

Оптика наносистем



Тимошенко Виктор Юрьевич

*Московский Государственный Университет
им. М. В. Ломоносова, Физический факультет
Научно-Образовательный Центр по нанотехнологиям*

Содержание курса

Лекция 1. Основные понятия оптики конденсированных фаз вещества.

Лекция 2. Взаимодействие света с металлами и диэлектриками.

Лекция 3. Поглощение света в полупроводниках.

Лекция 4. Экситонное и примесное поглощение света.

Лекция 5. Эмиссия излучения из твердых тел.

Лекция 6. Оптические явления в неоднородных твердотельных системах.

Лекция 7. Оптические свойства твердотельных наноконкомпозитов.

Лекция 8. Фотонные кристаллы и микрорезонаторы.

Лекция 9. Рассеяние света в твердых телах.

Лекции 10,11. Влияние размеров тел на их оптические свойства.

Лекции 12-14. Экситоны в полупроводниковых наноструктурах.

Лекция 15. Оптические свойства и применения полупроводниковых наноструктур.

Лекция 16. Элементы спиновой оптики и спинтроники.

Лекция 17. Нелинейные оптические явления в твердотельных системах.

Лекция 18. Элементы нелинейной оптики наноструктур и наноконкомпозитов.

Лекция 1. Основные понятия оптики конденсированных фаз вещества.

Классификация твердых тел по размерности, электронным и оптическим свойствам. Уравнения Максвелла для среды с поглощением. Волновое уравнение. Комплексный показатель преломления и диэлектрическая проницаемость. Соотношения Крамерса-Кронига. Отражение света от границы раздела двух сред. Формулы Френеля. Угол Брюстера. Понятие о брюстеровской спектроскопии уровней и эллипсометрии. Особенности описания оптических свойств наносистем и наноккомпозитов

Основные понятия оптики конденсированных сред

В оптике изучают явления распространения и взаимодействия с веществом электромагнитного излучения с длиной волны: $10 \text{ нм} < \lambda < 1 \text{ мм}$.

Видимый свет соответствует спектральному диапазону: $400 \text{ нм} < \lambda < 800 \text{ нм}$.

Оптические явления:

поглощение, испускание, преломление, отражение и рассеяние света.

Конденсированные среды:

Твердые тела, жидкости, плотная плазма

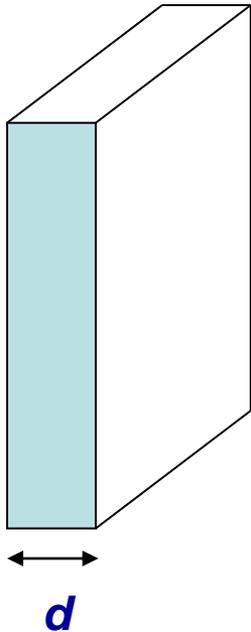
Классификация твердых тел по размерности, электронным и оптическим свойствам

- Твердые тела можно классифицировать по степени упорядоченности кристаллической структуры: *Кристаллы и аморфные тела*, а также по электронным свойствам: *металлы, полупроводники, диэлектрики. Это все 3D-системы.*
- Твердотельные системы пониженной размерности классифицируются по порядку размерности (числу геометрических направлений, по которым возможно свободное распространение частиц, квазичастиц или волн).
- *2D – двумерные системы*, например, поверхности, границы раздела, тонкие слои, квантовые ямы;
- *1D – одномерные системы*, например, нитевидные кристаллы, ступеньки и атомные цепочки на поверхности, квантовые нити;
- *0D – нульмерные системы*, например, малые частицы, нанокристаллы, квантовые точки.

Основные типы идеальных твердотельных наноструктур

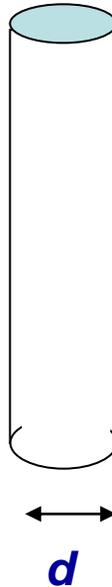
2D

Квантовая
яма



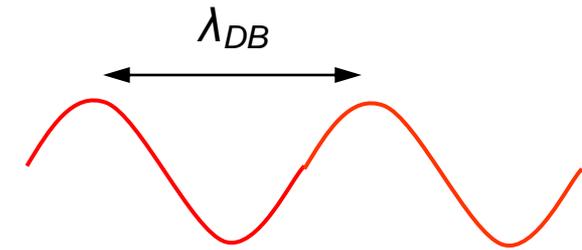
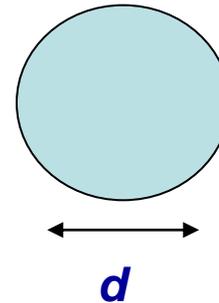
1D

