

# ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΦΩΤΟΝΙΟΥ-ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟΥ



## 1.1 Εισαγωγή

Στις παρακάτω παραγράφους θα μελετήσουμε εκείνα τα φαινόμενα αλληλεπίδρασης φωτός (φωτόνια) και ύλης στα οποία εξαιτίας της απορροφήσεως φωτονίων ηλεκτρόνια διεγείρονται σε υψηλότερες ενεργειακές καταστάσεις. Επίσης θεωρούμε ότι η αρχική κατάσταση του ηλεκτρονίου αντιστοιχεί σε μια κατάσταση της ταινίας σθένους (*valence band, Valenzband*) την οποία ταινία θεωρούμε πλήρως κατειλημμένη, ενώ η τελική κατάσταση σε μια κατάσταση της ταινίας αγωγιμότητας (*conduction band, Leitungsband*) την οποία θεωρούμε εντελώς άδεια. Συνεπώς θα μελετήσουμε το φαινόμενο της διαταινιακής ηλεκτρονικής απορροφήσεως (οπτική απορρόφηση) εξαιτίας μεταπτώσεων ηλεκτρονίων (σε αντιδιαστολή με τη φωνονική απορρόφηση λόγω της απορροφήσεως φωνονίων) στους ημιαγωγούς (*semiconductors, Halbleiter*) και μονωτές (*insulators, Isolatoren*).

Το Σχήμα 1.1-1 παριστά τυπικά πειραματικά αποτελέσματα μετρήσεων οπτικών παραμέτρων ημιαγωγών. Συγκεκριμένα το Σχήμα 1.1-1α παριστά το φάσμα ανακλαστικότητας του *Ge* για ενέργειες έως 20 eV. Αντίστοιχα, το Σχήμα 1.1-1β και το Σχήμα 1.1-1γ απεικονίζουν αντίστοιχα το πραγματικό,  $\epsilon_1(\omega)$ , και το φανταστικό,  $\epsilon_2(\omega)$ , μέρος της μιγαδικής διηλεκτρικής συναρτήσεως  $\epsilon(\omega)$ , που προήλθαν από το φάσμα ανακλαστικότητας  $R(\omega)$ , το οποίο είναι και το άμεσα πειραματικά μετρούμενο μέγεθος. Το γεγονός ότι είναι δυνατόν να προσδιοριστούν και τα δύο μέρη της διηλεκτρικής συναρτήσεως  $\epsilon(\omega)$  από το πειραματικό φάσμα  $R(\omega)$  οφείλεται στην ισχύ των σχέσεων *Kramers-Kronig* (*Kramers-Kronig relations, Kramers-Kronig-Beziehungen*) (βλέπε Υποενότητα 2.10), οι οποίες επιτρέπουν τον προσδιορισμό του πραγματικού (φανταστικού) μέρους μιας μιγαδικής συναρτήσεως, αν είναι γνωστό το φανταστικό (πραγματικό) μέρος της.

