую силу равной нулю (электроны свободны, т.е. $-m^*\omega_0^2\vec{r} = 0$). Это равносильно предположению о том, что резонансная частота для свободных электронов равна нулю $\omega_0 = 0$. Таким образом, рассматриваемая полоса поглощения «на свободных носителях» является самой длинноволновой.

Хотя мы используем здесь термин «свободные носители заряда», необходимо иметь в виду, что электроны в кристалле находятся под воздействием периодического кристаллического потенциала. Таким образом, рассматриваемые «свободные носители заряда» не являются вполне свободными. Вместе с тем, для малых значений волнового числа

электрона $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, когда длина волны де Бройля и область локализации электрона велики и охватывают большое число постоянных кристаллической решетки, электрон «не чувствует», что кристаллическая среда, где происходит его движение, периодически изменяет свои свойства. При этом имеется существенное качественное сходство движения электрона в кристалле и в свободном пространстве. На основании этого сходства электрон в кристалле можно рассматривать как свободный электрон, но с массой m^* , отличающейся от массы свободного электрона. Такая масса называется эффективной, ее введение позволяет учесть действие на электрон периодического кристаллического потенциала.

Таким образом, в применении к свободным носителям заряда в кристалле должна быть использована эффективная масса m^* , которая в теории Лоренца входит в дисперсионные соотношения для оптических постоянных. Постоянная затухания γ , которая представляет собой полуширину резонансного контура для свободных носителей заряда, имеет четкий физический смысл:

$$\gamma = \frac{1}{\tau}, \quad (9)$$

где $\tau = \frac{m^* \bar{e}}{\mu}$ – время свободного пробега, а $\mu = \frac{v}{E}$ – подвижность на частоте ω (скорость дрейфа свободных носителей заряда в единичном электрическом поле).

Подставив в уравнение движения свободных носителей заряда и в материальное уравнение для поляризации среды величины $\omega_0 = 0,1 \rightarrow \epsilon_\infty$, $m \rightarrow m^*$, найдем в соответствии с теорией Лоренца дисперсионные выражения для оптических постоянных вещества, определяемых свободными носителями заряда:

$$n^2 - k^2 - \epsilon_\infty = \frac{\left(\frac{N\bar{e}^2}{m^* \epsilon_0} \right)}{\omega^2 + \gamma^2} = \frac{\tau^2 \left(\frac{N\bar{e}^2}{m^* \epsilon_0} \right)}{(\omega\tau)^2 + 1}, \quad (10)$$

$$2nk = \text{cn}\alpha = \frac{\gamma \left(\frac{N\bar{e}^2}{m^* \epsilon_0} \right)}{\omega^2 + \gamma^2} = \frac{\tau \left(\frac{N\bar{e}^2}{m^* \epsilon_0} \right)}{(\omega\tau)^2 + 1}, \quad (11)$$

где $\alpha = \frac{2k\omega}{c}$ – коэффициент поглощения, а N – концентрация свободных носителей заряда.

Рассмотрим физический смысл коэффициента $\left(\frac{N\bar{e}^2}{m^* \epsilon_0} \right)$, входящего в выражения (10) и (11).

Для этого выполним анализ смещения свободных электронов под действием внешнего электрического поля \vec{E} электромагнитной волны в применении к металлам (рисунок б).

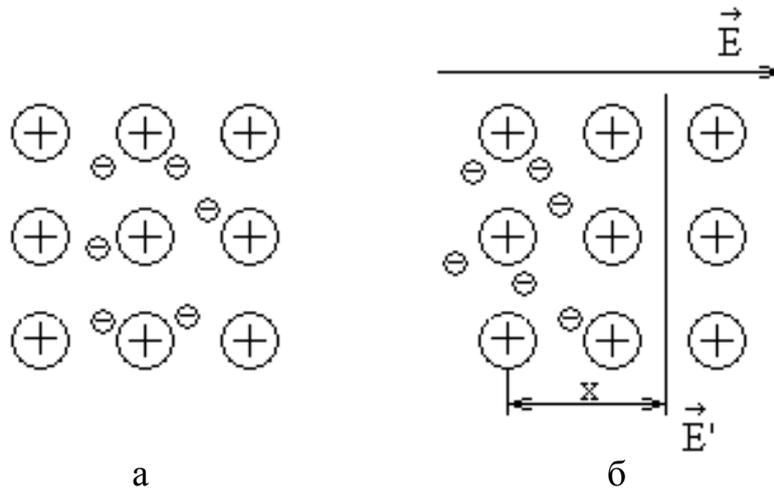


Рисунок б – Влияние внешнего электрического поля на смещение свободных электронов

При отсутствии внешнего электрического поля заряд неподвижных положительных ионов и компенсирующих их отрицательных свободных электронов равномерно распределены в кристалле, так что макроскопическое электрическое поле в такой среде отсутствует (рисунок б, а). Действие внешнего электрического поля приводит к смещению совокупности свободных зарядов как целого на величину x (рисунок б, б). В результате этого смещения в кристалле появляется внутреннее электрическое поле, которое компенсирует электрическое поле световой волны, поэтому результирующее электрическое поле в среде составляет:

$$E'_x = -\frac{Ne}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} x. \quad (12)$$

При отсутствии столкновений ($\gamma = 0$) уравнение движения электронов в этом поле имеет вид:

$$m^* \frac{d^2 x}{dt^2} = eE'_x = -\frac{N\bar{e}^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} x, \quad (13)$$

и описывает колебательное движение совокупности электронов с угловой частотой:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{N\bar{e}^2}{m^* \varepsilon_0 \varepsilon_\infty}}. \quad (14)$$

Эта частота называется плазменной, и коэффициенты в дисперсионных выражениях (10) и (11) представляют собой квадрат плазменной частоты свободных электронов.

Подставляя (14) в (10) и (11), получаем дисперсионные соотношения для оптических постоянных:

$$n^2 - k^2 = \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{(\omega_p \tau)^2}{(\omega \tau)^2 + 1} \right), \quad (15)$$

$$2nk\omega = \text{сн}\alpha = \frac{\varepsilon_\infty (\omega_p \tau)^2}{\omega \tau (\omega \tau)^2 + 1}. \quad (16)$$

Применим отдельно выражения (15) и (16) для области коротких волн

$(\omega \tau)^2 \gg 1$ и области длинных $(\omega \tau)^2 \ll 1$.

В коротковолновой области спектра обычно выполняется $n^2 \gg k^2$. Поэтому из выражений (14) и (15) получаем:

$$n^2 = \varepsilon_\infty \left(1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \right) = \varepsilon_\infty - \frac{N\bar{e}^2}{m^* \varepsilon_0 \omega}. \quad (17)$$

Аналогично из выражений (14) и (16) следует:

$$2nk\omega = \text{сн}\alpha = \frac{\varepsilon_\infty}{\tau} \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \quad (18)$$

или

$$\alpha = \frac{\bar{e}^2}{\text{сн} m^* \varepsilon_0} \frac{N}{\tau \omega^2}. \quad (19)$$

Таким образом, в коротковолновой области спектра, где дисперсия оптических постоянных определяется свободными носителями заряда и $(\omega \tau)^2 \gg 1$, вклад свободных носителей заряда в диэлектрическую проницаемость (17) и коэффициент поглощения на свободных носителях ((18), (19)) убывает обратно пропорционально квадрату частоты излучения.

Обе эти величины – как приращение диэлектрической проницаемости $(n^2 - \varepsilon_\infty)$, так и коэффициент поглощения – пропорциональны концентрации свободных носителей.

Коэффициент поглощения света α обратно пропорционален времени свободного пробега $\tau \sim \mu$. Так как время свободного пробега зависит от энергии свободных носителей заряда в кристалле, то множитель $(1/\tau)$ в выражениях (18) и (19) обуславливает отклонение спектральной зависимости коэффициента поглощения от квадратичного закона. В зависимости от механизма рассеяния свободных носителей заряда коэффициент поглощений изменяется: $\alpha \sim \omega^{-3/2} \div \omega^{-7/2}$, где показатель степени зависит от концентрации свободных носителей заряда.

В отличие от коэффициента поглощения приращение диэлектрической проницаемости $(n^2 - \varepsilon_\infty)$ не зависит от времени свободного пробега и, следовательно, от механизма рассеяния свободных носителей. Эта величина изменяется квадратично в зависимости от длины волны излучения $(n^2 - \varepsilon_\infty) \sim 1/\omega^2$.

В длинноволновой области спектра, где частота излучения достаточно мала, так что выполняется $(\omega\tau)^2 \ll 1$, из выражений (15) и (16) следует:

$$\left. \begin{aligned} n^2 - k^2 &= \varepsilon_\infty(1 - (\omega_p \tau)^2) \\ 2nk\omega &= cn\alpha = \frac{\varepsilon_\infty}{\tau}(\omega_p \tau)^2 \end{aligned} \right\} = \text{const}(\lambda). \quad (20)$$

Таким образом, в длинноволновой области спектра оптические постоянные, определяемые свободными носителями заряда, не зависят от частоты излучения.

Используя выражения (17) – (20), рассмотрим спектральную зависимость коэффициента отражения.

Из выражения (17), где предполагалось $n^2 \gg k^2$, следует, что показатель преломления среды быстро убывает в зависимости от длины волны излучения. Для того же соотношения между показателями преломления и поглощения, коэффициент отражения может быть представлен:

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2. \quad (21)$$

Следовательно, для некоторой длины волны излучения, когда показатель преломления уменьшится до значения $n = 1$, коэффициент отражения примет значение $R = 0$. При несколько большей длине волны

показатель преломления уменьшится до $n = 0$, а коэффициент отражения здесь возрастет до значения $R = 1$. В соответствии с выражением (17) значения $n = 0$ и $R = 1$ достигаются при длинах волн, отвечающих плазменной частоте $\omega = \omega_p$.

Таким образом, в области частот, близких к плазменной частоте $\omega \cong \omega_p$, коэффициент отражения в малом интервале частот быстро изменяется в пределах от $R = 0$ до $R = 1$. Эта область называется областью плазменного резонанса. При $\omega < \omega_p$ $n = 0$, и соответствующая длина волны излучения $\lambda = \frac{2\pi c}{n\alpha} \rightarrow \infty$, так что фаза световой волны повсюду в веществе одинакова, и все носители заряда движутся как единая совокупность, т.е. ведут себя как плазма. Фазовый угол между векторами \vec{E} и \vec{H} составляет здесь $\arctg(k/n) = 90^\circ$. Поэтому вектор Пойнтинга равен нулю, и распространения света вглубь кристалла не происходит. Так как мы предполагаем, что потери отсутствуют, коэффициент отражения здесь $R = 1$.

Представим полученные зависимости n , α , R в области дисперсии на свободных носителях заряда в виде графиков. Эти зависимости описываются выражениями (17) – (20) и представлены на рисунке 7 для двух концентраций свободных носителей заряда $N_1 > N_2$ соответственно пунктирной и сплошной линиями.

Как видно, для малой концентрации свободных носителей $N_1 > N_2$ плазменный резонанс смещен в длинноволновую область спектра.

Как следует из выражения (13), плазменная частота зависит от концентрации свободных носителей заряда. Измерения положения плазменного края в спектре отражения позволяют определить ω_p и найти концентрацию свободных носителей заряда, если известна m^* .

Содержание расчетной части

Необходимо получить у инженеров учебной лаборатории исходные данные. Для обработки данных целесообразно использовать математический пакет MATLAB.

1) По формуле (13) рассчитать плазменную частоту, приняв:

$$N = 2.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3};$$

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл};$$

$$m^* = 0.07m_e = 0.07 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг};$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}.$$

2) Найти время релаксации τ (время свободного пробега), подвижность μ свободных носителей заряда.

3) Принять рабочий диапазон длин волн: $\lambda = (0 \div 30) \text{ мкм}$.

- 4) По формулам (15), (16) и выражению (6) (расчетная работа №1) рассчитать спектры ε_1 и ε_2 , а также R.
- 5) Результаты расчета R представить графически.

