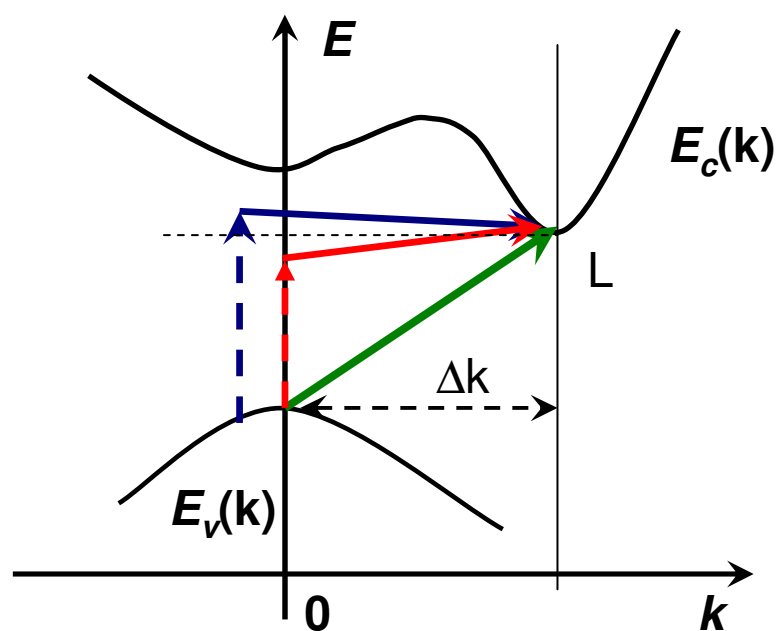


Podstawowa krawędź absorpcji dla przejść skośnych

Si, Ge, GaP, SiC,...



$\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ – np. z udziałem fononów
- fonony przenoszą pęd i energię
(niewiele energii w porównaniu z E_g)
- proces trójcząstkowy:

elektron + foton \pm fonon

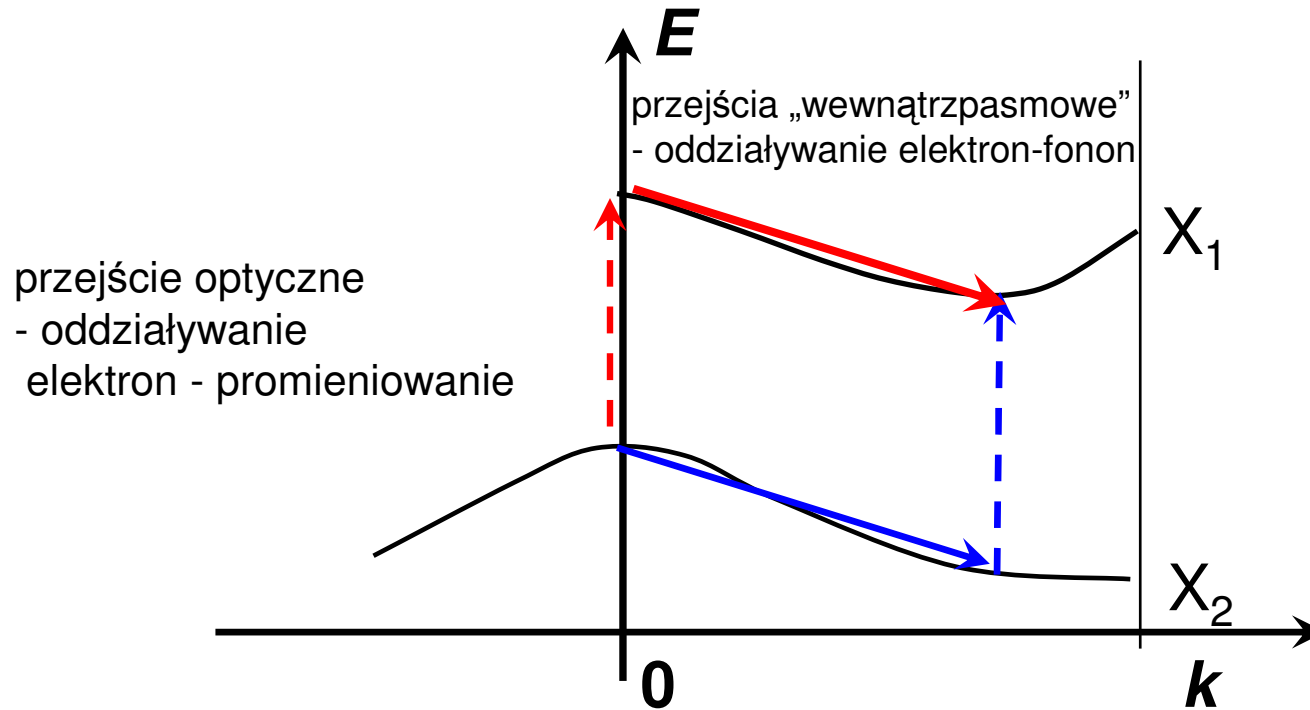
Zasada zachowania energii i pędu:

$$E_{el}(\vec{k}) \pm \hbar\omega_f + \hbar\omega = E_{el}(\vec{k}')$$

$$\hbar\vec{k} + \hbar\vec{q}_f = \hbar\vec{k}'$$

+ absorpcja fononu, - emisja fononu

Krzem – typowy półprzewodnik ze skośną przerwą



Należy rozważyć przejścia w dwóch etapach:

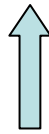
$$\sum_{k_v, k_c} \left| \sum_i \frac{\langle f | H_{ef} | i \rangle \langle i | H_{eR} | i \rangle}{E_{0i} - \hbar\omega} \right|^2 \delta(E_c(k_c) - E_v(k_v) - \hbar\omega \pm E_p)$$

H_{eR} - Hamiltonian oddziaływania elektron - fala elektromagnetyczna

H_{ef} - Hamiltonian oddziaływania elektron-fonon

Krawędź absorpcji dla przejść skośnych:

$$\alpha(\omega) = D \left[\frac{\hbar\omega + \hbar\omega_f - E_g}{e^{E_f/kT} - 1} + \frac{\hbar\omega - \hbar\omega_f - E_g}{1 - e^{-E_f/kT}} \right]$$



Człon związany z absorpcją fononu

$$n_f \sim \frac{1}{e^{E_f/kT} - 1}$$



Człon związany z emisją fononu

$$(n_f + 1) \sim \frac{1}{1 - e^{-E_f/kT}}$$

emisja spontaniczna

emisja wymuszona

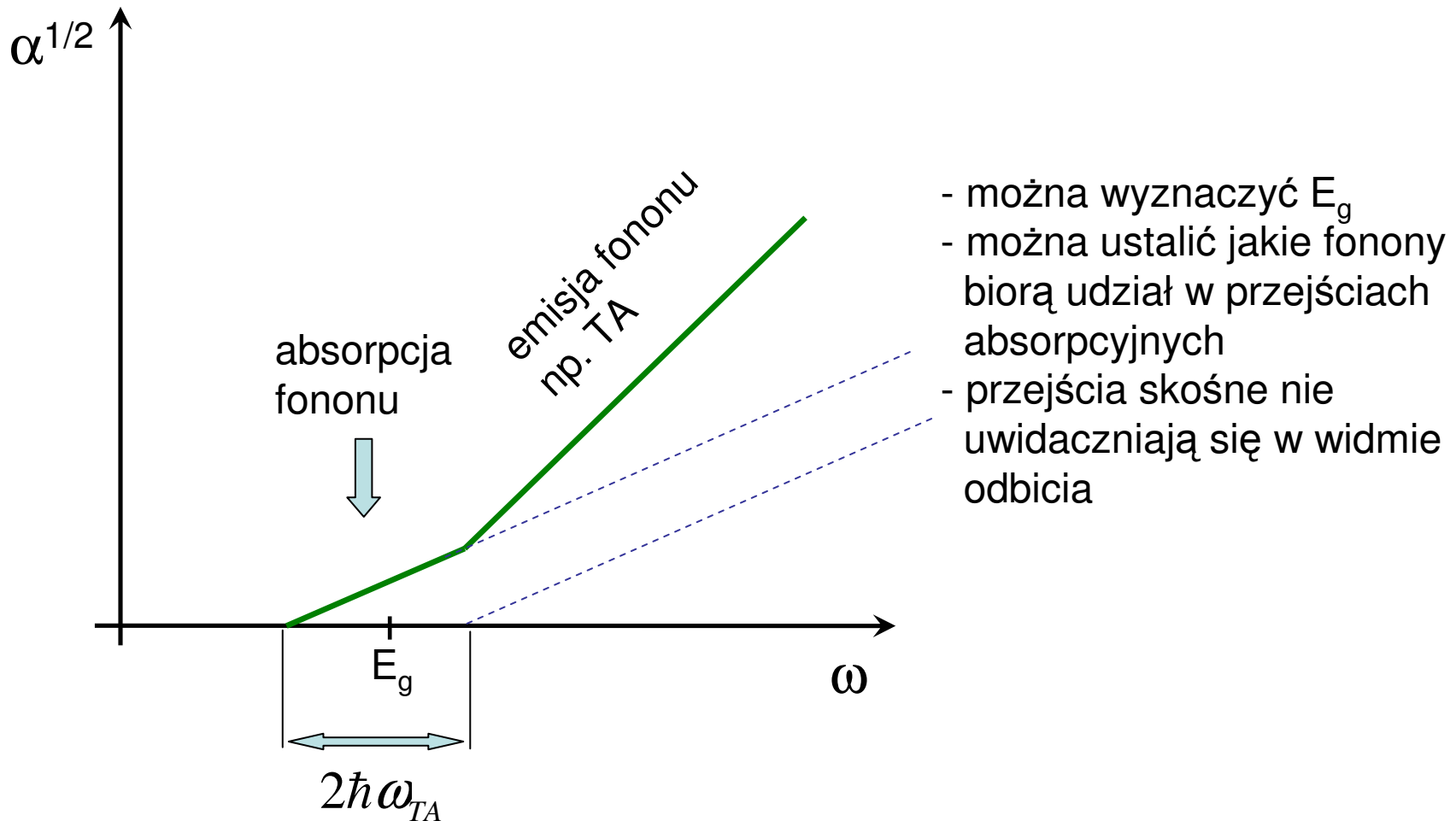
Typowo współczynniki absorpcji dla przejść skośnych:

