

## 12. Transport na optických frekvencích I

Vnější elektromagnetická vlna vyvolává pohyb nabitých částic (elektronů a atomových jader). Budeme předpokládat harmonickou časovou závislost intenzity elektrického pole v pevném místě prostoru,

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i2\pi ft} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}, \quad (12.1)$$

vektor  $E_0$  je amplituda. Zpravidla zacházíme s jednoduchým rozložením elektrického pole v prostoročase, například s rovinnou vlnou s vlnovým vektorem  $k_0$ :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - 2\pi \vec{k}_0 \vec{r} / \lambda)} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}_0 \vec{r})}. \quad (12.2)$$

Základní charakteristiky vlny:

elektrická intenzita	$E$ (V/m),
frekvence	$f = \omega/2\pi$ (Hz),
vlnová délka	$\lambda = c/f$ (mm, $\mu\text{m}$ , nm),
vlnočet	$W = 1/\lambda$ ( $\text{cm}^{-1}$ ).

Kvantové chování (Planck + Einstein):

energie fotonu	$\hbar\omega$ (eV),
hybnost	$\hbar\omega/c$ (eVs/m).

Převod vlnová délka – energie fotonu – vlnočet:

$$\hbar\omega \text{ (eV)} = \frac{1.239852}{\lambda \text{ (\mu m)}}, \quad W \text{ (cm}^{-1}\text{)} = 8065.48 \hbar\omega \text{ (eV)}. \quad (12.3)$$

Interakce nabitých částic s elektromagnetickou vlnou je dána intenzitou elektrického pole. Detektory ovšem reagují na intenzitu  $I$ , t.j. časovou střední hodnotu Poyntingova vektoru

$$I = \left\langle \vec{E}(t) \times \vec{H}(t) \right\rangle = \frac{c\epsilon_0}{2} |\vec{E}_0|^2. \quad (12.4)$$

Numerický příklad:

vlna s amplitudou intenzity el. pole 1 V/m má intenzitu  $1.33 \text{ mW/m}^2$ ; vlna s intenzitou  $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$  má amplitudu elektrické intenzity  $8.68\text{E}5 \text{ V/m}$ . Vhodné je srovnání s intenzitou elektrického pole jednoho elementárního náboje ve vzdálenosti  $0.1 \text{ nm}$ , která je  $1.44\text{E}11 \text{ V/m}$ .

Ke kvantovému chování elmag vlny:

klasická představa v mnoha situacích selhává, energie je přenášena ve svazku kvant (fotonů). Intenzita a výkon monochromatického svazku jsou

$$I = \hbar\omega \times (\text{počet fotonů na jednotku plochy a času}), \quad (12.5)$$

$$P = \hbar\omega \times (\text{počet fotonů na jednotku času}).$$

Příklad:

červená linie HeNe laseru s vlnovou délkou  $\lambda=632.8$  nm sestává z kvant s energií 1.959 eV. Výkon 1 mW znamená tok  $3.19 \times 10^{18}$  fotonů za sekundu. Současné detektory pracují s úrovní temného šumu zhruba 10 elementárních nábojů (které mohou být generovány o něco větším počtem fotonů). Je tedy relativně snadné pozorovat lineární odezvu (počet absorbovaných fotonů úměrný počtu dopadajících fotonů).

### Elektrická polarizace hmoty

Elektrické pole světelné vlny způsobuje pohyb jader a elektronů. Tyto pohyby jsou typicky asynchronní, s „fázovým posuvem“ mezi vynucující silou (úměrnou intenzitě elektrického pole  $E$ ) a indukovaným dipólovým momentem (alternativně indukovaným proudem). Obvyklá je významná závislost na frekvenci pole  $\omega$ . Je vhodné používat komplexní veličiny, ve kterých je zároveň amplituda a fáze.

Ve slabých polích je odezva lineární:

$$\begin{aligned} \vec{D} &\equiv \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = (1 + \hat{\chi}) \epsilon_0 \vec{E} = \hat{\epsilon} \epsilon_0 \vec{E} , \\ \vec{j} &= -i\omega \vec{P} = \sigma \vec{E} . \end{aligned} \quad (12.6)$$

Zde je  $D$  elektrické posunutí,  $P$  polarizace,  $\chi$  susceptibilita,  $\epsilon$  permitivita,  $j$  indukovaná proudová hustota,  $\sigma$  vodivost.

Základními odezвовými funkcemi jsou (komplexní) permitivita a vodivost. Jejich hodnoty pro danou frekvenci se také označují jako optické konstanty. Ve fyzikálních modelech jsou preferovanými optickými konstantami reálná část vodivosti nebo imaginární část permitivity, protože jsou měřítkem absorbované energie (počítáme ji jako energii kvanta násobenou pravděpodobností absorpce). Občas je vhodné používat záporně vzatou převrácenou hodnotu permitivity – zejména při sledování kolektivních plasmonových excitací. Při sledování šíření vlny je vhodnou veličinou (komplexní) index lomu, což je odmocnina z permitivity. Jeho imaginární část je mírou tlumení vlny.

