

Лекция №3. Рассеяние света на фононах

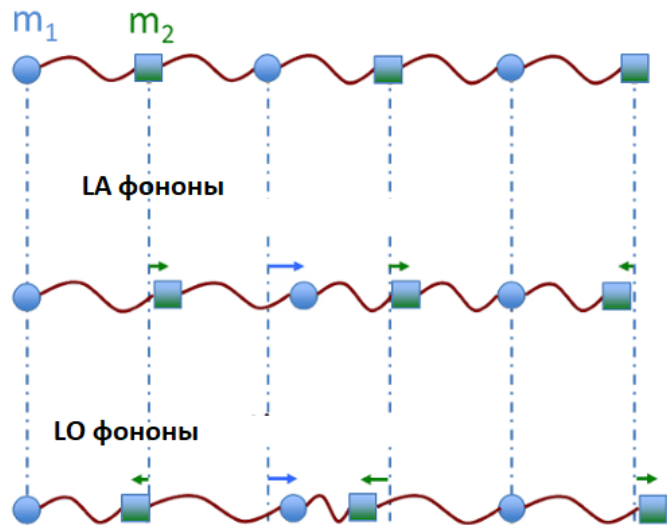
I. Фононы

II. Комбинационное (рамановское) рассеяние света

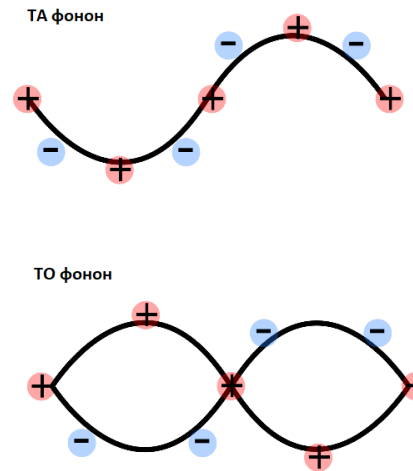
III. Рассеяние света Мандельштама-Бриллюэна

IV. Многофононное рассеяние

Продольные фононы



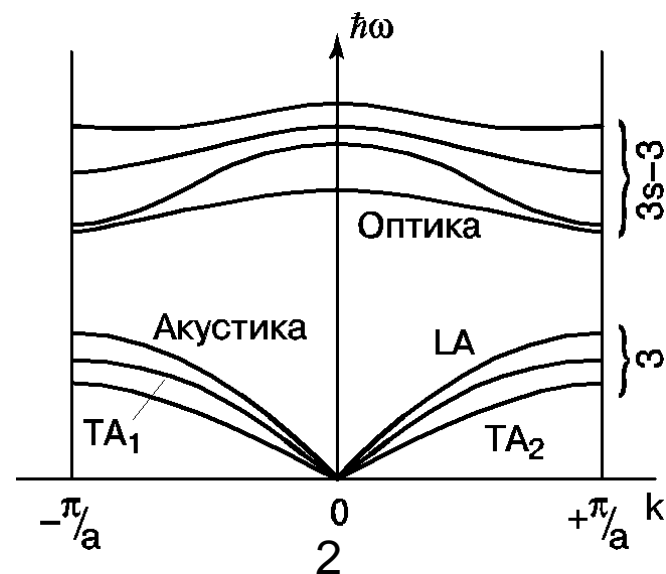
Поперечные фононы



$$H = \sum_i \frac{m_i v_i^2}{2} + \sum_j \frac{M_j v_j^2}{2} + \sum_l \frac{u(x_l - x_{l-1})^2}{2}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \Rightarrow \omega = \omega(k)$$

