

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

На правах рукопису

УДК 535.39:535.015:535.51

ЛАТИНІН Сергій Миколаєвич

ТЕОРІЯ ДИСИПАТИВНИХ ПРОЦЕСІВ
З УЧАСТЮ СВІТЛОЕКСИТОНІВ

01.04.02 — «Теоретична фізика»

Автореферат
дисертації на здобуття вченого ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ДОНЕЦЬК — 1993

ДВ 28904

ЛННБ України ім. В. Стефаніка



00814122 (1)

Робота виконана в Донецькому фізико-технічному інституті
в Україні

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук
професор, член-кор. АН України
ТОЛШИГО К. Б.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук
ТРОЦЬКА Є. П.
кандидат фізико-математичних наук
КАТАЛЬНИКОВ В. В.

Провідна організація: Інститут фізики АН України

Захист відбудеться " " 1993 року о год на
засіданні спеціалізованої ради в Донецькому державному
університеті (вул. Університетська, 24, Донець, головний корпус)

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Донецького
державного університета.

Автореферат розповсюджено " " 1993 року

Вчений секретар
спеціалізованої ради
кандидат фізико-математичних наук

Зобанов О.Є.

ЛННБ ім. В. Стефаніка

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Атомарні кристали виявляються ідеальними об'єктами для вивчення ряду принципових проблем кристалооптики, зокрема їх вивчення надає можливості досліджень самих різних проявлень електрон-фононних і екситон-фононних взаємодій (процеси автолокалізації, поляритонні ефекти, додаткові світлові хвилі (ДСХ) та інші). З другого боку, вивчення взаємодії електромагнітних хвиль з кристалами має велике наукове та практичне значення. Цінність застосувань сучасної кристалооптики зростає, оскільки на її основі вирішується багато проблем квантової електроніки, фото- і оптоелектроніки, одержання і перетворення лазерного випромінювання. Ефекти загашання і просторової дисперсії виявляються у формуванні смуг поглинання і відбиття, у особливостях резонансного розсіювання світла і в багатьох інших оптичних властивостях кристалів. Для визначення дисперсійних і температурних залежностей показників заломлення і коефіцієнтів поглинання необхідно визначення конкретних моделей кристалу і екситонів, а також механізму їх взаємодії. З розв'язанням цих задач, а також під час переходу до граничного випадка найбільших показників заломлення, у першу чергу, пов'язана мікроскопічна теорія оптичних явищ у кристалах. Вона також необхідна під час розрахунків формул Френеля і одержання коефіцієнтів еліптичності поляризації світла, відбитого від монокристалевих середовищ із тонкими перехідними шарами, які виникають завдяки структурним змінам поверхні. Серед кількох десятків методів еліпсометрії дозволяє отримувати інформацію про структуру поверхні на товщинах від кількох мікрон до окремих атомних кристалевих шарів, та до того ж і неруйнуючим способом. Теоретичні розрахунки у фізиці поверхні діелектриків і напівпровідників, базовані на взаємозалежності динамічних, термодинамічних, дифузійних характеристик і структури чистих поверхонь кристалів, стали науковою основою розвитку мікро-, акустоелектроніки, вакуумної техніки. Все вищесказане і робить актуальною тему дисертаційної роботи.

Мета роботи. Розвиток теорії розповсюдження світла у двовимірно-періодичних структурах. Дослідження розсіювання світла

тепловими коливаннями ґраток атомарних кристалів, а також деформованих поверхнях монокристалів кубічної симетрії. Звідси випливають конкретні завдання:

1. Поширити метод діючого поля на випадок обмежених кристалів.
2. Визначити додаткову поверхневу поляризацію (ДПП) кристала з деформованою структурою на поверхні.
3. Одержати і проаналізувати вирази коефіцієнтів еліптичності.
4. Розрахувати константи екситон-фононої взаємодії для дипольно- і квадрупольно-дозволених переходів атомарних кристалів і знайти постійні поглинання, та атомні поляризованості.

Наукова новизна. У роботі досліджується застосування еліпсометрії к вивченню поверхневої структури. Вперше одержані і проаналізовані вирази коефіцієнтів еліптичності світла для ГПК і ОПК ґраток, для одно, двох та трьохшарових перехідних шарів, залежних від типу поверхневих граней (10m), їх структури і поляризованостей поверхневих атомів. На основі атомної моделі для кристалів благородних газів вперше розраховані константи екситон-фононої взаємодії для квадрупольно-дозволених переходів. Одержані і проаналізовані поляризованості окремих атомів, які самоузгоджено визначаються законом дисперсії світлоекситонів.

Наукове та практичне значення. Одержані у роботі результати на прикладі атомарних кристалів свідчать, що метод діючого поля після узагальнення на двовимірно-періодичні структури успішно може бути використований під час досліджень релаксації і реконструкції поверхней напівпровідникових сполук, аналізу поверхневих моделей. Важливість цих результатів містить у тому, що поверхнева структура визначає кінетику послідовних зароджень шарів і інших багатозварних систем, кількість і природу дефектів у них, а також важлива під час опису електронних і фононних характеристик поверхонь. Одже передбачувальна цінність еліпсометрії підвищується, і вона виявляє стимульований вплив та постановку нових експериментів. У пропонованій теорії виявляються великі можливості для розвитку і модифікації.