$$\alpha(\omega) \sim 10^3 \text{ cm}^{-1}$$

Si, Ge, SiC...

Głębokość wnikania przy pobudzeniu światłem laserowym jest większa niż dla struktur o przerwie prostej

Typowy kształt krawędzi absorpcji dla przejść skośnych (np. dla krzemu)



Inna zależność od temperatury dla przejść z absorpcją i emisją fotonu – możliwość wyznaczenia E_g , E_f

Krawędź skośna jest w niskich temperaturach modyfikowana przez efekty ekscytonowe

Krawędź absorpcji dla germanu

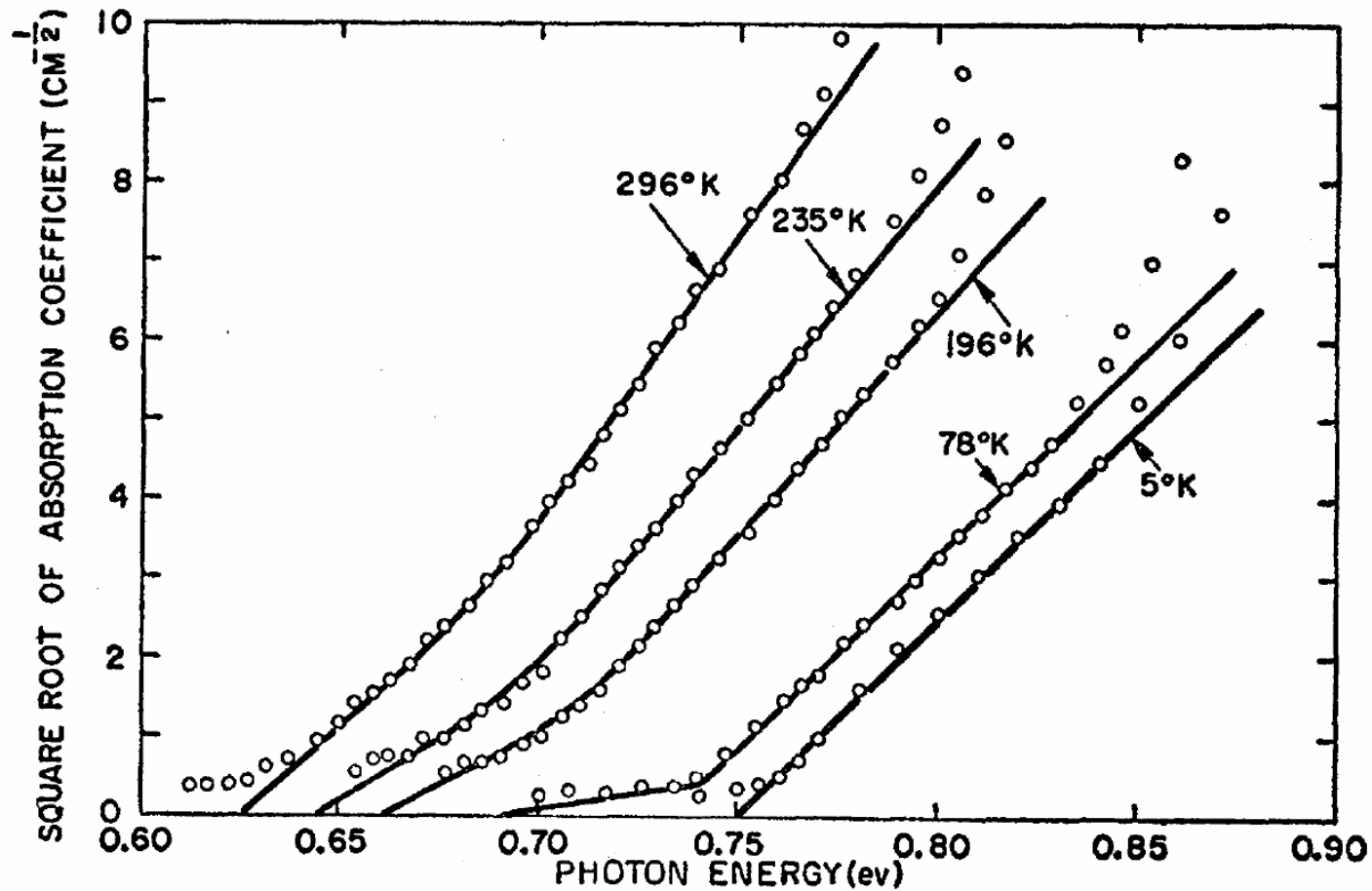


FIG. 6. Dependence of absorption coefficient on photon energy for pure Ge at various temperatures.

