

УДК 549:53

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В КРИСТАЛЛАХ ТИПА ВИСМУТА В УЛЬТРАКВАНТОВОМ ПРЕДЕЛЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

О.В. Кондаков*, Е.Г. Киселёв**

**Национальный университет Руанды (Бутар)*

**Елецкий государственный университет им. Бунина
399770, Липецкая обл., г. Елец, ул. Коммунаров, д. 28*

Аннотация. В статье моделируется квантовомеханическая система, состоящая из висмута и сплавов висмут-сурьма и помещённая в магнитное поле до 25 Тл. Электронный энергетический спектр кристаллов расквантован, а ультраквантовый предел достигается при магнитном поле 2 Тл. Прохождение инфракрасного излучения с энергией кванта 119 мЭв приводит к межзонным и внутризонным переходам электронов на уровни Ландау зоны проводимости. Численные результаты показали хорошее согласие с экспериментальными.

Ключевые слова: анизотропный монокристалл, плоский волновод, уровни Ландау, магнитооптические осцилляции.

Целью настоящего исследования являлось создание математической модели магнитооптического эксперимента в ультраквантовом пределе магнитного поля, пригодной для анализа данных, полученных при исследовании кристаллов висмут-сурьма в широком диапазоне концентраций сурьмы. Проведение численного эксперимента по моделированию магнитооптических спектров для проверки эффективности, изучения свойств и особенностей модифицированной модели Бараффа и получения научно значимых достоверных выводов о применимости этой модели для сплавов висмут-сурьма.

Рассматриваемая задача представляет собой решение уравнений Максвелла для особого вида волн – поверхностных волн. Наличие анизотропии резко увеличивает громоздкость вычислений. Таким образом, взаимодействие электромагнитной волны со стенками волновода учитывается средствами макроскопической электродинамики, т.е. классически. Решение задачи описания свойств среды требует существенно квантового рассмотрения. Поэтому в целом моделирование состоит из классической и квантовой части, и, в целом, модель можно рассматривать либо как полуклассическую, либо как полуквантовую.

Так как экспериментально измеряется энергия излучения, прошедшего планарный волновод (рис. 1), то необходимо тем или иным образом рассчитать интенсивность электромагнитной волны на выходе этого волновода.

Рассчитывая энергию волны, прошедшую через планарный волновод, как среднее значение y – компоненты вектора Умова – Пойтинга (рис. 1) проинтегрированное по поперечному сечению волновода и определяя коэффициент пропускания планарного волновода как отношение энергии $W(B)$, переносимой волной при некотором значении магнитного поля B , и энергии $W(0)$, переносимой волной при $B = 0$, получаем выражение для $T(B)$ [1-3]:

$$T(B) = 1,07 \times \exp\{2L[q_y''(B) - q_y''(0)]\}, \quad (1)$$

где q_y – y компонента волнового вектора.

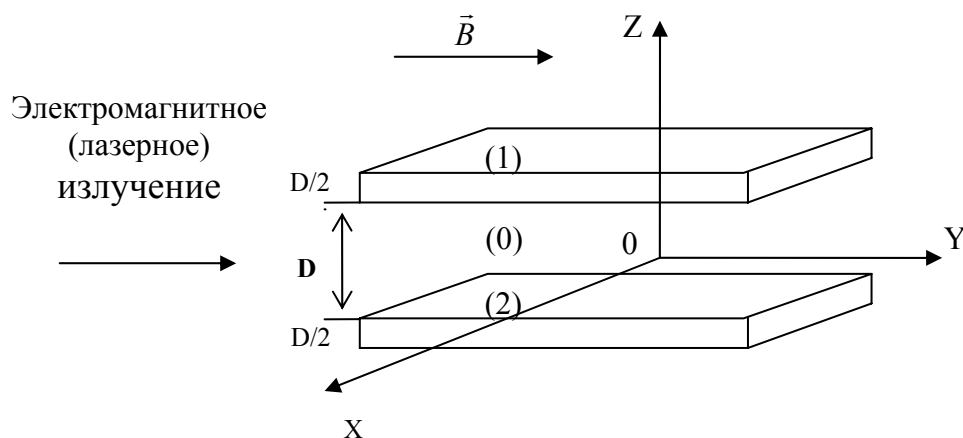


Рис. 1. Взаимное расположение вектора индукции магнитного поля, волнового вектора электромагнитного излучения и исследуемого монокристалла относительно выбранной системы координат.