Souvislosti mezi optickými konstantami

Optical Constant (symbol)	Real part	Imaginary part
conductivity ( $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$ )	$\sigma_1 = \omega\epsilon_0\epsilon_2$	$\sigma_2 = -\omega\epsilon_0(\epsilon_1 - 1)$
dielectric function ( $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ )	$\epsilon_1 = 1 - \sigma_2/(\omega\epsilon_0)$ $\epsilon_1 = n^2 - k^2$	$\epsilon_2 = \sigma_1/(\omega\epsilon_0)$ $\epsilon_2 = 2nk$
refractive index ( $N = n + ik$ )	$n = \sqrt{(\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2})/2}$ $n = \epsilon_2/(2k)$	$k = \sqrt{(-\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2})/2}$ $k = \epsilon_2/(2n)$
negative inverse of dielectric function ( $-\epsilon^{-1}$ )	$-\epsilon_1/(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)$	$\epsilon_2/(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)$

Kauzálnost odezvy vede k požadavku na splnění integrálních Kramers-Kronigových relací

$$\epsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega \epsilon_2(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega, \quad \epsilon_2(\omega) = \frac{\sigma_0}{\omega\epsilon_0} - \frac{2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{\epsilon_1(\Omega) - 1}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (12.7a)$$

$$\sigma_1(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{\sigma_2(\Omega)}{\Omega - \omega} d\Omega = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega \sigma_2(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega$$

$$\sigma_2(\omega) = \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{\sigma_1(\Omega)}{\Omega - \omega} d\Omega = \frac{-2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sigma_1(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (12.7b)$$

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega k(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega, \quad k(\omega) = \frac{-2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{n(\Omega) - 1}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (12.7c)$$

**Klasický tlumený harmonický oscilátor** s výchylkou  $u$ , tlumení úměrné rychlosti – Lorentzův spektrální profil

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = -m\omega_0^2 u - \frac{m}{\tau} \frac{du}{dt} - eE_0 e^{i\omega t}. \quad (12.8)$$

Výchylka je

$$u = -\frac{e}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} E_0 e^{i\omega t}, \quad (12.9)$$

její amplituda

$$u_0 = -\frac{eE_0}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} \quad (12.10)$$

a polarizovatelnost

$$\alpha = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}. \quad (12.11)$$

S objemovou hustotou oscilátorů  $N$  je susceptibilita

$$\chi = \frac{Ne^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} \quad (12.12)$$

a permitivita

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi Ne^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}. \quad (12.13)$$

Pro slabé tlumení ( $1/\tau \ll \omega_0$ ) dostáváme rezonanci kolem vlastní frekvence oscilátoru.

## Drudeho model – odezva volných nábojů

Zvláštní případ Lorentzova modelu, ve kterém vynecháme vratnou sílu oscilátoru (vezmeme  $\omega_0$  nulové). „Rezonance“ volných nosičů náboje vyjde pro nulovou frekvenci elmag pole:

$$\varepsilon = 1 - \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{1}{\omega(\omega + i/\tau)}, \quad (12.14)$$

pro kterou imaginární část permitivity diverguje. Reálná část je konečná,

$$\operatorname{Re}\{\varepsilon(0)\} = 1 - \frac{4\pi N e^2 \tau^2}{m}, \quad (12.15)$$

pro dostatečně velké  $N$  a/nebo  $\tau$  nabývá záporných hodnot. Chování při nízkých frekvencích je podle očekávání vhodněji popisováno komplexní vodivostí. Její imaginární část je pro nulovou frekvenci nulová a reálná část je konečná (viz 10.10, pozor na volbu soustavy jednotek),

$$\sigma_1(0) = \frac{e^2 \tau}{m}. \quad (12.16)$$

## Kvantový popis – přechody způsobené časově závislou poruchou

Poruch závislá harmonicky na čase vede pro kvazistatické výchozí a konečné stavy s rozdílem energií

$$E_f - E_i = \hbar \omega_0 \quad (12.17)$$

k Lorentzovu profilu permitivity centrovanému na frekvenci  $\omega_0$ , pokud předpokládáme konstantní dobu života excitovaného stavu (exponenciální rozdělení pravděpodobnosti nalezení systému v excitovaném stavu).

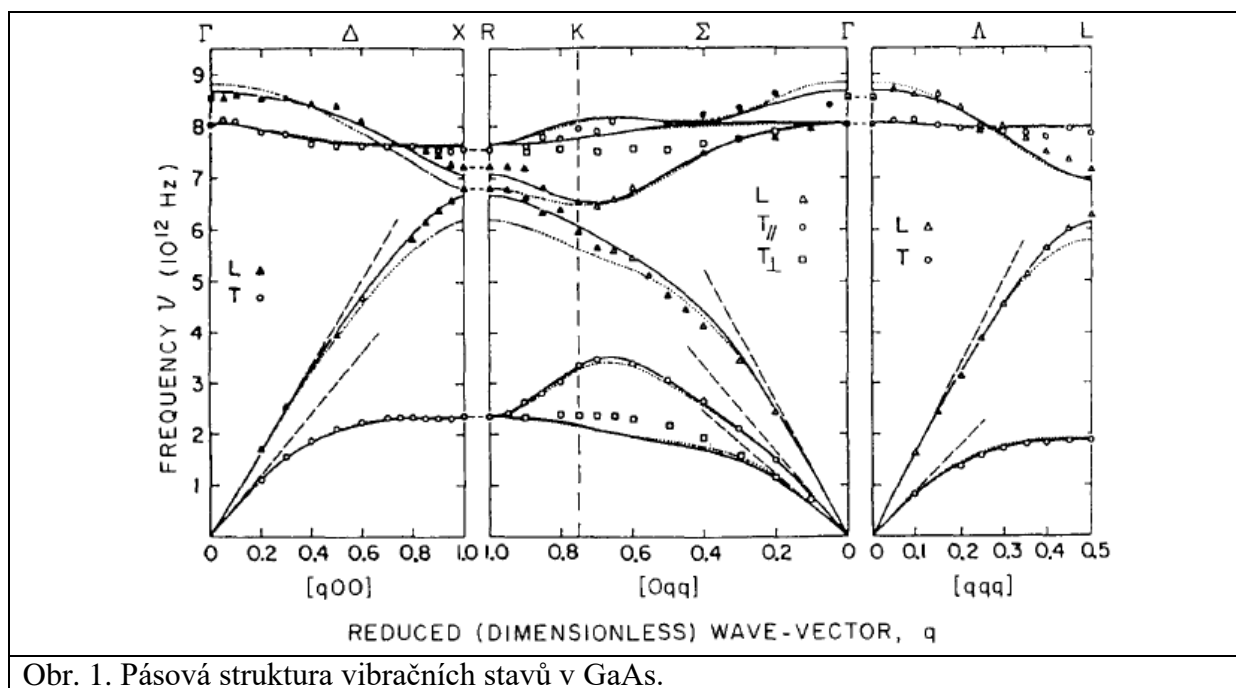
Pravděpodobnosti přechodu z Fermiho zlatého pravidla předpovídají absorptivní část odezvových funkcí, zbylé části dostáváme z KK relací.