Основні положення, винесені до захисту:

1. Досліджена структура внутрішньокристалевого поля напівнес-

кінченних дипольних ґраток атомарних кристалив. Показано, що неоднорідні компоненти поля приводять до додаткових дипольних моментів поверхових атомів порядку $a/\lambda \exp(-2z)$ по відношенню до об'ємного дипольного моменту і експоненціально спадаючих з глибиною.

2. Розроблен метод діючого поля для двовимірно-періодичних структур, шарових кристалів з порушеною періодичністю розташування атомних площин у напрямку перпендикулярному до поверху монокристалів.

3. Одержані коефіцієнти еліптичності для світла відбитого від напівнескінчених кристалів кубічної симетрії з деформованою структурою у поверху і досліджені для різних атомних площин типу $(10m)$, утворюючих поверх. Також розрахована додаткова поверхова поляризація кристалу пов'язану із змінами міжплощинних відстаней в глибину і змінами векторів основних трансляцій на поверху, а також із змінами поляризованостей окремих атомів.

4. Одержані постійні поглинання і атомні поляризованості в області частот дипольно- і квадрупольно-дозволених переходів, у тому разі комплексні нелінійні поляризованості.

Апробація роботи. Результати цієї роботи докладались на засіданні семінара з енергетичної структури неметалевих кристалів з різними типами хімічного зв'язку (Ужгород, 1991р.); на П'ятнадцятій пекаровській нараді з теорії напівпровідників (Львів, 1992р.); на Весоюзній конференції з низьких температур (Казань, 1992р.).

Структура та обсяг дисертації: Дисертація об'ємом 125 сторінок складає із Вступу, чотирьох глав, Заключення і Додатків. Вона містить 3 малюнка, 5 таблиць і список літератури із 126 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність теми, сформульовані основні цілі досліджень, пропонується короткий зміст роботи, висвітлюється наукова новизна, сформульовані основні положення, винесені на захист.

ГЛАВА I. ВЗАЄМОДІЯ СВІТЛА З РЕЧОВИНОЮ

У першій главі обґрунтовується необхідність мікроскопічної

теорії під час розгляду задач на відбиття і заломлення світла в межах поділу прозорих середовищ, включаючи і область екситонного поглинання, де суттєві ефекти просторової дисперсії. Аналізується еквівалентність рівнянь Максвелла з межовими умовами самоузгодженої системи рівнянь для діючого поля:

$$P_{\alpha}^I(t) = A_{\alpha\beta}(\omega) \{ E_{\beta}^{(e)}(\vec{r}, t) + E_{\beta}^*(\vec{r}, t) \}, \quad (1)$$

$$E_{\beta}^*(\vec{r}, t) = \left[\nabla_{\beta} \nabla_{\gamma} - \frac{\delta_{\beta\gamma}}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \cdot \Pi_{\gamma}^I(\vec{r}, t), \quad (2)$$

де вектор Герца $\Pi(\vec{r}, t) = \sum_{l_1, l_2 = -\infty}^{+\infty} \sum_{l_3 < c} \Xi^{l_1}(\vec{r}, t)$, $\Xi^{l_1}(\vec{r}, t) = P^{l_1}(t - |\vec{r} - \vec{r}^l|/c) / |\vec{r} - \vec{r}^l|$; $A(\omega)$ - приведена атомна поляризованість; $E^{(e)}(\vec{r}, t) = E_0 \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - i\omega t)$ - падаюча на поверхню хвиля; $k_0 = \omega a/c$; P^{l_1} - дипольний момент l_1 -го атому. Із (1)-(2) випливає багато відомих результатів: формули Френеля, теорема погашення Звальда-Озесна і інші, котрі аналізуються у роботі.

Навколо кута Брюстера ($\varphi + \psi = \pi/2$, де ψ - кут падіння, а φ - кут заломлення) експериментально спостерігається відхилення від формул Френеля: фаза не змінюється стрибком від 0 до π , а відношення $E^{(r)P} E^{(r)S} = 1/\rho + \alpha((a/\lambda)^2)$, де $E^{(r)}$ - відбита хвиля, 'p', 's' - її складові, відповідно у плоскості падіння і перпендикулярно їй; ρ - коефіцієнт еліптичності. Для пояснення цих ефектів Друде ввів перехідний шар товщиною d ($a \ll d \ll \lambda$).