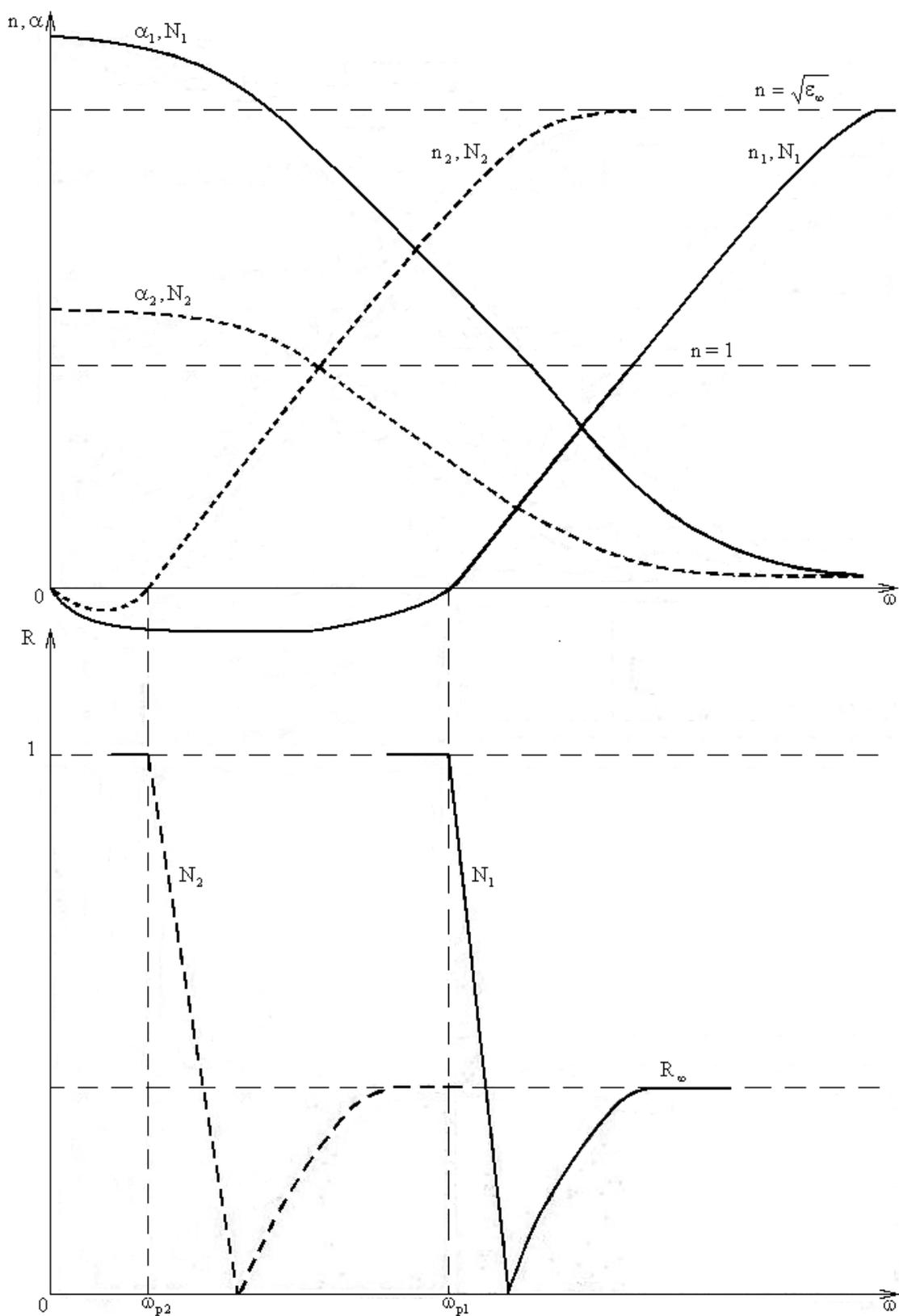


Рисунок 7 – Зависимости n , α и R от частоты

РАСЧЕТНАЯ РАБОТА № 3.

«Спектры инфракрасного отражения кристаллов и их взаимосвязь с характеристическими параметрами вещества».

Цель работы: Определение по спектрам решеточного или плазменного отражения характеристических параметров кристаллов.

Основные теоретические положения

Инфракрасная оптическая спектроскопия является мощным средством определения характеристических параметров электронных и колебательных состояний кристаллов. Особенности спектров отражения кристаллов в ближней и средней инфракрасной области спектра чаще всего обусловлены взаимодействием излучения с колебаниями атомов кристаллической решетки фононами, а также, когда концентрации свободных носителей заряда в кристаллах достаточно велики, – взаимодействием излучения с плазменными колебаниями свободных электронов (плазмонами).

По спектрам колебательного отражения могут быть определены частоты длинноволновых колебаний атомов кристалла ω_0 (энергии фононов $\hbar\omega_0$), постоянная затухания γ этих колебаний (время жизни фононов $\tau = \frac{1}{\gamma}$), высокочастотная ϵ_∞ и низкочастотная ϵ_0 диэлектрическая проницаемости, определяемые соответственно вкладом в поляризуемость кристалла связанных электронов, а также суммарным вкладом связанных электронов и фононов.

По спектрам плазменного отражения могут быть определены частота плазменных колебаний свободных электронов:

$$\omega_p = \left(\frac{Ne^2}{m^* \epsilon_\infty \epsilon_0} \right)^{1/2}, \quad (22)$$

где N – концентрация свободных электронов, e – заряд электрона, m^* – эффективная масса, ϵ_0 – электрическая постоянная.

Коэффициент отражения света при нормальном падении излучения на границу раздела «вакуум-поглощающая среда» может быть представлен выражением:

$$R = \left| \frac{N^* - 1}{N^* + 1} \right|^2 = \left| \frac{(\epsilon^*)^{1/2} - 1}{(\epsilon^*)^{1/2} + 1} \right|^2, \quad (23)$$

где $N^* = n - i \cdot k$ и $\varepsilon^* = (N^*)^2 = \varepsilon_1 - i \cdot \varepsilon_2$ – соответственно комплексный показатель преломления и комплексная диэлектрическая проницаемость; n – показатель преломления; k – показатель поглощения; ε_1 и ε_2 – вещественная и мнимая части диэлектрической проницаемости.

Взаимосвязь между n и k с одной стороны, а также ε_1 и ε_2 с другой дается соотношением:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (24)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk.$$

В кристаллах с ионной химической связью, содержащих два атома в элементарной ячейке, взаимодействие электромагнитных волн с кристаллической решеткой в области однофононного резонанса хорошо описывается моделью одного эквивалентного осциллятора. Собственная частота эквивалентного осциллятора соответствует частоте длинноволнового поперечного ТО фонона $\omega_0 = \Omega_{TO}$, его постоянная затухания определяется временем жизни ТО (Γ) фононов, а амплитуда – вкладом колебаний кристаллической решетки в поляризуемость кристалла $\Delta\varepsilon = \varepsilon_0 - \varepsilon_\infty$. Частотная зависимость ε_1 и ε_2 (как n и k) в модели одного эквивалентного осциллятора дается выражением:

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \left(1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right)}{\left(1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right)^2 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2}, \quad (25)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk = \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right) \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)}{\left(1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right)^2 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2}. \quad (26)$$

Выражения (23), (25) и (26) используются для нахождения параметров ε_∞ , ω_0 и γ по экспериментально измеренному спектру отражения ε_1 .

Частотная зависимость величин $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$ и $R(\omega)$, определяемая выражениями (23), (25) и (26) в области однофоновнного резонанса, изображена графически на рисунке 8.

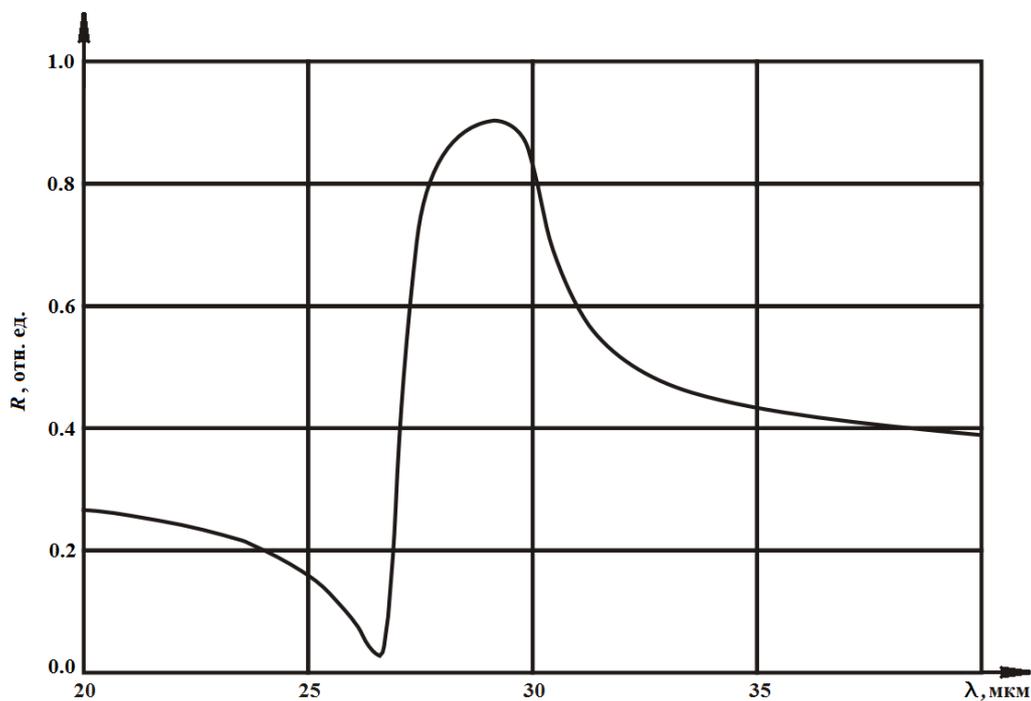
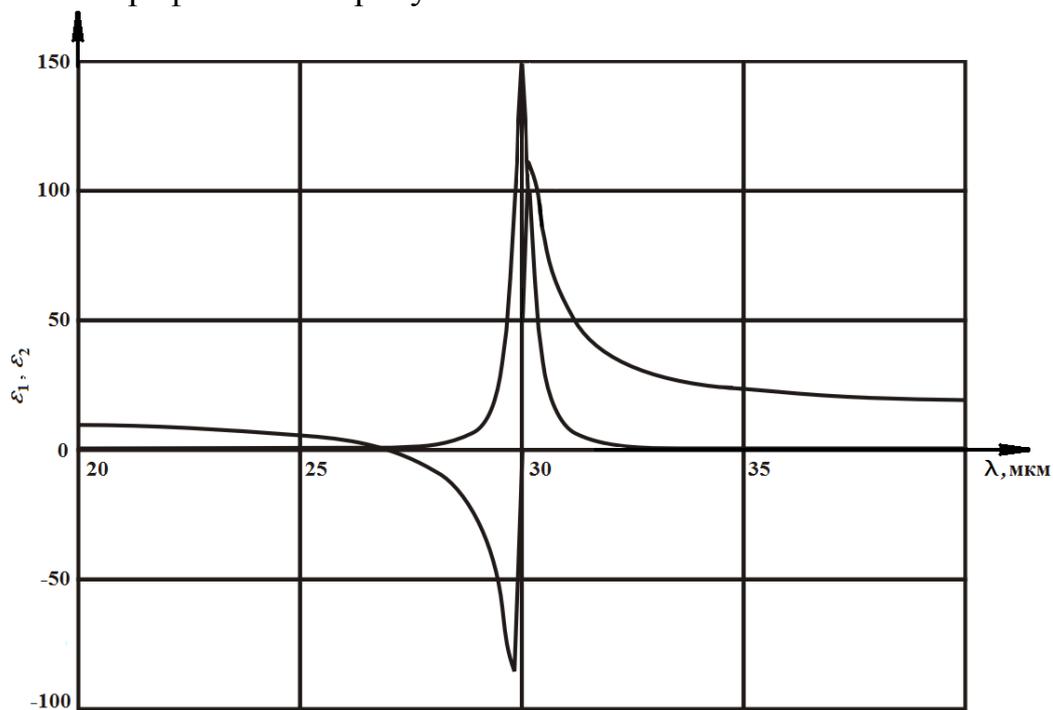


Рисунок 8 – Зависимости $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$ и $R(\omega)$ от длины волны ($\varepsilon_0 = 15$; $\varepsilon_\infty = 12$; $\gamma/\omega_0 = 0.05$)

Из рассмотренных выражений и рисунка 8 следует, что значение коэффициента отражения R в коротковолновой области спектра (вдали от ω_0) определяется, в основном, ε_∞ ; соответствующее значение R в длинноволновой области спектра зависит, в основном, от ε_0 . Длинноволновый край полосы отражения соответствует частоте $\omega = \omega_0$. Ширина полосы отражения определяется из соотношения Лидлена-Сакса-Теллера:

$$\left(\frac{\omega_1}{\omega_0}\right)^2 = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty}\right), \quad (27)$$

где частота ω_1 соответствует коротковолновому краю полосы отражения и довольно близка к частоте продольного длинноволнового ($q = 0$) оптического фонона: $\omega_1 \cong \Omega_{LO}^{(r)}$.

Рассмотренные данные по величинам длинноволнового и коротковолнового коэффициентов отражения, положению и ширине полосы отражения необходимо использовать при выборе начальных приближений для численного поиска параметров ε_∞ , ω_0 и γ .

В кристаллах, содержащих свободные носители заряда (полупроводниках или металлах), для области плазменного резонанса частотная зависимость вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости (ε_1 и ε_2) или показателя преломления и показателя поглощения (n и k) имеют вид:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 = \varepsilon \left(1 - \frac{(\omega_p \tau)^2}{(\omega_p \tau)^2 + 1} \right), \quad (28)$$

$$\varepsilon_2 \omega = 2nk\omega = \frac{\varepsilon}{\tau} \frac{(\omega_p \tau)^2}{(\omega_p \tau)^2 + 1}. \quad (29)$$

где диэлектрическая проницаемость ε может иметь смысл ε_∞ или ε_0 в зависимости от положения плазменного края (в коротковолновой или длинноволновой области по отношению к полосе решеточного отражения при $\omega = \omega_0$), ω_p – плазменная частота свободных носителей заряда,

$\tau = \left(\frac{m^*}{e} \right) \mu$ – время релаксации плазменных колебаний (соизмеримое с

временем жизни свободных носителей), а μ – подвижность свободных носителей.