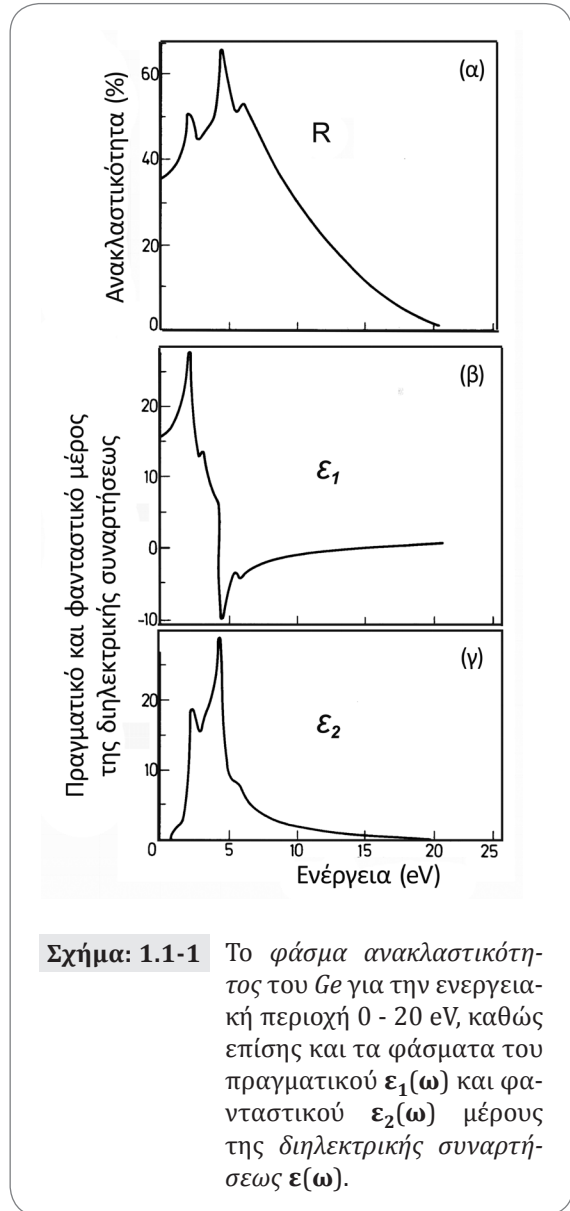
Για την περαιτέρω συζήτησή μας το πλέον βασικό μέρος στο Σχήμα 1.1-1 είναι το 1.1.1γ, καθόσον, όπως θα δούμε πιο κάτω, η  $\epsilon_2(\omega)$  είναι το καθοριστικό μέγεθος για την παρατηρούμενη ηλεκτρονική απορρόφηση. Από τα βασικά χα-

ρακτηριστικά της συναρτήσεως  $\epsilon_2(\omega)$  είναι η ύπαρξη ενός ενεργειακού κατωφλίου πάνω από το οποίο παρατηρείται μια περιοχική υψηλής απορροφήσεως με σημαντική δομή (*Structure, Struktur*) (εμφάνιση κορυφών), ενώ για ακόμη υψηλότερες ενέργειες η απορρόφηση φθίνει για να καταστεί τελικά μηδενική.

Το φάσμα της  $\epsilon_2(\omega)$  που απεικονίζεται στο Σχήμα 1.1-1γ είναι, εν πολλοίς, τυπικό για όλους τους ημιαγωγούς και μονωτές. Το μόνο που διαφοροποιείται στα διάφορα υλικά είναι οι ενεργειακές θέσεις των επιμέρους δομών, καθώς επίσης και τα επιμέρους χαρακτηριστικά των, π.χ. σχετικό ύψος, εύρος, μορφή και αριθμός κορυφών. Η ενέργεια κατωφλίου (*threshold energy, Schwellenenergie*) αντιστοιχεί στην ελάχιστη ενεργειακή απόσταση του μεγίστου της ταινίας σθένους από το ελάχιστο της ταινίας αγωγιμότητας. Η περιοχή αυτή ονομάζεται και *απαγορευμένη ζώνη (forbidden zone, verbotene Zone)*, καθώς σ' αυτή την ενεργειακή περιοχή δεν ενδύσκονται επιτρεπτές καταστάσεις του εν λόγω υλικού.