На відміну від багатьох робіт по феноменологічній теорії Друде у роботах Сивухіна, виконаних на квазімікроскопічній основі (система (1)-(2) для континуальної моделі, $\sum_l + \int dV$), перехідний шар пов'язується з появою ДПП. Відмовившись від макроскопічних характеристик шару (n, ϵ), там вводять поверхневі дипольні моменти усереднені на одиницю поверхні, випромінювання яких нарівні з об'ємними дипольними моментами формують відбиту і заломлену хвилі. Від цього ρ дійсні для значно тонких перехідних шарів, аж до мономолекулярних:

$$\rho = \pi \frac{a}{\lambda} \sqrt{1+n^2} (\gamma_x - \gamma_z) \quad (3)$$

де γ_x, γ_z - феноменологічні параметри, котрі визначаються безпосередньо із експерименту, але можемо їх розрахувати у рамках мікроскопічних модельних уявлень о молекулярній структурі відбиваючої поверхні. Мікротеорія перехідного шару необхідна під час аналізу структурних змін поверхні монокристалів (релаксація і реконструкція).

Облік ефектів просторової дисперсії у області частот екситонного поглинення приводить до виникнення нових світлових хвиль (ДСХ). Задача однозначного зв'язку усіх амплітуд хвиль, виникаючих у задачах по відбиттю і заломленню світла, стає визначеною, якщо увести додаткові межові умови (ДМУ), характер котрих визначається фізичними властивостями середовища, його поверхні, і моделі екситону. У рамках феноменологічної теорії вплив поверхні обраховується у вигляді:

$$P_{\alpha}^{(0)} + \gamma_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial P_{\beta}^{(0)}}{\partial x_{\beta}} + \dots = L_{\alpha\beta} E_{\beta}^{(0)} + L_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial E_{\beta}^{(0)}}{\partial x_{\beta}} + \dots \quad (4)$$

де тензорні коефіцієнти $\gamma_{\alpha\beta\gamma}, L_{\alpha\beta}, L_{\alpha\beta\gamma}$ взагалі залежать від ω і \vec{k} і визначаються із мікротеорії. Найкраще узгодження теорії і експерименту дають ДМУ Пекара, одержані квантово-механічно із закону відбиття екситонів.

Якщо урахувати ДСХ, аналіз розповсюдження світла необхідно провести приймаючи до уваги поглинення. На мові поляритонів поглинення світла розглядається як комбінаційне розсіяння на дефектах і теплових коливаннях ґратки. Квантовомеханічне розглядання дисипативних процесів звичайно здійснюють у методі Вігнера-Вайскопфа, котрий зводиться до пошуку нестационарного рішення рівняння Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{W}) \Psi_n(t), \quad (5)$$

де \hat{W} - збудження. Вибір хвильової функції ψ_n не повинен приводити до поляризованостей залежних від часу. Це досягається у режимі "напівстаціонарного освітлення", коли усі стани незбудженого кристалу розподіляються на дві групи: у першу групу входять стани, в які дозволен прямиї фотоперехід із початкового стану; другу - стани, в які прямиї фотоперехід заборонен.

ГЛАВА 2. МІКРОСКОПІЧНА ТЕОРІЯ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ СВІТЛА У НАПІВНЕСКІНЧЕННОМУ КРИСТАЛІ

У другій главі проведено "узагальнення" методу Звальда на двовимірно-періодичні структури, і на його основі побудовані вирази для поля, утворені напівнескінченною дипольною ГДК ґраткою, у кристалі і поза нього. У Звальда рішення самоузгодженої системи (1)-(2) обиралось у вигляді плоскої хвилі (рішення для нескінченного кристалу):

$$\vec{P}^l(t) = \vec{P}_0 \exp(i\vec{k}\vec{r} - i\omega t), \quad (6)$$

а поле (2) визначалось додатком і відніманням недостаючого півпростору диполів ($l'_3 < 0$) із схеми:

$$\sum_{l'_3 > 0} S^{l'_3} = \sum_{l'_1, l'_2, l'_3 = -\infty} S^{l'_3} - \sum_{l'_3 < 0} S^{l'_3}, \quad (7)$$

де

$$\sum_{l'_3 < 0} S^{l'_3} \sim \sum_{\vec{q}_1} \exp(-\gamma_q |r_3 - l'_3| + i\vec{k}_1 \vec{r}_1 - i\omega t); \quad \gamma_q = \sqrt{(\vec{k}_1 + \vec{q}_1)^2 - k_0^2}; \quad \vec{q}_1 -$$

проекція вектору оберненої ґратки на площину xy , яка утворює поверх ($z, l'_3 > 0$); $\vec{k} = (\vec{k}_1, k_3)$. Другий доданок має неоднорідні компоненти $\exp(-|\vec{q}_1| |r_3|)$, с показниками приблизно лінійно зростаючими з $|\vec{q}_1|$. І незгасаючий член з $\vec{q}_1 = 0$ - плоска хвиля з хвильовим вектором \vec{k}_0 , котра гасить падаючу хвилю (ПІ для кристалевих середовищ). Тут розвинуто прямиї метод підсумовування, коли діюче поле складається із полів, утворюваних окремими атомними площинами із схемою:

$$\sum_{l'_3 > 0} S^{l'_3} = S^{l_3} + \sum_{l'_3=1}^{l_3-1} S^{l'_3} + \sum_{l'_3=l_3+1}^{\infty} S^{l'_3} \quad (8)$$