Моделирование диэлектрической проницаемости использует методы квантовой механики. Свойства среды учитывались компонентами тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon}$:

$$\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}_l + \frac{\hat{\sigma}}{i \cdot \omega \cdot \varepsilon_0}, \quad (2)$$

где ω – циклическая частота, падающего электромагнитного излучения, ε_l – диэлектрическая проницаемость, обусловленная всеми процессами, за исключением межзонных и внутризонных переходов на уровнях Ландау в точке L зоны Бриллюэна, ε_0 – электрическая постоянная, σ – тензор комплексной удельной электропроводности.

$$\hat{\sigma}_{\alpha\beta} = -e^2 \cdot \sum_{l,l'} \frac{(f_l - f_{l'}) \cdot \langle l | V_\alpha | l' \rangle \cdot \langle l' | V_\beta | l \rangle}{(E_l - E_{l'}) \cdot \left(\left(\frac{i}{\hbar} \right) \cdot (E_l - E_{l'}) - i \cdot \omega + \frac{1}{\tau} \right)}, \quad (3)$$

где α, β – индексы, означающие оси координат; $\alpha, \beta = 1, 2, 3$; e – заряд электрона; l, l' – полные наборы квантовых чисел, характеризующие начальные l' и конечные l состояния; V_α и V_β – оператор скорости; τ – время релаксации; $f_l, f_{l'}$ – это распределения Ферми для электронов, находящихся на уровнях Ландау с наборами квантовых чисел l, l' :

$$f_l = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_l - E_f}{k_0 \cdot T}\right)}, \quad (4)$$

где E_f – энергия Ферми, k_0 – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, при которой находится исследуемый кристалл.

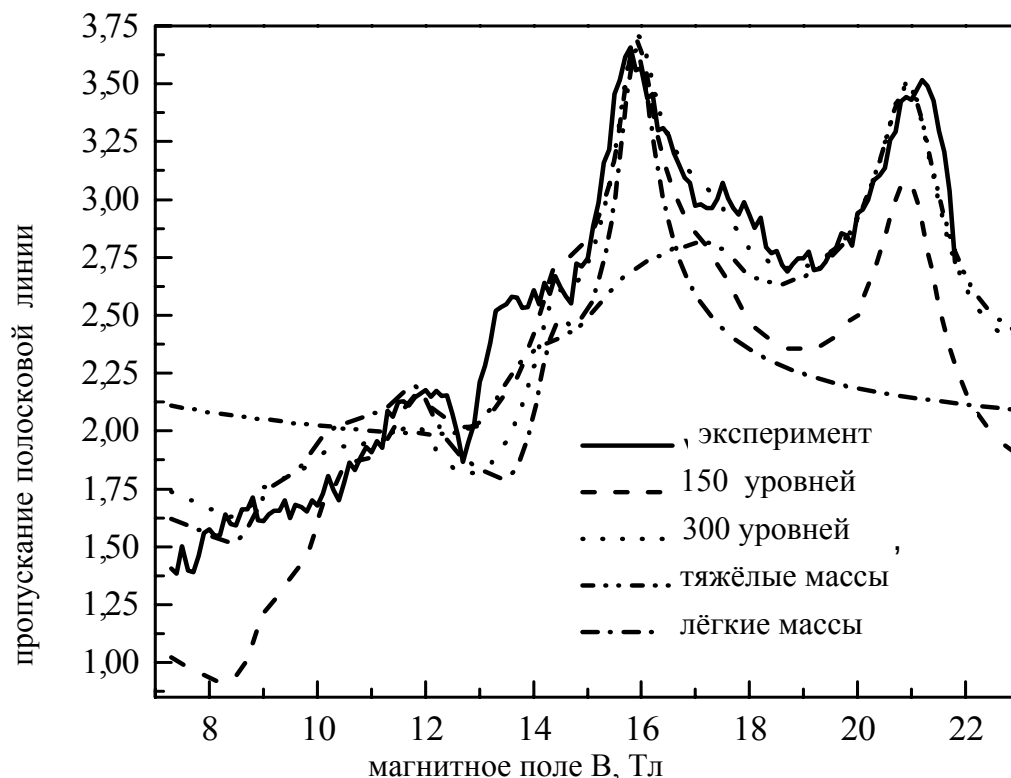


Рис. 2. Результаты моделирования для висмута (B/C_2).