Typicky sčítáme pravděpodobnosti (nezávislých) procesů přes všechny páry výchozích a konečných stavů, čímž dostaneme výsledné odezvvové funkce.

## Odezvové funkce krystalů

Translační symetrie vede k indexování jednočásticových stavů vlnovým vektorem  $k$ , pásy dovolených energií omezujeme na 1. BZ, používáme grupové symboly pro označení bodů a směrů vysoké symetrie v recipročním prostoru.

V pásové struktuře fononů v GaAs odlišíme akustické a optické módy, posoudíme degeneraci vynucenou symetrií.



Obr. 1. Pásová struktura vibračních stavů v GaAs.

Oddělení frekvencí LO a TO módů v  $\Gamma$  je dáno (částečnou) ionicitou vazby:

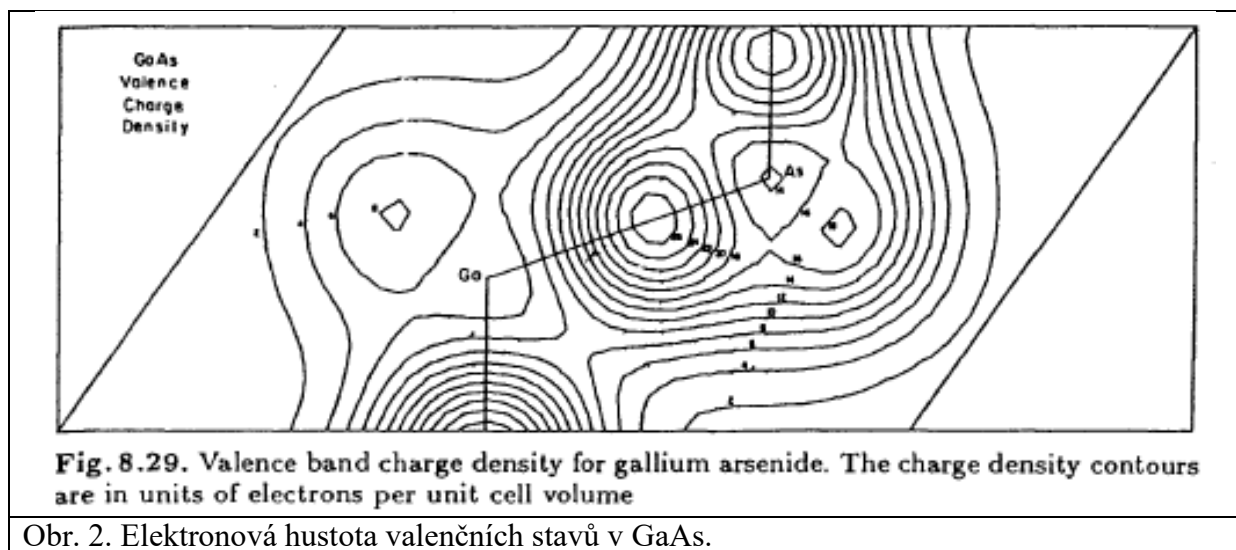
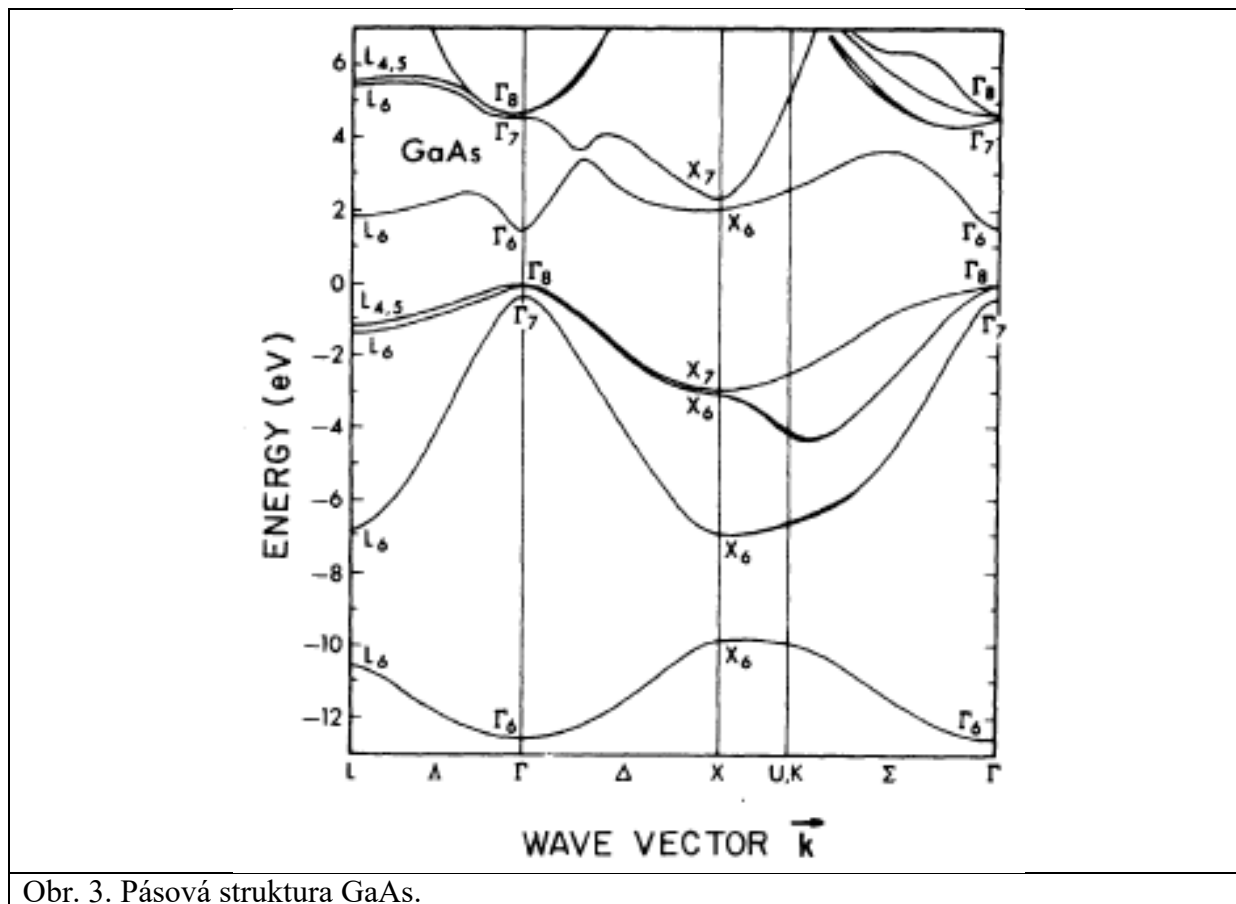