Із (7) і (8) виходить, що дипольні моменти (6) не замикають систему (1)-(2) у всьому просторі. Неоднорідні компоненти внутрішнього поля (чи остача) порядку $0,1 P_0$ для поверхневих атомів. На основі цього Сивухін зробив припущення, що виникнення ДПП пов'язано з відміною поля діючого на атоми поверхні, від такого у глибині. На відміну від (7) (8) дозволяє визначити дипольний момент так, щоб (1)-(2) було замкнено у всьому кристалі і поширити метод діючого поля на моноплщини і кристали з порушеною періодичністю розташування атомних площин. У роботі розглянуто дипольні моменти "загального" вигляду.

$$\vec{P}^i(t) = \vec{P}_0 \exp(i\vec{k}I - i\omega t) + \sum_{\vec{q}_\perp \neq 0} \vec{B}(\vec{q}_\perp) \exp(-\gamma q_\perp + i\vec{k}_\perp I_\perp - i\omega t) \quad (9)$$

Другий доданок у (9) відрізняється від звичайної плоскої хвилі у тому, що замість третьої складової хвильового вектора k_z узяти $i\gamma_\perp$, і зображує поверхову хвилю, відповідаючу за ДПП. Амплітуду $B(\vec{q}_\perp)$ обирають так, щоб (1)-(2) збернулося у тотожність у кожному вузлі

$$\frac{1}{\Lambda(\omega)} P_{\alpha\alpha} = \varphi_{\alpha\beta}(\omega, \vec{k}) P_{\alpha\beta} \quad (10)$$

$$E_{\alpha\alpha}^{(e)} + 4\pi \frac{k_{\alpha\alpha} k_{\alpha\beta} - k_{\alpha\beta}^2 \delta_{\alpha\beta}}{ik_{\alpha\beta}} \left\{ \frac{2P_{\alpha\beta}}{i(k_{\alpha\beta} - k_z)} - \sum_{\vec{q}_\perp \neq 0} \frac{B_\beta(\vec{q}_\perp) \exp(-ik_{\alpha\beta} \gamma_\perp)}{1 - \exp\left[-\frac{ik_{\alpha\beta} + \gamma_\perp q}{2}\right]} \right\} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{1}{\Lambda(\omega)} B_\alpha(\vec{q}_\perp) - \tilde{\varphi}_{\alpha\beta}(\omega, \vec{k}_\perp, i\gamma_\alpha) B_\beta(\vec{q}_\perp) - \sum_{\vec{q}'_\perp \neq 0, \vec{q}_\perp} D_{\alpha\beta}(\omega, \vec{k}_\perp, i\gamma_\alpha, \vec{q}'_\perp)$$

$$B_{\beta}(\vec{q}_{\perp}) = D_{\alpha\beta}(\omega, \vec{k}, \vec{q}_{\perp}) P_{\alpha\beta} \quad (12)$$

(10) дає закон дисперсії світлоекситонів у напі внескітченному кристалі. $\varphi_{\alpha\beta}(\omega, \vec{k})$ мають таку ж структуру як і в нескінченному кристалі (поле Лорентца, макрполе і інші). Рівняння (II) визначає умови відсутності у глибині хвиль з хвильовим вектором \vec{k}_0 (ПД). Із системи лінійно-неоднорідних рівнянь (12) слідує, що амплітуди $B(\vec{q}_{\perp})$ порядку $k_{\perp} P_0$, а відповідно (9) вже при $i_2=1$ додатковий дипольний момент порядку $a/\lambda \exp(-2\tau) P_0$. Коефіцієнти $D_{\alpha\beta}$ у неоднорідних членах такі ж як у Евальда.

Поле диполів поза кристалу - відбита хвиля:

$$E_{\alpha\alpha}^{(r)} = -4\pi \frac{k_{\alpha\alpha} k_{\alpha\beta} - k_{\alpha}^2 \delta_{\alpha\beta}}{ik_{\alpha 3}} \left\{ \frac{2P_{\alpha\beta}}{i(k_{\alpha 3} - k_{\beta 3})} - \sum_{q_{\perp} \neq 0} \frac{B_{\beta}(\vec{q}_{\perp}) \exp(ik_{\alpha 3} - \gamma q_{\alpha})}{1 - \exp\left[-\frac{ik_{\alpha 3} - \gamma q_{\alpha}}{2}\right]} \right\} \quad (13)$$

де $\vec{k}_0 = (\vec{k}_{\perp}, -k_{\alpha 3})$. У цьому виразі другий доданок у дужках обумовлен ДПП і по відношенню до першого має порядок $(a/\lambda)^2 \exp(-2\tau)$. Це приводить до незначних відхилень коефіцієнтів в відбитті від формул Френеля. Оскільки напрямки \vec{P}_0 і $B(\vec{q}_{\perp})$ не збігаються, то при відбитті світла під кутом Брюстера він виявляється зліптично поляризованим, крім випадку, якщо падає світло лінійно поляризоване. Але ρ надзвичайно малий, щоб можливо було говорити про їх експериментальне спостереження.