Квантовая
нить



0D

Квантовая
точка



$$d \sim \lambda_{DB} = h / p$$

p – квазиимпульс
электрона или
дырки в кристалле

Для электрона в полупроводнике с $m_e^* = (0.1-1) m_0$: $3 \text{ нм} < \lambda_{DB} < 30 \text{ нм}$

В наноструктурах с минимальными размерами 1 -100 нм электроны, дырки и другие квазичастицы будут испытывать ограничения при движении, что приводит к **квантовому размерному эффекту**.

Уравнения Максвелла в среде с поглощением.

Оптические характеристики однородной и изотропной среды

Уравнения Максвелла в дифференциальной форме (система единиц СИ):

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \\ \operatorname{div} \vec{D} = \rho \\ \operatorname{div} \vec{H} = 0 \end{cases}$$

Материальные уравнения:

$$\begin{cases} \vec{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E} \\ \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H} \\ \vec{j} = \sigma \vec{E} \end{cases}$$

где $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м и $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м – постоянные.

Предполагается однородность и изотропность среды: величины ε (диэлектрическая проницаемость), μ (магнитная проницаемость) и σ (удельная проводимость) – постоянны в пространстве. В дальнейшем, если специально не оговорено, будем полагать, что среда немагнитная ($\mu \approx 1$), и отсутствуют объемные заряды ($\rho = 0$).

Волновое уравнение

Из уравнений Максвелла и материальных уравнений получим:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \vec{B} = -\mu_0 \mu \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \vec{H} = -\mu_0 \mu \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \right) = \\ &= -\mu_0 \mu \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} - \mu_0 \mu \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} = -\mu_0 \epsilon_0 \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu_0 \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \end{aligned}$$

С учетом соотношения

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{E} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{E} - \Delta \vec{E}$$

Приходим к волновому уравнению:

$$\Delta \vec{E} = \mu_0 \epsilon_0 \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

В случае распространения плоской волны вдоль оси z :

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial z^2} = \mu_0 \epsilon_0 \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Решением является уравнение волны:

$$\frac{k^2}{\omega^2} = \mu_0 \epsilon_0 \mu \epsilon + i \frac{\mu_0 \mu \sigma}{\omega}$$

$$\mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2}$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp \left[-i\omega \left(t - \frac{z}{v} \right) \right] = \vec{E}_0 \exp [-i(\omega t - kz)]$$

$v = \frac{\omega}{k}$ – фазовая скорость волны.

где $c \approx 3 \cdot 10^8$ м/с – скорость света в вакууме

Комплексные диэлектрическая проницаемость и показатель преломления

Имеем соотношение:

$$\frac{c^2}{v^2} = \mu\varepsilon + i \frac{\mu_0 \mu \sigma c^2}{\omega}$$

Полагая $\mu = 1$, получим:

$$\frac{c^2}{v^2} = \varepsilon + i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$$

Комплексная диэлектрическая
проницаемость:

$$\frac{c^2}{v^2} = \tilde{n}^2 = \tilde{\varepsilon} = \varepsilon' + i\varepsilon'',$$

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon' + i\varepsilon''$$

$$\varepsilon' = \varepsilon \quad \varepsilon'' = \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$$

Комплексный показатель преломления:

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}}$$

$$\tilde{n} = n + ik$$

n – показатель преломления

k – показатель поглощения (коэффициент экстинкции).

Взаимосвязь оптических характеристик

$$\tilde{n}^2 = (n + ik)^2 = n^2 + 2ink - k^2 = \varepsilon' + i\varepsilon''$$

$$\varepsilon' = n^2 - k^2$$

$$\varepsilon'' = 2nk$$

$$k = \frac{\varepsilon''}{2n}, \quad \varepsilon' = n^2 - \left(\frac{\varepsilon''}{2n}\right)^2$$

$$n^2 = \frac{1}{2} \left(\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2} \right), \quad k^2 = \frac{1}{2} \left(-\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2} \right)$$

Соотношения Крамерса-Кронига:

$$\varepsilon'(\omega_0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega \varepsilon''(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega,$$