Выражения (23), (28) и (29) используются для нахождения параметров ε , ω_p и τ по экспериментально измеренному спектру отражения $R(\omega)$. Вид спектров ε_1 , ε_2 и R , определяемый выражениями (23), (28) и (29), изображен на рисунке 9.

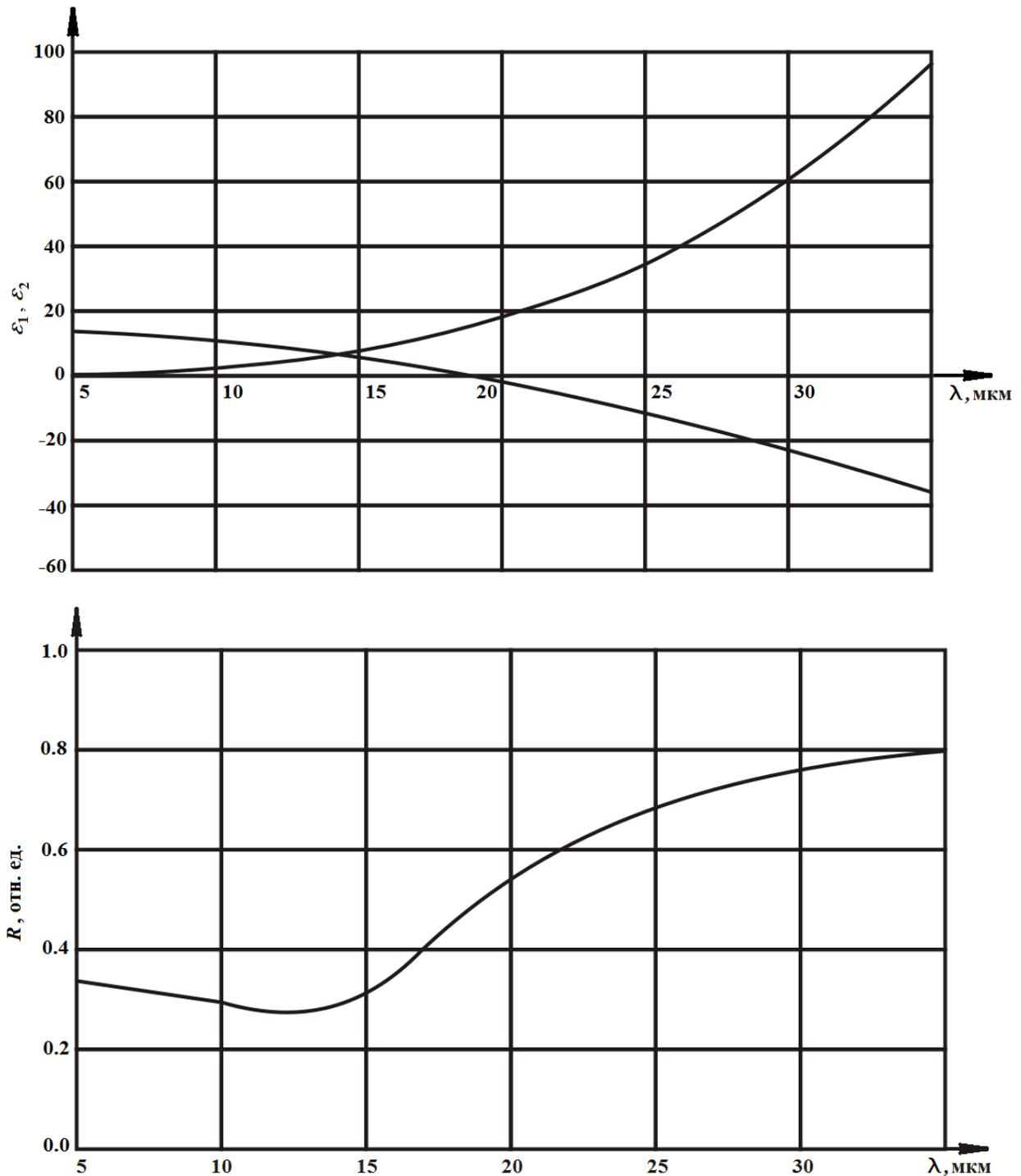


Рисунок 9 – Зависимости $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$ и $R(\omega)$ от длины волны ($\varepsilon = 15$, $\omega_p = 10^{12} \text{ c}^{-1}$; $\tau_p = 10^{-14} \text{ c}$)

Из рассмотренных выше выражений и рисунка 9 следует, что значение коэффициента отражения R в коротковолновой области спектра (вдали от ω_p) определяется, в основном, параметром ε , положение плазменного края (частота, соответствующая быстрому возрастанию R с увеличением λ) соответствует плазменной частоте ω_p , а крутизна края плазменного отражения, а также степень отклонения от $R = 0$ в области минимума и $R = 1$ в области длинных волн зависят от параметра τ .

Рассмотренные данные по значениям R в области коротких и длинных волн, а также положению и крутизне края плазменного отражения необходимо использовать для выбора начальных приближений при численном анализе параметров ε , ω_p и τ .

Минимальная энергия, необходимая для «разрыва» собственных валентных связей в кристалле, составляет ширину его запрещенной зоны E_g . Для определения ширины запрещенной зоны можно измерять спектры пропускания плоскопараллельных пластинок, изготовленных из исследуемого кристалла:

$$T = (1 - R)^2 e^{-\alpha x}, \quad (30)$$

где T – коэффициент пропускания исследуемой пластины, α – коэффициент поглощения, x – толщина пластины.

Показатель поглощения связан с коэффициентом поглощения следующим выражением:

$$k = \frac{\alpha \lambda}{4\pi}. \quad (31)$$

Вид спектров пропускания и поглощения для кристалла с шириной запрещенной зоны $E_g = 2.81$ эВ показан на рисунке 10.

Граница перехода от области «прозрачности» к области собственного поглощения называется краем собственного поглощения. Форма края собственного поглощения определяется строением энергетических зон. Две различные ситуации при формировании края собственного поглощения изображены на рисунке 11 (а, б), где показаны зонные диаграммы зависимости энергии электрона E на уровнях валентной зоны и зоны проводимости от волнового числа q для полупроводников с прямой и непрямой структурами энергетических зон. На этом рисунке $\hbar\omega$ – энергия кванта света, $\hbar\Omega$ – энергия колебаний кристаллической решетки, E_n – энергия свободного электрона в зоне проводимости; E_p – энергия свободной дырки в валентной зоне; q_n – волновое число свободного

электрона в зоне проводимости; q_p – волновое число свободной дырки в валентной зоне.

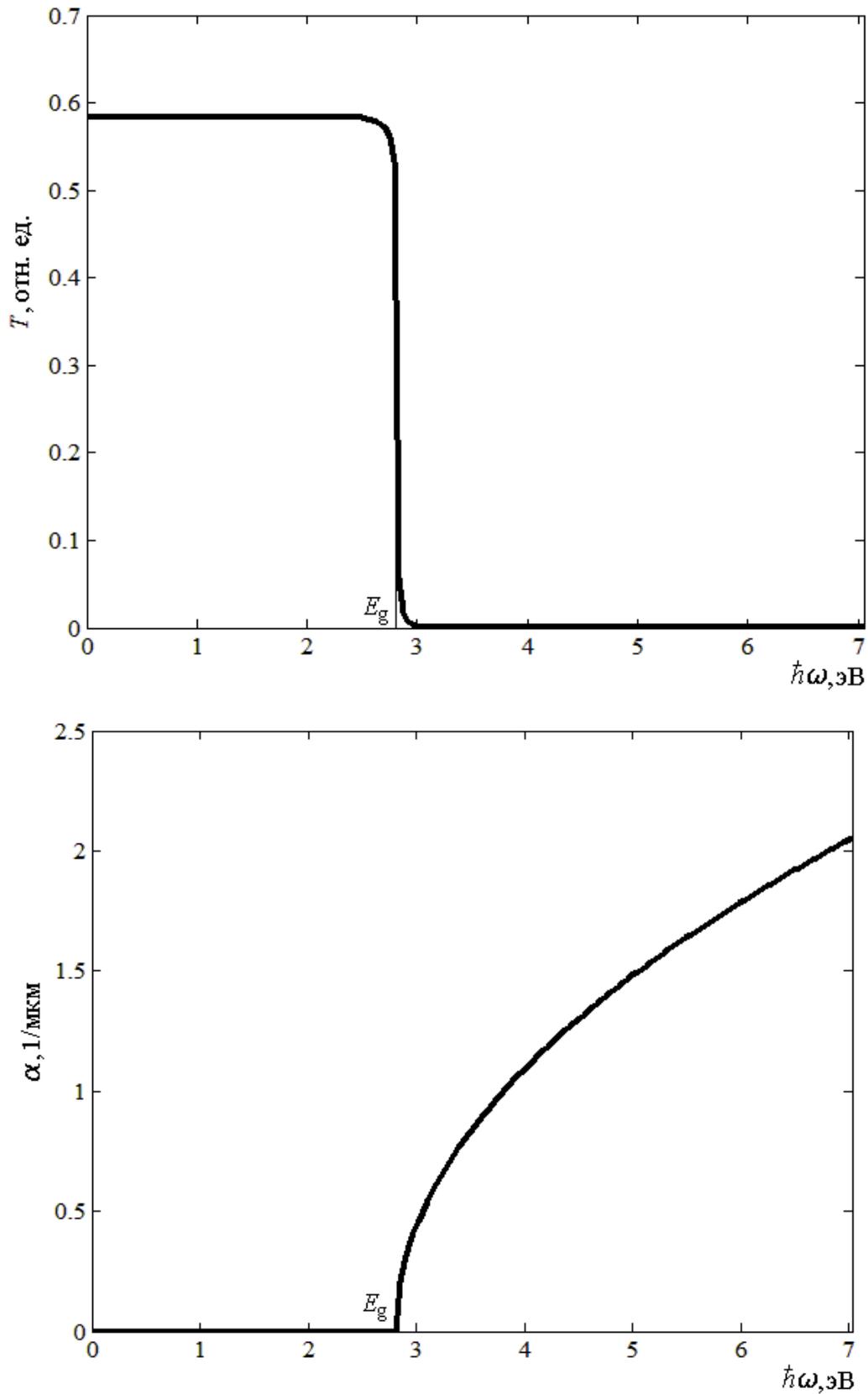


Рисунок 10 – Спектры пропускания $T(\hbar\omega)$ и поглощения $\alpha(\hbar\omega)$ для кристалла с шириной запрещенной зоны $E_g = 2.81$ эВ

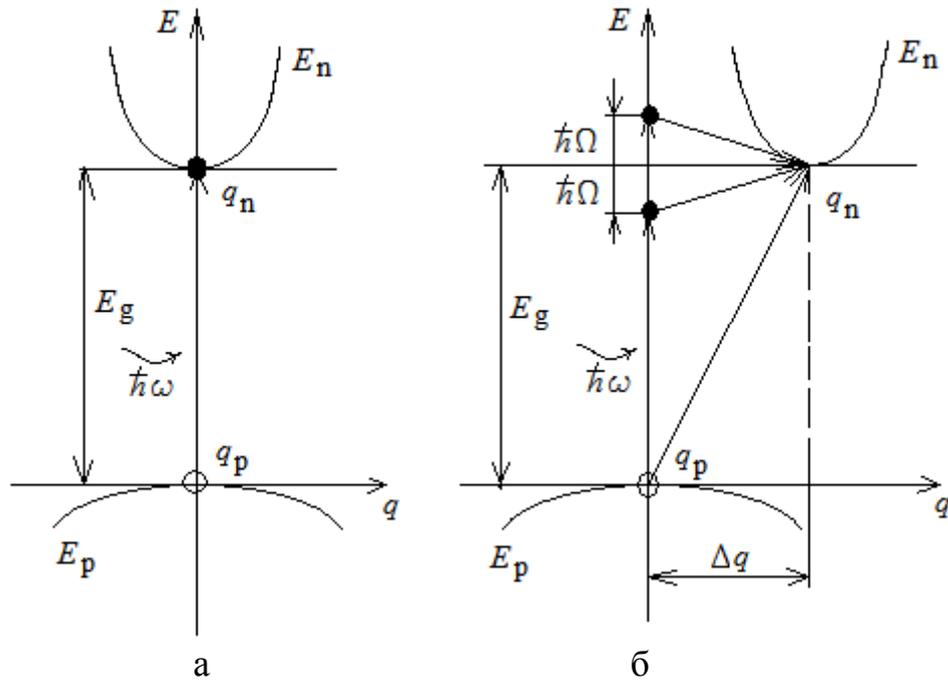


Рисунок 11 – Зонные диаграммы для полупроводников с прямой (а) и непрямой (б) структурами энергетических зон

Зависимость коэффициента поглощения от энергии квантов света в полупроводниках с прямой структурой энергетических зон имеет вид:

$$\alpha(\hbar\omega) = A\sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad (32)$$

где A – постоянная.

Зависимость коэффициента поглощения от энергии квантов света в полупроводниках с непрямой структурой энергетических зон имеет вид:

$$\alpha(\hbar\omega) = B(\hbar\omega - (E_g \pm \hbar\Omega))^2, \quad (33)$$

где B – постоянная.