Fig. 8.29. Valence band charge density for gallium arsenide. The charge density contours are in units of electrons per unit cell volume

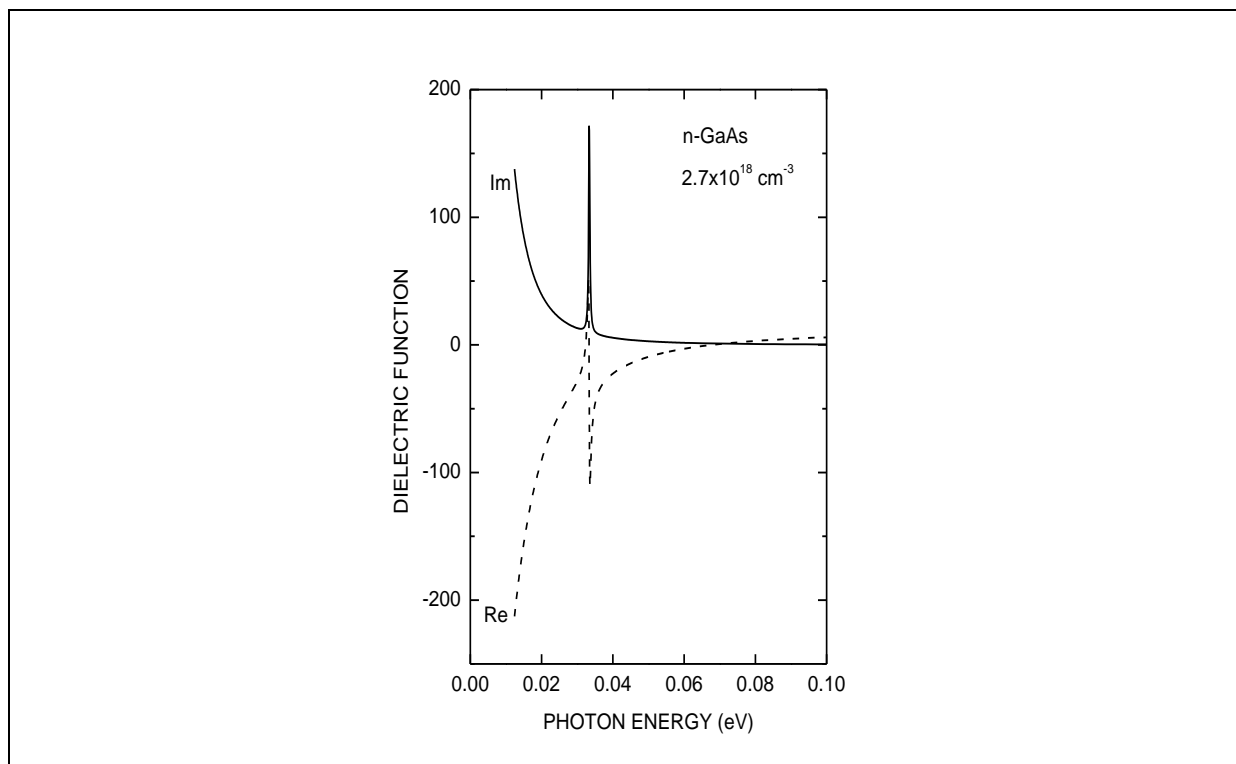
Obr. 2. Elektronová hustota valenčních stavů v GaAs.