3D



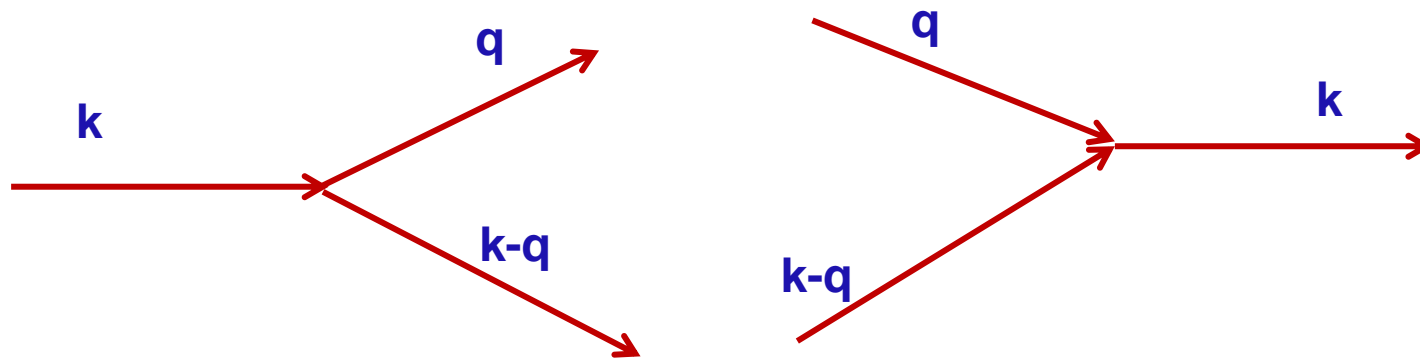
$$x_n \propto \sum_k A_k (\hat{a}_k e^{ikl} + \hat{a}_k^+ e^{-ikl})$$

$$p_n \propto i \sum_k B_k (\hat{a}_k e^{ikl} - \hat{a}_k^+ e^{-ikl})$$

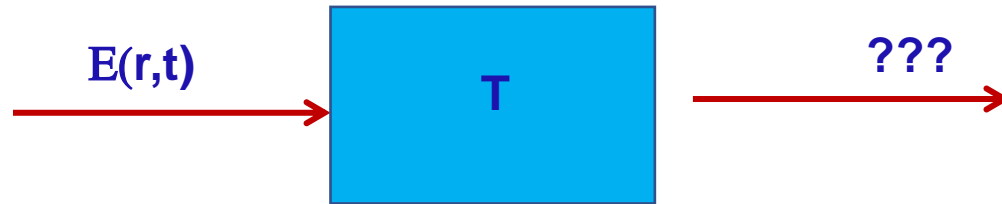
$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k (\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + 1/2) + \sum_k \sum_q \Gamma(k, q) (\hat{a}_{k-q}^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_k - \hat{a}_k^+ \hat{a}_q \hat{a}_{k-q}) + \dots$$

$$\hat{N}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \text{ оператор числа фононов}$$

Ангармонизм колебаний = рассеяние фононов



Комбинационное рассеяние света (рамановское)



$$E(r,t) = E(k_i, \omega_i) \cos(k_i r - \omega_i t)$$

$$P(r,t) = P(k_i, \omega_i) \cos(k_i r - \omega_i t)$$

$$P(k_i, \omega_i) = \chi(k_i, \omega_i) E(k_i, \omega_i)$$

$Q(r,t)$ – смещения атомов, соотв. фононам

$$Q(r,t) = Q(q, \omega_0) \cos(qr - \omega_0 t)$$

$\omega_{electron} \gg \omega_0$ (адиабат. приближение) \Rightarrow ряд Тейлора по Q

$$\chi(k_i, \omega_i, Q) = \chi_0(k_i, \omega_i) + \left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(r,t) + \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial Q^2} \right)_0 Q^2(r,t) + \dots$$

$$P(r, t, Q) = P_0(r, t) + P_{ind}(r, t, Q)$$

$P_0(r, t) = \chi_0(k_i, \omega_i) E_i(k_i, \omega_i) \cos(k_i r - \omega_i t)$ – в фазе с падающим излучением

$P_{ind}(r, t, Q) = \left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(r, t) E_i(k_i, \omega_i) \cos(k_i r - \omega_i t)$ – индуцирована фононом

Распишем:

$$\begin{aligned} P_{ind}(r, t, Q) &= \left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(q, \omega_0) \cos(qr - \omega_0 t) E_i(k_i, \omega_i) \cos(k_i r - \omega_i t) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(q, \omega_0) E_i(k_i, \omega_i) \left[\cos((k_i + q)r - (\omega_i + \omega_0)t) + \cos((k_i - q)r - (\omega_i - \omega_0)t) \right] \end{aligned}$$