R. Braunstein, A. R. Moore, and F. Herman Phys. Rev. **109**, 695 (1958)

Krawędź absorpcji dla krzemu

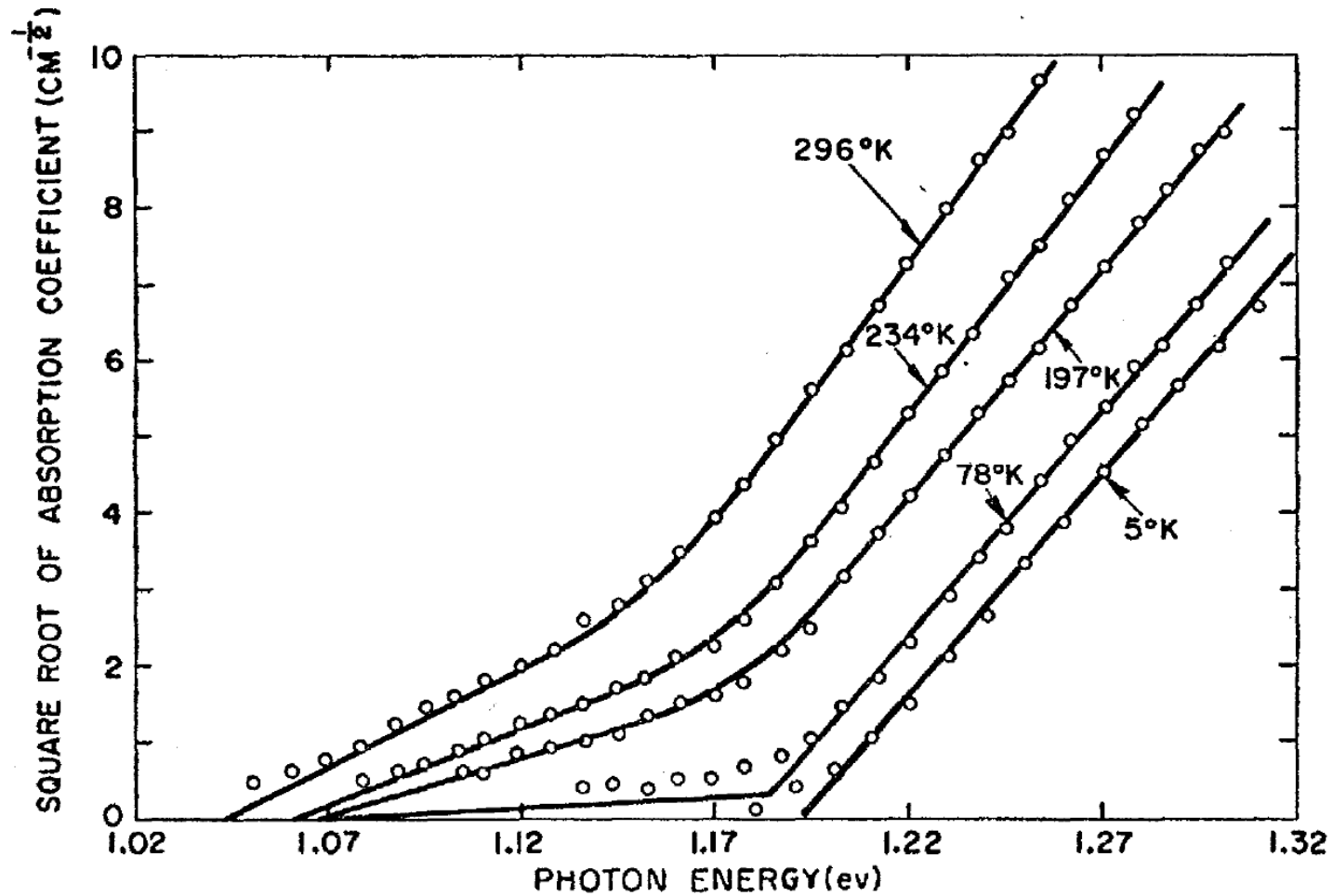


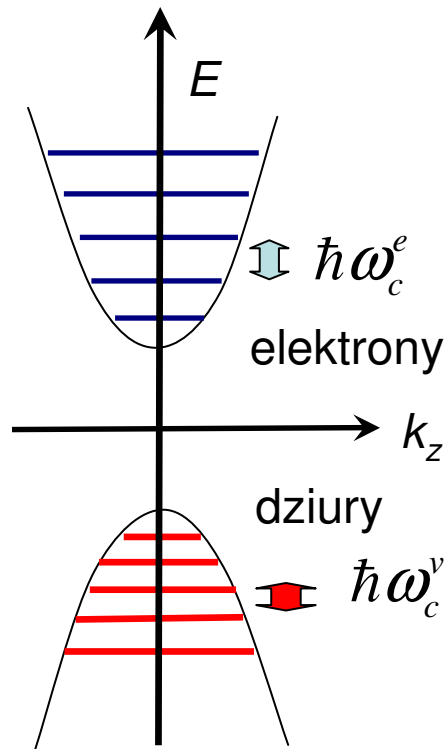
FIG. 7. Dependence of absorption coefficient on photon energy for pure Si at various temperatures.

R. Braunstein, A. R. Moore, and F. Herman Phys. Rev. **109**, 695 (1958)

Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na przejścia w obszarze krawędzi absorpcji

Rozważaliśmy już poprzednio pojedyncze pasmo w zewnętrznym polu magnetycznym

Korzystając z formalizmu masy efektywnej zapisywaliśmy pełną funkcję falową jako część „blochowska” i funkcje oscylatora harmonicznego



$$\Psi_n = u_{\mu k} \varphi_n$$

funkcja Blocha

funkcja oscylatora
harmonicznego

$$E_{n_z}^c = \frac{\hbar^2 k_{zc}^2}{2m_c^*} + (n + 1/2)\hbar\omega_c^c \pm \frac{1}{2} g_c^* \mu_B B$$

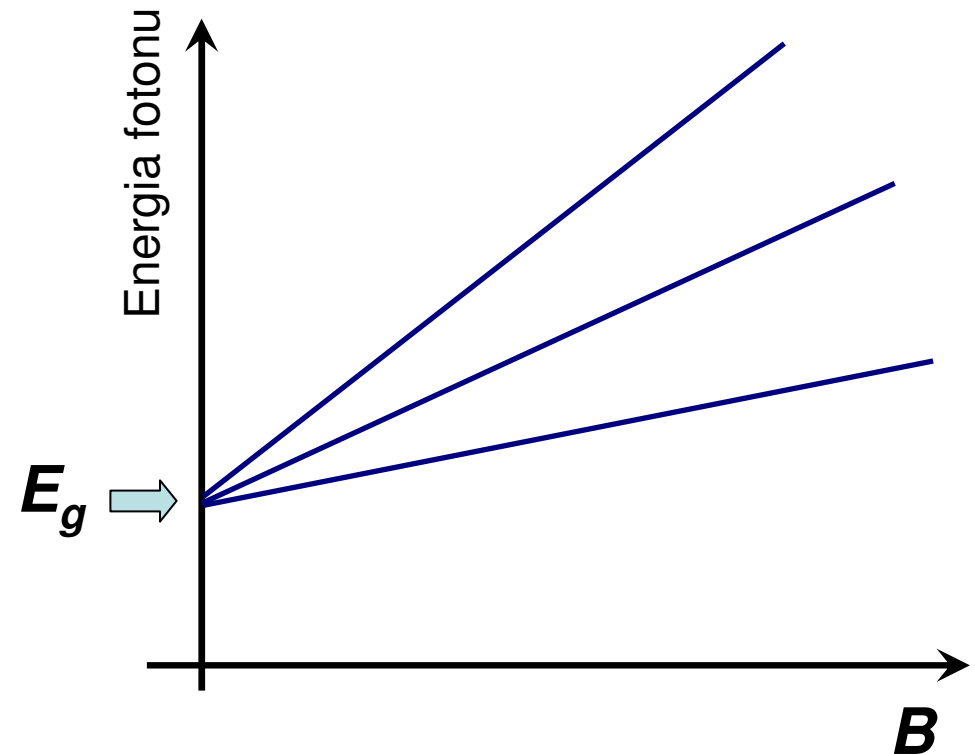
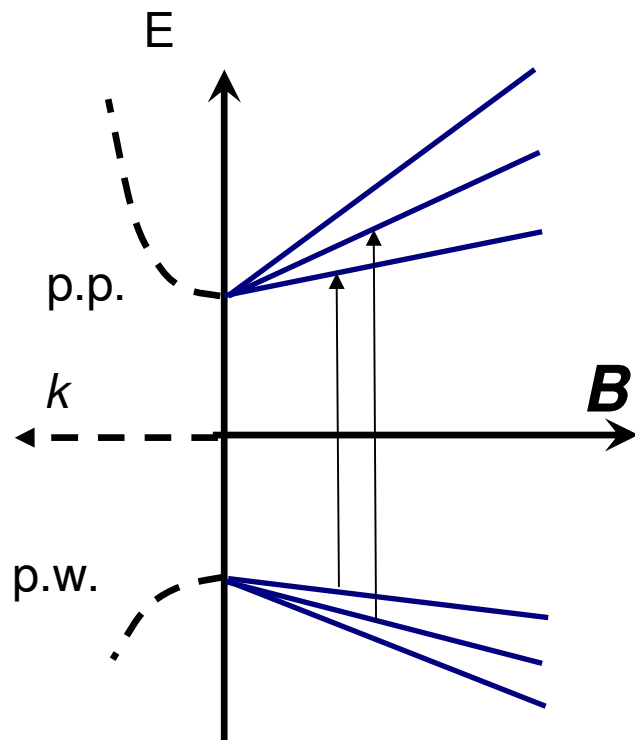
φ_n^c - funkcje oscylatorów elektronowych

$$E_{n_z}^v = \frac{\hbar^2 k_{zv}^2}{2m_c^*} + (n + 1/2)\hbar\omega_c^v \pm \frac{1}{2} g_v^* \mu_B B$$