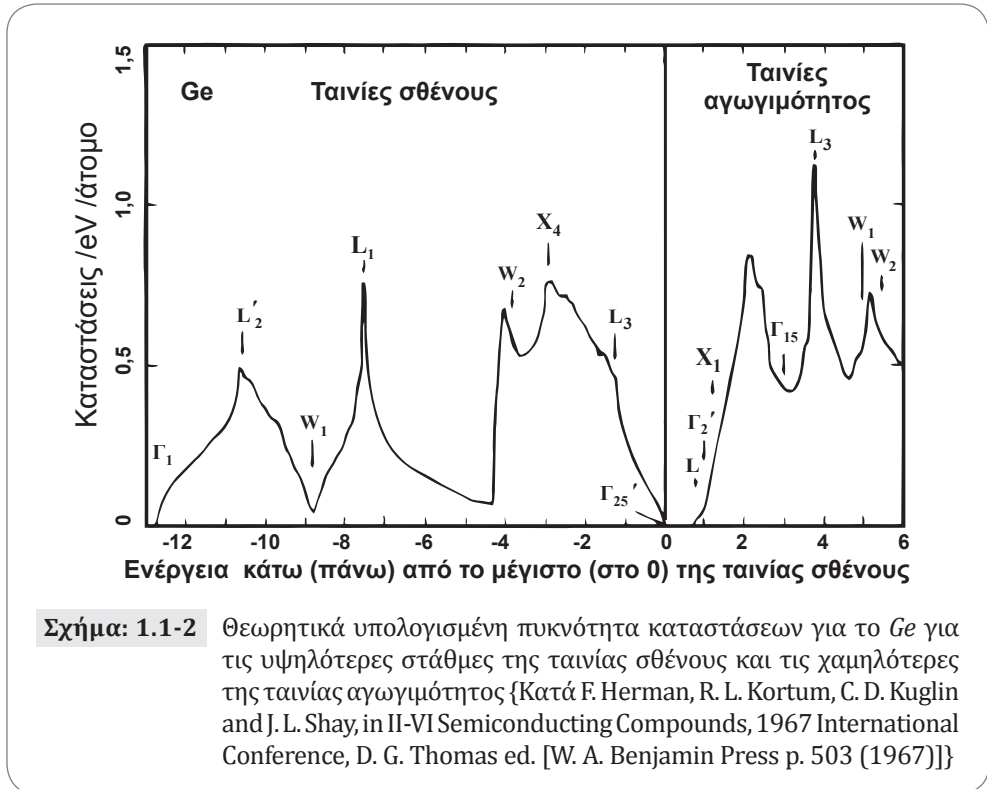
Η ενέργεια κατωφλίου είναι το ελάχιστο ποσό ενέργειας που πρέπει να μεταφερθεί σε ένα ηλεκτρόνιο, ώστε αυτό να μπορέσει να μεταπηδήσει από την ταινία σθένους στην ταινία αγωγιμότητας, και στο Σχήμα 1.1-1γ αντιστοιχεί στο σημείο όπου το  $\epsilon_2(\omega)$  αρχίζει να είναι διάφορο του μηδενός. Οι δομές που παρουσιάζονται στο φά-

σμα της  $\epsilon_2(\omega)$  αφορούν, καθώς δημιουργούνται εξαιτίας των μεταπτώσεων ηλεκτρονίων από την ίδια ή κάποια άλλη, διαφορετική, κατάσταση της ταινίας σθένους, σε ενεργειακά υψηλότερες καταστάσεις της ταινίας αγωγιμότητας.



**Σχήμα: 1.1-1** Το φάσμα ανακλαστικότητας του Ge για την ενεργειακή περιοχή 0 - 20 eV, καθώς επίσης και τα φάσματα του πραγματικού  $\epsilon_1(\omega)$  και φανταστικού  $\epsilon_2(\omega)$  μέρους της διηλεκτρικής συναρτήσεως  $\epsilon(\omega)$ .

Η συνεισφορά της κάθε μιας από τις επιμέρους μεταπτώσεις στην  $\epsilon_2(\omega)$  εξαρτάται ισχυρά **i)** από το σημείο της ζώνης του Brillouin όπου ευρίσκονται τόσο η αρχική όσο και η τελική κατάσταση, **ii)** από το πόσο μεγάλη είναι η πυκνότητα καταστάσεων στα σημεία αυτά και **iii)** από το εάν, με βάση τη συμμετρία των εμπλεκόμενων καταστάσεων του υλικού και τη συμμετρία της διεργασίας που προκαλεί τη σύζευξη των εν λόγω καταστάσεων, είναι επιτρεπτή ή όχι αυτή η σύζευξη.



Για να δείξουμε την πολυπλοκότητα του προβλήματος, στο Σχήμα 1.1-2 απεικονίζεται η πυκνότητα καταστάσεων για το πάνω μέρος της ταινίας σθένους και το κάτω μέρος της ταινίας αγωγιμότητας του Ge που υπολογίστηκε θεωρητικά και όπου, πράγματι, φαίνονται καθαρά τόσο η πολυπλοκότητα του φάσματος όσο και τα εύρη των διαφόρων ταινιών. Από το Σχήμα 1.1-2 προκύπτει σαφέστατα το πόσο απέχει η παραπάνω εικόνα από τη γνωστή μας εικόνα των διακεκριμένων και πολύ στενών σταθμών που παρατηρούνται στα άτομα ή στα απλά μόρια. Έτσι, για τους ενδογενείς ημιαγωγούς (*Intrinsic semiconductors, Eigenhalbleiter*), θα περίμενε κανείς ότι οι μεταπτώσεις θα ήταν επιτρεπτές απ' όλες τις ταινίες της ζώνης σθένους προς όλες τις ταινίες της ζώνης αγωγιμότητας, δημιουργώντας έτσι ένα αρκετά ευρύ φάσμα (μερικών eV). Τα πράγματα όμως, όπως θα δούμε πιο κάτω, δεν είναι ακριβώς έτσι, αλλά δημιουργείται μια ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ αυτής των στενών ταινιών (απλών μορίων) και των ευρέων ταινιών.