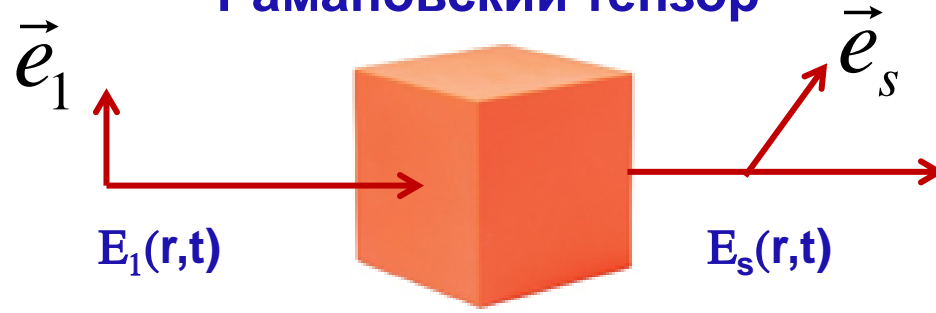
$$k_{Anti_stokes} = k_i + q$$

$$k_{Stokes} = k_i - q$$

$$\omega_{Anti_stokes} = \omega_i + \omega_0$$

$$\omega_{Stokes} = \omega_i - \omega_0$$

Рамановский тензор



$$I_s \propto \left| \vec{P}_{ind} \vec{e}_s \right|^2 \propto \left| \vec{e}_i \left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(\omega_0) \vec{e}_s \right|^2 = \left| \vec{e}_i \hat{R} \vec{e}_s \right|^2$$

$$\hat{R} \equiv \left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(\omega_0)$$

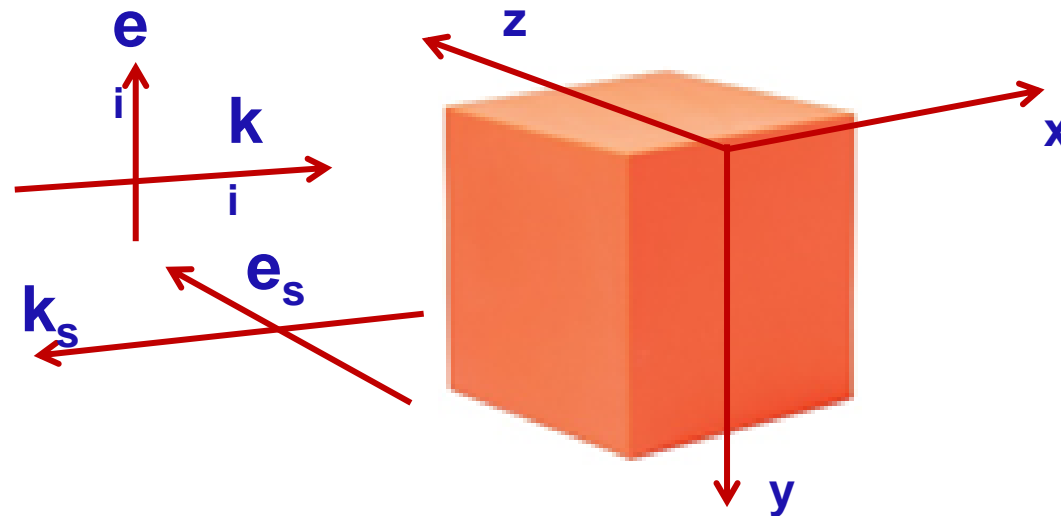
$$\vec{P}_s = \hat{R} \vec{E}_i$$

$$\vec{e}_s = \hat{R} \vec{e}_i$$

Геометрия рассеяния

$$\vec{k}_i (\vec{e}_i, \vec{e}_s) \vec{k}_s$$

Пример: $x(y, z) \bar{x}$



Пример: GaAs

$$R = \begin{pmatrix} R_{xx} & R_{xy} & R_{xz} \\ R_{xy} & R_{yy} & R_{zy} \\ R_{xz} & R_{yz} & R_{zz} \end{pmatrix}$$