Elektronová pásová struktura – přechody mezi obsazenými valenčními a prázdnými vodivostními stavy.

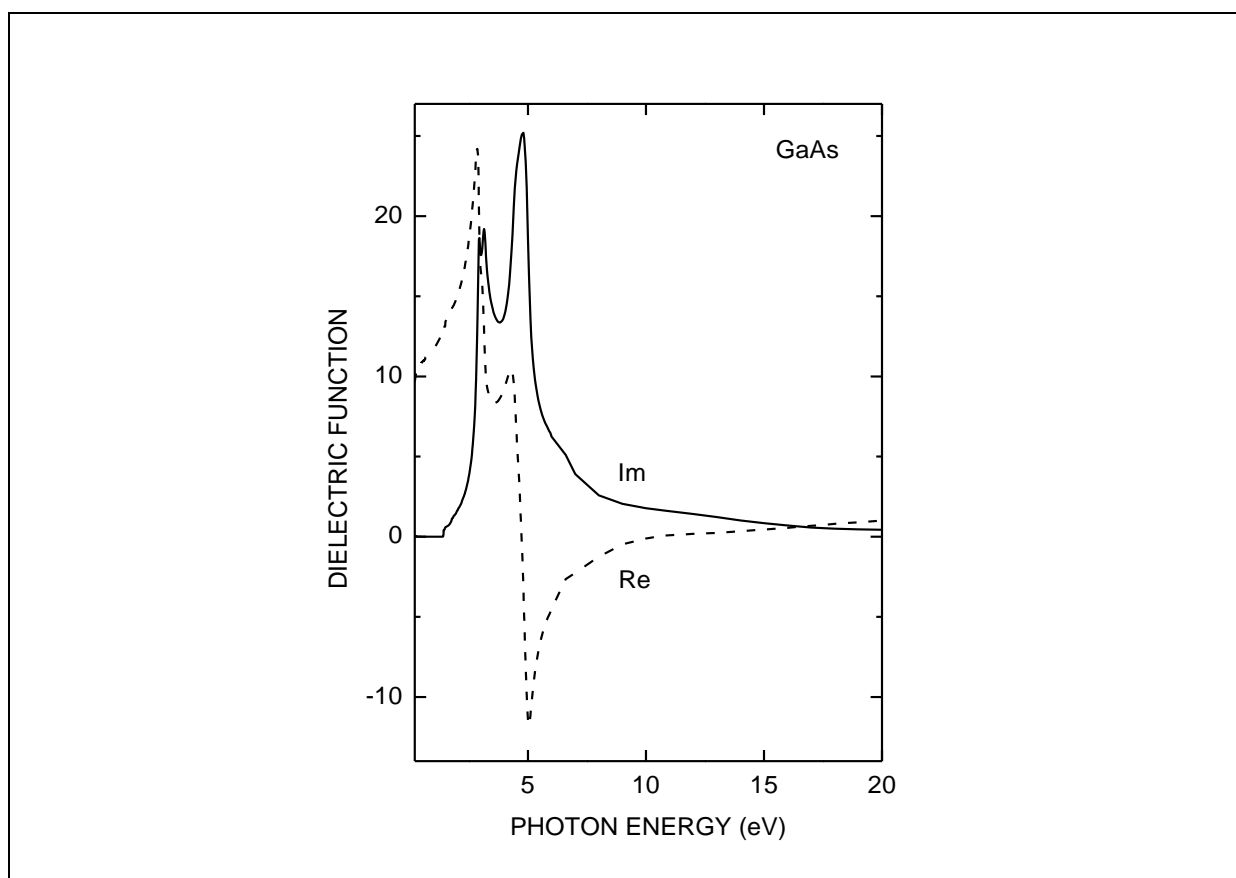


Obr. 3. Pásová struktura GaAs.

Charakteristická spektra optických konstant – dopovaný GaAs

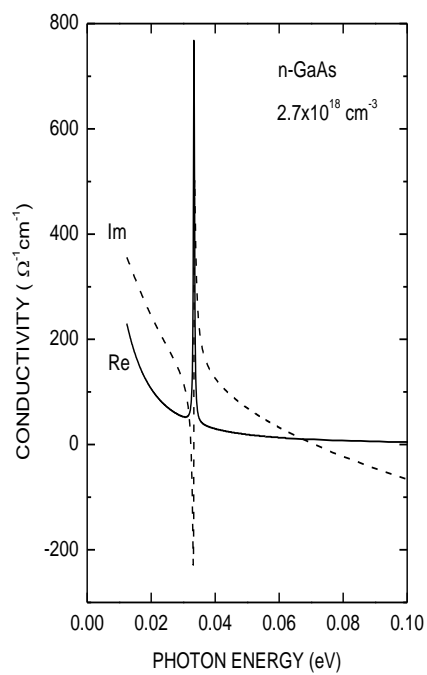


Obr. 4a. Spektra permitivity GaAs v IR.