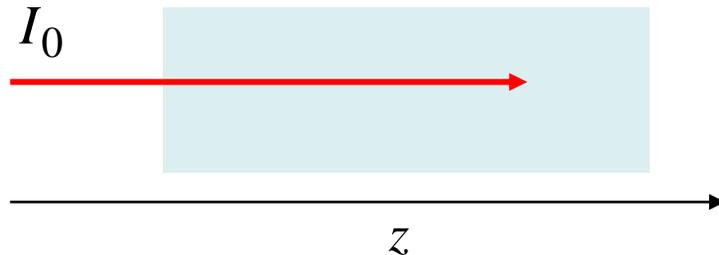
$$\varepsilon''(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon'(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

$$n(\omega_0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega k(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega,$$

$$k(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{n(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

Отражают принцип причинности, а именно, наличие поглощения на какой-либо длине волны ведет к появлению отличного от 1 показателя преломления и наоборот.

Поглощение света в однородной и изотропной среде



$$dI = -I \cdot \alpha \cdot dz$$

Закон Бугера - Ламберта-Бера: $I = I_0 \exp(-\alpha z)$

Коэффициент поглощения света: $\alpha = \alpha(\omega)$

Комплексное представление для электрического поля в э/м волне:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{\tilde{n}}{c}z\right)\right] = \vec{E}_0 \exp\left[-i\omega t + i\omega\frac{\tilde{n}}{c}z\right] = \vec{E}_0 \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{n}{c}z\right)\right] \exp\left(-\frac{\omega\kappa}{c}z\right)$$

Комплексный показатель преломления:

$$\tilde{n} \equiv n + i\kappa$$

Комплексная диэлектрическая проницаемость:

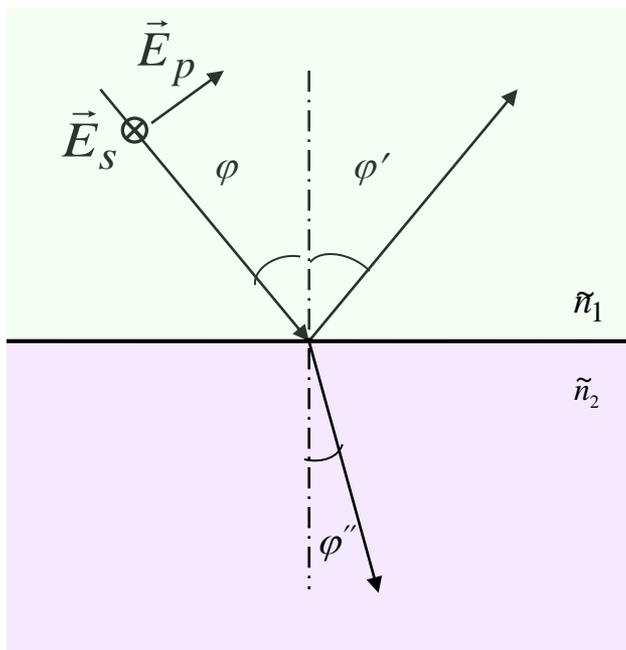
$$\tilde{\epsilon} \equiv \epsilon' + i\epsilon'' = \tilde{n}^2$$



$$\begin{aligned}\epsilon' &= n^2 - \kappa^2 \\ \epsilon'' &= 2n\kappa\end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c} = \frac{\omega\epsilon''}{cn}$$

Отражение света на границе однородных и изотропных сред



$$\vec{E} = \vec{E}_p + \vec{E}_s$$

Интенсивность света : $I \propto |\vec{E}|^2$

Закон отражения:

$$\varphi = \varphi'$$

Закон преломления:

$$\tilde{n}_1 \sin \varphi = \tilde{n}_2 \sin \varphi''$$

Для электрического поля отраженной волны справедливы формулы Френеля:

$$E'_s = -\frac{\sin(\varphi - \varphi'')}{\sin(\varphi + \varphi'')} E_s \quad E'_p = -\frac{\text{tg}(\varphi - \varphi'')}{\text{tg}(\varphi + \varphi'')} E_p$$

Коэффициенты пропускания T и отражения R :

$$T = \frac{I''}{I}, \quad R = \frac{I'}{I}, \quad \text{где } T + R = 1, \quad I' + I'' = I$$

