

4 非結合発振器のアンサンブル

物質の光学的性質は、物質中の様々な種類の振動子を電磁放射場に結合することによって決定されます。言い換えれば、入射電磁場はこれらの振動子に駆動振動または強制振動を行わせるであろう。これらの駆動された振動の振幅は、入射場の角周波数 ω 、振動子の固有振動数 ω_0 、電磁場と振動子との間の結合強度 f 、およびその減衰 r に依存する。半導体において、主な固有振動子または共鳴は、光学フォノン、それらのイオン化連続体およびより高いバンド間遷移またはプラズモンを含む励起子である。彼らはいくつかの詳細で説明されます

7～10 章。これらの共鳴の光学的性質の多くの基本的特徴は類似していると我々は予想することができる。したがって、一般的な方法で、モデル振動子の集団の光学的性質を最初に議論することは合理的です。4～6 章の結果を使用することによって、11～15 章で、半導体の光学的性質への非常に単純で直接的なアクセスを得ることができます。

古典力学と電気力学の観点からモデル振動子の集団の光学的性質を扱うと、多くの点で現実に非常に近い結果が得られることがわかっています。これは特にスペクトルに当てはまります。複素誘電関数または屈折率、または反射および透過のスペクトルの。4 つすべてが密接に関連しています (第 6 章)。したがって、しばらくの間この古典的なアプローチに従い、量子力学が適用された場合にどのような修正が行われるかを適切な場所で説明します。

これらのモデル発振器は、ローレンツ発振器として知られています。これらのローレンツ振動子の扱い、あるいは有限の導電率が含まれる場合 (例えば、(2.24) を参照)、チャップスで述べられているような光学および固体物理学に関する多くの教科書にあります。[63H1,72W1]も参照。

第 2 版の序文で述べたように、現在光学特性、特に半導体の電子システムの光学特性を光学式または半導体のブロッホ方程式で記述する傾向があります。

物理学がかなり複雑な数学的定式化の背後に隠されているか、それは数値解法で部分的に消えるという大きなリスクです。したがって、ローレンツ発振器の単純で直感的に明確な概念から始めますが、読者がそれに慣れることができるように第 27 章で他の概念を提示します。

ここで、発振器のアンサンブルの光学特性について考えます。カップリングされていないオシレータの最も単純なケースから始めて、次の章のさまざまなステップで概念を洗練します。

4.1 運動方程式と誘電関数

我々は、同一の、結合されていない調和振動子のアンサンブルがあると仮定する。簡単にするために、図 4. 1 a に示すように、格子定数 a を有する光伝搬方向に周期的な一次元アレイを選択する。これらの高調波発振器はすべて同じ固有振動数 ω_0 を有する。ダンピングを無視するとそのとき、 ω_0 は力学モデルで質量 m とバネの力定数 β によって次のように表すことができます。

4.1

振動子を同相で伸ばすと (図 4.1b)、全体がオメガ ω_0 で振動し、隣り合う振動子を逆位相で励振しても同じことが言えます (図 4.1c)。最初の対応するケースは

4.2a

次のケースは

4.2b

点 $k = 0$ は通常 k 空間の A 点と呼ばれ、条件 (4.2b) は単純な線形鎖または立方格子に対する最初のブリルアンゾーンの境界を与えます。(4.2b) で与えられた値は最も物理的に意味のあるフル波長と最大の k 私達のシステムのベクトル。固有周波数もまた、その間のすべての λ または k 値に対してオメガ ω_0 になるため、図 4.2a のシステムの水平方向の分散関係が得られます。すなわち、固有周波数帯の幅はゼロである。(フラットバンドと呼ばれます)。ただ 1 つの発振器 (図 4. 1 d) を伸張させることによって我々のシステムで生成された波束は、隣接する発振器への非カップリングであるので伝播しないであろう。これと一致して、我々は群速度 $d\omega/dk$ がゼロであることを (2.15) から見いだす。

ここで見てきたのは、同一の振動子 (または原子や他の (準) 粒子) の集団では、隣同士の有結合が有限の帯域幅と非消失群速度をもたらすという一般規則の例です。消失結合は消失帯域幅と群速度をもたらす。

4.3

セクション 5.4 の結合オシレータのより現実的な仮定に進む前に、「結合されていない」

仮定を緩和することの意味について議論します。 次のステップでは、独立した発振器を式で与えられる電磁放射の電界に結合します。

4.4a

これは、光波が z 方向に伝播し、 x 方向に偏光子の伸びと平行に偏光されることを意味する。 z D_0 における振動子を考慮すること、または $(3, 5, 6) - (3, 6, 0)$ の双極子近似（すなわち、 $a \ll \lambda$ ）を利用することによって、 $(4, 4, a)$ における空間変動を落として 4.4b を得ることができる。

4.4b

カップリングのために、超小型振動子搬送装置の質量が最大であると仮定する。 中立性の理由から、我々は全ての質量の平衡位置に固定された電荷を必要とする。 すると E は振動子に力を加え、伸び x は 4.5 を介して電気双極子モーメントと結び付きます。

4.5

このモデルまたは類似のモデル、あるいは "。 ! /" の結果の方程式は、Lorentz や Selmaier の発振器、Helmholtz-Ketteler、Kramers-Heisenberg の式などのさまざまな名前で表されます。

