

INSTYTUT FIZYKI
POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ

Raport nr I-9/S-119/82

WEWNĄTRZPASMOWA MAGNETOABSORPCJA
W
WĄSKOPRZERWOWYCH PÓŁPRZEWODNIKACH
TYPU $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$,
WYWOŁANA NIEPORZĄDKIEM CHEMICZNYM
STOPU

J. Szatkowski

Praca doktorska
wykonana pod kierunkiem
Prof.  hab. Jerzego Mycielskiego



WROCŁAW 1982

Panu Profesorowi dr hab. Jerzemu Mycielskiemu
serdecznie dziękuję za opiekę naukową i cenne uwagi w trakcie
wykonywania pracy.

Dziękuję również Docentowi dr hab. Januszowi M.
Pawlikowskiemu za cenne uwagi w trakcie wykonywania pracy.

SPIS TREŚCI

	str.
I. Wstęp	4
II. Przybliżenie kryształu wirtualnego	
1. Idea przybliżenia kryształu wirtualnego	7
2. Struktura pasmowa $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ w przybliżeniu kryształu wirtualnego	10
3. Stany elektronowe w obecności kwantującego pola magnetycznego	
3.1 Model wielopasmowy	14
3.2 Przybliżenie trójpasmowe dla półprzewodników typu $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$	22
4. Reguły wyboru dla jednofotonowych przejść magnetoptycznych	31
III. Wpływ istnienia nieporządku chemicznego na wewnątrzpasmową magnetoabsorpcję w kryształach mieszanym typu $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$	
1. Elementy macierzowe potencjału stopowego	37
2. Prawdopodobieństwo przejść magnetoptycznych udozwalanych istnieniem nieporządku chemicznego	44
3. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej istnieniem nieporządku chemicznego w kryształach mieszanym	53
4. Zależność współczynnika magnetoabsorpcji od energii oraz polaryzacji absorbowanego fotonu	62
5. Dyskusja otrzymanych rezultatów. Przykłady numeryczne	65
IV. Podsumowanie	74
Dodatek A	76
Spis literatury	77

I. WSTĘP

W ostatnim czasie wzrosło zainteresowanie własnościami materiałów półprzewodnikowych o nieuporządkowanej strukturze krystalicznej. Spowodowane to zostało głównie dwiema przyczynami. Po pierwsze- szerokie techniczne zastosowanie znalazły materiały niekrystaliczne /częściowo bądź całkowicie/, w tym także półprzewodnikowe stopy o szczególnych własnościach fizycznych /o wysokiej podatności magnetycznej, z niskimi współczynnikami rozszerzania, z wysokim przewodnictwem, itd./, oraz materiały ze zdefektowaną siecią i materiały amorficzne. Po drugie- w ostatnim dziesięcioleciu opracowano metody matematyczne, w szczególności oparte o zastosowanie funkcji Greena, pozwalające w zadawalający sposób rozwiązać problem stanów elektronowych w materiałach niekrystalicznych.

Materiały niekrystaliczne można podzielić na cztery grupy

- 1) - materiały, w których atomy lub jony nie tworzą sieci krystalicznej/do nich można zaliczyć ciecze oraz amorficzne i szklopodobne ciała stałe/ ;
- 2) - materiały, w których atomy lub jony zajmują położenia w węzłach sieci krystalicznej, jednakże w sieci znajdują się defekty naruszające jej periodyczność;
- 3) - materiały typu nieuporządkowanego stopu substytucyjnego A_xB_{1-x} /gdzie x jest składem molowym/, gdzie w węzłach sieci krystalicznej zajmują miejsce, w sposób zupełnie przypadkowy, atomy lub jony /składniki stopu/ różniące się ładunkiem elektrycznym i potencjałem.

- 4) - materiały typu "z gradientem składu", gdzie wzdłuż jednego z kierunków w próbce skład stopu zmienia się z położeniem.

Szczególnie intensywnie prowadzone są ostatnio badania własności fizycznych materiałów typu "nieuporządkowanego stopu substytucyjnego", tzw. kryształy mieszane $A_xB_{1-x}/A_xB_{1-x}C$ itd./. Jednym z powodów szczególnego zainteresowania kryształami mieszanymi jest możliwość zmiany, w szerokim zakresie, własności otrzymywanych materiałów poprzez zmianę składu. Daje to możliwość otrzymywania np. materiałów o z góry zadanej przerwie energetycznej, czy masie efektywnej elektronów, poprzez odpowiednie dobranie składu molowego.

Odrębnym powodem zainteresowania kryształami mieszanymi jest możliwość ich wykorzystania do szerokopasmowej detekcji promieniowania elektromagnetycznego, w zakresie widzialnym i podczerwieni [1-3], oraz zastosowania w laserach [3]. Jednym z najczęściej wykorzystywanym do tego celu kryształem mieszanym jest tellurek kadmowo-rtęciowy $Cd_xHg_{1-x}Te$ [1,3].

Do opisu własności tego typu materiałów stosuje się najczęściej przybliżenie kryształu wirtualnego [4-6], w którym rzeczywisty potencjał sieci zastępuje się pewnym potencjałem periodycznym, uśrednionym po wszystkich możliwych konfiguracjach atomów. Procedura taka zaniedbuje wpływ nieporządku chemicznego, tj. przypadkowego ułożenia atomów różnego rodzaju w węzłach sieci krystalicznej, na własności fizyczne kryształu mieszanego.

Celem niniejszej pracy jest wykazanie, że nieporządek chemiczny w stopach półprzewodnikowych związków II-VI o strukturze blendy cynkowej daje istotny wkład do magnetoabsorpcji na swobodnych nośnikach.

W pracy policzono prawdopodobieństwo przejść wzbronionych w rezonansie cyklotronowym, udozwolonych przez oddziaływanie elektronów z potencjałem wywołanym nieporządkiem chemicznym stopu, oraz związanym z tymi przejściami współczynnik magnetoabsorpcji. Przedyskutowano również zależność współczynnika magnetoabsorpcji od częstości dla wszystkich trzech polaryzacji absorbowanego promieniowania.

II. Przybliżenie kryształu wirtualnego.

1. Idea przybliżenia kryształu wirtualnego

Stopy substytucyjne A_xB_{1-x} (kryształy mieszane) są jednym z prostszych typów materiałów nieuporządkowanych. W materiałach tych dwie składowe stopu A i B są rozmieszczone w sposób chaotyczny w węzłach sieci krystalicznej. Narusza to periodyczność sieci krystalicznej, prowadząc w konsekwencji do tego, że stacjonarne stany elektronowe nie mogą być charakteryzowane przez quasipęd (wektor falowy $\vec{k}$ nie jest dobrą liczbą kwantową).

Rozkład ten zmieniać się może od próbki do próbki, dlatego też strukturę energetyczną takich materiałów można opisać tylko przy pomocy metod statystycznych. Prowadzi to do pojawienia się składowej losowej w wyrażeniach na energię potencjalną układu. Makroskopowe własności takiego układu opisuje się poprzez wielkości uśrednione po wszystkich możliwych konfiguracjach atomów A i B, dopuszczalnych dla danej struktury stopu.

Istnieje jednak możliwość stworzenia teorii ośrodka efektywnego, zachowującej przy pewnych uproszczeniach niektóre cechy charakterystyczne dla zagadnienia potencjału periodycznego. Jednakże, w odróżnieniu od przypadku kryształu idealnego, stanom elektronowym należy przypisać wówczas zespoloną wartość energii.