Η πιο απλή περίπτωση αλληλεπιδράσεως φωτονίου-ηλεκτρονίου είναι βέβαια να μη συμμετέχει σ' αυτή καμιά άλλη στοιχειώδης διέγερση [π.χ. *φωνόνια* (*phonons, Phononen*), *προσμίξεις* (*impurities, Verunreinigungen*), *μαγνόνια* (*magnons, Magnonen*), *πολαρόνια* (*polarons, Polaronen*), *πολαριτόνια* (*polaritons, Polaritonen*) κ.λπ.]. Ένα άλλο σημείο που επίσης θεωρούμε ότι ισχύει στη μελέτη μας είναι το εξής: Επειδή οι ενέργειες που υπεισέρχονται στις θεωρούμενες αλληλεπιδράσεις είναι της τάξεως των μερικών  $eV$ , το κυματοδιάνυσμα  $\mathbf{k}$  του φωτονίου

$$|\mathbf{k}| = E / \hbar c \quad (1.1.1)$$

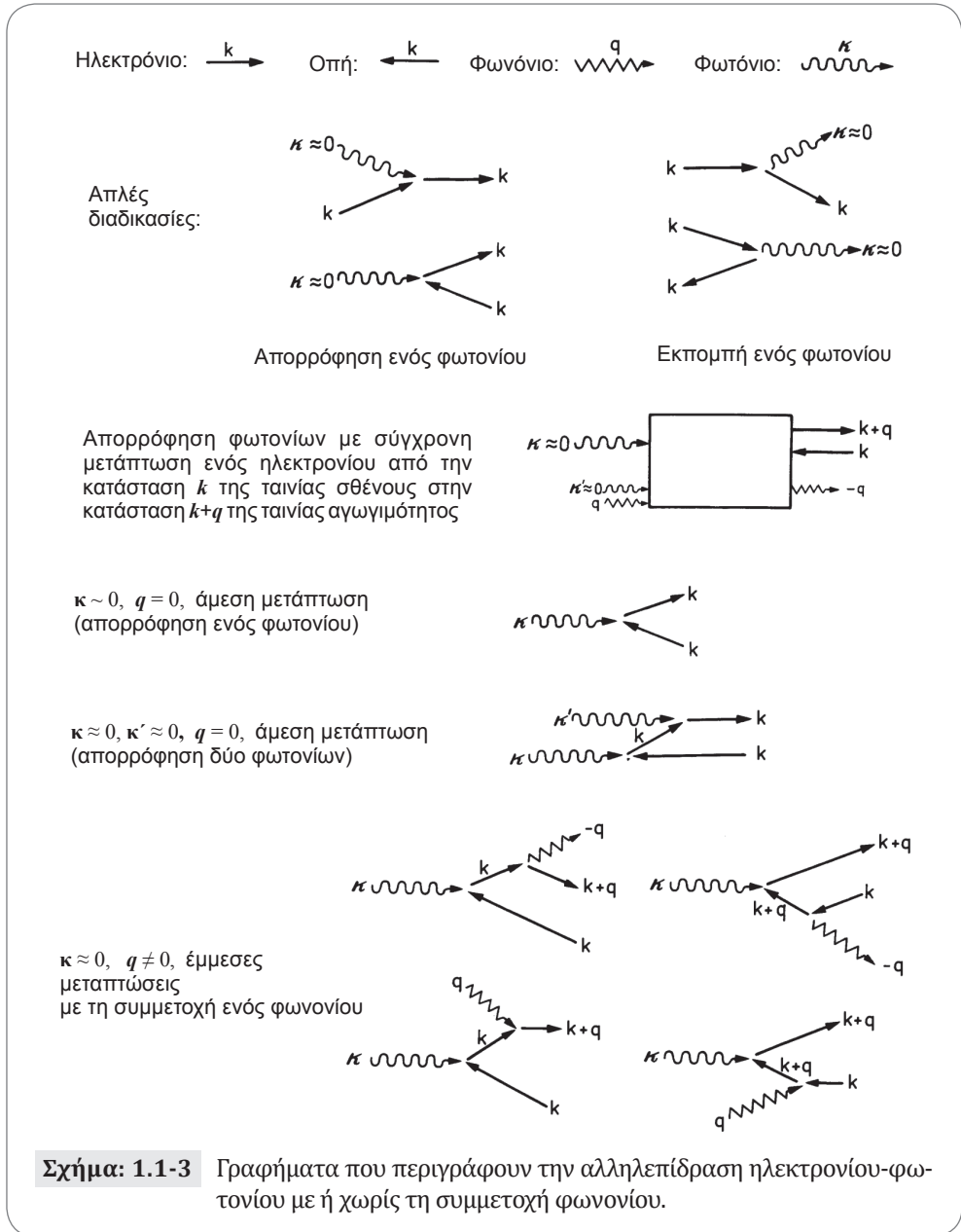
είναι της τάξεως  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ , τρεις τάξεις μικρότερες από τις διαστάσεις της ζώνης του Brillouin, που είναι της τάξεως των  $10^8 \text{ cm}^{-1}$ . Έτσι, η προσέγγιση ότι, σε σχέση με το *κυματοδιάνυσμα*  $\mathbf{k}$  του ηλεκτρονίου και του *φωνονίου*  $\mathbf{q}$ , το *κυματοδιάνυσμα*  $\mathbf{k}$  του φωτονίου είναι περίπου ίσο με μηδέν, δηλαδή  $\mathbf{k} \sim \mathbf{0}$ , είναι μια προσέγγιση η οποία και πειραματικά αποδεικνύεται ότι ευρίσκεται πολύ κοντά στην πραγματικότητα.