Расчет значений ε_0 и ε_∞ производится по формулам:

$$\varepsilon_0 = \left(\frac{1 + \sqrt{R_0}}{1 - \sqrt{R_0}} \right), \quad (34)$$

$$\varepsilon_\infty = \left(\frac{1 + \sqrt{R_\infty}}{1 - \sqrt{R_\infty}} \right). \quad (35)$$

Вещественная ε_1 и мнимая ε_2 части комплексной диэлектрической проницаемости ε^* определяются по (25) и (26).

Коэффициент отражения для амплитуды и интенсивности задаются выражениями соответственно:

$$r = \frac{\left(\sqrt{\varepsilon^*} - 1 \right)}{\left(\sqrt{\varepsilon^*} + 1 \right)}, \quad (36)$$

$$R = |r|^2. \quad (37)$$

Расчет значения ε_∞ производится по формуле (35). Вещественная ε_1 и мнимая ε_2 части комплексной диэлектрической проницаемости ε^* определяются по (28) и (29). Коэффициент отражения для амплитуды и интенсивности задаются выражениями (36) и (37). По формуле (22) найти значение эффективной массы m^* .

По спектру $T(\hbar\omega)$ найти значение ширины запрещенной зоны E_g . Используя выражение (33), построить зависимость $\alpha(\hbar\omega)$ для кристалла с прямой структурой энергетических зон.

По данным $T(\hbar\omega)$ рассчитать спектр поглощения:

$$\alpha = -\frac{1}{x} \ln \left(\frac{T}{(1-R)^2} \right). \quad (38)$$

Установить область энергий квантов $\hbar\omega$, где спектральная зависимость коэффициента поглощения имеет наибольшую скорость изменения, и провести в этой области линейную интерполяцию зависимости $\alpha(\hbar\omega)$ (рисунок 12). По данным линейной интерполяции найти ширину запрещенной зоны E_g и найденное значение сравнить с величиной, определенной по спектру $T(\hbar\omega)$.

Содержание расчетной части

- 1) Получить распечатки спектров решеточного или плазменного отражения $R(\lambda)$, а также спектра пропускания $T(\hbar\omega)$.
- 2) Определить для каждого из прилагаемых спектров параметры ε_∞ , ε_0 , ω_0 и γ в случае решеточного отражения или параметры ε , ω_p и τ в случае плазменного отражения. Найти также m^* , предполагая $N = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. По спектру пропускания определить значение ширины запрещенной зоны E_g .

3) Произвести расчеты спектров решеточного или плазменного отражения, а также спектра поглощения $\alpha(\hbar\omega)$ для кристалла с прямой структурой энергетических зон. Изобразить рассчитанные зависимости $R(\lambda)$ и $\alpha(\hbar\omega)$.

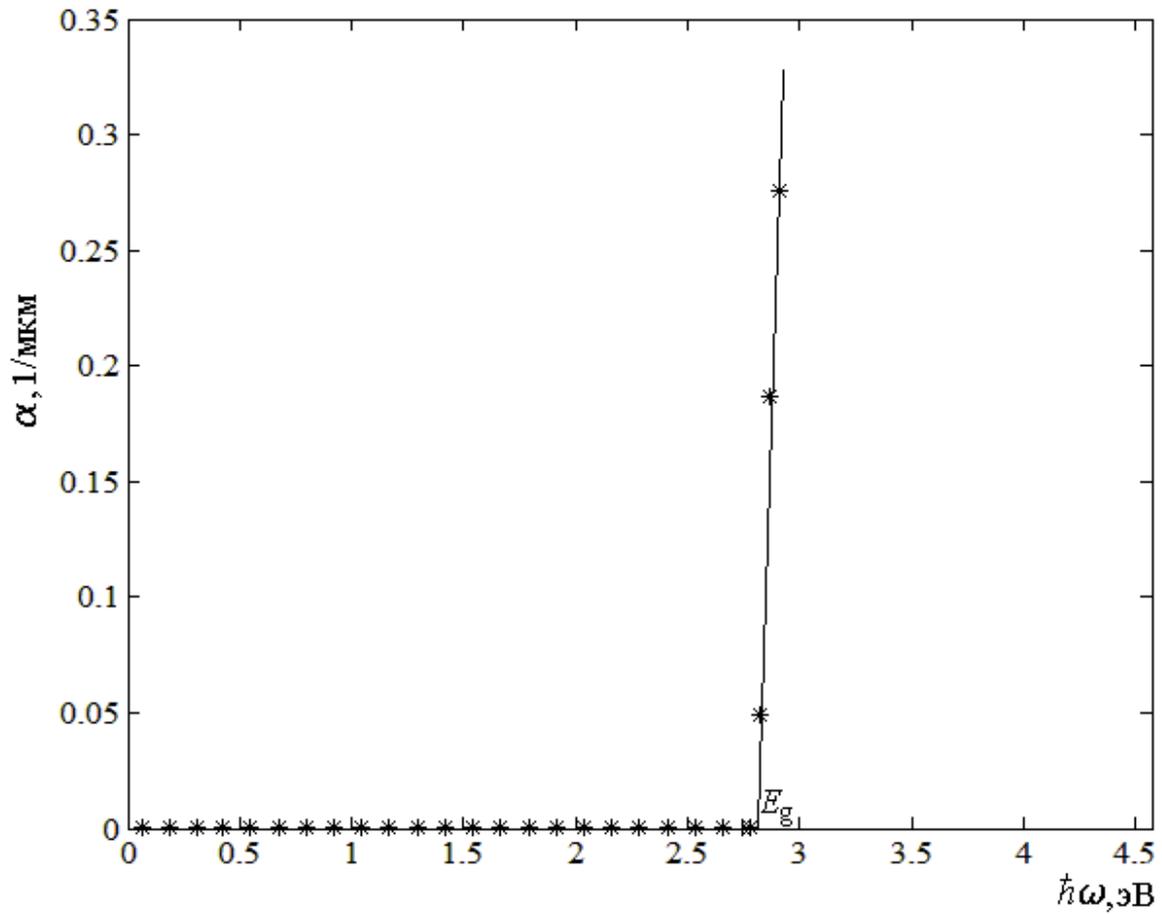


Рисунок 12 – Определение ширины запрещенной зоны E_g по спектру поглощения $\alpha(\hbar\omega)$

Расчет спектров решеточного отражения, используя математический пакет
MATLAB

Задание значений коэффициентов отражения в длинноволновой и коротковолновой областях спектра:

R_0 ;

R_∞ ;

Задание длины волны, соответствующей частоте ω_0 :

l_0 ;

Задание значения постоянной затухания:

g ;

Задание диапазона длин волн:

l ;

Расчет низкочастотной диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_0 = ((\sqrt{R_0} + 1) / (1 - \sqrt{R_0}))^2;$$

Расчет высокочастотной диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_\infty = ((\sqrt{R_\infty} + 1) / (1 - \sqrt{R_\infty}))^2;$$

Расчет диапазона частот:

$$w = 2 * \pi * 3e14 ./ l;$$

Расчет частоты ω_0 :

$$w_0 = 2 * \pi * 3e14 ./ l_0;$$

Расчет вещественной части диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_1 = \epsilon_\infty + (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) * (1 - (w ./ w_0).^2) ./ (((1 - (w ./ w_0).^2).^2) + (w ./ w_0).^2 * (g ./ w_0).^2);$$

Расчет мнимой части диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_2 = (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) * (g ./ w_0) * (w ./ w_0) ./ (((1 - (w ./ w_0).^2).^2) + (w ./ w_0).^2 * (g ./ w_0).^2);$$

Определение комплексной диэлектрической проницаемости:

$$e = \epsilon_1 - i * \epsilon_2;$$

Расчет коэффициента отражения для амплитуды:

$$r = (\sqrt{e} - 1) ./ (\sqrt{e} + 1);$$

Расчет коэффициента отражения для интенсивности:

$$R = \text{abs}(r).^2;$$

Построение зависимости коэффициента отражения от длины волны:

$$\text{plot}(l, R);$$

Построение зависимостей вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости от длины волны:

$$\text{plot}(l, \epsilon_1, l, \epsilon_2);$$

Расчет спектров плазменного отражения, используя математический пакет
MATLAB

Задание значения высокочастотной диэлектрической проницаемости:

$\epsilon_{\infty} i$

Задание значения постоянной затухания:

$g i$

Задание значения концентрации свободных электронов:

$N i$

Задание значения заряда электрона:

$q i$

Задание значения эффективной массы:

$m i$

Задание значения электрической постоянной:

$\epsilon_0 i$

Задание диапазона длин волн:

$l i$

Расчет диапазона частот:

$w = 2 * \pi * 3e14 ./ l i$

Расчет плазменной частоты:

$w_p = \text{sqrt}(N * q^2 / (m * \epsilon_{\infty} * \epsilon_0)) i$

Расчет вещественной части диэлектрической проницаемости:

$e_1 = \epsilon_{\infty} .* (1 - ((w_p / g)^2) ./ ((w ./ g).^2 + 1)) i$

Расчет мнимой части диэлектрической проницаемости:

$e_2 = (\epsilon_{\infty} ./ w) .* g .* ((w_p / g)^2) ./ ((w ./ g).^2 + 1) i$

Расчет комплексной диэлектрической проницаемости:

$e = e_1 - i * e_2 i$

Расчет коэффициента отражения для амплитуды:

$r = (\text{sqrt}(e) - 1) ./ (\text{sqrt}(e) + 1) i$

Расчет коэффициента отражения для интенсивности:

$R = \text{abs}(r).^2 i$

Построение зависимости коэффициента отражения от длины волны:

$\text{plot}(l, R) i$

Построение зависимостей вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости от длины волны:

$\text{plot}(l, e_1, l, e_2) i$

Примеры заданий к расчетным работам

1. Укажите, какое условие определяет зону Бриллюэна для линейной цепочки атомов из N атомов с постоянной кристаллической решётки a ?

а) $-\frac{\pi}{a} \leq q < \frac{\pi}{a}$;

б) $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$;

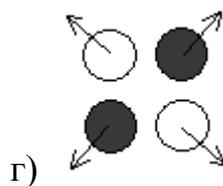
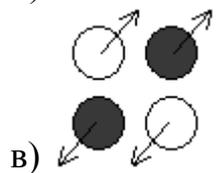
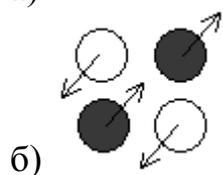
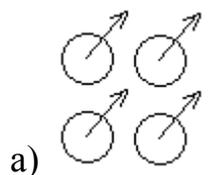
в) $-\frac{2\pi}{a} \leq q < \frac{2\pi}{a}$;

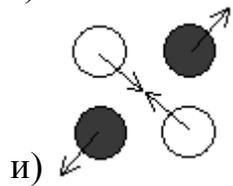
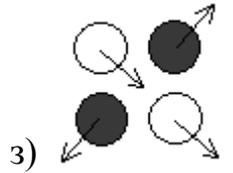
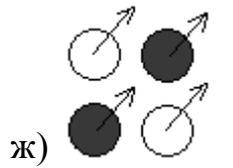
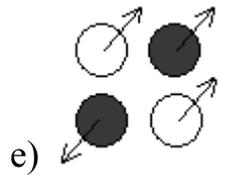
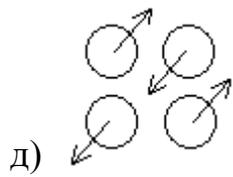
г) $-\infty \leq q < +\infty$;

д) $-\frac{a}{\pi} \leq q \leq \frac{a}{\pi}$;

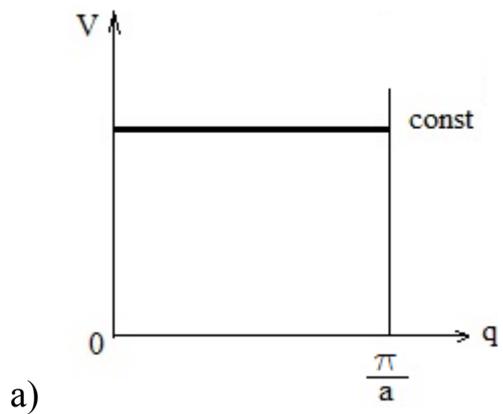
е) $-\frac{N}{2} \leq q \leq \frac{N}{2}$.

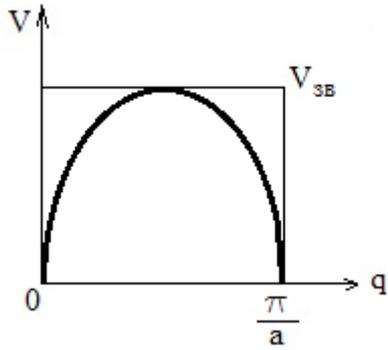
2. На каком из приведённых ниже рисунков изображены схематически оптические колебания атомов?