Do opisu własności fizycznych stopów stosuje się najczęściej trzy metody: metodę kryształu wirtualnego (VCA) [4 ÷ 6], przybliżenie potencjału koherentnego (CPA) [7 ÷ 14], oraz przybliżenie uśrednionej T-macierzy (ATA) [14 ÷ 19]. Dwie ostatnie metody oparte są na ogólnym formalizmie teorii wielokrotnego rozpraszania [20, 21]. Formalizm ten jest dostatecznie ogólny, jednakże do otrzymania konkretnych rezultatów należy dokonać szeregu uproszczeń. Jednym z najistotniejszych uproszczeń jest założenie o nieoddziaływaniu stanów elektronowych w węzłach sieci między sobą. Takie jednowęzłowe przybliżenie dopuszczalne jest dla ograniczonej klasy modelowych hamiltonianów. Efektywny ośrodek opisany jest jednakże hamiltonianem niehermitowskim posiadającym zespolone wartości własne, których część urojona opisuje czas życia sfanów jednoelektronowych. Metoda CPA zastosowana była [22] do obliczenia zmiany położenia wierzchołka pasma waleńcyjnego oraz dna pasma przewodnictwa w zależności od zmiany składu

dla niektórych stopów półprzewodnikowych, powstających na bazie półprzewodnikowych związków grupy III-V. Do obliczeń zastosowano dwupasmowy model Kanea. Uwzględniono również fakt, że związki wchodzące w skład stopu mają różne stałe sieci. Przegląd metod stosowanych do opisu własności stopów przedstawiono w monografiach [23, 24].

W większości prac teoretycznych dotyczących analizy własności stopów półprzewodnikowych stosuje się metodę kryształu wirtualnego (VCA). W modelu tym rozważa się rzeczywisty potencjał jako sumę dwu potencjałów: potencjału periodycznego $V_{VC}(\vec{r})$ o symetrii sieci krystalicznej stopu, oraz potencjału nieperiodycznego $V_R(\vec{r})$ wywołanego przypadkowym rozkładem atomów A i B. Potencjał periodyczny zakłada się w postaci:

$$V_{VC}/\vec{r}/ = \sum_{\vec{R}_n} \left\{ x V^A/\vec{r}-\vec{R}_n/ + (1-x) V^B/\vec{r}-\vec{R}_n/ \right\} . \quad /1/$$

gdzie x jest składem molowym, $V^A/\vec{r}/$ i $V^B/\vec{r}/$ są potencjałami atomów czystych składników A i B.

Następnie zaniedbując nieperiodyczną część potencjału i biorąc do obliczeń tylko potencjał $V_{VC}/\vec{r}/$ można, stosując standartowe metody pasmowej teorii ciała stałego, znaleźć strukturę pasmową stopu. Przybliżenie takie daje dobre rezultaty gdy potencjały $V^A/\vec{r}/$ oraz $V^B/\vec{r}/$ mało różnią się między sobą. Sytuacja taka ma miejsce np. w stopach Ge-Si oraz /Cd,Hg/Te.

W przybliżeniu kryształu wirtualnego przerwa energetyczna oraz energia rozszczepienia spin-orbita zmieniają się liniowo ze składem. Jednakże dla dużej ilości stopów półprzewodnikowych eksperymentalne wartości przerwy energetycznej oraz energii rozszczepienia spin-orbita wykazują /nieznaczne/ odchylenia od liniowej zmiany w funkcji składu. Odchylenia te można wytłumaczyć wpływem nieperiodycznej składowej potencjału sieciowego na stany elektronowe [25 ÷ 27] lub wpływem różnicy stałych sieci składowych stopu [28]. Nieperiodyczny potencjał $V_R/\vec{r}/$ będzie mieszał funkcje falowe pasm: walencyjnego i przewodnictwa.

Jeżeli założyć periodyczną część potencjału sieciowego w postaci /1/, to nieperiodyczna część potencjału sieciowego będzie miała postać:

$$V_R/\vec{r} = V/\vec{r} - V_{VC}/\vec{r} = \sum_{\vec{R}_n} (\Theta_{\vec{R}_n} - x) \cdot V_{BA}/\vec{r} - \vec{R}_n/ \quad /2/$$

gdzie

$$V_{BA}/\vec{r} = V^A/\vec{r} - V^B/\vec{r} \quad /3/$$

Zmienna losowa $\Theta_{\vec{R}_n}$ zdefiniowana jest następująco:

$$\Theta_{\vec{R}_n} = \begin{cases} 1 & \text{jeżeli w węźle } \vec{R}_n \text{ znajduje się atom A} \\ 0 & \text{jeżeli w węźle } \vec{R}_n \text{ znajduje się atom B} \end{cases} \quad /4/$$

Nieperiodyczny potencjał dany wzorem /2/ (tzw. potencjał stopowy) będzie wpływał na własności transportowe i optyczne półprzewodnikowych kryształów mieszanych, będąc źródłem rozpraszania elektronów.

W przypadku zjawisk transportowych prowadzić to będzie do obniżenia się wartości ruchliwości nośników prądu wskutek rozpraszania na potencjale /2/ (tzw. rozpraszanie stopowe) [29 ÷ 36]. Traktując potencjał $V_R/\vec{r}$ jako zaburzenie, policzono w pracy [32] ruchliwość elektronów związaną z tym potencjałem dla materiałów o strukturze krystalicznej blendy cynkowej. W pracach [33, 34, 36, 37] wykazano, że uwzględnienie rozpraszania stopowego pozwala na lepsze dopasowanie krzywych teoretycznych do eksperymentalnych wartości ruchliwości.

Wpływ rozpraszania stopowego na własności optyczne badano w pracach [38, 39]. W pracy [38] zbadano wpływ rozpraszania stopowego na własności optyczne materiałów o strukturze krystalicznej blendy cynkowej. Wykazano, że w przypadku kryształów mieszanych $Cd_xHg_{1-x}Te$ absorpcja światła przez swobodne nośniki, związana z istnieniem nieporządku chemicznego, może być porównywalna z absorpcją związaną z istnieniem zjonizowanych domieszek. W pracy [39] badano wpływ nieporządku chemicznego na absorpcję wewnątrzprasmową w $Pb_xSn_{1-x}Te$.

Nieporządek chemiczny generuje lokalne fluktuacje składu molowego, wywołując lokalne zmiany energii ekstremów pasm oraz masy efektywnej [40, 41]. Wpływ tych fluktuacji na absorpcję światła przez swobodne nośniki o parabolicznym równaniu dyspersji rozpa-

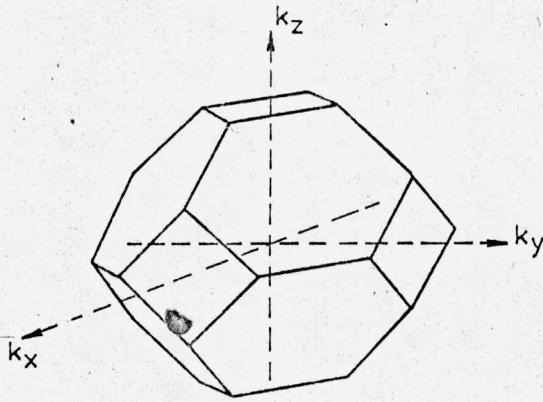
trazono w pracach [41, 42]. W pracy [42] wykazano, że w przypadku absorpcji światła w obecności kwantującego pola magnetycznego, istnienie fluktuacji składu prowadzi do zniesienia reguł wyboru. Uwzględnienie tych fluktuacji prowadzi do pojawienia się dodatkowych przejść optycznych ze zmianą numeru podpasma Landaua o $\Delta N \geq 2$.