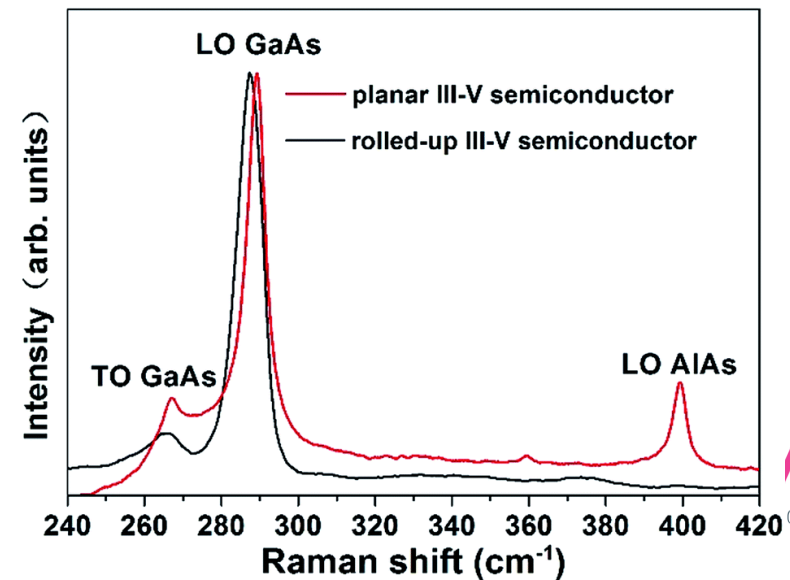
$$R(X) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix}$$

$$R(Y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$R(Z) = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