Дипольний момент "загального" вигляду (9) все ж не замикає систему (I)-(2) у всьому просторі, як і раніше виникає остача, але вона надзвичайно мала, майже у 10^3 разів менш ніж остача у (7), визначеного для плоских хвиль. Крім того, строго визначену у роботі ДПП можливо уявити у вигляді ряду з загальним членом порядку $(i_2-1)^{n-2} k_{\perp}^n P_0$, слід цього в ньому будуть значними тільки члени з $n=1$, які ми і розглянули.

Облічити ДСХ у резонансній області можливо, якщо у (9) увести суму моментів з \vec{k}^1 і \vec{k}^2 . Відповідно Пекару амплітуди $P_0(\vec{k}^1)$, узяті із (9) тут обчислені поверхові

викривлення), необхідно вибрати так, щоб остача обернулася у нуль для будь якого вузлу l_3 . Однак така умова приводить до дуже переозначеної системи і може мати тільки тривіальне рішення $P_{\alpha\beta}(k^1) = 0$. Ії можна виконати приблизно, скажемо якщо $l_3=2$, тоді

$$\sum_{l=1}^2 (a_{\alpha\beta} + ik_3^l b_{\alpha\beta}) P_{\alpha\beta}(k^1) = 0, \quad (14)$$

де тензори $a_{\alpha\beta}$ і $b_{\alpha\beta}$ вмістять відповідно множники $\exp(-\gamma_q)$ і $\exp(-2\gamma_q)$, і в загальному випадку $\text{Det} |a_{\alpha\beta}| \neq 0$, то в найнижчому приближенні (з точністю вище $\exp(-\gamma_q)$) ДМУ будуть типу Пекара:

$$\sum_{l=1}^2 P_{\alpha\beta}(k^1) = 0 \quad (15)$$

Інакше кажучи, об'ємна частина поляризації (15), пов'язана з екситонами, перетворюється у нуль на поверхні кристалу. Облік у (14) малих членів в порядку α/λ (їх можливо замінити оператором $\partial/\partial x_3$) дає би умову Аграновіча-Гінзбурга (4). Відзначимо, що якщо ДПМ кристалу визначити строго, то остача зовсім відсутня. У цьому випадку ДМУ можливо визначати тільки із аналізу остачи для короткодіючої взаємодії, або зовсім не розглядати ДМУ, а для зв'язку амплітуд використовувати твердження типу III, узагальнене для ДСХ.

ГЛАВА 3. ЗЛІПСОМЕТРІЯ АТОМАРНИХ КРИСТАЛІВ

У третій главі викладається мікротеорія тонкого ($d \ll \lambda$) перехідного шару монокристалевих структур. Зліптична поляризація відбитого світла визначається структурними змінами поверхні:

- варіація міжплощинних відстаней у напрямку перпендикулярному до поверхні;
- зміною векторів основних трансляцій межевої кристаллової площини;
- зміною поляризованості атомів поверхні.

У роботі із (I)-(2) визначені додаткові дипольні моменти

поверхневих атомів для кубічних ґраток з площиною зрізу ($10m$), де m - ціле число, і перехідним шаром, маючим довільне число атомних площин. Дістали формули Френеля у зміненому вигляді з точністю до членів порядку a/λ :

$$\frac{E_c^{(r)p}}{E_c^{(e)p}} = \frac{\sin(\Psi-p)}{\sin(\Psi+p)} \left\{ \frac{\cos(\Psi+p)}{\cos(\Psi-p)} + 4\pi \frac{a}{\lambda} \cos \Psi \frac{\cos^2 \Psi}{\cos(\Psi-p)} (\theta_{11}^{-1} D_{11}^m(w, \nu_1) + \theta_{33}^{-1} D_{33}^m(w, \nu_1) \operatorname{tg} \Psi \operatorname{tg} \Psi) \right\} \quad (16)$$

$$\frac{E_c^{(r)a}}{E_c^{(e)a}} = - \frac{\sin(\Psi-p)}{\sin(\Psi+p)} \left[1 + 4\pi \frac{a}{\lambda} \cos \Psi \theta_{22}^{-1} D_{22}^m(w, \nu_1) \right] \quad (17)$$

У цьому ж приближенні із (16) і (17) випливає, що при падінні під кутом Брюстера відношення $E_c^{(r)p}/E_c^{(r)a}$ зовсім уявне і ρ має вигляд:

$$\frac{E_c^{(r)p}}{E_c^{(e)a}} = i\rho = -12\pi \frac{a}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{1+n^2}} \left\{ \theta_{11}^{-1} D_{11}^m + \theta_{33}^{-1} D_{33}^m \right\} \frac{E_c^{(e)p}}{E_c^{(e)a}}, \quad (18)$$

де $\theta_{\alpha\beta}^{-1}$ - тензор обернений до $\delta_{\alpha\beta}/\Lambda(w) - 4\pi\delta_{\alpha\beta}/\sqrt{3+4\pi\delta_{\alpha 3}\delta_{\beta 3}}$ ($\delta_{m, \text{нечет}} \sqrt{bv} + \dots$ (поправки на внутрішньокристалеве поле): $\nu_\tau = \sqrt{1+m^2} \cdot (1 - \delta_{m, \text{нечет}}/2)$; $b = 1/2\sqrt{1+m^2}$; ν_{l_3} - зсув l_3 -ої атомної площини. У загальному вигляді коефіцієнти D_{α}^m залежать від m , T , ω , ν , а також від Δa (зміни постійних ґраток) і від $\Delta \Lambda$ (зміни поляризованостей поверхневих атомів). Залежність D_{α}^m від зсуву верхньої площини приведена у Таблиці I. (для площин типу $10m$), де $m = 0, 1, 2, 3$, при $\nu \rightarrow 0$ $D_{\alpha}^m \rightarrow 0$).