2. Struktura pasmowa $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ w przybliżeniu kryształu wirtualnego.

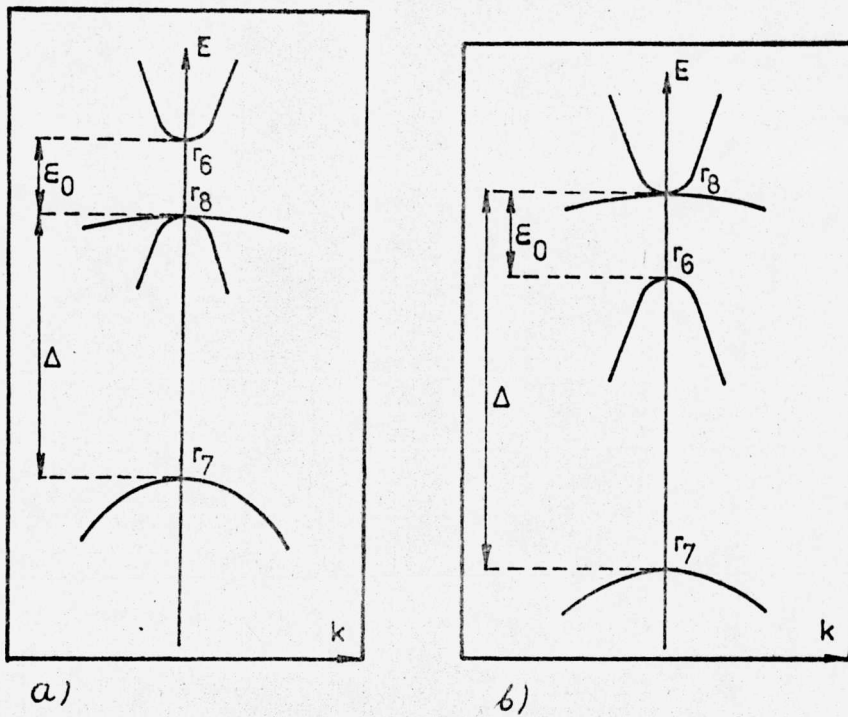
$\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ jest trójskładnikowym kryształem mieszanym, otrzymywanym na bazie dwu związków grupy II-VI: HgTe oraz CdTe. Oba związki wyjściowe należą do grupy związków półprzewodnikowych krystalizujących w postaci sieci krystalicznej typu blendy cynkowej. Sieć krystaliczna blendy cynkowej składa się z dwóch wzajemnie przenikających się sieci regularnych, powierzchniowo centrowanych. Atomy w każdej z dwóch podsieci są różne, dlatego też struktura ta nie posiada środka inwersji. Struktura blendy cynkowej posiada symetrię grupy punktowej T_d . Pierwsza strefa Brillouina jest czternastościanem /rys.1/. W punkcie $/\vec{k}=0/$ pierwszej strefy Brillouina stany elektronowe można sklasyfikować według trzech nieprzywiedlnych reprezentacji $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ podwójnej grupy punktowej T_d^2 . Stany Γ_6, Γ_7 są dwukrotnie zdegenerowane, natomiast stan Γ_8 jest czterokrotnie zdegenerowany.

W zależności od wzajemnego ułożenia pasm $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ struktura energetyczna może być prosta lub odwrócona. W strukturze prostej $E_{\Gamma_6} > E_{\Gamma_8}$ /rys.2a/, natomiast w strukturze odwróconej $E_{\Gamma_6} < E_{\Gamma_8}$ /rys.2b/. CdTe posiada prostą strukturę energetyczną, natomiast HgTe odwróconą [43].

Półprzewodnikowy kryształ mieszany $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ powstaje w wyniku zamiany atomów rtęci atomami kadmu. Zamiana ta następuje w przypadkowym węźle sieci krystalicznej, tak więc atomy Cd i Hg ułożone są w węzłach sieci w sposób przypadkowy. Stop jako całość nie posiada symetrii translacyjnej, zatem nie jest możliwe, bez odpowiednich przybliżeń, zastosowanie do obliczenia struktury pasmowej standartowych metod teorii ciała stałego. Najczęściej sto-



Rys.1. Pierwsza strefa Brillouina dla struktury krystalicznej typu blendy cynkowej.



Rys.2. Struktura pasmowa $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ w pobliżu punktu Γ :
a/struktura prosta ; b/odwrócona.

sowanym przybliżeniem jest przybliżenie kryształu wirtualnego, w którym rzeczywisty potencjał $V(\vec{r})$ sieciowy zastępuje się przybliżonym potencjałem danym wzorem /1/.

Takie przybliżenie przywraca symetrię translacyjną jednoelektronowemu hamiltonianowi stopu. Przyjęcie przybliżonego potencjału w postaci /1/ powoduje, że otrzymane w tym przybliżeniu własności kryształu mieszanego zmieniać się będą wraz ze zmianą składu molowego x , od własności tellurku rtęci $/x=0/$ do własności tellurku kadmu $/x=1/$. W szczególności powinno to dotyczyć zmiany przerwy energetycznej wraz ze zmianą składu. Zmiana taka została stwierdzona eksperymentalnie w wielu pracach [44., 45]. W przybliżeniu kryształu wirtualnego przerwa energetyczna oraz energia rozszczepienia spin-orbita powinny być liniowymi funkcjami składu molowego. Jednakże niektóre eksperymentalne wartości zmiany przerwy energetycznej w funkcji składu wykazują, w przypadku $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, nieznaczne odchylenia od liniowości [44, 45]. Wartość energii spin-orbitalnego rozszczepienia jest natomiast praktycznie niezależna od składu [46]. W temperaturze 4.2 dla składów $x < 0.165$ mamy do czynienia z odwróconą strukturą pasmową, natomiast dla $x > 0.165$ ze strukturą prostą [47].

W przybliżeniu kryształu wirtualnego równanie dyspersji w pobliżu punktu Γ otrzymać można przy zastosowaniu modelu Kane'a [48]. W modelu tym uwzględnia się ściśle oddziaływanie pomiędzy pasmami Γ_6 , Γ_7 , i Γ_8 . Oddziaływanie z pozostałymi pasmami uwzględnia się metodami rachunku zaburzeń.

Uwzględniając w pierwszym przybliżeniu jedynie oddziaływanie pomiędzy pasmami Γ_6 , Γ_7 , oraz Γ_8 otrzymać można [48÷50] dla energii $E \ll E_g + \Delta$, równanie dyspersji dla pasma przewodnictwa w postaci

$$E(k) = -\frac{E_g}{2} + \left\{ \left(\frac{E_g}{2} \right)^2 + E_g \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*} \right\}^{1/2}, \quad /5/$$

gdzie $E_g = |E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}|$ jest przerwą energetyczną.

Jako początek odliczania energii przyjęto energię dna pasma przewodnictwa. m_c^* jest masą efektywną elektronu na dnie pasma. Dla struktury prostej

$$\frac{1}{m_c^*} = \frac{4 P^2}{3 \hbar^2 E_g} \frac{\Delta + \frac{3}{2} E_g}{\Delta + E_g} \quad , \quad /6/$$

a dla struktury odwróconej

$$\frac{1}{m_c^*} = \frac{4 P^2}{3 \hbar^2 E_g} \quad , \quad /7/$$

gdzie $\Delta = E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_7}$ jest energią rozszczepienia spin-orbita,
a

$$P = - \frac{i \hbar}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle \quad . \quad /8/$$

m_0 oznacza masę swobodnego elektronu. Funkcje S oraz X są periodycznymi funkcjami transformującymi się jak funkcje atomowe s oraz p pod działaniem operacji symetrii grupy punktowej T_d .