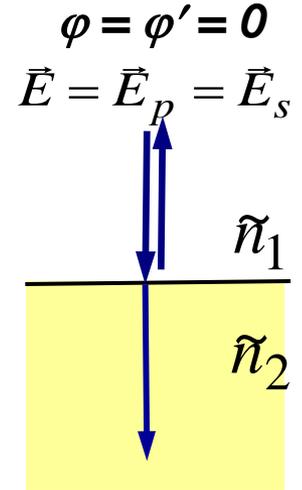
$$R_s = \left| \frac{E'_s}{E_s} \right|^2 = \left| \frac{\sin(\varphi - \varphi'')}{\sin(\varphi + \varphi'')} \right|^2,$$

$$R_p = \left| \frac{E'_p}{E_p} \right|^2 = \left| \frac{\text{tg}(\varphi - \varphi'')}{\text{tg}(\varphi + \varphi'')} \right|^2$$

Отражение света при нормальном падении

$$R_s = R_p = R = \left| \frac{\sin(\varphi - \varphi'')}{\sin(\varphi + \varphi'')} \right|^2 = \left| \frac{\sin \varphi \cos \varphi'' - \sin \varphi'' \cos \varphi}{\sin \varphi \cos \varphi'' + \sin \varphi'' \cos \varphi} \right|^2 =$$

$$= \left| \frac{\sin \varphi - \sin \varphi''}{\sin \varphi + \sin \varphi''} \right|^2 = \left| \frac{\tilde{n}_2 / \tilde{n}_1 - 1}{\tilde{n}_2 / \tilde{n}_1 + 1} \right|^2 = \left| \frac{\tilde{n}_2 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_2 + \tilde{n}_1} \right|^2 = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2},$$



Относительный комплексный показатель преломления:

$$\tilde{n} \equiv \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} \quad \tilde{n} = n + i\kappa$$

При достаточно слабом поглощении:

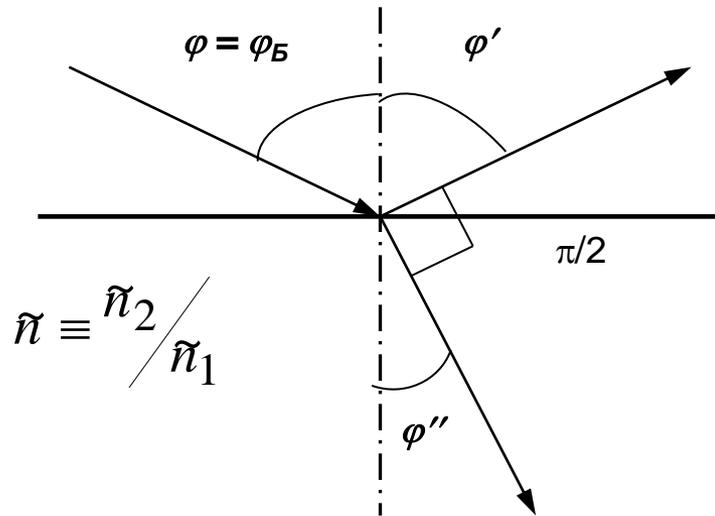
$$\tilde{n} \approx n \quad \Rightarrow \quad R \approx \left(\frac{n - 1}{n + 1} \right)^2$$

Можно выразить n через R :

$$n - 1 = (n + 1)\sqrt{R}, \quad n(1 - \sqrt{R}) = \sqrt{R} + 1 \quad \Rightarrow \quad n = \frac{1 + \sqrt{R}}{1 - \sqrt{R}}$$

Для прозрачной среды, измерив R можно рассчитать величину n .