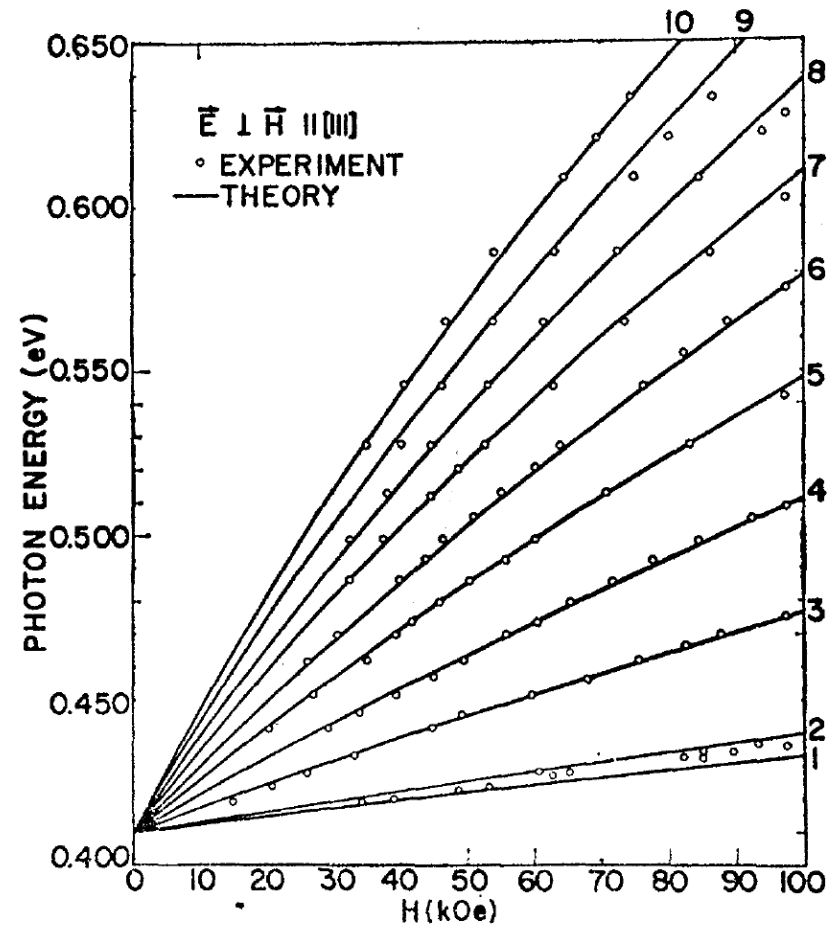
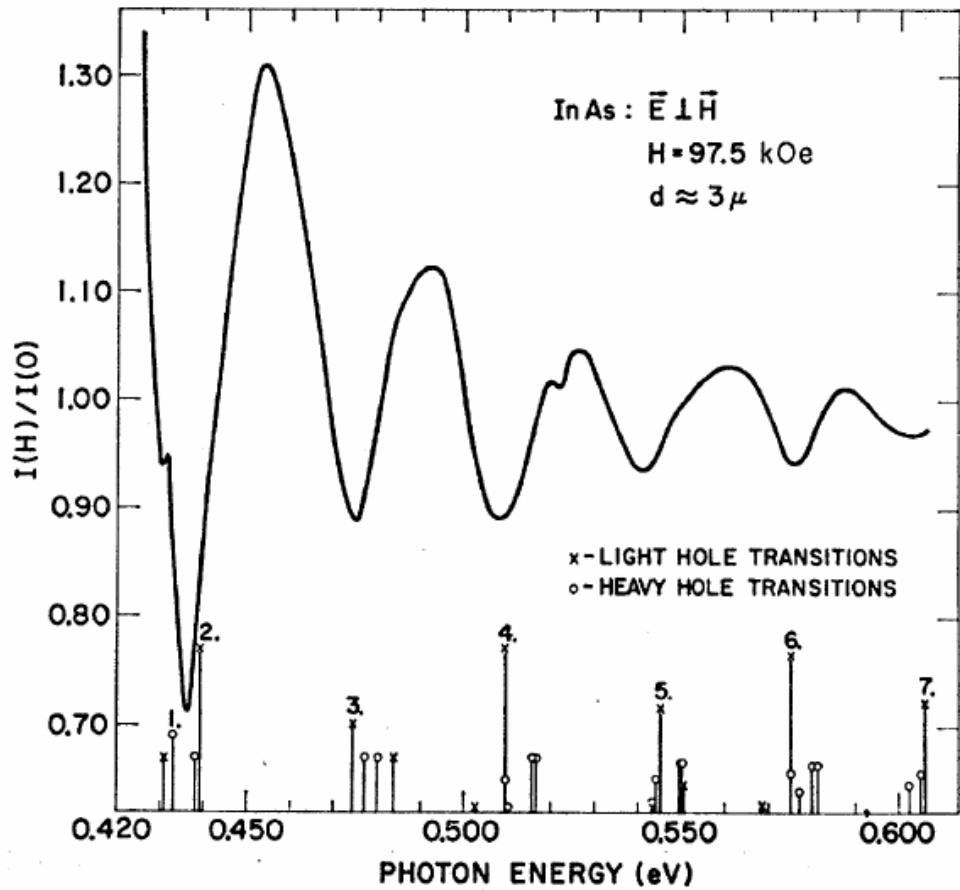
φ_n^v - funkcje oscylatorów dziurowych

Obserwowane widma przejść międzypasmowych odzwierciedlają punkty osobliwe gęstości stanów pasma przewodnictwa i pasma walencyjnego.

Reguły wyboru określone przez elementy macierzowe **pełnych** funkcji falowych obydwu pasm w polu magnetycznym.



Magneto transmisja(absorpcja) międzypasmowa - InAs



$E_{g,}, \Delta_{SO}$, parametry pasma walencyjnego

C. R. Pigeon, D. L. Mitchell, R. N. Brown, Phys. Rev **154**, 737 (1967)

Magneto-transmisja

- można wyznaczyć E_g
- różne konfiguracje (Faraday'a, Voigta)
- nachylenia związane z kombinacjami częstości cyklotronowych i czynników Landego

Magneto-odbicie

- zbliżone energie przejść inny kształt widma niż dla transmisji

Między-pasmowy efekt Faradaya

Dla danej energii fotonu mamy inne przejścia dla polaryzacji σ^- oraz σ^+



$$n_+ \neq n_-$$

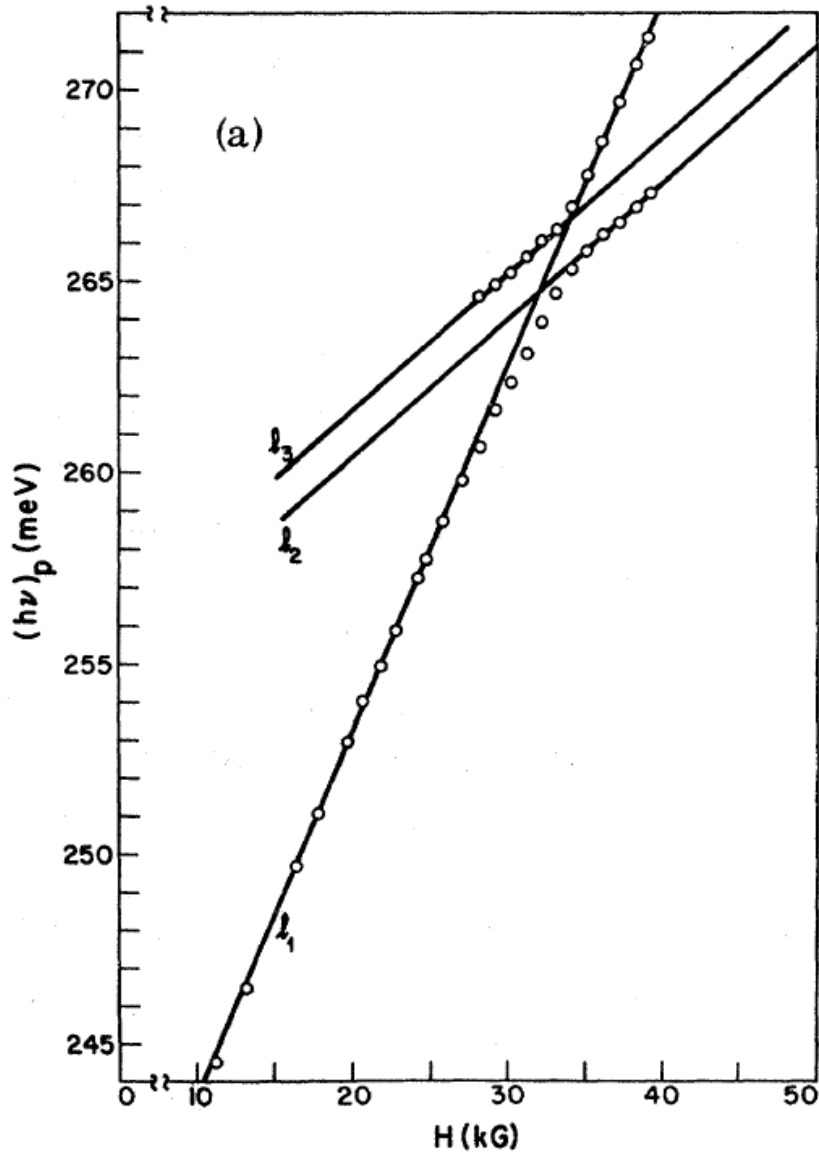


Skręcenie płaszczyzny polaryzacji

$$\hbar\omega > E_g$$

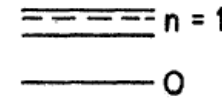
$$\Theta \sim (n^+ - n^-)$$

Międzypasmowa magnetotransmisja w InSb

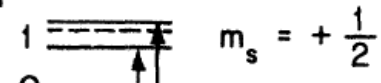


CONDUCTION BAND

$$m_s = -\frac{1}{2}$$



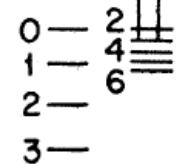
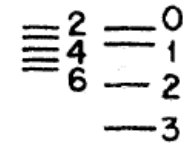
(b)