Przesuwając początek odliczania energii do wierzchołka pasma dziur lekkich i przyjmując, że energia dziur rośnie w głąb pasma, otrzymamy dla energii dziur lekkich $E_{lh} \ll \frac{2}{3} \Delta$ równanie dyspersji w postaci:

$$E_{lh}(k) = - \frac{E_g}{2} + \left\{ \left(\frac{E_g}{2} \right)^2 + E_g \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_{lh}^*} \right\}^{1/2} \quad /9/$$

gdzie dla struktury prostej

$$\frac{1}{m_{lh}^*} = \frac{4 P^2}{3 \hbar^2 E_g} \quad , \quad /10/$$

a dla struktury odwróconej

$$\frac{1}{m_{lh}^*} = \frac{4 P^2}{3 \hbar^2 E_g} \frac{\Delta + \frac{3}{2} E_g}{\Delta + E_g} \quad /11/$$

3. Stany elektronowe w obecności kwantującego pola magnetycznego

3.1 Model wielopasmowy.

Równanie opisujące ruch elektronu w kryształach w obecności zewnętrznego, jednorodnego pola magnetycznego zaburzającego pole periodyczne sieci $V_0/\vec{r}$ ma postać:

$$H\Psi = \left[H_0(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r})) + \frac{1}{2}g_0\mu_0\vec{B}\cdot\vec{\sigma} \right] \Psi = E\Psi, \quad /12/$$

gdzie

$$H_0(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \vec{p} \quad /13/$$

jest operatorem Schrödingera dla idealnej sieci. $\vec{A}$ jest potencjałem wektorowym pola magnetycznego, $\mu_0 = e\hbar/2m_0$ jest magnetonem Bohra, g_0 jest czynnikiem giromagnetycznym swobodnego elektronu, a $\vec{\sigma}$ jest wektorem o składowych będącymi macierzami Pauliego

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad /14/$$

Hamiltonian /12/ nie posiada symetrii translacyjnej, dlatego też jego funkcje własne nie są funkcjami Blocha. Jeżeli zewnętrzne pole magnetyczne jest dostatecznie gładkie, tzn. mało zmienia się na odległości rzędu stałej sieci, to zagadnienie ruchu elektronów znajdujących się w pobliżu interesującego nas punktu $\vec{k}_0$ można sprowadzić do problemu ruchu cząstki o określonej masie efektywnej w wolnozmiennym polu zewnętrznym. W przypadku pasm zdegenerowanych lub silnie oddziaływujących /qasizdegenerowanych/ ruch ten jest opisany poprzez układ równań.

W przybliżeniu masy efektywnej funkcję falową elektronu zapisuje się [51] w postaci iloczynu wolnozmiennnej funkcji $\mathcal{F}_L(\vec{r})$ i funkcji własnych $\psi_{n,\vec{k}_0} = e^{i\vec{k}_0\vec{r}} u_{n,\vec{k}_0}$ niezaburzonego

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_l \mathcal{F}_l(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} u_{l\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad , \quad /15/$$

gdzie sumowanie przebiega po wszystkich pasmach energetycznych. Funkcje $\mathcal{F}_l(\vec{r})$ są wolnozmiennymi funkcjami położenia, mało zmieniającymi się w obszarze komórki elementarnej. Funkcje $u_{n,\vec{k}_0}$ są funkcjami periodycznymi o okresie będącym wektorem sieci krystalicznej, unormowanymi w objętości komórki elementarnej

$$\langle u_{l\vec{k}_0} | u_{l'\vec{k}_0} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{l\vec{k}_0}^*(\vec{r}) u_{l'\vec{k}_0}(\vec{r}) d^3r = \delta_{ll'} \quad . \quad /16/$$

Rozwińmy funkcję $\mathcal{F}_l(\vec{r})$ w szereg Fouriera

$$\mathcal{F}_l(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} c_{l\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad , \quad /17/$$

gdzie

$$c_{l\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int \mathcal{F}_l(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad . \quad /18/$$

V jest objętością pudła periodyczności o krawędziach L_x, L_y, L_z . Podstawiając wyrażenie /17/ do wzoru /15/ otrzymujemy rozwinięcie funkcji falowej elektronu w postaci:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_l \sum_{\vec{k}} c_{l\vec{k}} \phi_{l\vec{k}}(\vec{r}) \quad , \quad /19/$$

gdzie funkcje $\phi_{l\vec{k}}(\vec{r})$ /tzw. funkcje Luttingera-Kohna [52]/ dane są następującą zależnością:

$$\phi_{l\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k} + \vec{k}_0) \cdot \vec{r}} u_{l\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad . \quad /20/$$

Wstawiając rozwinięcie /19/ do równania /12/, a następnie mnożąc obie strony równania przez $\phi_{n'\vec{k}}^*$ i całkując po współrzędnych otrzymamy:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n'\vec{k}} | H | \phi_{n\vec{k}} \rangle = & \frac{1}{V} \langle \psi_{n'\vec{k}_0} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} | H_0(\vec{r}) | \psi_{n\vec{k}_0} \rangle + \\ & + \frac{1}{2m_0} \frac{1}{V} \langle \psi_{n'\vec{k}_0} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} | 2\hbar \vec{k}\cdot\vec{\pi} + e(\vec{A}\cdot\vec{\pi} + \vec{\pi}\cdot\vec{A}) | \psi_{n\vec{k}_0} \rangle + \\ & + \frac{1}{2m_0} \langle \phi_{n'\vec{k}} | (\hbar\vec{k} + e\vec{A})^2 | \phi_{n\vec{k}} \rangle + \frac{1}{2} g_0 \mu_0 \langle \phi_{n'\vec{k}} | \vec{\sigma}\cdot\vec{B} | \phi_{n\vec{k}} \rangle, \end{aligned} \quad /21/$$

gdzie

$$\vec{\pi} = \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V_0) \quad , \quad /22/$$

Założmy, że potencjał wektorowy zewnętrznego pola magnetycznego nieznacznie zmienia się na odległości rzędu stałej sieci. Dla takiego przypadku można pokazać [51], że

$$\frac{1}{V} \langle \psi_{n'\vec{k}_0} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} | \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{\pi} | \psi_{n\vec{k}_0} \rangle = \vec{A}_{\vec{k}'-\vec{k}} \cdot \vec{\pi}_{n'n} \quad , \quad /23/$$

oraz

$$\frac{1}{V} \langle \psi_{n'\vec{k}_0} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} | \vec{\pi} \cdot \vec{A}(\vec{r}) | \psi_{n\vec{k}_0} \rangle = \vec{A}_{\vec{k}'-\vec{k}} \cdot [\vec{\pi}_{n'n} + \hbar(\vec{k}'-\vec{k})\delta_{nn'}] \quad , \quad /24/$$

gdzie $\vec{A}_{\vec{k}'-\vec{k}} = \frac{1}{V} \int \vec{A}(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} d^3r \quad .$

Wykorzystując związki /23/ i /24/ można przedstawić macierz $H_{n'\vec{k}', n\vec{k}}$ w postaci sumy dwu macierzy: H_0 zawierającej tylko elementy wewnątrzpasmowe

$$(H_0)_{n'\vec{k}', n\vec{k}} = E_n(\vec{k}) \delta_{nn'} \delta_{\vec{k}', \vec{k}} + \frac{1}{2} g_0 \mu_0 \vec{\sigma}_{nn'} \cdot \vec{B}_{\vec{k}' - \vec{k}} + \quad /26/$$

$$+ \frac{1}{2m_0} \left\{ \hbar^2 k^2 \delta_{\vec{k}', \vec{k}} + e\hbar(\vec{k}' + \vec{k}) \vec{A}_{\vec{k}' - \vec{k}} + e^2 A_{\vec{k}' - \vec{k}}^{(2)} \right\} \delta_{nn'}$$

i macierzy H' , zawierającej wyrazy międzypasmowe

$$(H')_{n'\vec{k}', n\vec{k}} = \frac{1}{m_0} (\hbar \vec{k} \delta_{\vec{k}', \vec{k}} + e \vec{A}_{\vec{k}' - \vec{k}}) \cdot \vec{\pi}_{nn'} \quad . \quad /27/$$

W rezultacie otrzymujemy układ równań

$$\sum_n \sum_{\vec{k}} \left\{ (H_0)_{n'\vec{k}', n\vec{k}} + (H')_{n'\vec{k}', n\vec{k}} \right\} = E c_{n'\vec{k}'} \quad . \quad /28/$$

Układ równań /28/ zawiera sumę po wszystkich pasmach. Układ ten zapisać można w następującej postaci macierzowej:

$$\left| H_0 + H' - EI \right| C = 0 \quad , \quad /29/$$

gdzie I jest macierzą jednostkową, C jest wektorem o składowych $c_{nm} = c_{n\vec{m}}$. Wartości własne E są pierwiastkami równania

$$\left| H_0 - IE + H' \right| = 0 \quad /30/$$

Zatem problem wyznaczenia wartości własnych E sprowadza się do problemu diagonalizacji macierzy $H = H_0 + H'$. Zazwyczaj diagonalizację macierzy H przeprowadza się metodą kolejnych przybliżeń, którą to stosuje się gdy wszystkie niediagonalne elementy

H_{nn} , są małe w porównaniu z odpowiednimi różnicami energii poziomów niezaburzonych $E_n^0 - E_n^0$.