Экспериментальные результаты демонстрируют такое разнообразие структур в ультраквантовом пределе магнитного поля, что для объяснения этого приходится рассматривать модель взаимодействующих между собой уровней Ландау валентной зоны и зоны проводимости с квантовыми числами $j=0$. Это даёт возможность ввести дополнительные степени свободы для осуществления возможности подгонки модельных спектров к экспериментальным. В нашем рассмотрении мы ограничились рассмотрением второго порядка теории возмущений. В результате величины матричных элементов оператора скорости имеют сложную и ярко выраженную зависимость от магнитного поля. Учет в математической модели смешанного характера волновых функций при малых значениях квантовых чисел позволяет в деталях описать форму зависимости интенсивности излучения прошедшего через планарный волновод от величины магнитного поля для полуметалла висмута и сплавов висмут-сурьма (рис. 2) [4]. Так, например, легко разделяются в модельном эксперименте вклады электронов с большей (штрихпунктирная линия с двумя точками) и меньшей (штрихпунктирная линия) эффективной массой.

Анализ структуры магнитооптических особенностей на рис. 2 представляет определённую трудность из-за обилия осцилляций и чувствительности формы линии к различным параметрам. Например, увеличение количества уровней Ландау, по которым производился расчёт, от 150 до 300 приводит к качественно лучшему соответствию

расчётной и экспериментальной формы линии. Особенность при $B=21$ Тл приобретает соответствующую эксперименту интенсивность.

Численный расчёт зависимости коэффициента пропускания планарного волновода от величины магнитного поля в ультраквантовом пределе магнитного поля для трёх взаимно перпендикулярных ориентаций магнитного поля относительно кристаллической решётки висмута установил адекватность математической модели при сравнении с ранее полученными результатами для параметров энергетического спектра носителей заряда.

ЛИТЕРАТУРА

1. Киселёв, Е.Г., Кондаков О.В., Гладких О.Б. Условия моделирования формы экспериментальной линии магнитооптического эксперимента. Материалы всероссийского научного семинара "Неравновесные явления в узкозонных полупроводниках и полуметаллах". – Елец. –2004г. - 212с.
2. Киселёв, Е.Г., Кондаков О.В., Токарев В.В. Моделирование магнитопротекания планарного волновода. Материалы IV международной дистанционной научно-практической конференции «Моделирование. Теория, методы и средства». – Новочеркасск. –2004г.-314с.
3. Киселёв, Е.Г., Кондаков О.В., Нишимюмана Ж.Д. Моделирование магнитооптического эффекта в сплавах висмут-сурьма в ультраквантовом пределе магнитного поля. Материалы Международной междисциплинарной научной конференции «Синергетика в естественных науках». – Тверь. 2007г. – 252с.
4. Киселёв, Е.Г., Кондаков О.В., Гладких О.Б., Хабимана Ж.В. Возможности моделирования магнитооптического отклика кристаллов висмута. Материалы IX межгосударственного семинара "Термоэлектрики и их применения". – Россия, Санкт-Петербург, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН. - 2006 г. – 454 с.

MATHEMATICAL MODEL OF A MAGNETOOPTICAL EFFECT IN CRYSTALS OF A KIND OF BISMUTH IN THE ULTRAQUANTUM LIMIT OF THE MAGNETIC FIELD

O. Kondakov*, E. Kiselev**

**National University of Rwanda*

***Yelets State University*

Abstract. The paper aims to model the behavior of a quantum mechanical system consisting of a planar wave guide made of bismuth and bismuth - antimony alloys and located in a magnetic field up to 25 T. The electronic energy spectrum in crystals is quantized, and the ultra quantum limit is reached for magnetic field of about 2 T. The passage through the planar waveguide of a monochromatic infrared radiation with quantum energy of 119 meV results in electrons jumping to Landau levels located in the conduction band. The numerical results showed a good coincidence between modeling and experimental results.
Keywords: anisotropic monocrystal, planar waveguide, Landau level, magneto-optical oscillations.