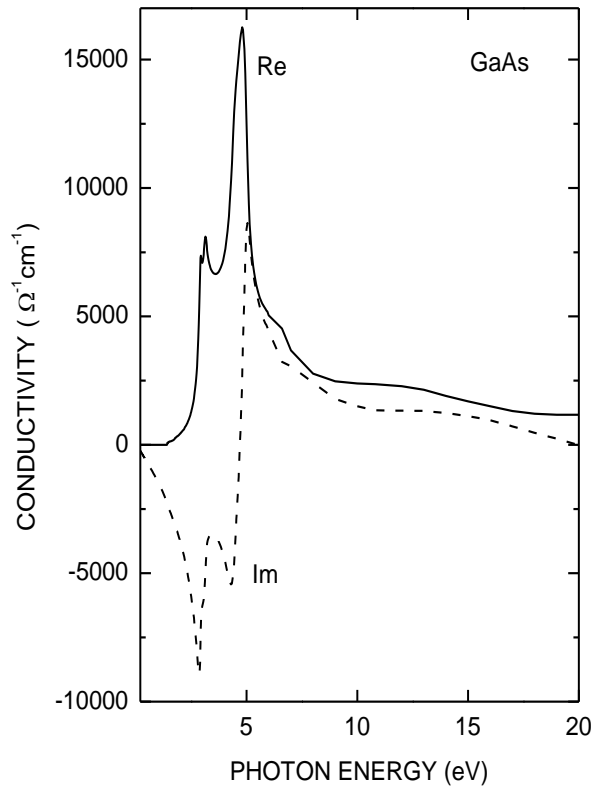


Obr. 4b. Spektra permitivity GaAs v NIR-VIS-UV.

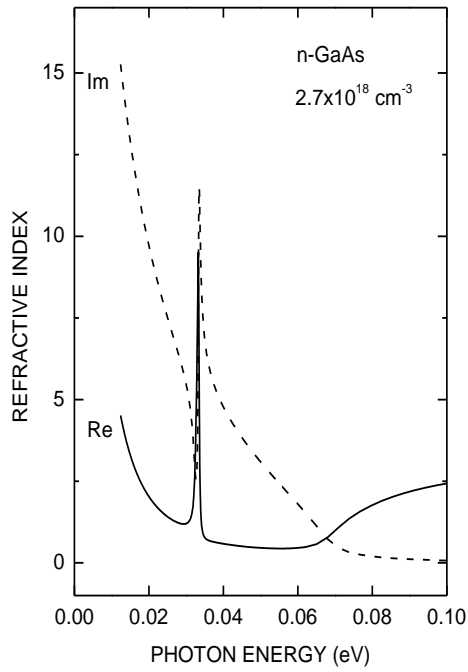




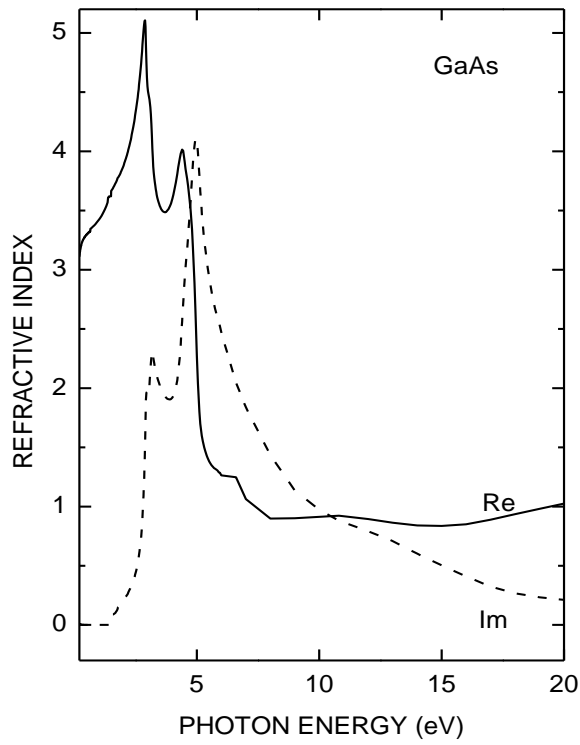
Obr. 5a. Spektra vodivosti GaAs v IR.



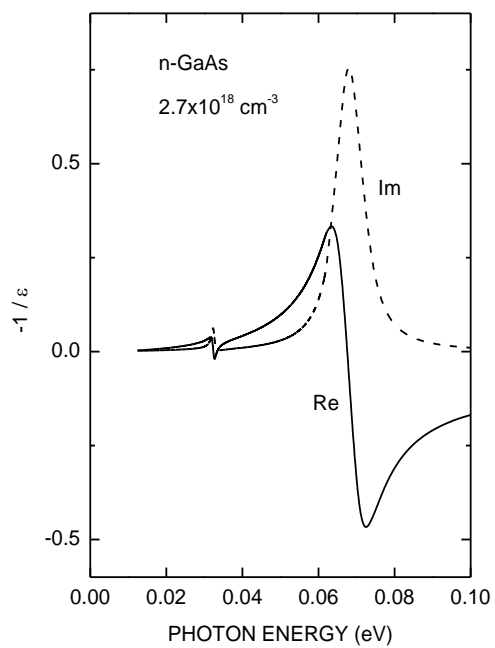
Obr. 5b. Spektra vodivosti GaAs v NIR-VIS-UV.