W wielu przypadkach wygodnie jest posługiwać się metodą teorii zaburzeń w postaci zaproponowanej przez Löwdina [53]. W metodzie tej zakłada się, że wszystkie stany można rozdzielić na dwie grupy: A i B. Stany grupy A mogą silnie oddziaływać między sobą, ale słabo ze stanami grupy B. Podobnie jak w zwykłej teorii zaburzeń, oddziaływania wiążące stany A i B usuwa się za pomocą procedury iteracyjnej, co powoduje zmianę elementów macierzowych oddziaływania między stanami A. Następnie przekształconą w ten sposób macierz oddziaływania diagonalizuje się ściśle. Metodą tą otrzymuje się od razu układ równań dla danych N silnie oddziaływujących stanów $m^1, m^2, \dots, m^N$. Układ ten uwzględnia wkład wszystkich innych stanów $l, l', l'' \dots$ w żądanym rzędzie rachunku zaburzeń.

Najwygodniej otrzymuje się taki układ równań poprzez zastosowanie unitarnej transformacji e^S [52] częściowo diagonalizującej hamiltonian [28], to znaczy takiej aby przetransformowana macierz

$$H = e^{-S} H e^S \quad /31/$$

nie zawierała pozadiagonalnych składowych H_{ml} ($m \in \{A\}, l \in \{B\}$). Tak więc układ równań

$$(\tilde{H} - EI) C = 0 \quad /32/$$

rozpada się na dwa niezależne układy równań. Pierwszy dla stanów silnie oddziaływujących $\{m\}$, oraz drugi dla wszystkich pozostałych $\{l\}$.

W rzeczywistości, poza najprostszymi przypadkami, ściśle wyznaczenie macierzy S nie jest możliwe. W związku z tym poszukuje się macierzy e^S w postaci rozwinięcia w szereg

$$e^S = I + S + \frac{1}{2!} S^2 + \frac{1}{3!} S^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} S^n \quad /33/$$

Następnie macierz e^S wyznacza się metodą kolejnych przybliżeń. Wstawiając rozwinięcie /33/ do równania /31/ otrzymamy

$$\tilde{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \{H, S\}^{(n)} . \quad /34/$$

We wzorze tym przyjęto następujące oznaczenia:

$$\{H, S\}^{(0)} = H ; \{H, S\}^{(1)} = \{H, S\} ; \{H, S\}^{(2)} = \{\{H, S\}, S\} ; \dots$$

gdzie $\{\dots\}$ oznacza komutator.

Rozłóżmy macierz H na macierz "diagonalną" H_1 , nie zawierającą składowych H_{m1} , oraz macierz "niediagonalną" H_2 , nie zawierającą składowych H_{mm} , i H_{11} . Wówczas równanie /31/ można zapisać w postaci:

$$\tilde{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \{H^0, S\}^{(n)} + \sum_{n=0}^{\infty} \{H_2, S\}^{(n)} , \quad /35/$$

gdzie

$$H^0 = H_0 + H_1 . \quad /36/$$

Ponieważ macierz S również jest macierzą niediagonalną, to "diagonalna" część macierzy $\tilde{H}_d$ powinna zawierać komutatory $\{H^0, S\}^{(i)}$ z parzystymi potęgami i komutatory $\{H_2, S\}^{(i)}$ z nieparzystymi potęgami: "niediagonalna" część macierzy $\tilde{H}_{nd}$ - odwrotnie-komutatory $\{H^0, S\}^{(i)}$ z nieparzystymi potęgami oraz $\{H_2, S\}^{(i)}$ z parzystymi potęgami:

$$\tilde{H}_d = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t)!} \{H^0, S\}^{(2t)} + \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t+1)!} \{H_2, S\}^{(2t+1)} . \quad /37/$$

Macierz S wyznacza się z warunku zerowania się części "niediagonalnej"

$$\tilde{H}_{nd} = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t+1)!} \{H^0, S\}^{(2t+1)} + \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{(2t)!} \{H_2, S\}^{(2t)} = 0 . \quad /38/$$

Równanie /38/ można rozwiązać metodą kolejnych przybliżeń, kładąc

$$S = S_1 + S_2 + S_3 + \dots, \quad /39/$$

gdzie S_1 jest macierzą pierwszego rzędu względem H_1 , S_2 jest macierzą drugiego rzędu itd. Zachowując w /37/ kolejno wyrazy pierwszego, drugiego itd. rzędów otrzymamy [51]:

$$\begin{aligned} \{H_0, S_1\} &= -H_2, \\ \{H_0, S_2\} &= -\{H_1, S_1\}, \\ \{H_0, S_3\} &= -\{H_1, S_2\} - \{\{H_2, S_1\}, S_1\}, \end{aligned} \quad /40/$$

itd.

Wykorzystując zależność

$$\{H_0, S\}_{ml} = (E_m^0 - E_l^0) S_{ml} \quad /41/$$

z równań /40/ otrzymamy

$$(S_1)_{ml} = - \frac{H'_{ml}}{E_m^0 - E_l^0}, \quad /42/$$

$$(S_2)_{ml} = \sum_{m'} \frac{H'_{mm'} H'_{m'l}}{(E_m^0 - E_l^0)(E_{m'}^0 - E_l^0)} - \sum_{l'} \frac{H'_{ml'} H'_{l'l}}{(E_m^0 - E_{l'}^0)(E_m^0 - E_{l'}^0)}.$$

Uwzględniliśmy przy tym, że dla operatora H_1 różne od zera są jedynie "diagonalne" elementy macierzowe $(H_1)_{mm} = H'_{mm}$, oraz $(H_1)_{11} = H'_{11}$, a dla operatora H_2 - jedynie niediagonalne $(H_2)_{ml} = H'_{ml}$.

Znając macierz S znajdujemy operator $\tilde{H}$, który można zapisać w następującej postaci [51, 52]:

$$\tilde{H} = H_0 + H_1 + \frac{1}{2} \{H_2, S_1\} + \frac{1}{2} \{H_2, S_2\} + \frac{1}{2} \{H_2, S_3\} + \dots \quad /43/$$

Podstawiając wartości $(S_1)_{m1}$ z równości /42/ znajdujemy elementy macierzowe H_{mm} , z dokładnością do wyrazów drugiego rzędu:

$$\tilde{H}_{m'\vec{k}', m\vec{k}} = H_{m'\vec{k}', m\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_S \sum_{\vec{k}''} H'_{m'\vec{k}', S\vec{k}''} H'_{S\vec{k}'', m\vec{k}} \left(\frac{1}{E_m - E_S} + \frac{1}{E_{m'} - E_S} \right) . \quad /44/$$

Obecnie układ równań /35/ zastąpiony zostanie układem równań zawierającym jedynie elementy wewnątrzpasmostwo efektywnego hamiltonianu /31/ pomiędzy stanami silnie oddziaływującymi:

$$\sum_m \sum_{\vec{k}} \tilde{H}_{m'\vec{k}', m\vec{k}} \tilde{c}_{m\vec{k}} = E \tilde{c}_{m'\vec{k}'} , \quad /45/$$

gdzie

$$\tilde{c} = e^{-S} c . \quad /46/$$

Przechodząc w układzie równań /45/ do reprezentacji położenia otrzymamy

$$\sum_m \tilde{H}_{m'm} F_m(\vec{r}) = E F_m(\vec{r}) , \quad /47/$$

gdzie

$$H_{m'm} = \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} \cdot \vec{\pi}_{m'm} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{\alpha\beta} [K_\alpha K_\beta] \times \quad /48/$$

$$\times \left\{ \delta_{\alpha\beta} \delta_{m'm} + \frac{1}{2m_0} \sum_S (\pi_{m'S}^\alpha \pi_{Sm}^\beta + \pi_{m'S}^\beta \pi_{Sm}^\alpha) \left(\frac{1}{E_m^0 - E_S^0} + \frac{1}{E_{m'}^0 - E_S^0} \right) \right\} +$$

$$+ \frac{1}{2} \mu_0 \sum_\gamma B_\gamma \left\{ g_0 \sigma_{m'm}^\gamma - \frac{i}{2m_0} \sum_{\alpha\beta} \pi_{m'S}^\alpha \pi_{Sm}^\beta \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{1}{E_m^0 - E_S^0} + \frac{1}{E_{m'}^0 - E_S^0} \right) \right\} ,$$

$$F_m(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \tilde{c}_{m\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad , \quad /49/$$

$$\vec{K} = -i\nabla + \frac{e}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \quad , \quad /50/$$

$$[K_\alpha K_\beta] = \frac{1}{2} (K_\alpha K_\beta + K_\beta K_\alpha) \quad . \quad /51/$$