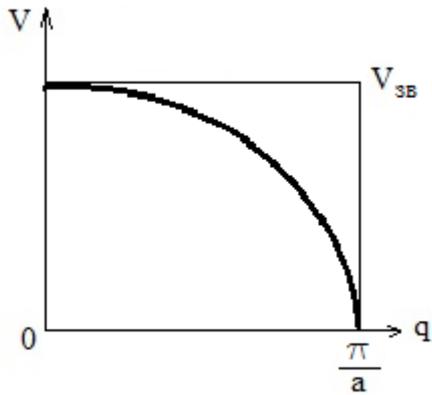


3. Какой из приведённых ниже графиков изображает зависимость групповой скорости акустических волн от волнового числа в линейной цепочке атомов?

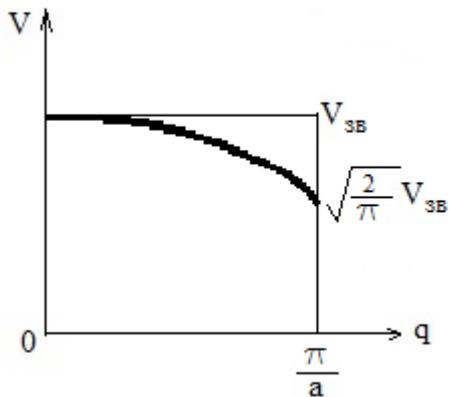




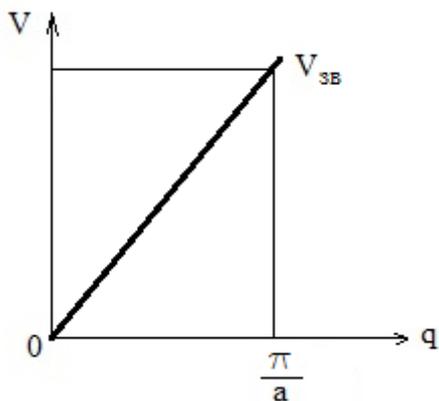
б)



в)

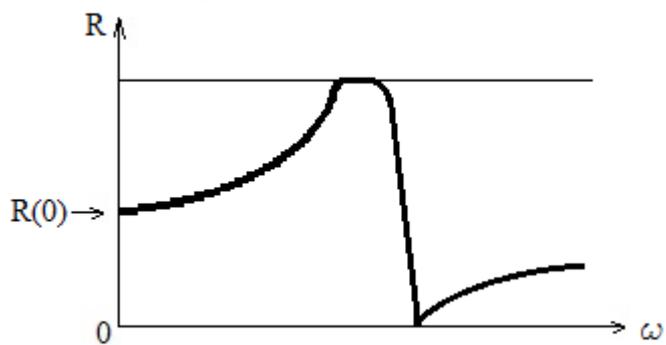


г)



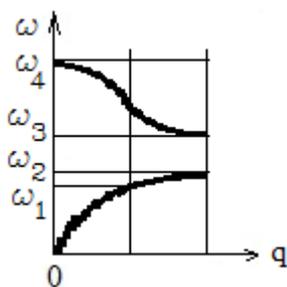
д)

4. На рисунке изображён спектр отражения кристалла в области «колебательной» полосы. Какую из величин определяет коэффициент отражения при $\omega \rightarrow 0$?



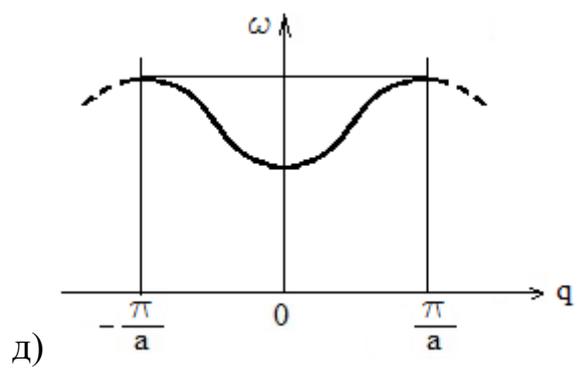
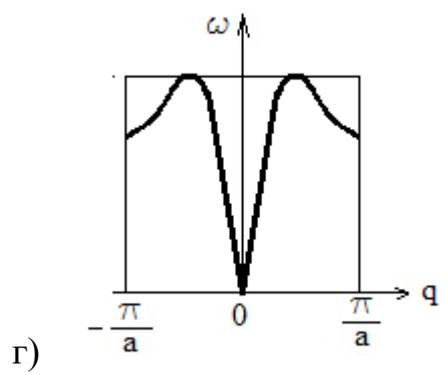
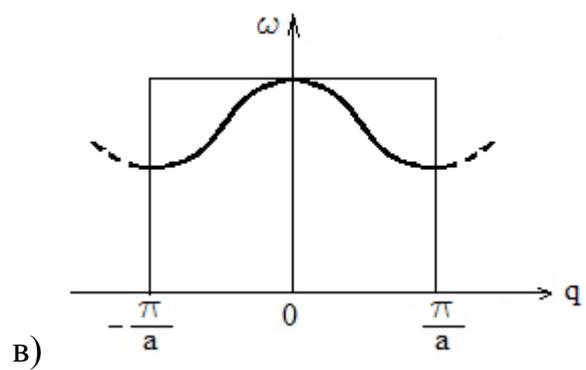
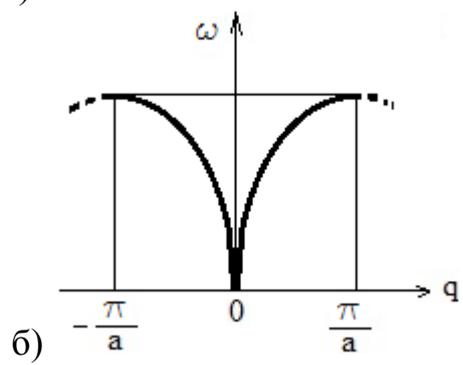
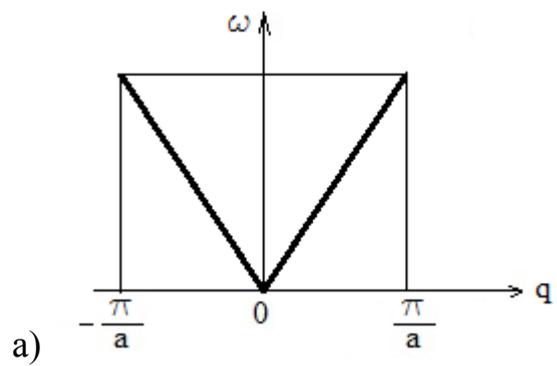
- а) ε статическую;
- б) ε оптическую;
- в) Ω_{TO} – частоту колебаний атомов;
- г) γ_{TO} – время затухания колебаний.

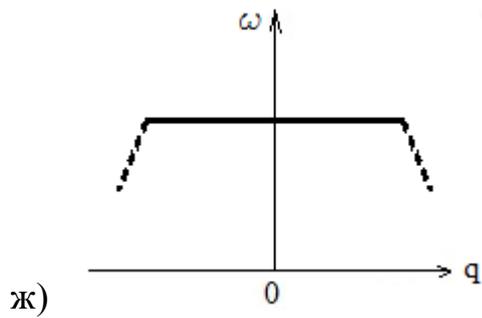
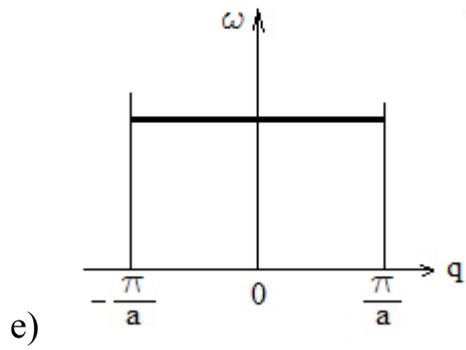
5. Какому из отмеченных на графике зависимости $\omega(q)$ значению частоты соответствует температура Дебая для акустических колебаний?



- а) ω_1 ;
- б) ω_2 ;
- в) ω_3 ;
- г) ω_4 .

6. Укажите, какой из графиков определяет зависимость $\omega(q)$ для акустических колебаний атомов кристалла?





7. Каким соотношением устанавливается объём зоны Бриллюэна для простого кубического кристалла, содержащего N элементарных ячеек с постоянной кристаллической решётки a ?

а) $V_B = \frac{8\pi^3}{N}$;

б) $V_B = \frac{8\pi^3}{a^3 N}$;

в) $V_B = \frac{8\pi^3}{a^3}$;

г) $V_B = \frac{1}{a^3}$;

д) $V_B = \frac{8\pi^3}{N^3}$;

е) $V_B = \frac{8\pi^3}{aN}$;

ж) $V_B = \frac{2\pi}{a}$;

з) $V_B = \frac{2\pi}{aN}$;

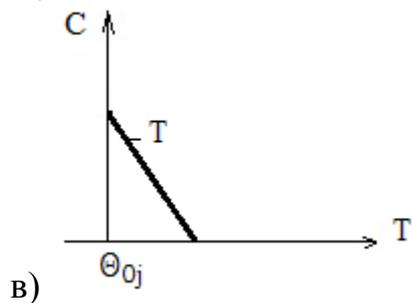
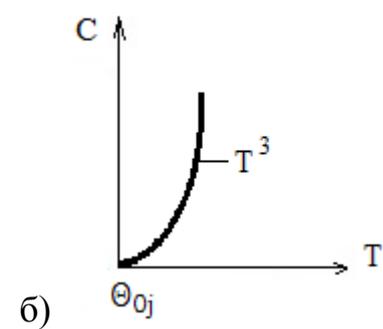
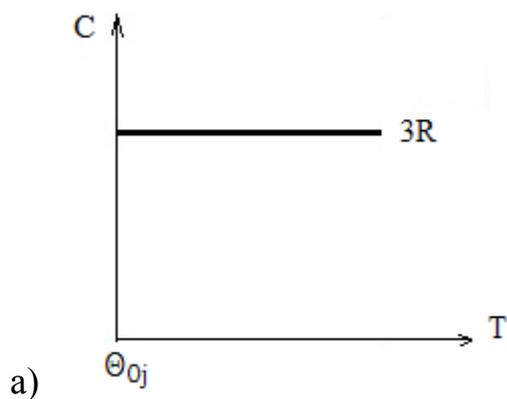
и) $V_B = \frac{2\pi^3}{a^3}$;

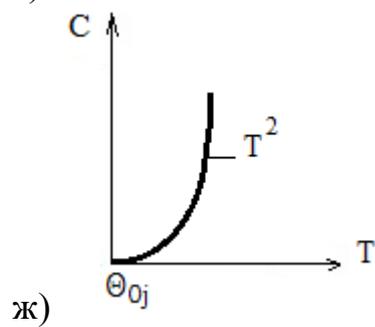
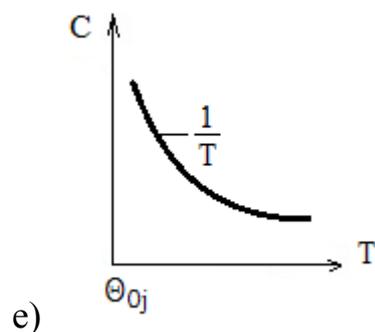
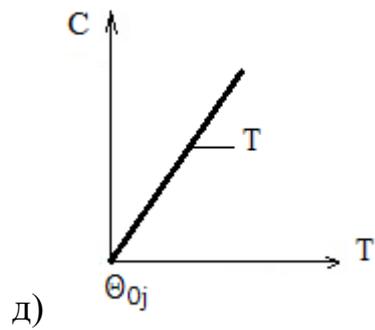
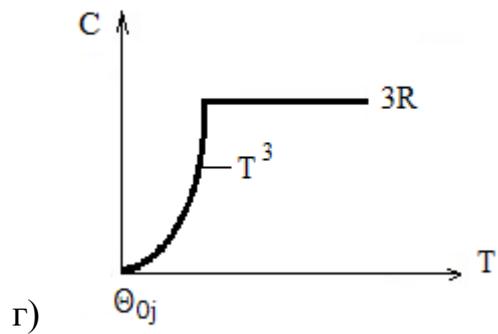
к) $V_B = \frac{2\pi^3}{aN^3}$;

л) $V_B = \frac{\pi^3}{a^3 N}$;

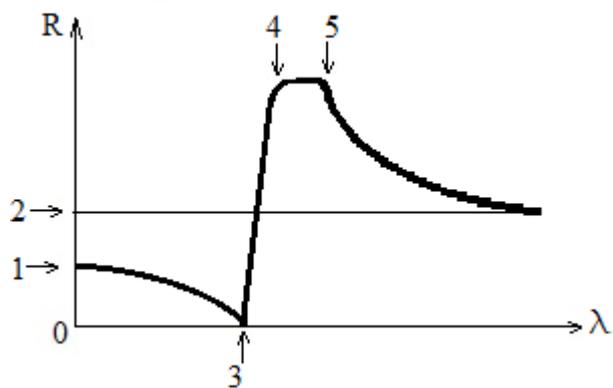
м) $V_B = \frac{2\pi^3}{aN}$.

8. Какой из приведённых ниже графиков изображает зависимость удельной теплоёмкости кристалла от температуры в области высоких температур?





9. Какой из пяти особенностей, отмеченных на спектре отражения кристалла в области колебательной полосы, отвечает частота продольных оптических колебаний?