Таблиця 1

Залежність $D_4^m = D_{10} + D_{11}/n$ і $D_3^m = D_{30} - D_{31}n$
від зсуву ν для ГЦК ґраток

m	0			2			3		
	0.01	0.09	0.20	0.01	0.07	0.17	0.01	0.05	0.17
D_{10}	-0.011	-0.9005	-4.109	0.001	0.0387	-26.36	0.0005	0.0112	134.9
D_{11}	0.	0.	0.	0.0024	0.1151	-22.458	-0.0014	-0.0341	408.2
D_{30}	-0.022	-1.801	-8.21	-0.0016	-0.0837	-34.42	0.0010	0.0246	960.0
D_{31}	0.	0.	0.	0.0024	0.1157	-22.458	-0.0014	-0.0341	408.2

У роботі у аналітичному вигляді здобути коефіцієнти еліптичності для одно, двох, трьохплощинних перехідних шарів, для ПК, ОК и ГЦК ґраток. Значення ρ для моношару атомарних кристалів у далечині від дисперсійної частоти, для $\lambda = 5500$ Å, приведені у Таблиці 2:

Таблиця 2

Залежність $\rho \cdot 10^5$ від ν и m

m	0			2			3		
	0.01	0.09	0.20	0.01	0.07	0.17	0.01	0.05	0.17
Ag	0.118	9.697	44.24	$2 \cdot 10^{-4}$	0.057	230	-0.005	-0.127	-3482
Kr	0.151	12.37	56.45	$-7 \cdot 10^{-3}$	0.039	288.1	-0.007	-0.162	-4296
Xe	0.198	16.19	73.86	-0.002	-0.009	395.9	-0.009	-0.211	-5368

ρ не залежить від знаку зсуву поверхневої площини. У області дисперсійної частоти ($\Lambda(\omega) = 3/4\pi$) ρ прагне до нескінченності і при низьких температурах повинні спостерігати максимум або мінімум, залежно від типу поверхневих площин (від m) і розмірів зсуву ν . Будь-яка комбінація структурних змін може бути врахована у ρ .

У роботі показано, що уведення перехідного шару викликає зміну амплітуд об'ємного дипольного моменту (δ) на величину порядку a/λ . Це пов'язано з тим, що погашується не тільки падаюча хвиля, але і хвилі які утворюють дефектні поверхневі площини. Тому ρ у $(1+n^2)/2$ разів менш ніж у квазімолекулярної теорії Сивухіна.

ρ , в яких враховуються тільки зміни поляризованостей атомів, мають вигляд:

$$\rho = \frac{2\pi a}{\lambda} \frac{b}{\sqrt{n^2+1}} \left[\theta_{11}^{-1} \left(\frac{1}{A_1(\omega)} - \frac{1}{A(\omega)} \right) - \theta_{33}^{-1} \left(\frac{1}{A_3(\omega)} - \frac{1}{A(\omega)} \right) \right] \quad (19)$$

де $A_{\alpha\beta}(\omega) = A_{\alpha}(\omega) \delta_{\alpha\beta}$ — поляризованість атомів поверхні. Розглянуті граничні випадки відповідають $k_{o2} = 0$, якщо ж покласти $k_{o2} \neq 0$, то ρ буде залежати також від орієнтації площини розділу відносно \vec{k}_o .

Визначені закони дисперсії світлоекситонів у платівках скінченної товщини, такі ж як для моношару і напівнескінченного кристалу. Показано, що макрополе завжди можливо виділити у кристалах з повністю порушеною періодичністю розташування атомних площин.

ГЛАВА 4. ДО ТЕОРІЇ ПОГЛИНЕННЯ СВІТЛА У МОЛЕКУЛЯРНОМУ КРИСТАЛІ.