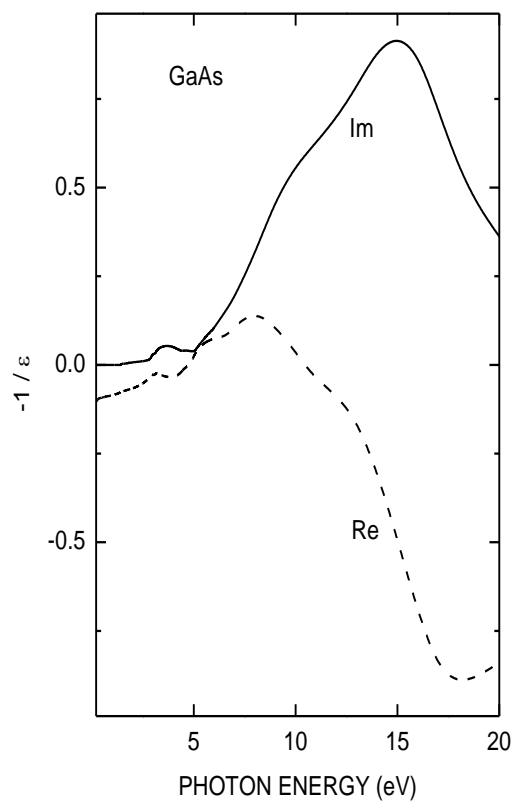
Obr. 6a. Spektra indexu lomu GaAs v IR.



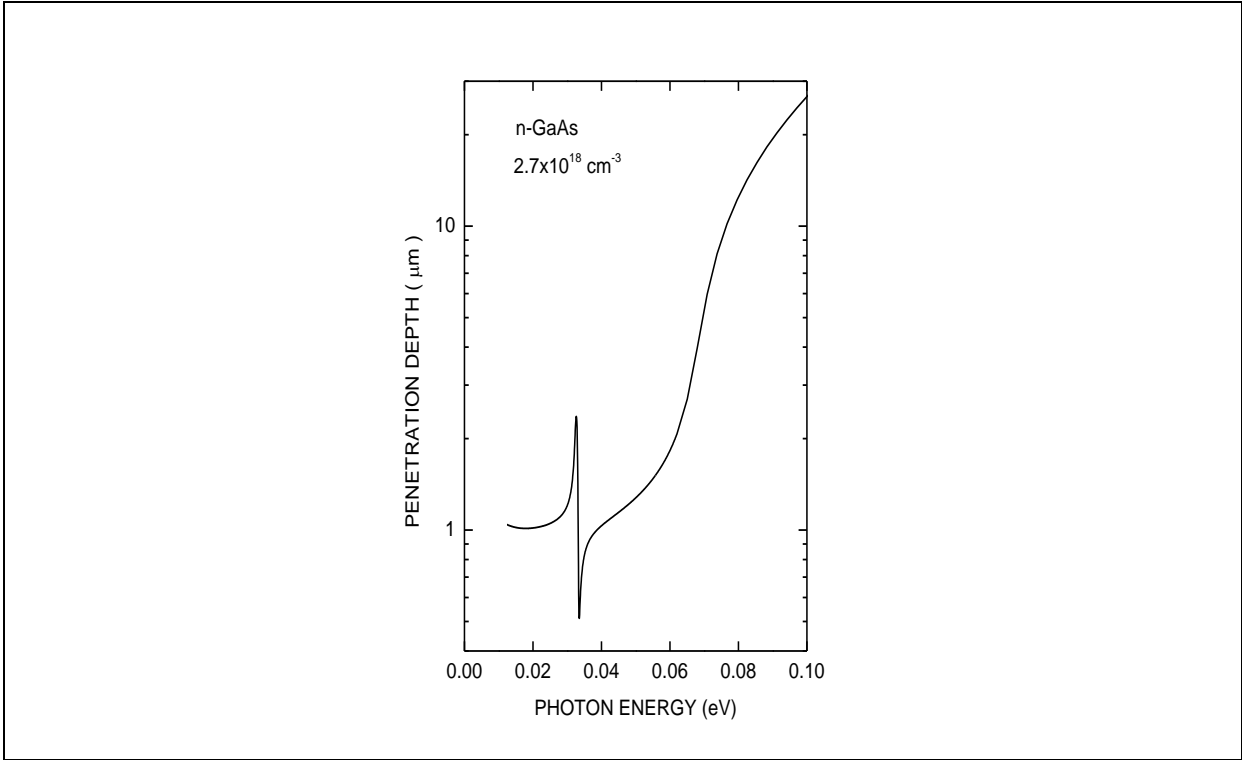
Obr. 6b. Spektra indexu lomu GaAs v NIR-VIS-UV.