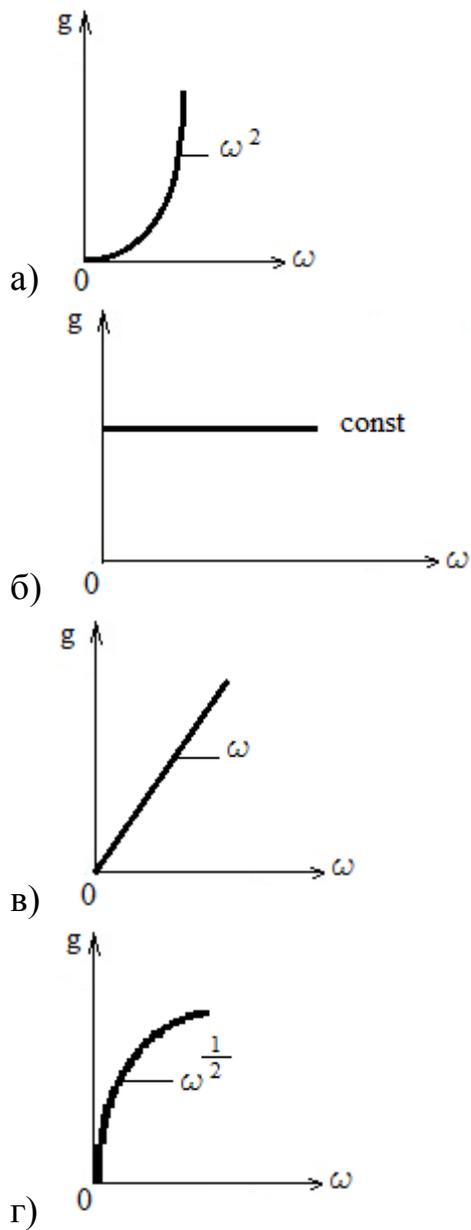


- а) 1;
- б) 2;
- в) 3;
- г) 4;
- д) 5.

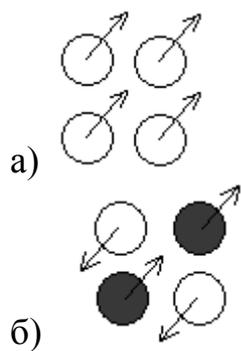
10. Сколько различных типов акустических колебаний имеется в кристалле, содержащем N элементарных ячеек по S атомов в каждой?

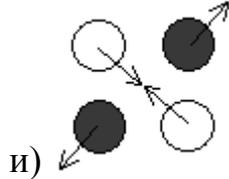
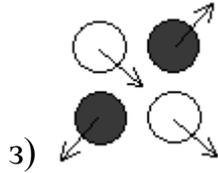
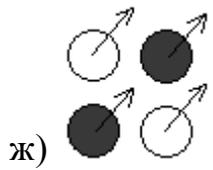
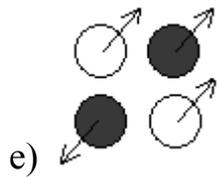
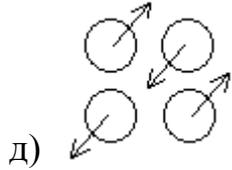
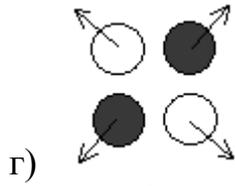
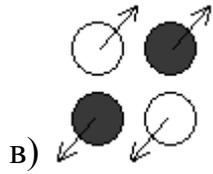
- а) $3SN$;
- б) $3S - 3$;
- в) $3(S - 3)$;
- г) 3;
- д) $3S$;
- е) $3N$.

11. Какой из приведённых ниже графиков изображает зависимость плотности колебательных состояний от частоты в модели Дебая?



12. Какой из приведённых ниже рисунков схематически изображает акустические колебания атомов кристалла?





13. Каким соотношением определяется наименьший объём пространства, приходящийся на одно колебательное состояние в простом кубическом кристалле из N элементарных ячеек с постоянной кристаллической решётки a ?

а) $V_B = \frac{8\pi^3}{N}$;

б) $V_B = \frac{8\pi^3}{a^3 N}$;

в) $V_B = \frac{8\pi^3}{a^3}$;

г) $V_B = \frac{1}{a^3}$;

д) $V_B = \frac{8\pi^3}{N^3}$;

е) $V_B = \frac{8\pi^3}{aN}$;

ж) $V_B = \frac{2\pi}{a}$;

з) $V_B = \frac{2\pi}{aN}$;

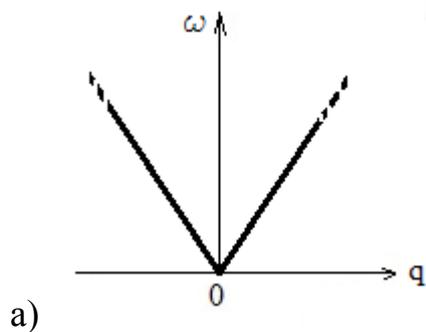
и) $V_B = \frac{2\pi^3}{a^3}$;

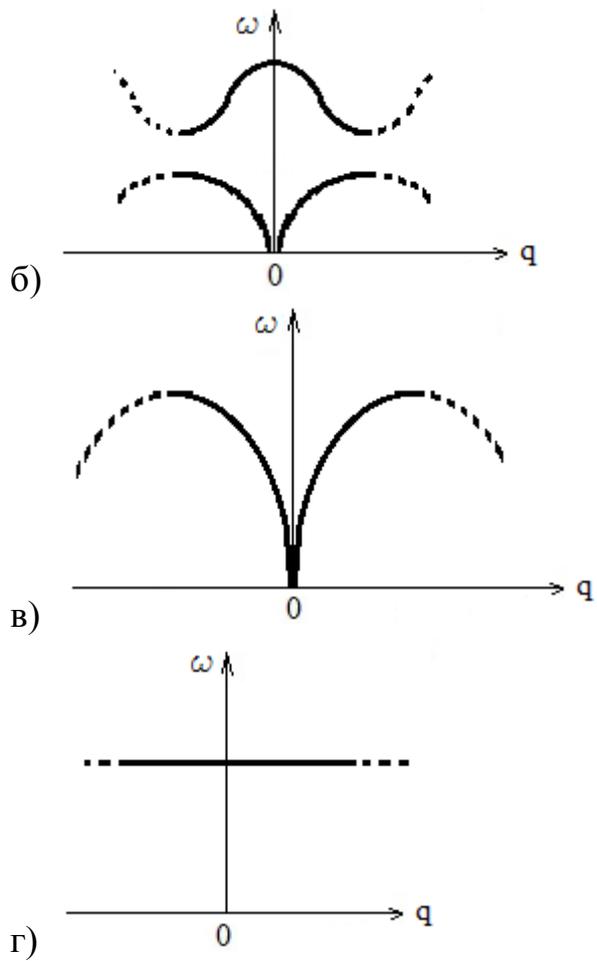
к) $V_B = \frac{2\pi^3}{aN^3}$;

л) $V_B = \frac{\pi^3}{a^3 N}$;

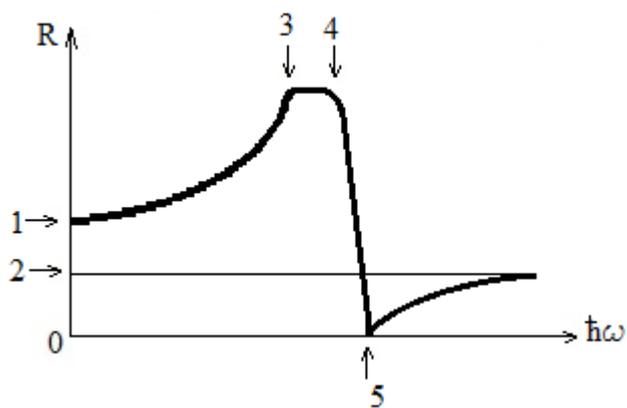
м) $V_B = \frac{2\pi^3}{aN}$.

14. Какой из приведённых ниже графиков описывает дисперсию колебаний в линейной одноатомной цепочке?





15. Какая из особенностей спектра отражения кристалла в области колебательной полосы определяет частоту длинноволновых поперечных оптических колебаний?



а) 1;

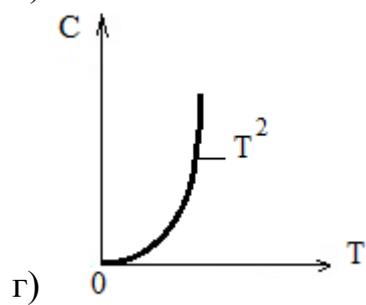
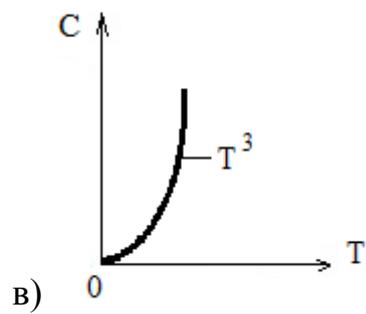
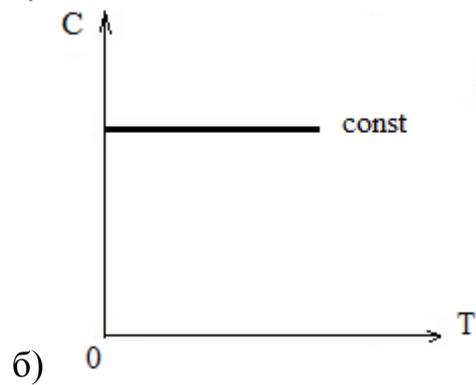
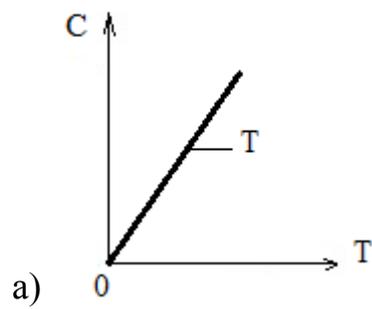
б) 2;

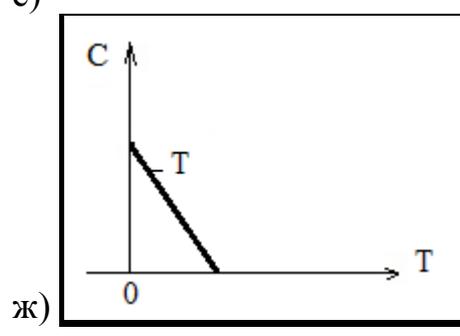
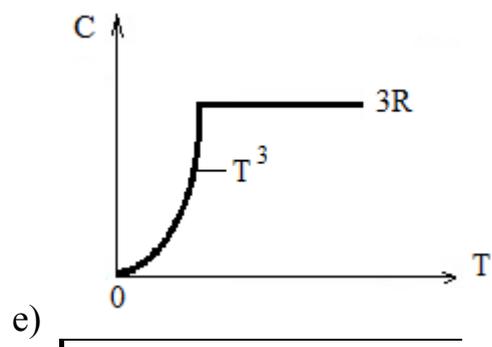
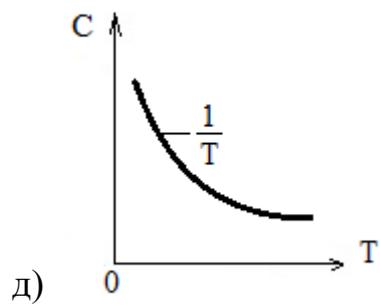
в) 3;

г) 4;

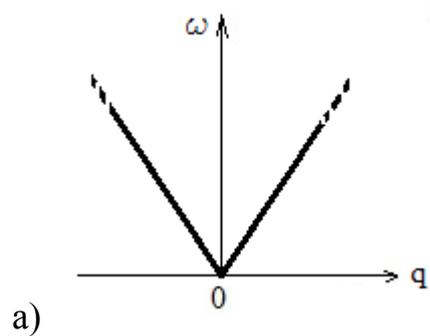
д) 5.

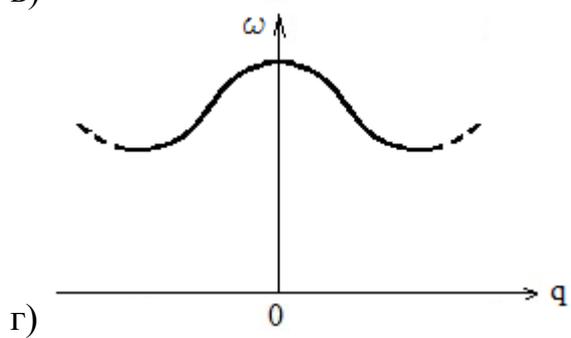
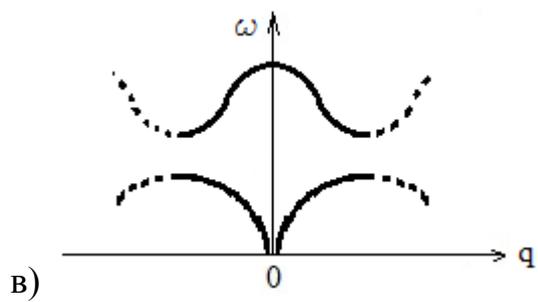
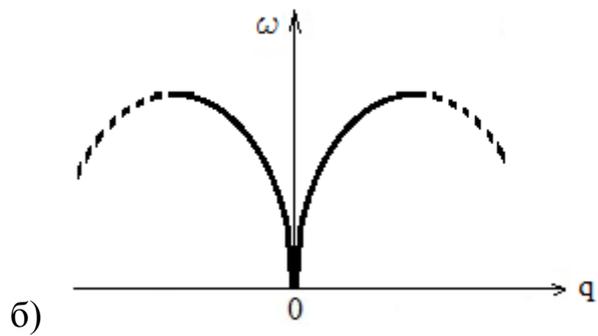
16. Какой из графиков изображает зависимость удельной теплоёмкости кристалла от температуры в области низких температур?