運動方程式は 4.6 で与えられ、

4.6

私たちが現象学的な減衰定数 γ を含めた。 より複雑な理論については 揺らぎ散逸定理の枠組みの中で、または非マルコフ減衰と比較した、ここで使用されるマルコフ減衰の観点については、[67K1,85C1,01W1,02S1] またはある程度まで 23.2 章とそこに与えられた参考文献。 式 4. 6 は 2 次の線形不均一微分方程式である。 一般解は、対応する同次方程式の一般解と不均質方程式の特殊解の合計です。 それに対応して、私たちは以下の仮説を使用します。

4.7

右側の最初の項は、同次方程式の解です。
一時的な機能について説明します。

4.8

において、減衰に依存する固有周波数 A の減衰振動を見つけます。
不等式 (4.8) は弱い減衰の体制を定義します。より強い減衰のためには、本質的に指数関数的に減衰する項が得られます。

この過渡的な特徴は、 $t \gg \gamma^{-1}$ の後に消えます。したがって、第 23 章で扱われる（超）高速の時間分解分光法にとって重要です。私たちが現在興味を持っている静止した線形光学レジームのために、私たちはこの用語を安全に省略するかもしれません。そのとき残っているのは振幅 x_p の強制振動です。挿入する Ansatz (4.7) から (4.6) に入れて 4.9 を見つける。すなわち、通常の共鳴項。

4.9

この振動は、 A のすべての振動子での双極子モーメントおよび A の分極率に関連しています。

4.10

A のハットと A のプライムは、こことセクション 4.2 で 2 つの訂正を紹介します。

4.11

密度 N の振動子の 3 次元配列を使用すると、結果は同じになり、振幅 A の予備偏光密度 A が得られます。

4.12

これは、オシレータのアンサンブルを有効な媒質として記述することを意味します。これは $A \ll \lambda$ の場合に正当化されるアプローチです。(4.4 b) または参考文献を参照のこと。1 章の[97W1]と 5 章の[97S1].

(4.12) と (2.27) から、誘電変位 D 、誘電関数 ϵ 、および磁化率 k_{ai} について次の式が得られます。

4.13

と

4.14

ここで、 N は単位体積あたりの発振器数です。 それでは、 e の最終式を取得するために、上記の一連の方程式に対する 2 つの修正を行います。

4.2 量子力学と局所場による補正

例えば (4. 1 2) における $N e^2 m^{-1}$ の項は、本発明者らの機械的モデルにおける電磁場の振動子への結合強度を与える。

量子力学では、この結合は遷移行列要素の 2 乗で与えられます。 双極子許容遷移については、3.2.2 節 (3.58) - (3.60) ですすでに述べたように、これは次のようになります。

4.15

ここで、 H は双極子演算子の 2 乗の期待値だけです。 (3.59) と (3.60) のコメント (comment) を参照してください。 ここで、 i と j は初期状態と最終状態を表し、 H は双極子演算子 $e r$ または $e x$ を表します。

双極子禁制遷移については、磁気双極子誘電四重極マトリックス要素が適切となり得る。 それらは通常桁違いに小さい。 遷移行列要素を誘電関数に導入するためのさまざまな規約があります。

何人かの作者は、無次元量 A を定義し、それを振動子強度と呼び、それを使って項 A を掛けます。 他のものは分子全体の振動子強度を f と呼ぶ。 すなわち 4.16

4.16

表記を簡単にするために 2 番目の方法に従いますが、メソッド間に物理的な違いはないことを強調します。 4.17 を取得します。

4.17

時々、(4.17) の $r \cdot h \cdot s$ 上の分子および分母は、2 倍される。その場合、振動強度は、二乗されたエネルギーの二乗の次元を有する。たとえば eV^2 。

(4.17) に対する次の補正のために、発振器に作用する電場 E (例えば (4.6) において) は何であるかを考慮しなければならない。希薄系では、 E は単なる外部入射場であり、(4.17) をそのまま使うことができます。高密度システム、すなわち高密度 N 個の発振器を有するシステムでは、発振器に作用する局所場 E_{loc} は、2 つの部分、すなわち外部場と他の全ての双極子によって生成される場とからなる。この効果を考慮すると、立方体または非晶質の材料は、いわゆるクラウジウス - モソッティまたはローレンツ - ローレンツの式に導かれ、これは分極率 a を 4.18A によって e に関連付ける。

4.18A

[02B1]も参照のこと。明らかに (4.18a) は Na が小さく、 e が 1 から少しだけ逸脱している希薄系 (小さい N) のための (4.17) の形を回復する。この近似が有効でない場合、 e は (4.17) の形式で小さい減衰に書き換えることができますが、固有周波数 4.18b をシフトしたものになります。

4.18b

その結果

4.19

この公式は、局所電界効果と量子力学的遷移確率を組み込んでいます。新しい固有周波数 ω_0 が唯一の物理的に適切で実験的にアクセス可能なものです。したがって、この量だけが実験に現れます。立方晶以外の結晶対称性についても同様の手順が有効ですが、これらの場合には e のテンソル特性が有効になります (セクション 3.1.7 を参照)。結晶軸に対する電界の向きに応じて、パラメータ f 、 ω および γ が得られる。