3.2. Przybliżenia trójpasmowe dla półprzewodników typu $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

W półprzewodnikach z wąską przerwą energetyczną już w stosunkowo niewysokich temperaturach przy niewielkich koncentracjach nośników prądu ich energia może być porównywalna z wartością przerwy energetycznej. W takim przypadku należy przy konstruowaniu efektywnego hamiltonianu /31/ uwzględnić dokładnie kilka najbliższych pasm usuwając, przy pomocy transformacji /33/, oddziaływanie rozważanych pasm z dalej położonymi.

W niniejszej pracy rozpatrywać będziemy stany elektronowe w kryształach mieszanym $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ w pobliżu punktu Γ w przybliżeniu trójpasmowym. W przybliżeniu tym uwzględnia się dokładnie oddziaływanie pomiędzy pasmami Γ_6 , Γ_7 , Γ_8 , pomijając wpływ pozostałych pasm. Model trójpasmowy dobrze opisuje cechy struktury pasmowej półprzewodników z wąską przerwą energetyczną, a więc nieparaboliczność pasm: przewodnictwa i lekkich dziur, oraz przestrzenną i spinową symetrię funkcji falowych. Nie opisuje ono natomiast dobrze pasma dziur ciężkich, które w tym przybliżeniu jest pasmem płaskim. Zaletą tego modelu jest wyrażenie energii i współczynników w funkcji falowej w postaci analitycznych funkcji zmiennej K_z .

Periodyczne części funkcji Luttingera-Kohna /20/ wybiera się w taki sposób by diagonalizowały one hamiltonian oddziaływania spin-orbita w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń. Kwantując moment pędu wzdłuż osi z , oraz przyjmując energię dna pasma przewodnictwa jako początek odliczenia energii funkcje te dla struktury prostej przedstawić można [54] w następującej postaci:

$$u_{1,0} = i S \uparrow$$

$$E_1^0 = 0$$

$$u_{2,0} = R_+ \uparrow$$

$$E_2^0 = -E_g$$

$$u_{3,0} = (1/3)^{1/2} R_- \uparrow + (2/3)^{1/2} Z \downarrow$$

$$E_3^0 = -E_g$$

$$u_{4,0} = -(2/3)^{1/2} R_- \uparrow + (1/3)^{1/2} Z \downarrow$$

$$E_4^0 = -E_g - \Delta$$

$$u_{5,0} = i S \downarrow$$

$$E_5^0 = 0 \quad /52/$$

$$u_{6,0} = R_- \downarrow$$

$$E_6^0 = -E_g$$

$$u_{7,0} = -(1/3)^{1/2} R_+ \downarrow + (2/3)^{1/2} Z \uparrow$$

$$E_7^0 = -E_g$$

$$u_{8,0} = (2/3) R_+ \downarrow + (1/3)^{1/2} Z \uparrow$$

$$E_8^0 = -E_g - \Delta$$

gdzie $R_{\pm} = (X \pm i Y)/\sqrt{2}$, a symbole $\uparrow$ oraz $\downarrow$ oznaczają funkcje własne operatora $\mathcal{B}_z$. S oraz X, Y, Z są periodycznymi, unormowanymi w objętości komórki elementarnej funkcjami transformującymi się podobnie jak funkcje atomowe s oraz p pod działaniem operacji symetrii grupy punktowej T_d w punkcie Γ . Wielkości E_i^0 są wartościami energii w punkcie Γ odpowiadającymi funkcjom własnym $u_{j,0}$ niezaburzonego hamiltonianu /13/ w punkcie $\vec{k} = 0$. Osie układu współrzędnych wybrane są wzdłuż osi krystalograficznych.

W przybliżeniu trójpasnowym efektywny hamiltonian powstaje z macierzy /48/ przez przyrównanie do zera wszystkich elementów drugiego rzędu i ma postać daną wzorem /53/. Równanie masy efektywnej można zapisać w następującej postaci macierzowej:

$$(D_0 - I\lambda) F = 0$$

/54/

gdzie F jest wektorem własnym zapisanym w następującej postaci:

$D_0 =$

$-\lambda$	$t P_+$	$\sqrt{\frac{1}{3}} t P_-$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} t P_-$	0	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} t P_z$	$\sqrt{\frac{1}{3}} t P_z$
$t P_-$	$-E_g - \lambda$	0	0	0	0	0	0
$\sqrt{\frac{1}{3}} t P_+$	0	$-E_g - \lambda$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} t P_z$	0	0	0
$-\sqrt{\frac{2}{3}} t P_+$	0	0	$-E_g - \Delta - \lambda$	$\sqrt{\frac{1}{3}} t P_z$	0	0	0
0	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} t P_z$	$\frac{1}{3} t P_z$	$-\lambda$	$t P_-$	$-\sqrt{\frac{1}{3}} t P_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}} t P_+$
0	0	0	0	$t P_+$	$-E_g - \lambda$	0	0
$\sqrt{\frac{2}{3}} t P_z$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}} t P_-$	0	$-E_g - \lambda$	0
$\sqrt{\frac{1}{3}} t P_z$	0	0	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} t P_-$	0	0	$-E_g - \Delta - \lambda$

/53/

$$P_{\pm} = (P_x \pm i P_y) \quad ; \quad t = \frac{-i}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle$$

$$F = \begin{bmatrix} d_1 f_1 / \vec{r} / \\ d_2 f_2 / \vec{r} / \\ d_3 f_3 / \vec{r} / \\ d_4 f_4 / \vec{r} / \\ d_5 f_5 / \vec{r} / \\ d_6 f_6 / \vec{r} / \\ d_7 f_7 / \vec{r} / \\ d_8 f_8 / \vec{r} / \end{bmatrix} \cdot \exp(ik_x x + ik_z z) \quad /55/$$

$d_1, d_2 \dots d_8$ są współczynnikami numerycznymi, $f_1, f_2 \dots f_8$ są funkcjami położenia. Wektory własne F mają taką samą postać dla wszystkich stanów, a różnią się tylko współczynnikami d_1 . Funkcje $f_1 \dots f_8$ mogą być wyrażone poprzez funkcje f_1 i f_2 .