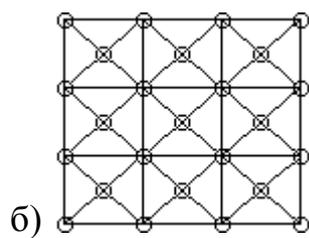
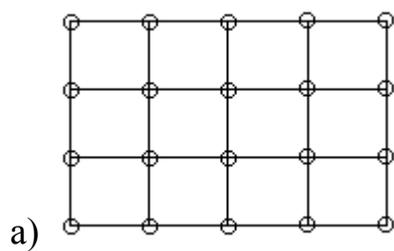


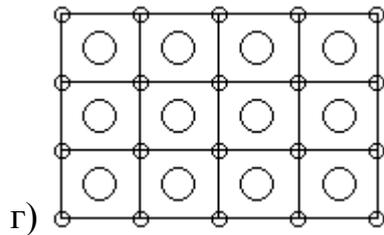
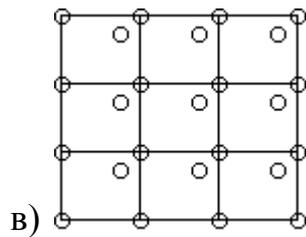
17. Какой из графиков изображает дисперсионные зависимости колебательных частот в линейной двухатомной цепочке?





18. Какие из изображённых ниже плоских моделей кристаллов являются простыми?





19. Какое число различных типов акустических колебаний имеется у кристалла, содержащего 3 атома в элементарной ячейке?

а) 1;

б) 3;

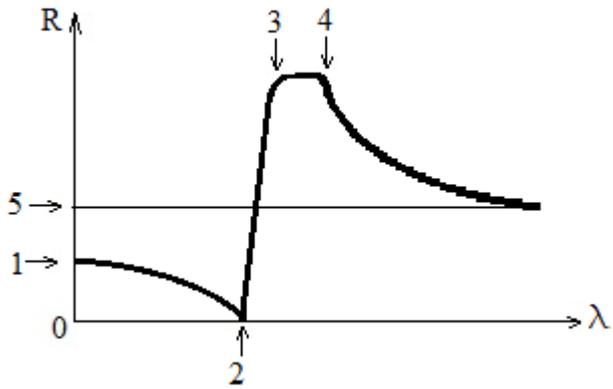
в) 4;

г) 5;

д) 6;

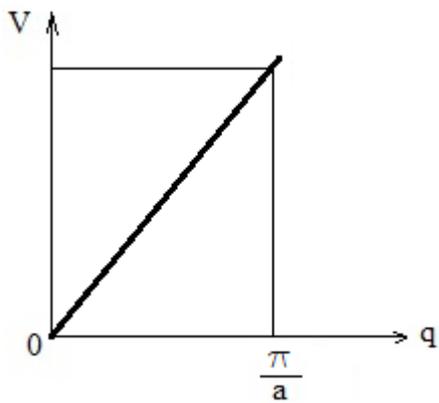
е) 9.

20. Какая из пяти отмеченных особенностей спектра отражения кристалла в области колебательной полосы определяет оптическую диэлектрическую проницаемость?

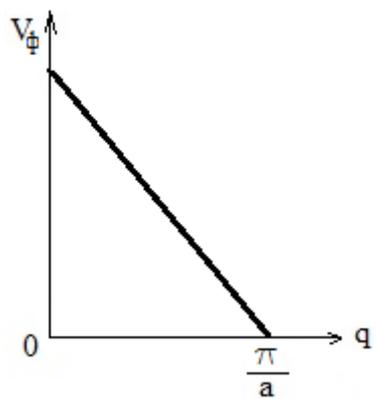


- а) 1;
- б) 2;
- в) 3;
- г) 4;
- д) 5.

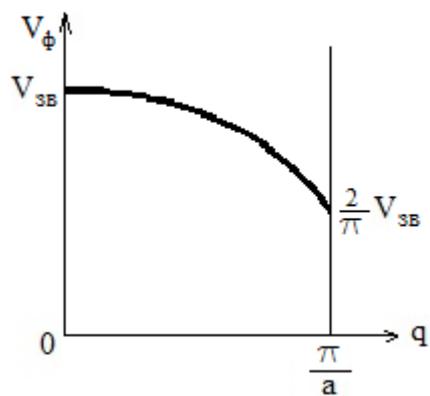
21. Какой из приведённых ниже графиков изображает зависимость фазовой скорости от волнового числа для акустических колебаний?



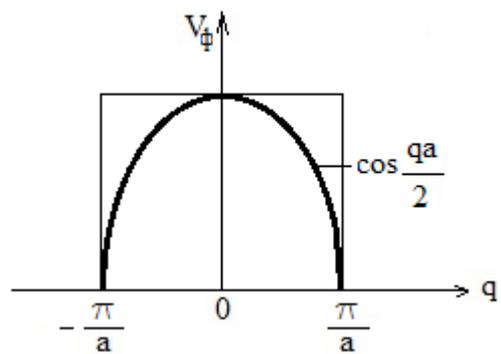
а)



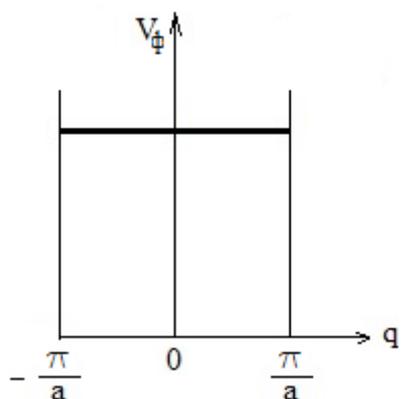
б)



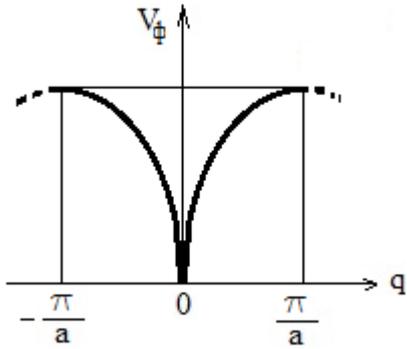
в)



г)



д)



е)

22. Какое число поперечных оптических типов колебаний имеется в объёмном кристалле с $S = 3$ атомами в элементарной ячейке?

а) 2;

г) 8;

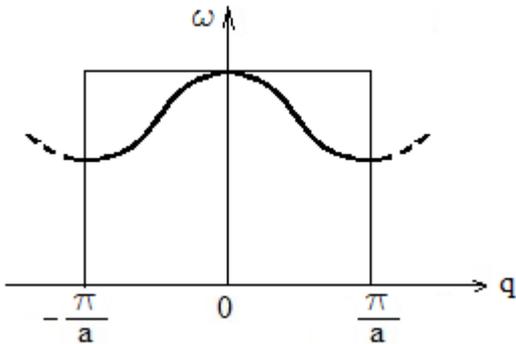
б) 4;

д) 10;

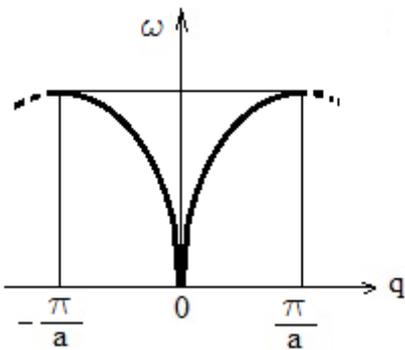
в) 6;

е) 12.

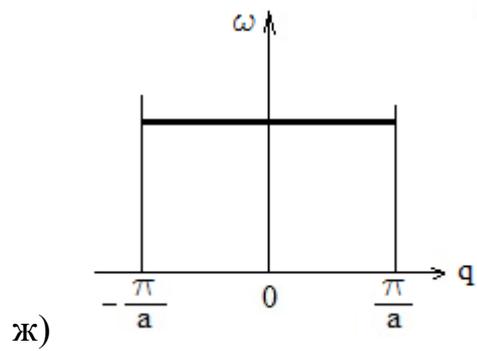
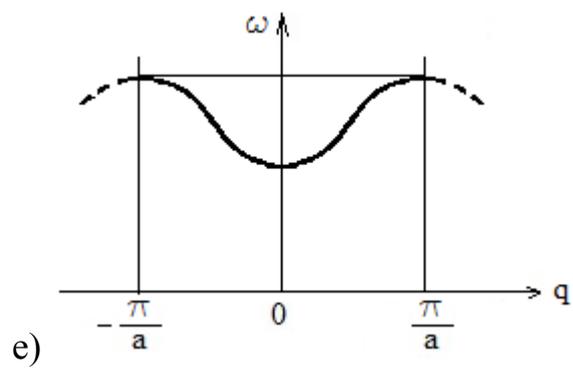
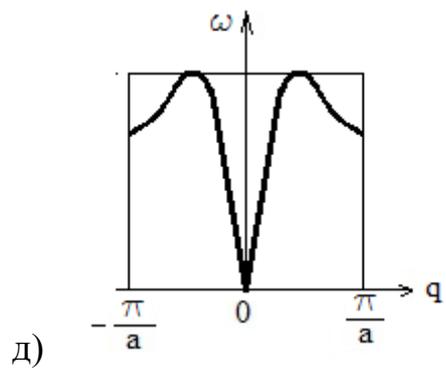
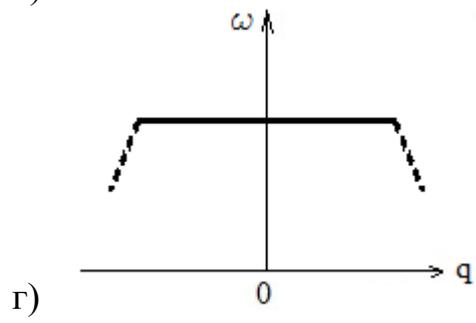
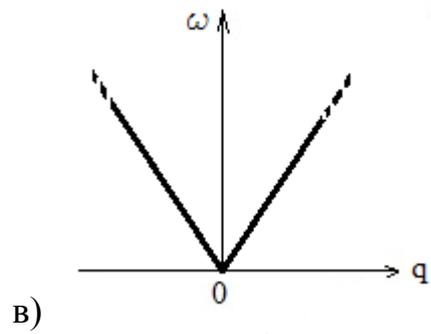
23. Какой вид имеет зависимость $\omega(q)$ для оптических колебаний?



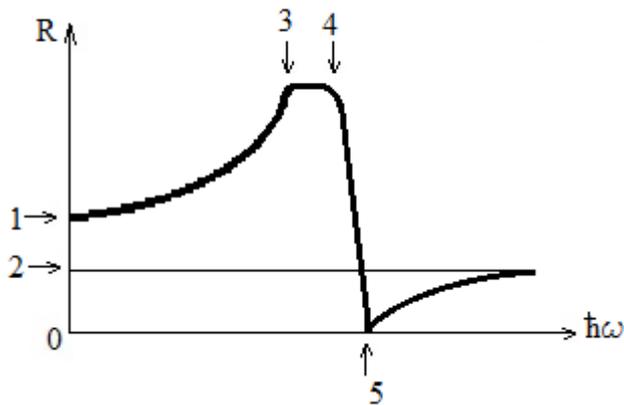
а)



б)



24. Какая из пяти отмеченных особенностей спектра отражения кристалла в области колебательной полосы определяет частоту продольных длинноволновых оптических фононов?



- а) 1;
- б) 2;
- в) 3;
- г) 4;
- д) 5.

25. Сколько различных типов акустических и оптических колебаний имеется в объёмном кристалле, содержащем $S = 4$ атома в элементарной ячейке?

- а) 4, 8;
- б) 6, 9;
- в) 3, 9;
- г) 8, 12;
- д) 2, 4;
- е) 3, 6.

26. С какими нормальными колебаниями взаимодействует электромагнитное излучение?

а) $\text{TO}\left(\frac{\pi}{a}\right)$;

б) $\text{LO}\left(\frac{\pi}{a}\right)$;

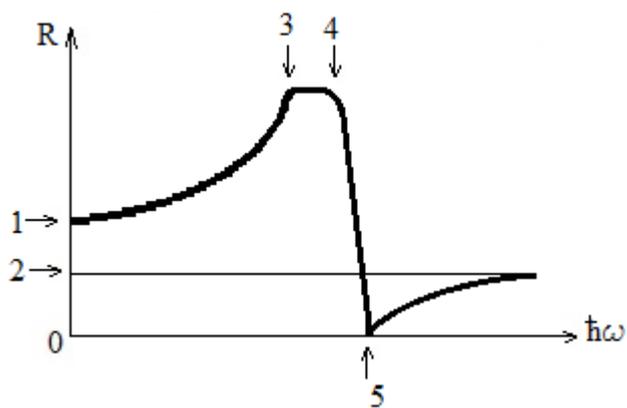
в) $\text{TO}(0)$;

г) $\text{LO}(0)$;

д) $\text{TA}\left(\frac{\pi}{a}\right)$;

е) $\text{TA}(0)$.

