

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КРИСТАЛЛА ОТ ПРИВЕДЕННОЙ ЧАСТОТЫ

Кан О.А., Баржаксынова А.И., Жаркимбекова А.Т.

Карагандинский государственный технический университет,

Караганда, Казахстан

В физике полупроводников используются различные методы определения различных параметров полупроводниковых материалов, которые служат базой для создания новых оптоэлектронных приборов. Теория, описывающая оптические свойства кристаллов, основана на том, что молекулы представляются в виде совокупности гармонических осцилляторов [1].

Кристаллы представляют собой вещества, атомы или молекулы которых имеют упорядоченное расположение в пространстве. Кристалл можно представить в виде совокупности периодически повторяющихся в пространстве групп атомов или молекул, область расположения которых называется ячейкой кристалла.

Электроны и ядра, входящие в состав атома, электрически заряжены, их колебания создают в молекулах или кристаллах электрические дипольные моменты, которые, в первом приближении синусоидально изменяются во времени. В связи с этим, каждое колебание сопровождается электромагнитным излучением. Потеря энергии в виде излучения приводит к экспоненциальному затуханию колебаний осциллятора.

Фундаментальные частоты оптических колебаний кристаллической решетки того же порядка, что и частоты инфракрасных электромагнитных волн (от 10^{11} до 10^{13} Гц). При определенных условиях возможно прямое взаимодействие этих двух типов волн. Для примитивной ячейки кристалла, содержащей N атомов, существует $3N$ фундаментальных колебаний. Три из них являются акустическими, а оставшиеся ($3N - 3$), оптическими фундаментальными колебаниями [2].

Способность вещества поглощать энергию ИК-излучения зависит от суммарного изменения дипольного момента молекулы при вращении и колебании, т.е. поглощать ИК-излучение может лишь молекула, обладающая электрическим дипольным моментом, величина или направление которого изменяется в процессе колебания и вращения. Дипольный момент означает несовпадение центров тяжести положительных и отрицательных зарядов в молекуле, т. е. электрическую асимметрию молекулы.

Совокупность всевозможных энергетических переходов в молекуле, сопровождаемых поглощением (излучением) электромагнитного излучения образует спектр.

Инфракрасная область спектра подразделяется на несколько диапазонов согласно применяемым оптическим материалам, которые должны быть прозрачны в данной области спектра. Область 0,8-2 мкм - ближняя инфракрасная

область, материал оптики кварц и стекло. Область 2-40 мкм - средняя (фундаментальная) инфракрасная область, используется солевая оптика (LiF, NaCl, KBr, CsI), область имеет чрезвычайно большое значение при исследовании органических соединений (в современных приборах солевая оптика заменена дифракционными решетками). Область до 200 мкм - далекая инфракрасная область, область имеет значение при исследовании неорганических соединений.

Оптические свойства изотропного вещества характеризуются оптическими константами n (показатель преломления) и k (показатель поглощения).

Для определения соотношения между комплексной диэлектрической проницаемостью $\bar{\varepsilon}$ и частотами длинноволновых оптических колебаний решетки воспользуемся моделью одного затухающего осциллятора.

Электрическое и магнитное поля в непроводящей поляризующей среде описываются уравнениями Максвелла. Следуя подходу М. Борна и Х. Куна можно рассмотреть уравнения Максвелла совместно с уравнениями движения решетки в форме

$$\ddot{\vec{\omega}} = b_{11} \vec{\omega} + b_{12} \vec{E} \quad (1)$$

Здесь параметр $\vec{\omega}$ описывает смещение положительных ионов решетки относительно отрицательных с учетом соотношения их масс.

При смещениях ионов во всех ячейках кристалла возникают дипольные моменты, образующие в сумме момент всей решетки. Изменение во времени вектора дипольного момента отнесенного к единице объема описывается уравнением

$$\vec{P} = b_{21} \vec{\omega} + b_{22} \vec{E} \quad (2)$$

Прямыми вычислениями можно показать, что вещественная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости $\bar{\varepsilon}(\omega)$ имеют вид:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)[1 - (\omega/\omega_0)^2]}{[1 - (\omega/\omega_0)^2]^2 + (\omega/\omega_0)^2(\gamma/\omega_0)^2} \quad (3)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)(\omega/\omega_0)(\gamma/\omega_0)}{[1 - (\omega/\omega_0)^2]^2 + (\omega/\omega_0)^2(\gamma/\omega_0)^2} \quad (4)$$

Здесь характеристическая частота ω_0 может быть отождествлена с предельной частотой поперечных оптических фононов, а γ с затуханием поперечных оптических колебаний. Низкочастотную диэлектрическую проницаемость можно определить при частотах намного меньше ω_0 с использованием формул (3) и (4). Эти константы описывают фазу и поглощение плоской волны внутри вещества:

Характер зависимости отражающей способности кристалла от частоты таков, что в интервале между продольными и поперечными колебаниями волновой вектор не имеет действительных значений. Поэтому в этом интервале частот в кристалле не могут распространяться волны и все падающее излучение должно полностью отражаться.

Коэффициент отражения R света, падающего нормально на поверхность поглощающего материала, связан с комплексным показателем преломления $\bar{n} = \sqrt{\bar{\varepsilon}}$ следующим соотношением [3]:

$$R = \left| \frac{\bar{n} - 1}{\bar{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (5)$$

где n – обычный показатель преломления; k – коэффициент экстинкции.