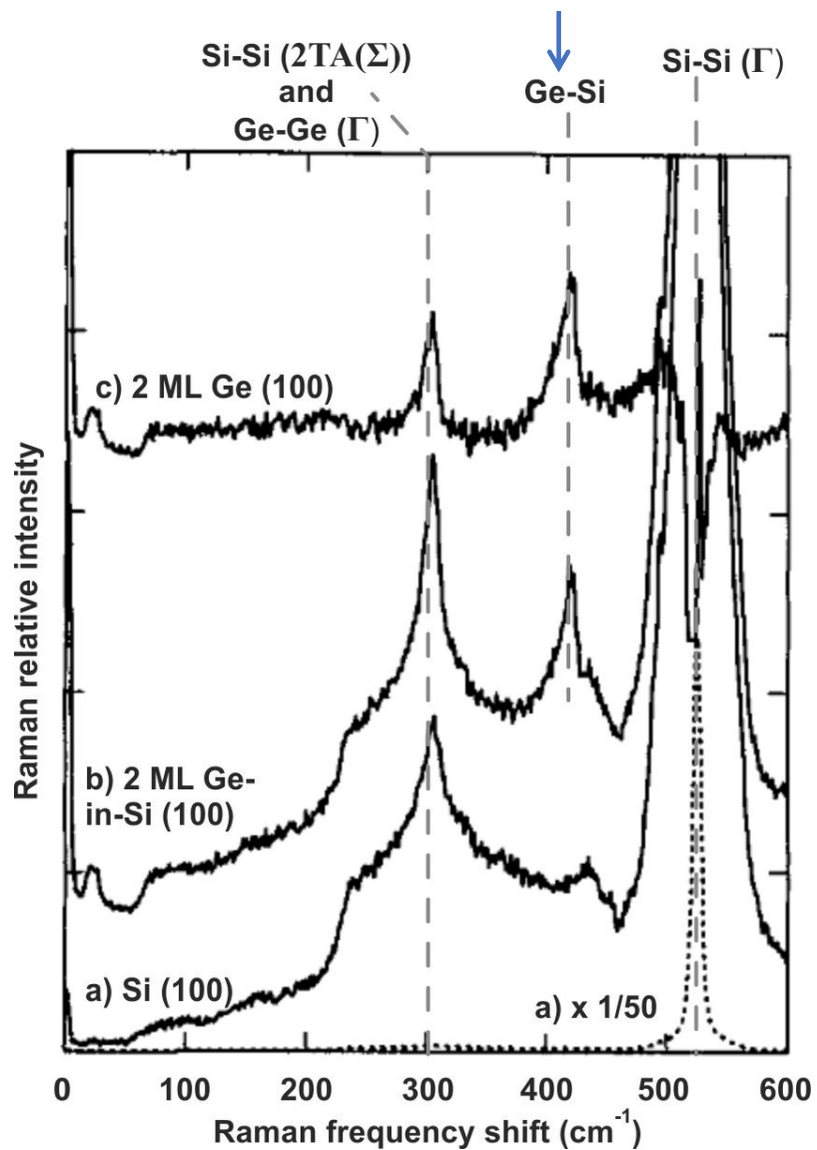
$$e_{sz} = R_{zy} e_{iy}$$

Есть такая компонента для LO-фононов
(поляризованы вдоль x) => $x(y, z) \bar{x}$

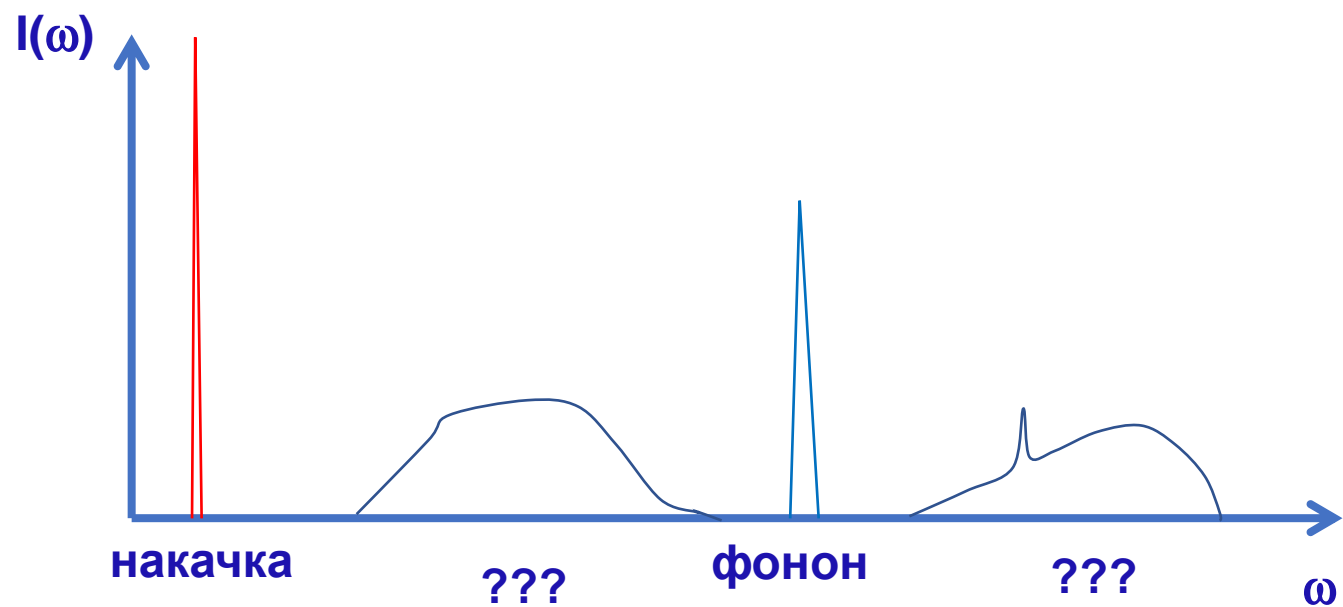
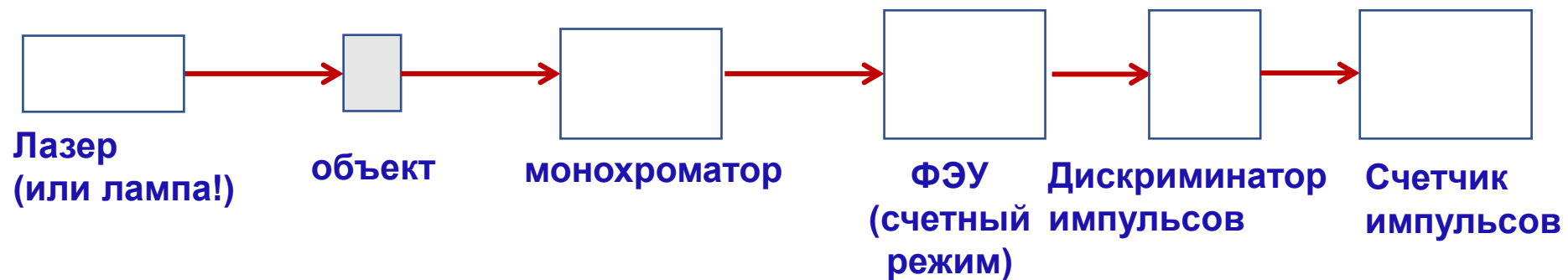