VALENCE BAND

a SET

$$m_J = +\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$$



b SET

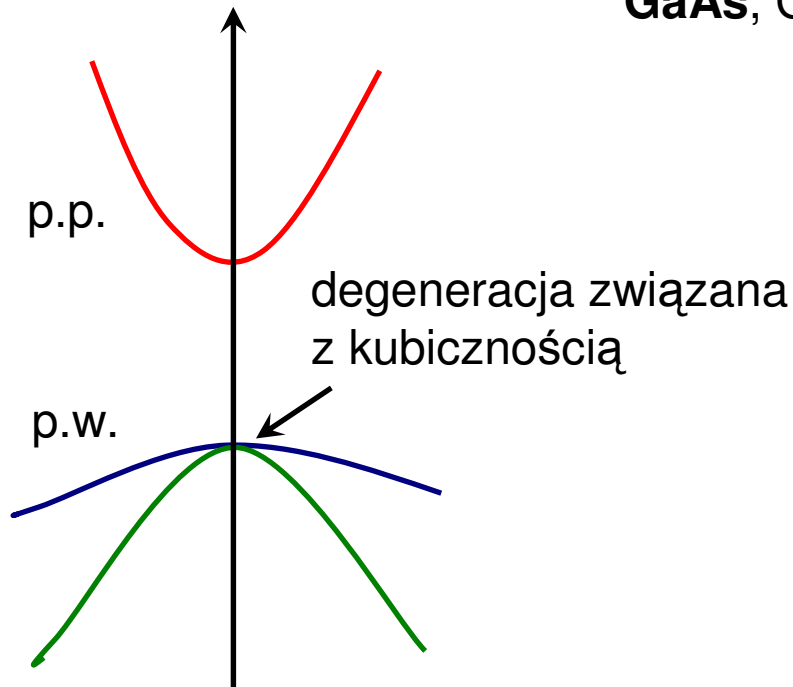
$$m_J = +\frac{1}{2}, -\dots$$

Jonson&Larsen, PRL **16**, 655 (1966)

Komplikacje - oddziaływanie z fononem optycznym LO (efekt magnetopolaronowy, nieparaboliczność)

Realna struktura pasmowa

GaAs, GaP, InP, PbS, Ge, Si, GaN, ZnO,



Dwa niezdegenerowane pasma sferyczne i paraboliczne nie występują...
Zwykle:

- pasma niezdegenerowane ale elipsoidalne i wielodolinowe (związki ołowiu, struktura NaCl)
- pasmo walencyjne zdegenerowane jak we wszystkich materiałach o strukturze blendy cynkowej

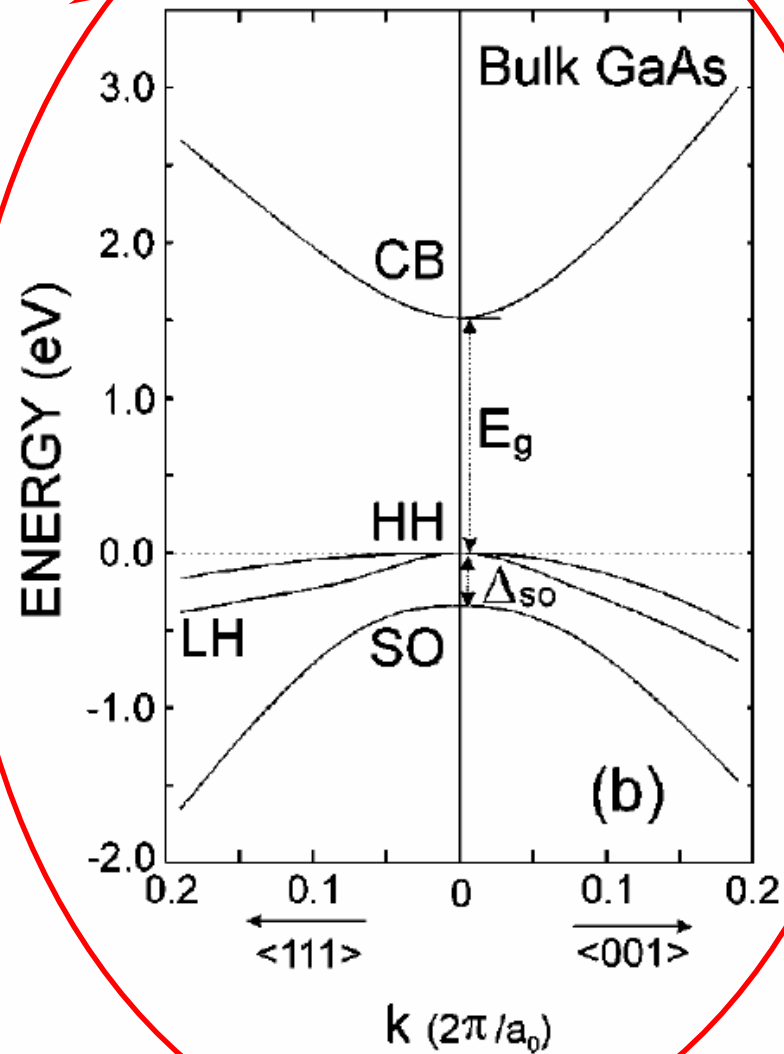
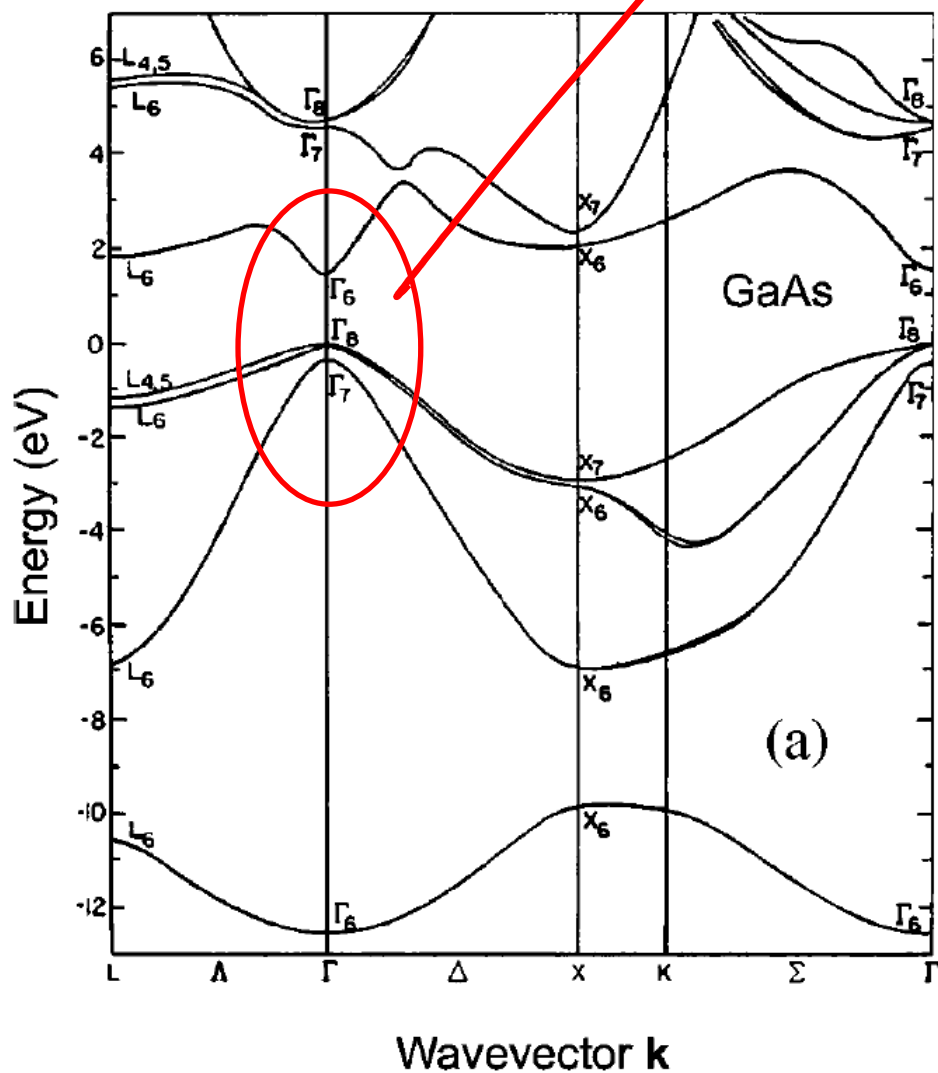
Struktura w polu magnetycznym staje się bardzo skomplikowana.