Rozważać będziemy przypadek gdy zewnętrzne pole magnetyczne skierowane jest wzdłuż osi z ($\vec{B} = (0, 0, B)$). Biorąc pod uwagę, że

$$\{P_x, P_y\} = -i\hbar s, \quad \{P_z, P_x\} = \{P_z, P_y\} = 0, \quad /56/$$

gdzie

$$s = \frac{1}{L^2} = \frac{eB}{\hbar}, \quad /57/$$

otrzymać można [55, 56] równania na funkcje f_1 i f_2 w postaci:

$$[\lambda(\lambda + E_g)(E_g + \Delta + \lambda) - \epsilon^2 P^2(\lambda + E_g + \frac{2}{3}\Delta) - \frac{1}{3}\epsilon^2 \hbar^2 \Delta s] f_1(\vec{r}) = 0, \quad /58/$$

$$[\lambda(\lambda + E_g)(E_g + \Delta + \lambda) - \epsilon^2 P^2(\lambda + E_g + \frac{2}{3}\Delta) + \frac{1}{3}\epsilon^2 \hbar^2 \Delta s] f_2(\vec{r}) = 0, \quad /59/$$

W równaniach /58/ i /59/ zaniedbano człon $P^2/2m_0$ zawierający w mianowniku masę swobodnego elektronu. Równania te są

równaniami oscylatora harmonicznego. Można pokazać, że w przypadku $\vec{B} \neq 0$ rozwiązanie $f_1/r/$ równania /58/ nie spełnia równania /59/ - i odwrotnie. Tak więc mamy do czynienia z dwoma ortogonalnymi rozwiązaniami równania /54/. Pierwsze odpowiadające przypadkowi gdy $d_2 = d_6 = 0$, oznaczane dalej jako F^- ; oraz drugie gdy $d_1 = d_3 = 0$, oznaczane dalej F^+ .

Jeżeli wybrać cechowanie potencjału wektorowego pola magnetycznego w postaci cechowania Landaua

$$\vec{A}(\vec{r}) = (-Hy, 0, 0), \quad /60/$$

to rozwiązań równań /58/ i /59/ poszukiwać można w postaci

$$f_{12}(\vec{r}) = \exp(ik_x x + ik_z z) \phi_n\left(\frac{y - y_0}{L}\right), \quad /61/$$

gdzie $\phi_n\left(\frac{y - y_0}{L}\right)$ jest unormowaną funkcją jednowymiarowego oscylatora harmonicznego, $y_0 = -k_x L^2$.

$$\int \phi_{n'}\left(\frac{y - y_0}{L}\right) \phi_n\left(\frac{y - y_0}{L}\right) dy = \delta_{nn'}.$$

Wstawiając 961/ do /58/ i /59/ otrzymamy układ równań na wartości własne

$$\begin{aligned} & \lambda(\lambda + E_g)(\lambda + E_g + \Delta) - \epsilon^2 \hbar^2 [S(2n+1) + k_z^2] (\lambda + E_g + \frac{2}{3}\Delta) \pm \\ & \pm \frac{1}{3} \epsilon^2 \hbar^2 S \Delta = 0. \end{aligned} \quad /62/$$

Trzy pierwiastki każdego z tych równań dają równanie dyspersji dla poziomów Landau pochodzących głównie z - odpowiednio - pasma przewodnictwa, pasma lekkich dziur, oraz pasma rozszczepionego w wyniku oddziaływania spin-orbita. Czwarty pierwiastek $\lambda_4 = -E_g$ odpowiada pasmu dziur ciężkich, które w tym modelu jest zupełnie płaskie. Znaki plus i minus w równaniu /62/ odpowiadają dwom rzutom spinu na kierunek osi z. Widać stąd, że rozszczepienie spinowe jest proporcjonalne do Δ - energii oddziaływania spin-orbita.

Dokładne rozwiązanie równania /62/ może nastąpić jedynie na drodze numerycznej. Jeżeli ograniczyć się do energii elektronów takich, że $\lambda \ll E_g + \frac{2}{3}\Delta$, wówczas równania /62/ dają następujące rozwiązania dla poziomów Landau z pasma przewodnictwa [55, 56]

$$\lambda_{n,k_z}^{\pm} = -\frac{E_g}{2} + \left[\left(\frac{E_g}{2} \right)^2 + E_g D_{n,k_z}^{\pm} \right]^{1/2}, \quad /63/$$

gdzie

$$D_{n,k_z}^{\pm} = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_c^*} \mp \frac{1}{2} \mu_B |g_e^*| B, \quad /64/$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m_c^*}. \quad /65/$$

Efektywny g-czynnik elektronu na dnie pasma wyraża się zależnością:

$$g_e^* = -\frac{m_0}{m_c^*} \frac{\Delta}{\Delta + \frac{3}{2}E_g}. \quad /66/$$

Przenieśmy obecnie początek odczytu energii do wierzchołka pasma dziur lekkich /tzn. przyjmijmy $E_3^0 = E_7^0 = 0/$, oraz przyjmijmy, że energia rośnie w głąb pasma. Wówczas, przy założeniu $\lambda \ll \frac{2}{3}\Delta$ otrzymamy równanie dyspersji dla lekkich dziur w postaci równań /63/ i /64/ w którym m_c^* należy zastąpić masą efektywną lekkich dziur daną równaniami /10/ i /11/, oraz g_c^* zastąpić przez

$$g_{lh}^* = -\frac{m_0}{m_{lh}^*}. \quad /67/$$

Wykorzystując równanie /54/ oraz równania od /61/ do /66/ otrzymamy 56 wyrażenie na wektory własne F macierzy

D_0 w postaci:

$$F^+ = \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} \begin{bmatrix} a_n^+ |n\rangle \\ \frac{\sqrt{3}}{2} b_n^+ \left(\frac{\hbar \omega_c n}{D_n^+} \right)^{1/2} |n-1\rangle \\ \frac{1}{2} b_n^+ \left(\frac{\hbar \omega_c (n+1)}{D_n^+} \right)^{1/2} |n+1\rangle \\ - \frac{\sqrt{2}}{2} c_n^+ \left(\frac{\hbar \omega_c (n+1)}{D_n^+} \right)^{1/2} |n+1\rangle \\ 0 \\ 0 \\ - \frac{\sqrt{2}}{2} b_n^+ \frac{\hbar k_z}{(D_n^+ m_c^*)^{1/2}} |n\rangle \\ - \frac{1}{2} c_n^+ \frac{\hbar k_z}{(D_n^+ m_c^*)^{1/2}} |n\rangle \end{bmatrix} \times \exp(ik_x x + ik_z z),$$

/68/

$$F^- = \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ - \frac{\sqrt{2}}{2} b_n^- \frac{\hbar k_z}{(D_n^- m_c^*)^{1/2}} |n\rangle \\ - \frac{1}{2} c_n^- \frac{\hbar k_z}{(D_n^- m_c^*)^{1/2}} |n\rangle \\ a_n^- |n\rangle \\ \frac{\sqrt{3}}{2} b_n^- \left(\frac{\hbar \omega_c (n+1)}{D_n^-} \right)^{1/2} |n+1\rangle \\ - \frac{1}{2} b_n^- \left(\frac{\hbar \omega_c n}{D_n^-} \right)^{1/2} |n-1\rangle \\ \frac{\sqrt{2}}{2} c_n^- \left(\frac{\hbar \omega_c n}{D_n^-} \right)^{1/2} |n-1\rangle \end{bmatrix} \times \exp(ik_x x + ik_z z),$$

/69/

gdzie $|n\rangle$ oznacza funkcję oscylatora harmonicznego $\phi_n\left(\frac{y-y_0}{L}\right)$,
oraz

$$a_n^{\pm} = \left(\frac{E_g + \lambda_n^{\pm}}{E_g + 2\lambda_n^{\pm}} \right)^{1/2} ,$$

$$b_n^{\pm} = \left(\frac{1}{3} \frac{\lambda_n^{\pm}}{E_g + 2\lambda_n^{\pm}} \right)^{1/2} \beta ,$$

/70/

$$c_n^{\pm} = \left(\frac{2}{3} \frac{\lambda_n^{\pm}}{E_g + 2\lambda_n^{\pm}} \right)^{1/2} \mathcal{S} ,$$

$$\beta = \left(\frac{\Delta^2}{(\Delta + E_g)(\Delta + \frac{3}{2} E_g)} \right)^{1/2} ,$$

$$\mathcal{S} = \left(\frac{\Delta + \frac{3}{2} E_g}{\Delta + E_g} \right)^{1/2} .$$

Dla pasma dziur lekkich wektory własne F będą miały również postać /68/ i /69/. Dla pasma lekkich dziur współczynniki a , b , c mają postać:

$$a_n^{\pm} = \left(\frac{\lambda_n^{\pm}}{E_g + 2\lambda_n^{\pm}} \right)^{1/2} ,$$