Возможности метода КР.

Разрешимы спектры отдельных монослоев и связей (типа Ge-Si) на интерфейсе!



Принципиальная схема КР-установки



$$\vec{P}(k, \omega, Q) = \left[\chi_0(k_i, \omega_i) + \underbrace{\left(\frac{\partial \chi}{\partial Q} \right)_0 Q(r, t)}_{\text{1-фононное КР}} + \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial Q^2} \right)_0 Q^2(r, t) + \dots}_{\text{2-фононное КР}} \right] \vec{E}$$

1-фононное КР

$$\vec{k}_s = \vec{k}_i \pm \vec{q}_{phon}$$

←
**Центр зоны
 Бриллюэна,
 т.к. $k_s \approx k_i \gg q_{phon}$
 => узкие линии с
 ширинами порядка 10
 см⁻¹**

2-фононное КР

$$\vec{k}_s = \vec{k}_i \pm \vec{q}_{phon1} \pm \vec{q}_{phon2}$$

↘
**Вся зона Бриллюэна!!!
 т.к. $q_{phon1} - q_{phon2} \approx 0$
 => широкие линии с
 ширинами порядка 100
 см⁻¹**

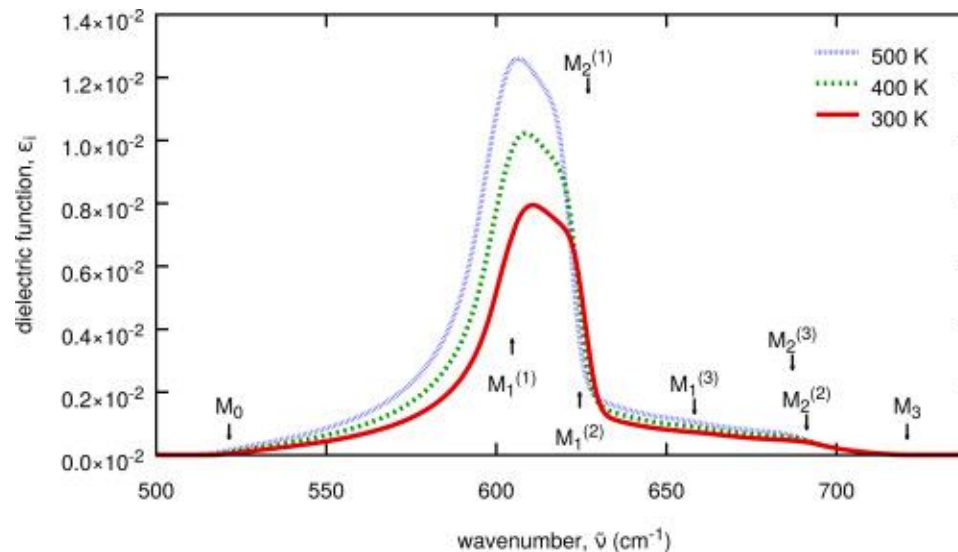
Особенности, изломы, слабые пики на фоне широких многофононных спектральных линий => сингулярности Ван-Хова

$$\rho(\omega) = \frac{V}{4\pi^3} \sum_j \frac{dS_j}{\text{grad}(\omega_j(k))}$$

Плотность фононных состояний (DOS – density of states)