Падение под углом Брюстера

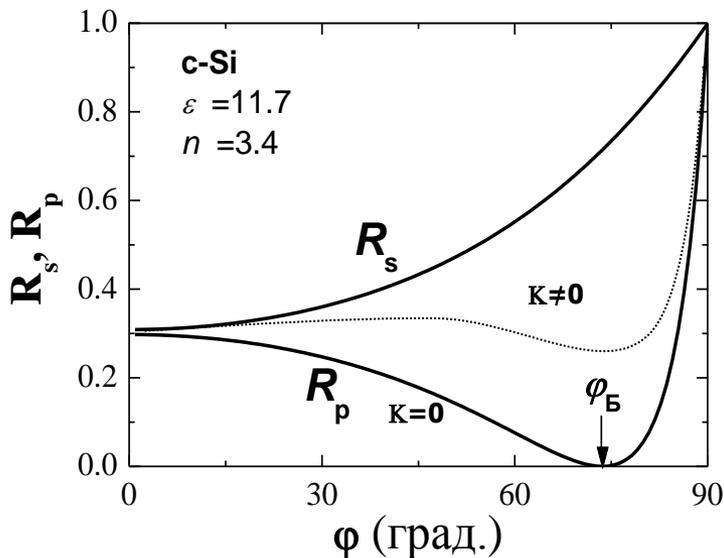


$$\varphi' + \varphi'' = \pi/2$$

$$\operatorname{tg}(\varphi_B + \varphi'') \rightarrow \infty$$

$$R_p = \left| \frac{\operatorname{tg}(\varphi - \varphi'')}{\operatorname{tg}(\varphi + \varphi'')} \right|^2 \rightarrow 0$$

$$\operatorname{tg} \varphi_B = \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} = \tilde{n}$$



На высокой чувствительности величины R_p к поглощению вблизи значения $\varphi \approx \varphi_B$ основан метод регистрации дефектов и примесей в полупроводниках, который носит название **брюстеровской спектроскопии глубоких уровней**. В данном методе появление поглощения на дефектных или примесных состояниях приводит к возрастанию R_p , измеряемому при углах падения близких к φ_B .

Понятие об эллипсометрии

Эллипсометрия – метод определения оптических характеристик веществ, основанный на измерении поляризационных зависимостей интенсивности отраженного света.

В точке отражения от поверхности падающая и отраженная световые волны могут быть представлены в виде:

$$\vec{E}_{s,p}(t) = \vec{E}_{s,p} \exp[-i(\omega t - \delta_{s,p})] \quad \vec{E}'_{s,p}(t) = \vec{E}'_{s,p} \exp[-i(\omega t - \delta'_{s,p})]$$

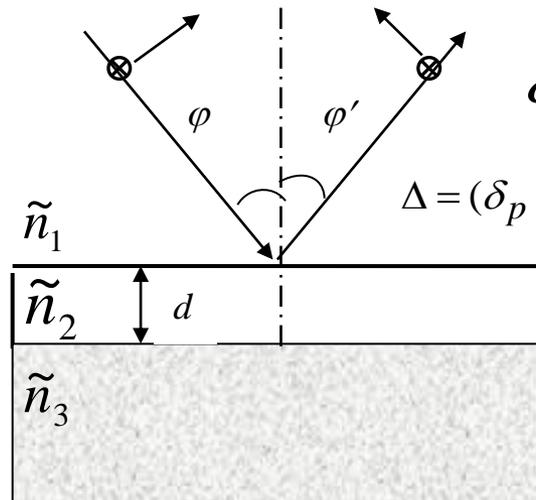
Основные уравнения эллипсометрии:

$$\left| \frac{E_p}{E_s} \right| = \operatorname{tg} \psi, \quad \left| \frac{E'_p}{E'_s} \right| = \operatorname{tg} \psi'$$

\tilde{n}_1

Зная Δ , ψ и ψ' , можно найти:

$$\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \text{ и } d$$



$$\delta'_{s,p}(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, d)$$

$$\Delta = (\delta_p - \delta'_p) - (\delta_s - \delta'_s) = (\delta_p - \delta_s) - (\delta'_p - \delta'_s)$$

- Высокая точность определения оптических констант вещества и толщин ($\Delta d \sim 1 \div 2 \text{ \AA}$).
- Спектральная эллипсометрия - мощный инструмент анализа оптических свойств вещества.

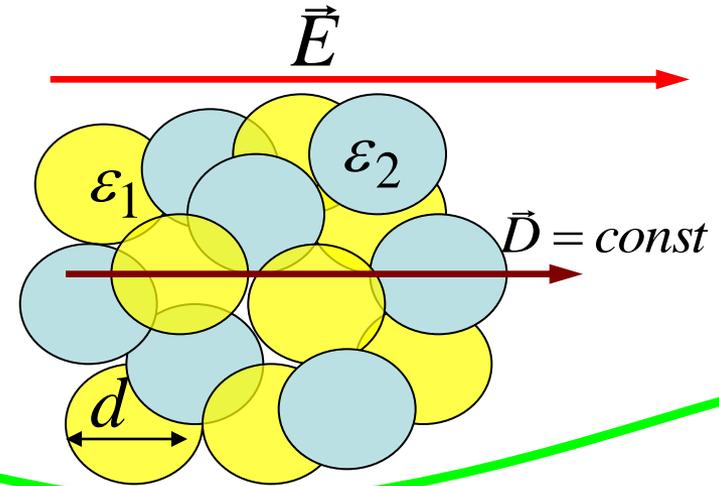
Оптические свойства неоднородных сред и нанокомпозитов. Концепция эффективной диэлектрической проницаемости (система единиц СГС)