Στο Σχήμα 1.1-3 απεικονίζονται συγκεντρωτικά, και για λόγους ευκολίας υπό μορφή γραφημάτων, οι διάφορες επιμέρους αλληλεπιδράσεις που εμπλέκονται κατά τη διαδικασία της διεγέρσεως ενός ηλεκτρονίου από την ταινία σθένους στην ταινία αγωγιμότητας και στη συνέχεια της *ανασυζεύξεως* του ηλεκτρονίου με τη δημιουργηθείσα *σπή* με τη σύγχρονη εκπομπή ενός φωτονίου (*ακτινοβόλος ανασύζευξη*).

Η συγκεκριμένη διαδικασία που θα περιγράψουμε στα παρακάτω συνίσταται στη μετάπτωση ενός ηλεκτρονίου από την κατάσταση  $\mathbf{k}$  της ταινίας σθένους στην κατάσταση  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  της ταινίας αγωγιμότητας. Κατά τη θεώρηση αυτή θα πρέπει να λάβουμε υπόψιν μας τις παρακάτω τρεις προϋποθέσεις:

1. Η μετάπτωση θα πρέπει είτε να αποτελεί από μόνη της μια από τις αυτοτελείς διαδικασίες που απεικονίζονται στο Σχήμα 1.1-3 είτε να αποτελείται από επιμέρους αυτοτελείς διαδικασίες με *δυνατές* (*virtual, Virtuelle*) ενδιάμεσες καταστάσεις.
2. Οι επιμέρους αυτοτελείς διαδικασίες πρέπει να είναι επιτρεπτές, δηλαδή τα *πινακοστοιχεία* της μεταπτώσεως (*matrix elements, Matrixelementen*) να μη μηδενίζονται για όλες τις συμμετρίες των εμπλεκόμενων καταστάσεων και *τελεστών αλληλεπιδράσεων* (*interaction operators, Wechselwirkungsoperatoren*).
3. Η ορμή οφείλει να διατηρείται σε κάθε επιμέρους στάδιο της διαδικασίας, ενώ η ενέργεια οφείλει να διατηρείται μεταξύ αρχικής και τελικής καταστάσεως, όχι όμως και στα επιμέρους στάδια. Αυτό είναι δυνατόν να συμβεί γιατί ο χρόνος ζωής των ενδιαμέσων καταστάσεων είναι πάρα πολύ μικρός και έτσι η σχέση αβεβαιότητας μεταξύ χρόνου και ενέργειας μπορεί να δικαιολογήσει τη μη διατήρηση της ενέργειας. Βέβαια, αντίστοιχη παραβίαση της