Pole magnetyczne w ogólności usuwa degenerację – wyróżniony kierunek

$$E_{1,2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[Ak^2 \pm \sqrt{B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_y^2)} \right]$$

A, B, C – zależą od elementów macierzowych oddziaływania z innymi pasmami

GaAs



GaN, ZnO, CdS...

Dla półprzewodników o strukturze wurcytu degeneracja pasma walencyjnego w pobliżu $k=0$ jest zniesiona (bez pola magnetycznego)

$$E_A - E_{B,C} = \frac{1}{2} \left[(\Delta_1 + 3\Delta_2) \mp \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 8\Delta_3^2} \right]$$

Δ_1 - rozszczepienie krystaliczne,
 Δ_2 oraz Δ_3 - parametry rozszczepienia spinowo-orbitalnego,

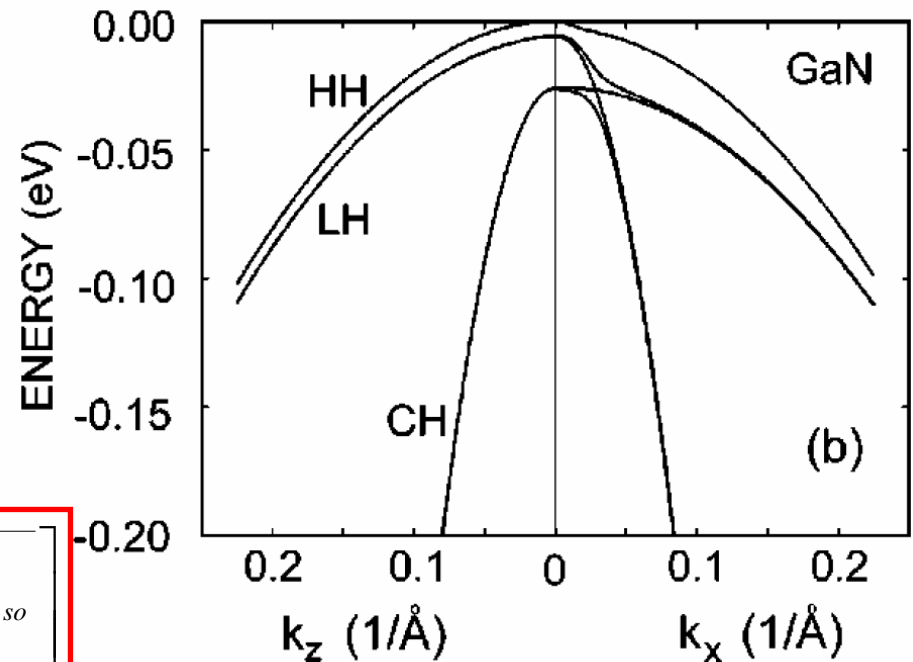
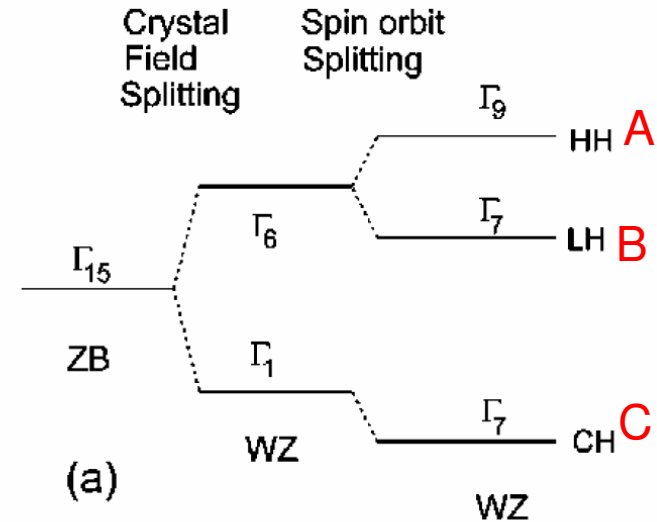
Przybliżenie kwazi-kubiczne

$$\Delta_1 = \Delta_{cr}, \quad \Delta_2 = \Delta_3 = \frac{1}{3} \Delta_{so}$$

Δ_{cr} - rozszczepieniem krystaliczne,
 Δ_{so} - rozszczepienie spinowo-orbitalne



$$E_A - E_{B,C} = \frac{1}{2} \left[(\Delta_{cr} + \Delta_{so}) \mp \sqrt{(\Delta_{cr} + \Delta_{so})^2 - \frac{8}{3} \Delta_{cr} \Delta_{so}} \right]$$



Efekty ekscytonowe

Przybliżenie jednoelektronowe – rozważamy tylko jeden elektron w potencjale krystalicznym, w którym jest zawarte oddziaływanie z innymi elektronami.

Ekscyton – kwazicząstka powstająca w wyniku oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronem i dziurą (analog atomu wodoru)

Wykraczamy poza przybliżenie jednoelektronowe!

Frenkiel (1931 r.) – nie każdej absorpcji światła odpowiada pobudzenie elektronowemu odpowiada fotoprzewodnictwo (pojawienie się swobodnych elektronów)

Rozważmy
elektron o masie efektywnej m_e^* i wektorze położenia \vec{r}_e
oraz
dziurę o masie efektywnej m_h^* i wektorze położenia \vec{r}_h

w półprzewodniku o stałej dielektrycznej \mathcal{E}

Równanie Schrödingera dla elektronu i dziury (eksycyonu)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right] \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$$

Wprowadzamy:

$$\vec{R} = \frac{m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h}{m_e^* + m_h^*} \quad \text{- wektor położenia środka masy układu elektron - dziura}$$

$$\vec{\rho} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad \text{- wektor położenia elektronu względem dziury}$$

W nowych współrzędnych równanie Schrödingera przyjmuje postać:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon\rho} \right] \Psi(\vec{R}, \vec{\rho}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{\rho})$$

gdzie: $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad M = m_e^* + m_h^* \quad \text{(masa całego eksycyonu)}$

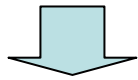
$\nabla_{\vec{R}}^2, \nabla_{\vec{\rho}}^2$ - operatory Laplace'a w zmiennych $\vec{R}, \vec{\rho}$

Proponuje my rozwiązanie w postaci iloczynu (metoda rozdzielania zmiennych):

$$\Psi(\vec{R}, \vec{\rho}) = \chi(\vec{R})\varphi(\vec{\rho})$$

Po podstawieniu do równania Schrödingera dostajemy”

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\chi(\vec{R})} \nabla_{\vec{R}}^2 \chi(\vec{R}) - \frac{1}{\varphi(\vec{\rho})} \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{\rho}}^2 \varphi(\vec{\rho}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon\rho} \varphi(\vec{\rho}) \right] = E'$$



$$E' = W + E$$

1) $-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 \chi(\vec{R}) = W\chi(\vec{R})$ \Rightarrow Fala płaska z wektorem falowym $k = \frac{\sqrt{2MW}}{\hbar}$

2) $-\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{\rho}}^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon\rho} \right] \varphi(\vec{\rho}) = E\varphi(\vec{\rho})$ \Rightarrow Problem wodoropodobny!

Zamiast masy elektronu* mamy masę zredukowaną elektron-dziura.