Выразим оптические постоянные n и k через действительную и мнимую части комплексной диэлектрической проницаемости $\bar{\varepsilon} = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2$, имея в виду сравнение с результатами для модели осциллятора в непоглощающей среде $n = \varepsilon^{1/2}$ (n и ε вещественны). В поглощающей среде существует аналогичная связь для комплексных величин \bar{n} , $\bar{\varepsilon}$. Возводя это выражение в квадрат, получим:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (6)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk. \quad (7)$$

Откуда можно получить, что:

$$n = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}}{2}}, \quad (8)$$

$$k = \frac{\varepsilon_2}{\sqrt{2(\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2})}}. \quad (9)$$

На основании формул (8), (9) была составлена компьютерная программа, которая строит графики зависимости действительной ($n^2 - k^2$) и мнимой ($2nk$) частей комплексной диэлектрической проницаемости от приведенной частоты, вычисленной на основе модели одного классического дисперсионного осциллятора (рис. 1). Цифрой 1 отмечен график мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости от приведенной частоты. Цифрой 2 отмечен график действительной части комплексной диэлектрической проницаемости от приведенной частоты. В программе можно задавать количество точек отсчета для

вычисления промежуточных значений диэлектрической проницаемости и построения графиков.

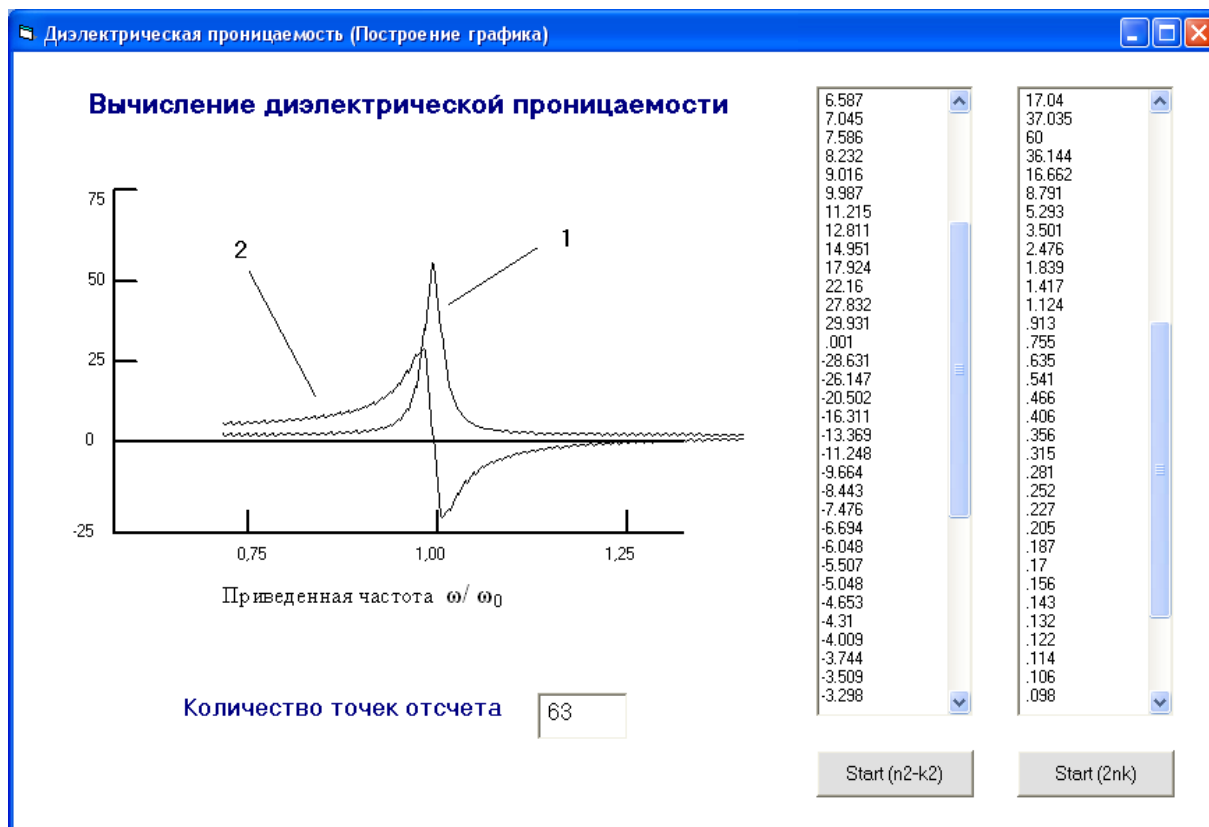


Рис. 1. Действительная ($n^2 - k^2$) и мнимая ($2nk$) части комплексной диэлектрической проницаемости

Таким образом, график зависимости показывает, что диэлектрическая проницаемость принимает отрицательные значения между значениями продольных и поперечных частот. Вне этого интервала диэлектрическая проницаемость положительна и кристалл вновь начинает пропускать свет.

Литература

1. Воробьев Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгин В.А. Оптические свойства наноструктур. Учеб. пособие. СПб. Наука, 2001.- 188 с.
2. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Пер. с англ., под ред. А.А. Гусева. Изд-во «Наука», М., 1978.- 237 с.
3. Оптические свойства полупроводников (полупроводниковые соединения типа $A^{III}B^V$). Пер. с англ., под ред. Е.Ф. Гросса, изд-во «Мир», М., 1970.- 488 с.

Ключевые слова

Оптические кристаллы, диэлектрическая проницаемость, модель осциллятора, оптические параметры кристалла, коэффициент отражения.