У четвертій главі розглянуто однофоновне комбінаційне розсіяння світлоекситонів у області частот дипольно- і квадрупольно-дозволених переходів. Поширення світла у кристалі розглядається як загальна передача збудження між його окремими атомами. Використовували приблизне уявлення о наявності у кожного i -го атома кристалив свого власного набору хвильових функцій ψ_i^l і рівняння Шредингера (5). Нестационарне рішення рівняння Шредингера для i -го атому побудовано у вигляді:

$$\psi^l(t) = c_c^l \psi_c^l \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_o t\right) + \sum_{j=0} (c_j^l(t) + \sum_{a,n} \tilde{c}_{jan}^l(t)) \psi_j^l \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_j t\right),$$

$$|\tilde{c}_{jan}^l|^2, |c_j^l|^2 \ll |c_o^l|^2 \approx 1, \quad (20)$$

якщо початкова умова $\tilde{c}_{jan}^l(0) = 0$, і де $c_j^l(t) = \sum_{\lambda \in \dots} c_j^\lambda \exp(i\lambda \omega t + i\lambda \vec{k} \vec{r} + i\omega_{j0} t)$ — однорідне за часом рішення, описуюче початкову хвилю, а \tilde{c}_{jan}^l описує комбінаційно розсіяну хвилю на теплових коливаннях ґратки і має амплітуду залежну від часу; $\lambda = +, -$.

Відповідно однофононному процесу розсіювання у збуренні зберегли лише лінійні члени розкладання по зсуву u^1 . У першому порядку теорії збурення визначені коефіцієнти розкладу у (20). Як висновок бачимо, що $\tilde{c}_{\alpha n}^1$ - нескінченно малі більш вищого порядку ніж c_{α}^1 , тобто при побудові поляризації кристалу і його атомної поляризованості їх можна не враховувати, що відповідає експериментальним n і ϵ , незалежним від t .

Дістали постійні поглинання Γ і розраховали константи екситон-фононної взаємодії $w^{m,\lambda}$ для дипольно- та квадрупольно-дозволенних переходів. Для дипольно-дозволених переходів вони мають вигляд:

$$\Gamma_l = \frac{1}{h} \frac{v_0}{8\pi^2} |P_{0l}|^2 |P_{10}|^2 \sum_n \int \frac{dv}{2\omega_{an} |v_{\alpha} \omega_{an}|} \left\{ \bar{n}_{an} + 1 (W^{+-})^2 \delta(\omega_{k-a} - \omega + \omega_{an}) + \bar{n}_{an} (W^{-+})^2 \delta(\omega_{k+a} - \omega - \omega_{an}) \right\}, \quad (21)$$

$$w^{m,\lambda} = \frac{\tilde{\epsilon}_{\alpha} \tilde{\epsilon}_{\beta} \rho}{a v_0} (2\lambda k \rho \frac{k_{\alpha} k_{\beta} - k_0^2 \delta_{\alpha\beta}}{k^2 - k_0^2} - 2\pi i (\lambda k + mQ) \rho \frac{(\lambda k + mQ)_{\alpha} (\lambda k + mQ)_{\beta} - k_0^2 \delta_{\alpha\beta}}{(\lambda k + mQ)^2 - k^2} + m i L_0 (Q_{\alpha} \delta_{\beta\rho} + Q_{\beta} \delta_{\alpha\rho} + Q_{\rho} \delta_{\alpha\beta}) + m i L_0 \gamma_{\alpha} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\gamma\rho} \delta_{\rho\alpha}), \quad m = +, -, \quad (22)$$

де dv - елемент поверхні $\omega_{an} = \text{const}$; $\bar{n}_{an} = 1/(\exp(h\omega_{an}/kT)+1)$; ω_{an} , \vec{Q}, n - відповідно частота, хвильовий вектор фонону і номер вітки; $\vec{P} = \vec{e} P_{\alpha}$; $\vec{u}^1 = \vec{e} u^1$; L_0 і L - числа, які дістають із ґраткових сум по Евальду для нескінченного кристалу. Константи w визначені у довжинохвильовому наближенні, де зберегли члени $\approx a/\lambda$, і залежать від хвильових векторів як фонону \vec{Q} , так і світлоекситону \vec{k} . При розрахунках враховували заґаювання як у гамільтоніані задачі, так і у законі дисперсії світлоекситонів. Безпосередньо із теорії виходить залежність Γ від енергії світлоекситонів $\omega_{k-ma} = \omega_{\alpha 0}$

$$\frac{1}{2v_0} P_{\alpha\alpha} P_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta}^{(2)} e^{(-\omega + m\omega_{an})}.$$

Константи w для квадрупольно-дозволенних переходів мають вигляд:

$$w^{m,\lambda} = \frac{mi}{v_0^2} \left[(12\langle \vec{Q} \vec{E} \rangle (\vec{E} \vec{E}) + 3\langle \vec{Q} \vec{E} \rangle T_0 + 4\langle \vec{Q} \vec{E} \rangle \sum_{\gamma} \tilde{e}_{\gamma}^3 e_{\gamma} + \langle \vec{Q} \vec{E} \rangle \tilde{e}_{\gamma}^4 E_0 + 6 \sum_{\gamma} Q_{\gamma} \tilde{e}_{\gamma}^2 e_{\gamma} + 4\langle \vec{E} \vec{E} \rangle \sum_{\gamma} Q_{\gamma} \tilde{e}_{\gamma}^3 T + \sum_{\gamma} Q_{\gamma} \tilde{e}_{\gamma}^4 e_{\gamma} E \right], \quad (23)$$

де T_0 , T , E_0 , E - числа; $w^{m,\lambda}$ не залежить від \vec{k} .