Promień bohrowski ekscytonu:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2} \left(\frac{m_0}{\mu} \right) \epsilon = 0.53 \cdot \left(\frac{m_0}{\mu} \right) \epsilon \quad (\text{\AA})$$

Ekscytony o dużych promieniach



Ekscytony Wanniera-Motta

Ekscytony małych promieniach



Ekscytony Frenkla

Energie własne (dla ruchu względnego):

$$E_n = -\frac{e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} \left(\frac{\mu}{m_0\epsilon^2} \right) \frac{1}{n^2} = R^* \frac{1}{n^2} = \left(\frac{\mu}{m_0\epsilon^2} \right) \frac{1}{n^2}$$

Energia kinetyczna środka masy (ruch całego ekscytonu): $W = \frac{\hbar^2 K^2}{2M}$

Funkcja falowa ekscytonu:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{\rho}) = \chi(\vec{R})\varphi(\vec{\rho}) = A \exp(i\vec{K}\vec{R}) R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

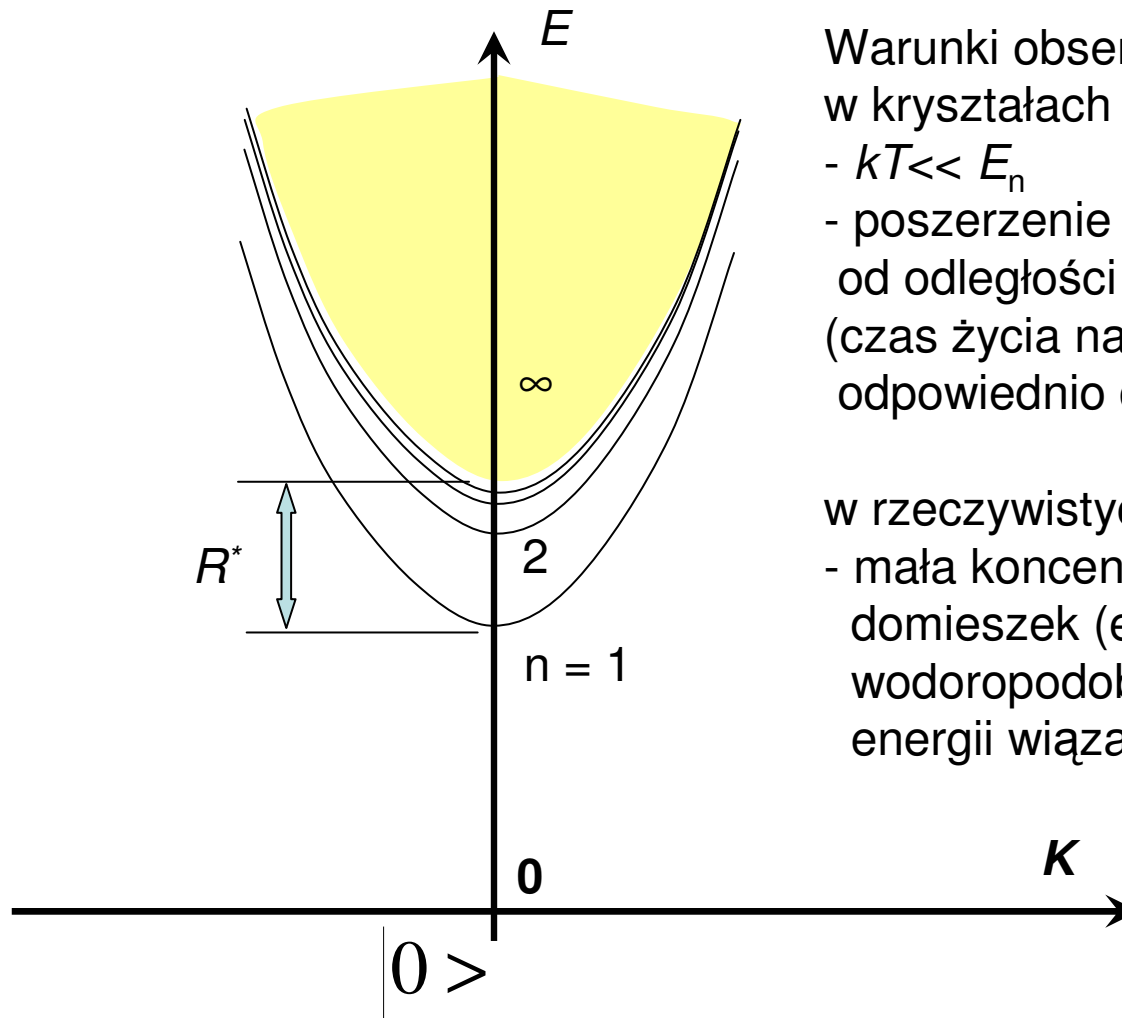
R_{nl} – stowarzyszone wielomiany Laguera

Y_{lm} – harmoniki sferyczne

l, m – orbitalna i magnetyczna liczba kwantowa

Energia całkowita ekscytynu:

$$E_{nml} = E_g + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{R^*}{n^2}$$



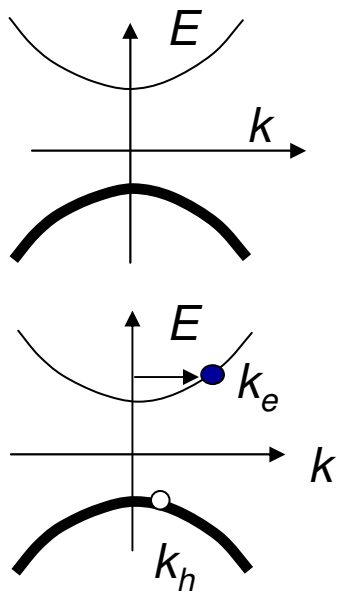
Warunki obserwacji ekscytonów
w kryształach idealnych

- $kT \ll E_n$
- poszerzenie poziome mniejsze od odległości pomiędzy stanami (czas życia na stanie ekscytonowym odpowiednio długi)

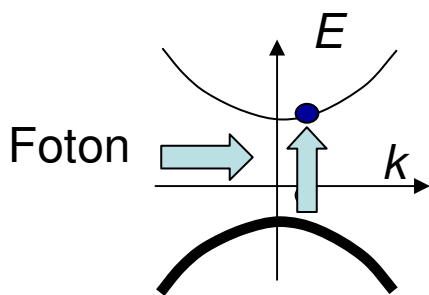
w rzeczywistych kryształach:

- mała koncentracja płytkich domieszek (energia domieszek wodoropodobnych jest bliska energii wiązania ekscytynu)

Wzbudzenia kryształu w języku jedoelektronowym

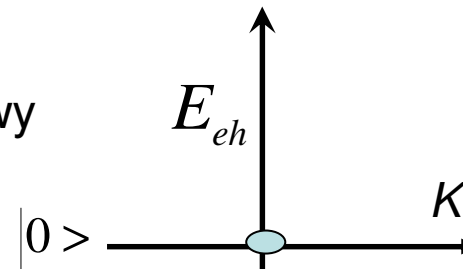


brak

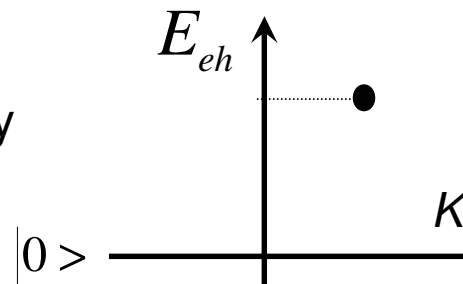


Wzbudzenia kryształu w języku dwucząstkowym

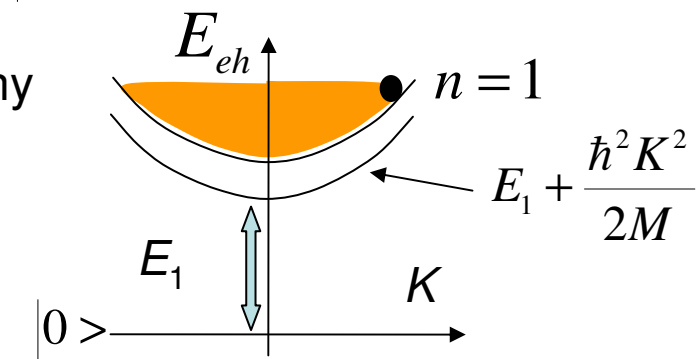
Stan podstawowy



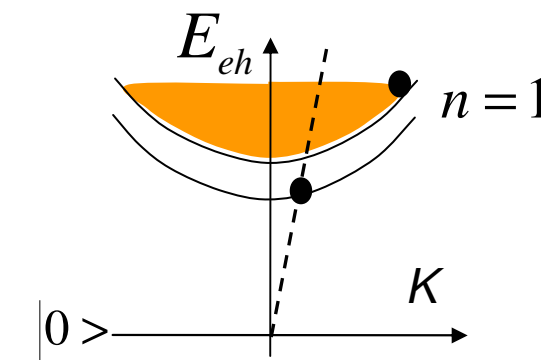
Stan wzbudzony



Stan skorelowany elektron-dziura (ekscyton)