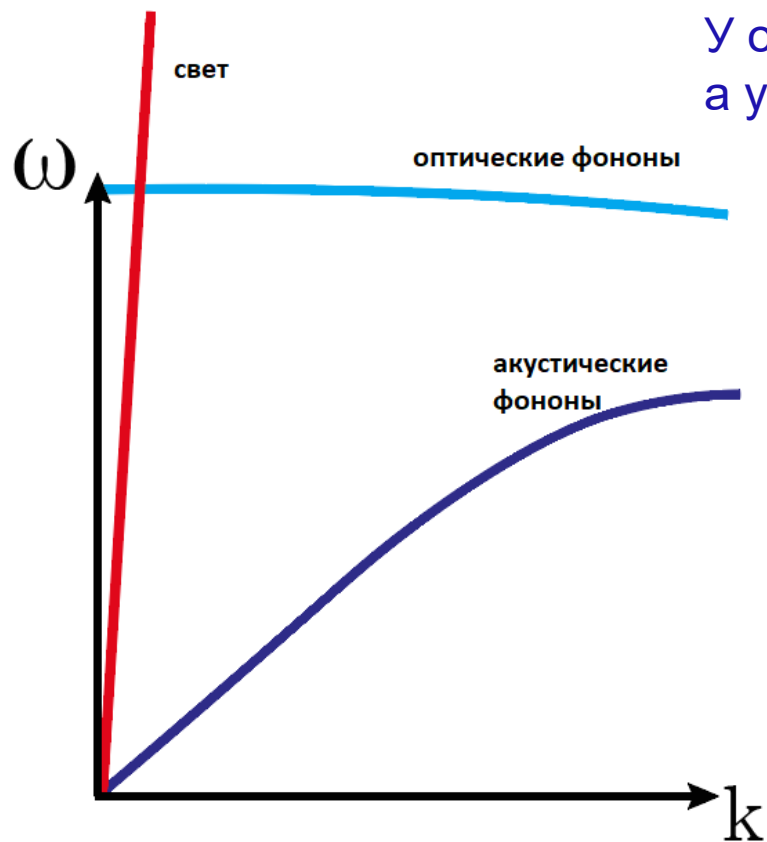
1. $\text{grad}(\omega_j) \rightarrow 0 \Rightarrow \rho(\omega) \rightarrow \text{infinity}$
2. разрывы $\text{grad}(\omega_j)$

Физические причины появления особых точек – пересечение различных фононных дисперсионных ветвей

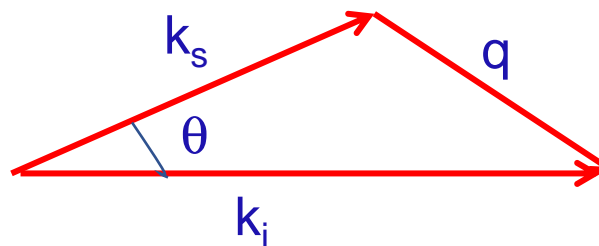


Пример фононных сингулярностей Ван-Хофа в кремнии

Рассеяние Мандельштама-Бриллюэна



У оптических фононов дисперсия почти не меняется, а у акустических линейно зависит от q