διατηρήσεως της ορμής μπορεί να εμφανισθεί σε συστήματα με υψηλή χωρική απροσδιοριστία. Τέτοια συστήματα είναι τα μικροκρυσταλλικά συστήματα ή συστήματα όπου παρατηρείται παραβίαση της κρυσταλλικής συμμετρίας του υλικού σε μακροσκοπική κλίμακα, π.χ. άμορφα υλικά. Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό με τον όρο *ατόνηση του κανόνα της διατηρήσεως του κυματανύσματος* (*k relaxation rule, k-Erhaltungsregelrelaxation*).



Αν  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ , είναι δυνατόν να σημειωθούν μόνο άμεσες μεταπτώσεις (*direct transitions, Direkte Übergänge*). Οι μεταπτώσεις αυτές ονομάζονται και κάθετες επειδή λαμβάνουν χώρα στο ίδιο σημείο της ζώνης του Brillouin ( $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ ). Επίσης, η διατήρηση της ενέργειας είναι δυνατόν ν' απαιτήσει τη διαδοχική απορρόφηση πλέον του ενός φωτονίου. Αυτού του είδους η απορρόφηση είναι γνωστή με τον όρο *πολυφωτονική απορρόφηση (multi photon absorption, Mehrphotonenabsorption)*.

Αν  $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ , δηλαδή η διαδικασία παύει να είναι απλή (δηλαδή συμμετέχουν περισσότερες από δύο διεγέρσεις, π.χ. φωτόνιο, φωνόνιο, ηλεκτρόνιο), η ορμή μπορεί να διατηρηθεί μόνο εφόσον απορροφάται ή εκπέμπεται αντίστοιχα ένα φωνόνιο ορμής  $\mathbf{q}$  ή  $-\mathbf{q}$ . Οι μεταπτώσεις αυτές ονομάζονται έμμεσες μεταπτώσεις (*indirect transitions, Indirekte Übergänge*).

Η μελέτη των παραπάνω κατηγοριών μεταπτώσεων θα γίνει στην προσέγγιση της διπολικής ροπής (*dipole transition approximation, Dipolübergang Näherung*) και στην ημικλασική προσέγγιση (*semi classical approximation, Halbklassische Näherung*). Αυτό σημαίνει ότι, για λόγους οι οποίοι αναφέρθηκαν και συζητήθηκαν παραπάνω, θεωρούμε ότι **i)** το κυματοδιάνυσμα του φωτονίου είναι ίσο με μηδέν,  $\mathbf{k} \sim \mathbf{0}$ , και **ii)** τη μεν ακτινοβολία τη μελετάμε κλασικά το δε υλικό με το οποίο αλληλεπιδρά, κυρίως ημιαγωγοί στις περισσότερες περιπτώσεις, κβαντομηχανικά. Αποδεικνύεται [Bassani and Altarelli· Τραχανάς] ότι η προσέγγιση αυτή περιγράφει πολύ ικανοποιητικά την πλειονότητα των παρατηρούμενων διατακτικών μεταπτώσεων στους ημιαγωγούς και μέταλλα και ότι μόνο σε εξαιρετικές περιπτώσεις, όπως όταν δημιουργούνται πολαριτόνια (*polaritons, Polaritonen*) ή όταν για λόγους συμμετρίας μηδενίζονται διάφορα πινακοστοιχεία ή, τέλος, όταν το υλικό μας εμφανίζει ισχυρή χωρική ανισοτροπία (*spatial anisotropy, Raumanisotropie*) απαιτείται η θεώρηση της επακριβούς εξαρτήσεως των διαφόρων μεγεθών από το κυματοδιάνυσμα (βλέπε Agranovich and Ginzburg και Agranovich and Mills).