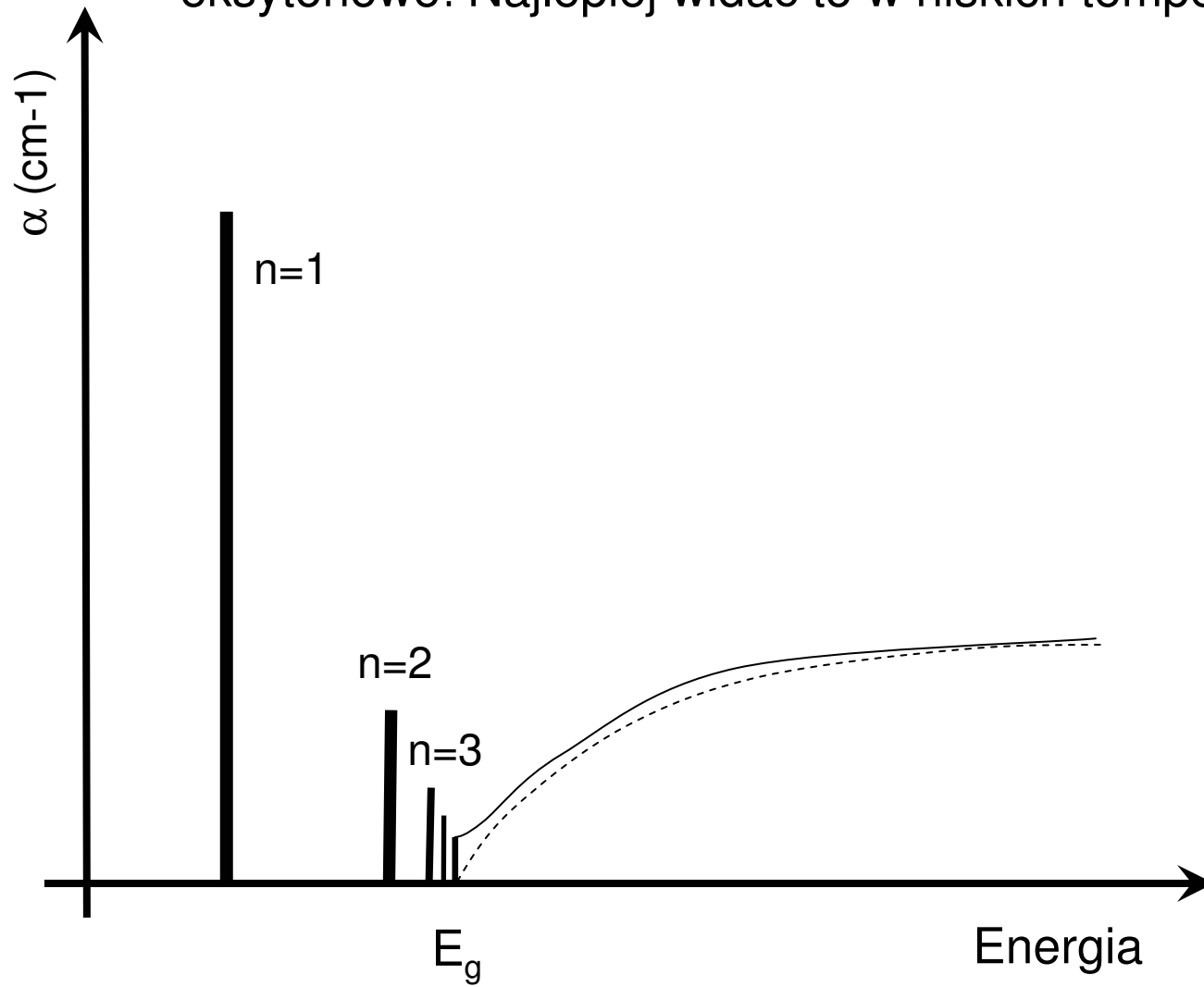


Absorpcja optyczna



Polariton ekscytonowy

Kraweź absorpcji jest silnie modyfikowana przez przejřcia ekcytonowe! Najlepiej widać to w niskich temperaturach.



Absorpcja ekscytonowa w GaAs

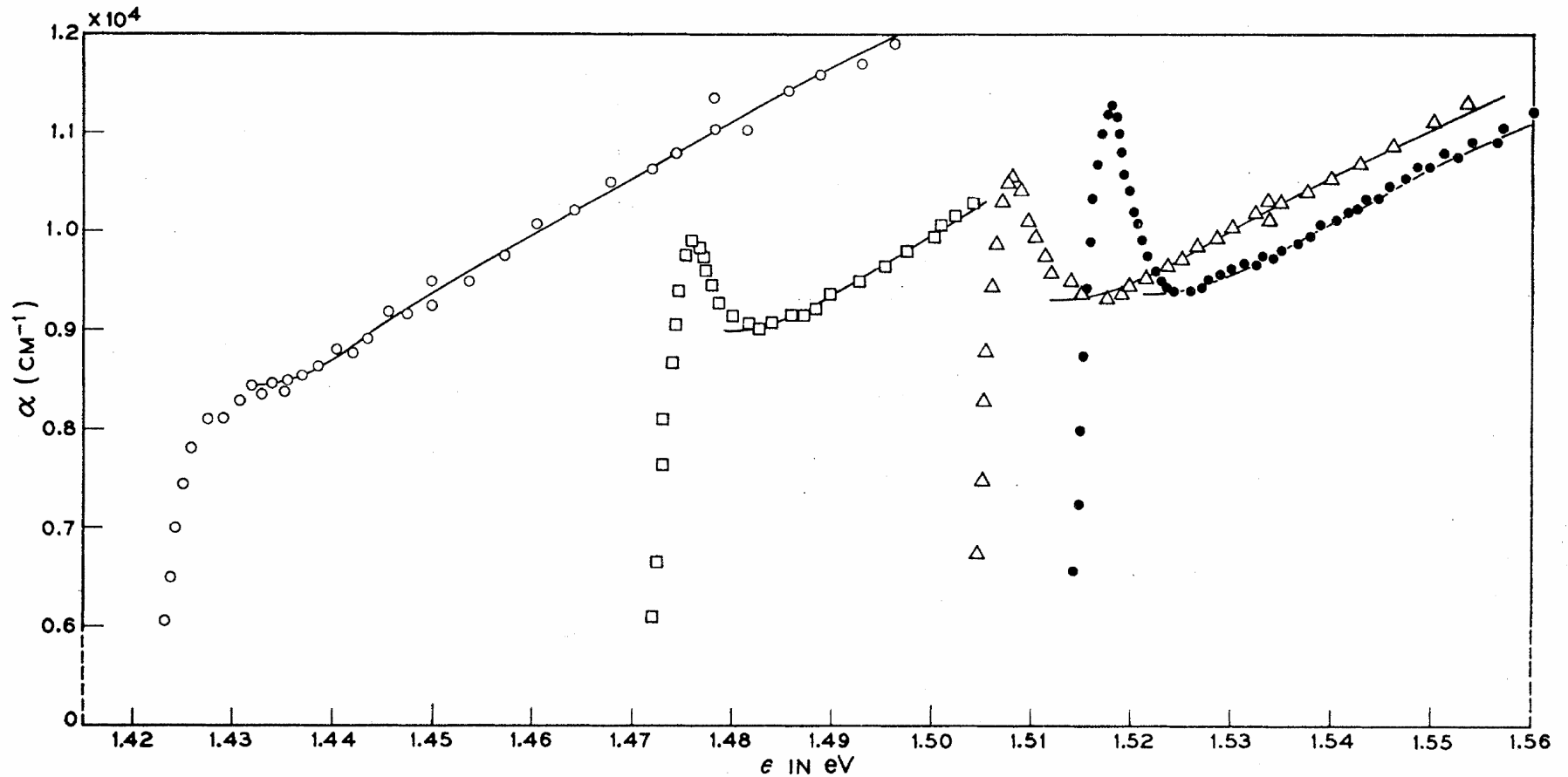


FIG 3 Exciton absorption in GaAs; \circ 294°K, \square 186°K, Δ 90°K, \bullet 21°K.

M. D. Sturge Phys. Rev. **127**, 768 (1962)