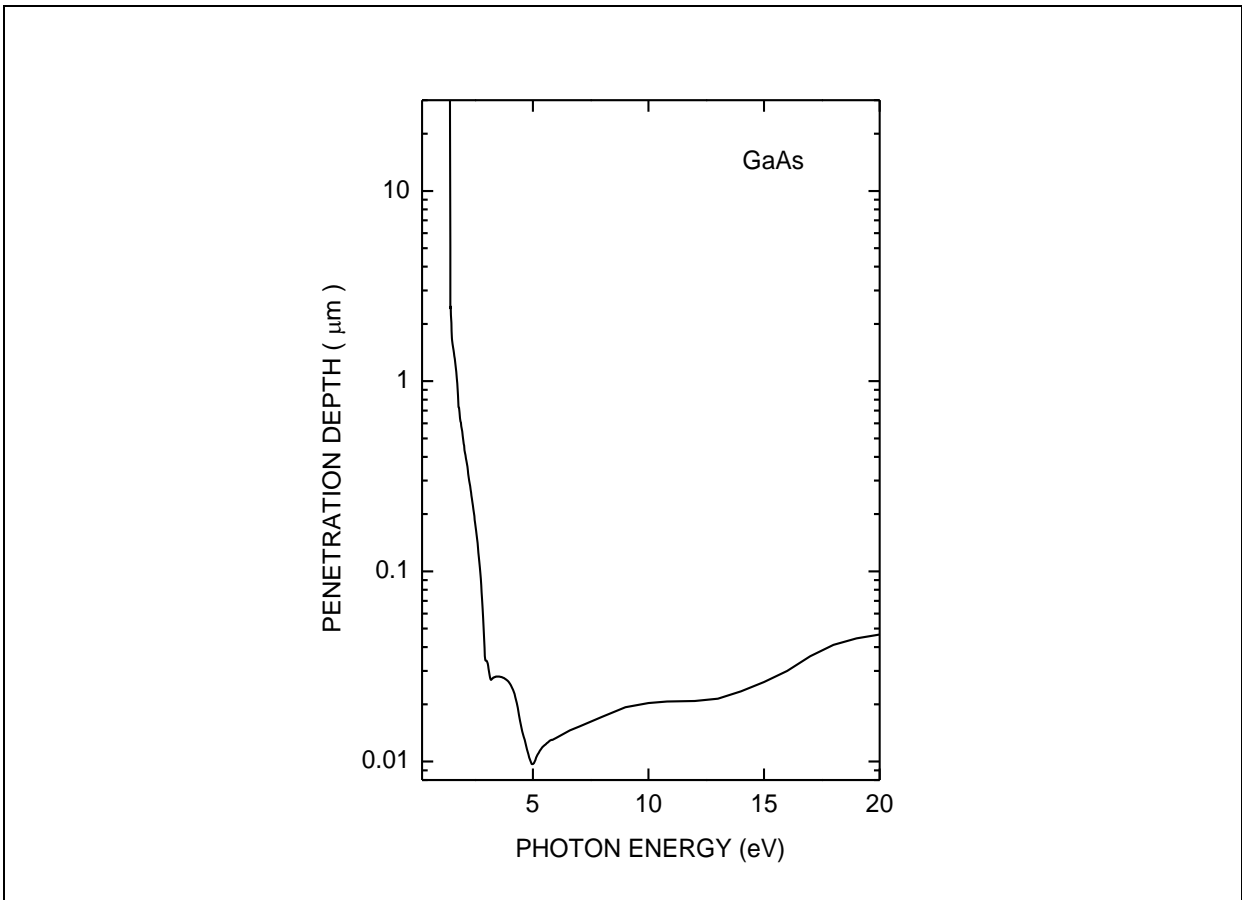
Obr. 7a. Spektra  $-1/\epsilon$  GaAs v IR.



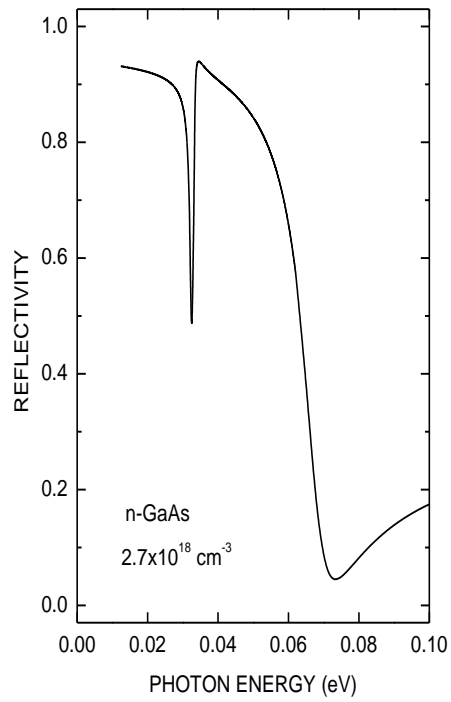
Obr. 7b. Spektra  $-1/\epsilon$  GaAs v NIR-VIS-UV.



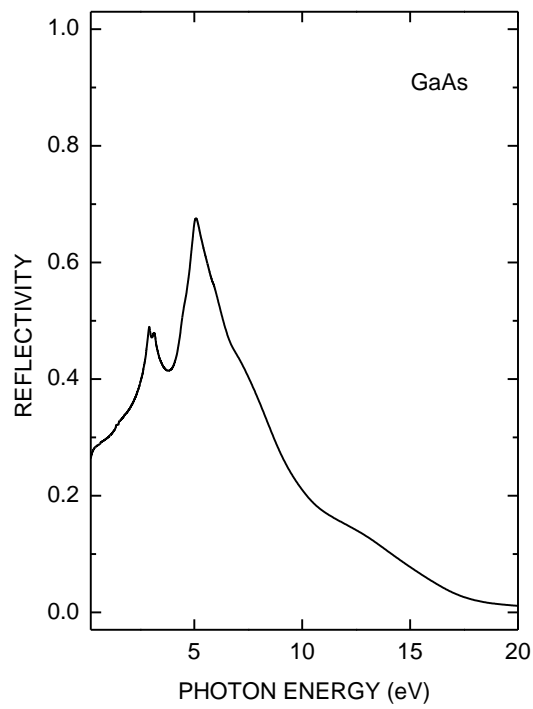
Obr. 8a. Spektra hloubky průniku GaAs v IR.



Obr. 8b. Spektra hloubky průniku GaAs v NIR-VIS-UV.



Obr. 9a. Spektra kolmé reflektivity GaAs v IR.



Obr. 9b. Spektra kolmé reflektivity GaAs v NIR-VIS-UV.