27. Какая из пяти отмеченных на приведённом ниже спектре отражения кристалла в области колебательной полосы определяет длинноволновую диэлектрическую проницаемость?



а) 1;

б) 2;

в) 3;

г) 4;

д) 5.

28. Каким из приведённых ниже соотношений определяется размер зоны Бриллюэна, приходящийся на одно колебательное состояние в линейной цепочке из N атомов с постоянной кристаллической решётки a ?

а) $\Delta V_B = \frac{8\pi^3}{N}$;

б) $\Delta V_B = \frac{8\pi^3}{a^3 N}$;

в) $\Delta V_B = \frac{8\pi^3}{a^3}$;

г) $\Delta V_B = \frac{1}{a^3}$;

д) $\Delta V_B = \frac{8\pi^3}{N^3}$;

е) $\Delta V_B = \frac{8\pi^3}{aN}$;

ж) $\Delta V_B = \frac{2\pi}{a}$;

з) $\Delta V_B = \frac{2\pi}{aN}$;

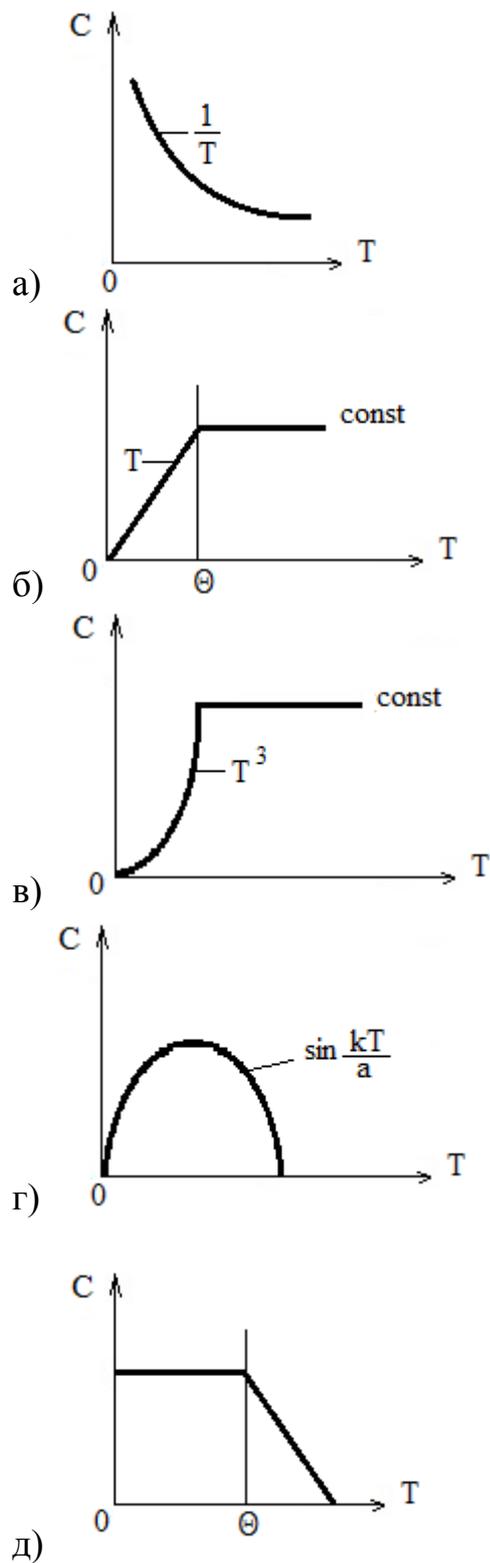
и) $\Delta V_B = \frac{2\pi^3}{a^3}$;

к) $\Delta V_B = \frac{2\pi^3}{aN^3}$;

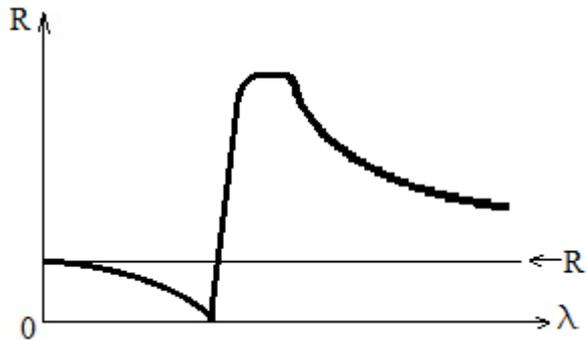
л) $\Delta V_B = \frac{\pi^3}{a^3 N}$;

$$\text{м) } \Delta V_B = \frac{2\pi^3}{aN}.$$

29. Каким из приведённых ниже графиков изображается зависимость удельной теплоёмкости кристалла от температуры?



30. Какой параметр кристалла определяет особенность, отмеченная на приведённом ниже спектре отражения в области однофононной колебательной полосы?



- а) ε_{∞} ;
- б) ε_0 ;
- в) $\Omega(TO)$;
- г) $\frac{1}{\tau}$;
- д) $(\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty})$.

31. Сколько различных типов оптических колебаний имеется в объёмном кристалле с $S = 6$ атомами в элементарной ячейке?

- а) 2;
- б) 3;
- в) 9;
- г) 15;
- д) 17;
- е) 20.

32. Каким из приведённых ниже выражений определяется оператор кинетической энергии электронов в кристалле?

а) $\sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \Delta_{\alpha} \right);$

б) $\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left(\frac{e^2}{r_{ij}} \right);$

в) $\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right);$

г) $\frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha} \left(\frac{z_{\alpha} e}{R_{i\alpha}} \right);$

д) $\frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha} \left(\frac{z_{\alpha} e}{R_{i\alpha}} \right).$

33. Какому из приведённых ниже условий удовлетворяет амплитуда функции Блоха $f_k(\vec{r}) = A e^{ik\vec{r}}$?

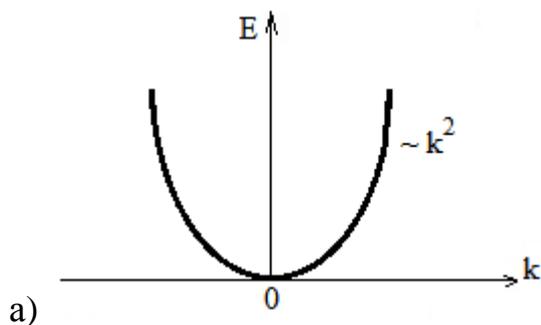
а) $A = A \left(\frac{\pi}{a} \right);$

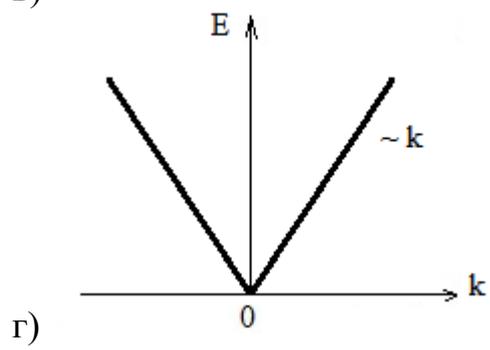
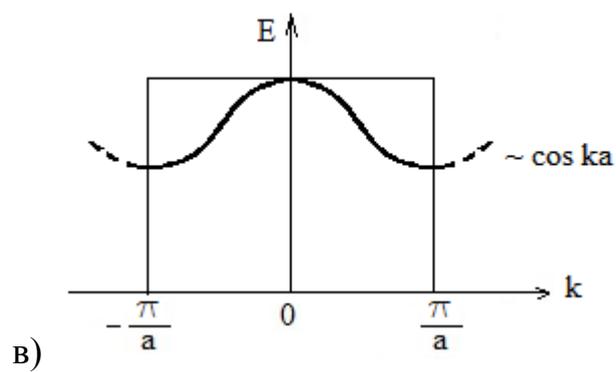
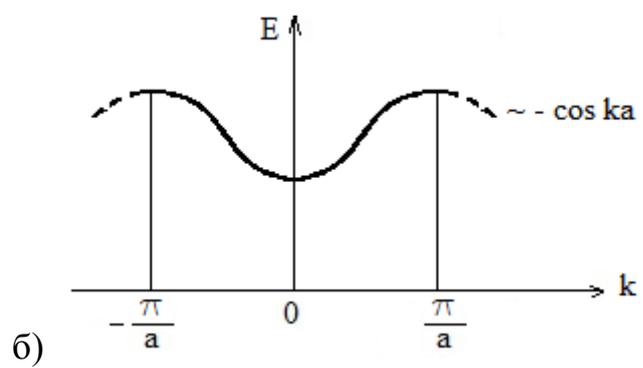
в) $A(\vec{r}) = A(\vec{r} + \vec{a}_n);$

б) $A = const;$

г) $A \left(\frac{\pi}{a} \right) = A \left(\frac{\pi}{a} + \frac{2\pi}{a} g \right).$

34. Какой из приведённых ниже графиков изображает зависимость $E(\vec{k})$ для s-зон?





Список литературы

1. Блейкмор Дж. Физика твердого тела. – М.: Мир, 1988. – 608 с.
2. Василевский А. С. Физика твердого тела. – М.: Дрофа, 2010. – 210 с.
3. Физика твердого тела / И. К. Верещагин, С. М. Кокин, В. А. Никитенко и др. – М.: Высшая школа, 2001. – 237 с.
4. Гинзбург И. Ф. Введение в физику твердого тела. – СПб: Лань, 2007. – 544 с.
5. Епифанов Г. И. Физика твердого тела. – СПб: Лань, 2010. – 287 с.
6. Зиненко В. И., Сорокин Б. П., Турчин П. П. Основы физики твёрдого тела. – М.: Физматлит, 2000. – 332 с.
7. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 789 с.
8. Маделунг О. Теория твердого тела. – М.: Наука, 1980. – 410 с.
9. Матухин В. Л., Ермаков В. Л. Физика твердого тела. – СПб: Лань, 2010. – 218 с.
10. Павлов П. В., Хохлов А. Ф. Физика твердого тела. – М.: Высшая школа, 2000. – 497 с.
11. Шалимова К. В. Физика полупроводников. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 399 с.
12. Борн М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Хуан Кунь. – М.: ИЛ, 1958.
13. Оптические свойства полупроводников / Под ред. Р.Уиллардсона и А.Бира. – М.: Мир, 1970.
14. Мосс Т. Полупроводниковая оптоэлектроника / Т. Мосс, Г. Баррел, Б. Эллис. – М.: Мир, 1976.
15. Уханов Ю.И. Оптические свойства полупроводников / Ю. И. Уханов. – М.: Наука, 1978.

Содержание

Расчетная работа № 1.....	3
Расчетная работа № 2.....	14
Расчетная работа № 3.....	21
Расчет спектров решеточного отражения, используя математический пакет MATLAB.....	31
Расчет спектров плазменного отражения, используя математический пакет MATLAB.....	32
Примеры заданий к расчетным работам.....	33
Список литературы.....	61

Миссия университета – генерация передовых знаний, внедрение инновационных разработок и подготовка элитных кадров, способных действовать в условиях быстро меняющегося мира и обеспечивать опережающее развитие науки, технологий и других областей для содействия решению актуальных задач.

КАФЕДРА СВЕТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

Кафедра организована в 1988 году в период активного развития оптоэлектроники как компонентной базы высокоскоростных систем передачи и обработки информации и ее выделения в самостоятельную область науки, техники и производства. Первоначальное название кафедры - кафедра твердотельной оптоэлектроники.

Специалисты кафедры обладают большим опытом научной, преподавательской и производственной деятельности, кафедра имеет оснащенные учебные и научные лаборатории.

Выпускники кафедры получают специальную подготовку по прикладной и физической оптике, физике твердого тела, полупроводниковой оптической технике, оптическим методам передачи и обработки информации, оптико-физическим измерениям, лазерной технике, волоконной и интегральной оптике, электронике, компьютерным технике и технологиям, оптико-электронным средствам массовой информации, экологии, иностранному языку, экономике, менеджменту и другим.

В 2015 году с целью достижения задачи попадания в 100 лучших ВУЗов Мира произошла реорганизация Университета, в результате кадровый состав кафедры пополнился ведущими российскими специалистами в своих областях, и кафедра получила современное название кафедра Световых технологий и оптоэлектроники.

Алексеев Сергей Андреевич
Белов Николай Павлович
Матвеев Николай Вадимович
Нагибин Юрий Тихонович
Прокопенко Виктор Трофимович
Смирнов Юрий Юрьевич
Трофимов Владимир Анатольевич
Шерстобитова Александра Сергеевна
Яськов Андрей Дмитриевич

Применение тензоров и матриц для описания физических свойств кристалла

Методические указания по выполнению расчетных работ

В авторской редакции

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО

Зав. РИО

Н.Ф. Гусарова

Подписано к печати

Заказ №

Тираж

Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел
Университета
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

ИТМО