Если характерные размеры структурных элементов каждой из фаз много меньше длины световой волны λ , то гетеросистема (например, нанокомпозит) может быть рассмотрена как однородная оптическая среда, а ее свойства могут быть описаны эффективной диэлектрической проницаемостью, которая, вообще говоря, комплексна. Электростатическое приближение:

Фактор поля показывает во сколько раз поле в каждой фазе отличается от среднего:

Фактор заполнения:

Для 2-х компонентной среды:



$$d \ll \lambda$$

$$\theta_{1,2} \equiv \frac{\langle \vec{E}_{1,2} \rangle}{\langle \vec{E} \rangle}$$

$$f_{1,2} \equiv \frac{V_{1,2}}{V}$$

$$\epsilon_{eff} \equiv \frac{\langle \vec{D} \rangle}{\langle \vec{E} \rangle}$$

$$n_{eff} = \sqrt{\epsilon_{eff}}$$

$$\epsilon_{eff} = f_1 \epsilon_1 \theta_1 + f_2 \epsilon_2 \theta_2$$

Эффективная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной гетеросистемы

Формула для эффективной диэлектрической проницаемости легко может быть обобщена на случай многокомпонентной гетеросистемы (ГС), где N – количество компонент (фаз). При этом должны выполняться условия нормировки:

$$\sum_{j=1}^N f_j \theta_j (\varepsilon_{eff} - \varepsilon_j) = 0$$

$$\sum_{j=1}^N f_j = 1$$

$$\sum_{j=1}^N \theta_j = 1$$

Уравнения являются базовым в рамках концепции эффективной диэлектрической проницаемости. Различные модели эффективной среды используют дополнительные предположения и приближения относительно формы включений и свойств фаз.

В качестве основных модельных приближений в теории эффективной среды рассматриваются два типа ГС, а именно,

- 1) матричные ГС, в которых каждый элемент среды-включения окружен со всех сторон некоторой средой-матрицей, и взаимодействием элементов включения можно пренебречь, и
- 2) статистические ГС, для которых все компоненты среды равноправны.

Эффективная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной статистической гетеросистемы

Фактор поля для сферических включений имеет вид:

$$\theta_j = \frac{3\varepsilon_{eff}}{\varepsilon_j + 2\varepsilon_{eff}}$$

Используя общую формулу, получим так называемую **формулу Бруггемана**, известную также как **приближение эффективной среды**:

$$\sum_{j=1}^N f_j \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_j}{\varepsilon_j + 2\varepsilon_{eff}} = 0$$

Последняя формула может быть обобщена на случай эллипсоидальной формы включений, что дает, так называемую, **обобщенную формулу Бруггемана**:

$$\sum_{j=1}^N f_j \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_j}{\varepsilon_{eff} + L_j(\varepsilon_j - \varepsilon_{eff})} = 0$$

Фактор деполяризации определяется локальным электрическим полем в области диэлектрического включения произвольной формы:

$$\vec{E}_j = \vec{E} - \hat{L}_j \vec{P}$$
$$L_x + L_y + L_z = 1$$

для сферы: $L_x = L_y = L_z = \frac{1}{3}$

для цилиндра: $L_{\parallel} = 0$ $L_{\perp} = \frac{1}{2}$ $L_{\parallel} + 2L_{\perp} = 1$

Итоги Лекции 1:

- Рассмотрены основные понятия оптики конденсированных фаз вещества (из уравнений Максвелла получено волновое уравнение и введены комплексный показатель преломления и диэлектрическая проницаемость).
- Рассмотрены случаи поглощения, преломления и отражения света.
- Проанализированы поляризационные свойства отражения и преломления. Отмечена важность угла Брюстера.
- Введены представления об эллипсометрии.
- Рассмотрены основные понятия теории оптических свойств нанокompозитов и твердотельных гетеросистем. Введено понятие эффективной диэлектрической проницаемости.