$$\omega_{ac}(q) = v_{ac} q$$

$$q = \sqrt{k_i^2 + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta}$$

$$\cos \theta = 1 - 2 \sin^2(\theta/2)$$

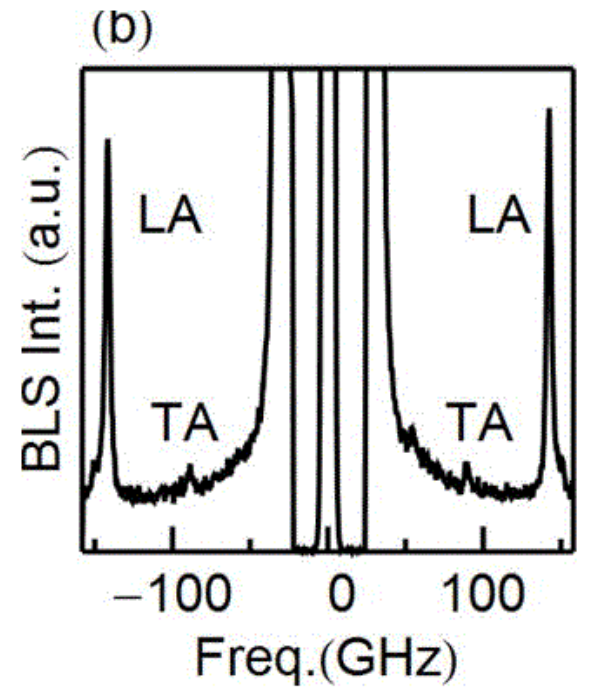
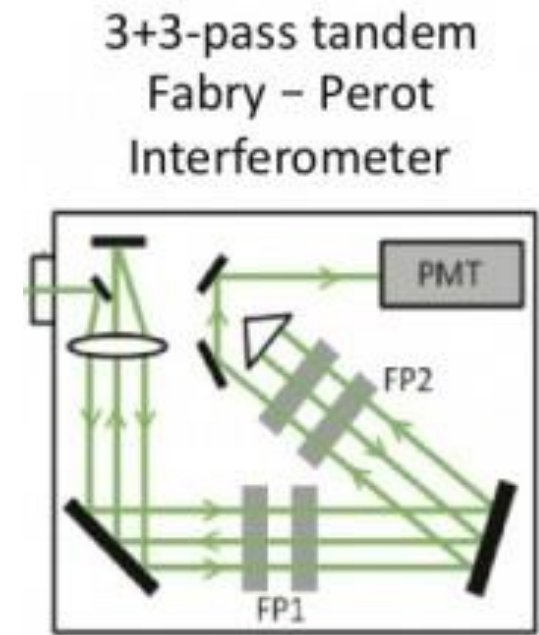
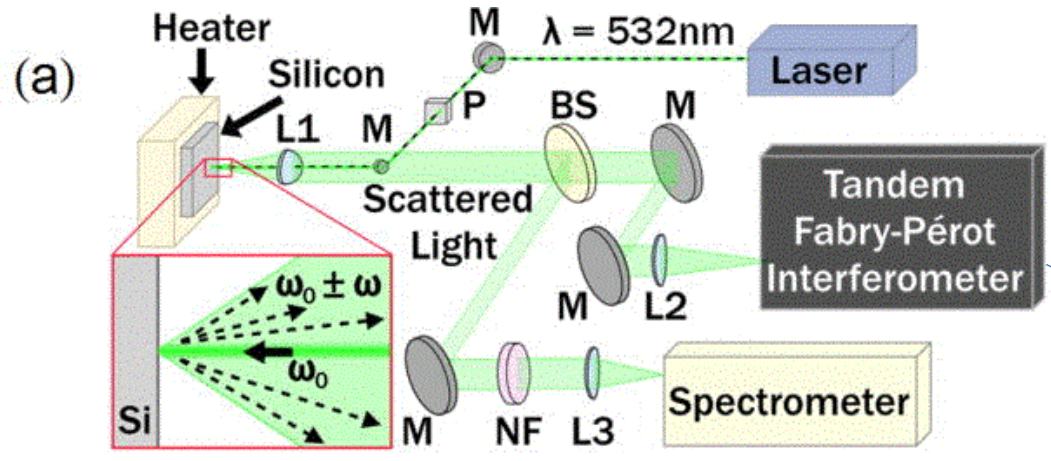
$$q = \sqrt{(k_i - k_s)^2 + 4k_i k_s \sin^2(\theta/2)}, \quad \omega_i \approx \omega_s$$

$$\omega_{ac}(q) = \frac{\omega_i v_{ac}}{c} \sqrt{(n_i - n_s)^2 + 4n_i n_s \sin^2(\theta/2)}, \quad n_i \approx n_s$$

$$\omega_{ac}(q) = \frac{2n_i \omega_i v_{ac}}{c} \sin(\theta/2)$$

$$I_s(\omega_s) = \frac{\Gamma_q}{\pi \left[(\omega_i - \omega_s - \omega_{ac})^2 + \Gamma_q^2 \right]}$$

Спектральная форма линии рассеяния МБР



Дописать подробнее про МБР и ВКР (Демтредер)

Спасибо за внимание!