Якщо припустити, що одночасно з початковою хвилею комбінаційно розсіюється і хвиля з частотою $\lambda\omega + m\omega_{an}$, тоді Γ залежить від енергії світлоекситонів з обліком поглинання. Крім того, вибір нестационарного рішення у вигляді (20) допускає введення комплексного хвильового вектору, що відповідає одночасному розгляду поглинання у просторі і за часом. Самоузгодженість залежності Γ від ω_k лише у найнижчому приближенні припускає використання Γ із (21), або ω_k , визначені без обліку поглинання. Для квадрупольно-дозволенних переходів - це надзвичайно точне наближення.

У нелінійній теорії поляризованості для поля з частотою поблизу ω_{10} слід рахувати у (20) великими разом з коефіцієнтами c_i^2 відповідний коефіцієнт c_i^4

$$|c_j|^2 \ll |c_0|^2 \approx |c_i|^2 \approx 1 \quad (26)$$

Змінюються постійні поглинання, $\Gamma_i \sim |c_0|^2$ і залежить від енергії світлоекситонів скінченної інтенсивності $\omega_k = \omega_{10}$.

$$\frac{1}{2v_0} |c_0|^2 P_{\alpha\alpha} P_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta}^{(2)} e^{i\omega}.$$

Знайшли комплексні нелінійні поляризованості окремих атомів. Якщо $\Gamma=0$, то поляризованість при $\omega \rightarrow \omega_{10}$ залишається скінченною, але має розрив першого роду (замість розриву другого роду у лінійному наближенні), при цьому змінюється знак. Якщо враховувати розсіювання, то $A(\omega)$ плавно змінюється. Поляризованість при будь яких температурах може не досягати значення $3/4\pi$, а тому ефекти

просторової дисперсії не значні. Особливе значення це має при визначенні частотної дисперсії коефіцієнта еліптичності, її температурної залежності.

Перерахуємо основні результати і висновки, одержані у дисертації:

1. Проведено "узагальнення" методу Евальда на двовимірні-періодичні структури. Розраховано внутрішньокристалеve поле напівнескінчених дипольних ґраток атомарних кристалів. З загальної теорії надходить теорема погашення Евальда-Озезна і додаткові граничні умови Пекара і Аграновича-Гінзбурґа. Одержані дипольні моменти "загального" виду, які урахують неоднорідні компоненти внутрішнього поля (експоненціально спадного з глибиною). Додаткові дипольні моменти поверхових атомів виявляються порядку $a/\lambda \exp(-2\pi)$ відносно об'ємного моменту.

2. Розроблен метод діючого поля для кристалевих платівок (у тому ж числі і моноплщини). Виділено макроскопічне поле у шарових кристалах з порушеною періодичністю розташування атомних площин у напрямку перпендикулярному до поверху. Розроблена мікроскопічна теорія тонкого перехідного шару. Показано, що перехідний шар монокристалів можливо визначать через виникнення ДПП кристалів. Проаналізовані можливі причини виникнення ДПП кристалів: зміна міжплщинних відстаней чи векторів основних трансляцій в поверховій площині, а також зміна поляризованостей атомів.

3. Розглянуто мікроскопічну теорію еліпсомерічних вимірювань структурних змін поверхні кристалів кубічної симетрії. Одержані коефіцієнти еліптичності для різних кристалевих площин типу $\langle 10m \rangle$, утворюючих поверх.

4. У мікроскопічній теорії одержані постійні поглинання в області частот дипольно- і квадрупольно-дозволених переходів. Постійні поглинання самоузгоджено залежать від енергії світлоекситонів. У нестационарне рівняння Шрединґера введено комплексний хвильовий вектор, що відповідає одночасному розгляданню поглинання у просторі і часу. Одержані комплексні і нелінійні поляризованості окремих атомів.

Основні результати дисертації опубліковані в роботах:

1. Латинін С. М., Толпиго К. Б. Мікроскопічна теорія поширення світла у напівнескінченному кристалі. - 1987. - 18с. - Деп. у ВІНТІ 24. II. 87., №8869 - В87.

2. Латинін С. М., Толпиго К. Б. Мікроскопічна теорія поширення світла у напівнескінченному кристалі // ФТТ. - 1988. - т. 30, №4. - с. 1191 - 1193.

3. Латинін С. М. Мікроскопічна теорія поляризації світла. - 1990. - 23с. - Деп. у ВІНТІ 19. 04. 90., №4399 - В90.

4. Латинін С. М. Вплив атомарного перехідного шару на поляризацію відбитого світла. // ФТТ. - 1991. - Т. 33, №7. - с. 2116 - 2119.

5. Латинін С. М. До теорії поглинання світла у молекулярному кристалі. 1 // УФЖ. - 1991. - Т. 36, №8. - с. 1142 - 1148.

6. Латинін С. М. До теорії поглинання світла у молекулярному кристалі. 2 // УФЖ. - 1991. - Т. 36, №9. - с. 1314 - 1318.

Латинін

AB 28904

AB 28.904