/71/

$$b_n^{\pm} = \left(\frac{1}{3} \frac{E_g + \lambda_n^{\pm}}{E_g + 2\lambda_n^{\pm}} \right)^{1/2} ,$$

$$c_n^{\pm} = \left(\frac{2}{3} \frac{E_g + \lambda_n^{\pm}}{E_g + 2\lambda_n^{\pm}} \right)^{1/2} .$$

Wykorzystując równania /68/, /69/ i /52/ otrzymamy [55, 56] wyrażenia na funkcje falowe elektronu w paśmie przewodnictwa w pobliżu punktu Γ w postaci:

$$\psi_{n, k_x, k_z}^{-}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} \exp(i k_x x + i k_z z) \times$$

$$\times \left\{ \left[i a_n^{-} \phi_n S + \frac{b_n^{-} + c_n^{-} \sqrt{2}}{2} \left(\frac{\hbar \omega_c (n+1)}{D_n^{-}} \right)^{1/2} \phi_{n+1} R_{-} - \right.$$

/72/

$$- \frac{b_n^{-} - c_n^{-} \sqrt{2}}{2} \left(\frac{\hbar \omega_c n}{D_n^{-}} \right)^{1/2} \phi_{n-1} R_{+} + c_n^{-} \frac{\hbar k_z}{(2 m_e^{*} D_n^{-})^{1/2}} \phi_n Z \Big] \downarrow +$$

$$+ b_n^{-} \left[\frac{\hbar k_z}{(2 m_e^{*} D_n^{-})^{1/2}} \phi_n R_{-} - \left(\frac{\hbar \omega_c n}{D_n^{-}} \right)^{1/2} \phi_{n-1} \frac{Z}{\sqrt{2}} \right] \uparrow \Big\} ,$$

$$\psi_{n, k_x, k_z}^{+}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} \exp(i k_x x + i k_z z) \times$$

$$\times \left\{ \left[i a_n^{+} \phi_n S - \frac{b_n^{+} - c_n^{+} \sqrt{2}}{2} \left(\frac{\hbar \omega_c (n+1)}{D_n^{+}} \right)^{1/2} \phi_{n+1} R_{-} + \right.$$

/73/

$$+ \frac{b_n^{+} + c_n^{+} \sqrt{2}}{2} \left(\frac{\hbar \omega_c n}{D_n^{+}} \right)^{1/2} \phi_{n-1} R_{+} + c_n^{+} \frac{\hbar k_z}{(2 m_e^{*} D_n^{+})^{1/2}} \phi_n Z \Big] \uparrow -$$

$$- b_n^{+} \left[\frac{\hbar k_z}{(2 m_e^{*} D_n^{+})^{1/2}} \phi_n R_{+} - \left(\frac{\hbar \omega_c (n+1)}{D_n^{+}} \right)^{1/2} \phi_{n+1} \frac{Z}{\sqrt{2}} \right] \downarrow \Big\} .$$

4. Reguły wyboru dla jednofotonowych przejść magnetoptycznych

Obecnie rozważać będziemy wewnątrzpasmowe przejścia optyczne w kryształach mieszanych w obecności zewnętrznego pola magnetycznego o indukcji $\vec{B} = (0,0,B)$. Rozpatrywać będziemy przejścia pod wpływem monochromatycznej fali płaskiej o częstotliwości ω . Potencjał wektorowy takiej fali wygodnie jest zapisać w postaci:

$$\vec{A}_f = \frac{1}{\omega} \text{Im}(\vec{E} \exp(-i\omega t)) \quad , \quad /74/$$

gdzie $\vec{E}$ jest wektorem zespolonym, takim, że $\text{Re}/\vec{E} \exp(-i\omega t)/$ jest wektorem natężenia pola elektrycznego fali elektromagnetycznej, natomiast jej potencjał skalarny

$$\Phi(\vec{r}, t) \equiv 0 \quad . \quad /75/$$

Pełny hamiltonian elektronu w kryształach mieszanych w obecności zewnętrznego pola magnetycznego i elektromagnetycznego ma postać

$$H = H_0(\vec{p}) + \frac{e}{m_0} \vec{A}_f \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2m_0} \vec{A}_f^2 + V_R(\vec{r}) + \\ + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V_R(\vec{r})) \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V(\vec{r})) \cdot \vec{A}_f \quad , \quad /76/$$

gdzie H_0 jest jednoelektronowym hamiltonianem opisującym stany elektronowe w przybliżeniu kryształu wirtualnego /wzór 12/, $\vec{p} = -i\hbar \nabla + e\vec{A}_0$ jest uogólnionym pędem, $\vec{A}_0$ oraz $\vec{A}_f$ są potencjałami wektorowymi zewnętrznego, stałego pola magnetycznego i oscylującego pola elektrycznego, odpowiednio, $V(\vec{r}) = V_{VC}(\vec{r}) + V_R(\vec{r})$ jest pełnym potencjałem sieciowym.

Ograniczając się do przypadku małych mocy fali elektromagnetycznej można w hamiltonianie /76/ pominąć składnik $(e\vec{A}_f)^2$.

Zaniedbamy również dwa ostatnie składniki: składnik $\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{A}_f$ jako mały w porównaniu z $(e/m_0)\vec{A}_f \cdot \vec{P}$, oraz składnik $\frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V_R) \cdot \vec{P}$ jako mały w porównaniu z V_R/r . W takim przybliżeniu hamiltonian /76/ redukuje się do postaci:

$$H = H_0(\vec{p}) + \frac{e}{m_0} \vec{A}_f \cdot \vec{P} + V_R(\vec{r}) \quad . \quad /77/$$

Wprowadźmy obecnie operatory

$$H_1 = \frac{e}{\omega m_0} (\text{Im} \vec{E}) \cdot \vec{P} \quad , \quad /78/$$

$$H_2 = \frac{e}{\omega m_0} (\text{Re} \vec{E}) \cdot \vec{P} \quad , \quad /79/$$

wówczas hamiltonian oddziaływania fali elektromagnetycznej z elektronem można zapisać w postaci:

$$\frac{e}{m_0} \vec{A}_f \cdot \vec{P} = \frac{1}{2} H_+ e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} H_- e^{i\omega t} \quad , \quad /80/$$

gdzie

$$H_{\pm} = H_1 \pm iH_2 \quad . \quad /81/$$

Z dokładnością do drugiego rzędu rachunku zaburzeń szybkość przejść /prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu/ dla absorpcji fotonów wyraża się zależnością [41]:

$$W_{|k_{0x}, k_{0z}, n, \alpha\rangle \rightarrow |k_x, k_z, m, \beta\rangle} = \frac{\pi}{2\hbar} \delta(\hbar\omega - (\lambda_{m, k_z}^\beta - \lambda_{n, k_{0z}}^\alpha)) \times$$

$$\times \left| \langle m, \beta, k_z, k_x | H_+ | k_{0x}, k_{0z}, n, \alpha \rangle + \sum_{\substack{k'_x, k'_z, \alpha', l \\ \lambda_{l, k'_z}^{\alpha'} \neq \lambda_{m, k_z}^\beta}} \frac{\langle \beta, m, k_z, k_x | V_R | k'_x, k'_z, \alpha' \rangle \langle \alpha', l, k'_z, k'_x | H_+ | k_{0x}, k_{0z}, n, \alpha \rangle}{\lambda_{m, k_z}^\beta - \lambda_{l, k'_z}^{\alpha'}} \right|$$

$$-\sum_{\substack{k'_x, k'_z, l, \alpha' \\ \lambda_{l, k'_z}^{\alpha'} \neq \lambda_{n, k_{0z}}^{\alpha}}} \frac{\langle \beta, m, k_z, k_x | H_+ | k'_x, k'_z, l, \alpha' \rangle \langle \alpha', l, k'_z, k'_x | V_R | k_{0x}, k_{0z}, n, \alpha \rangle}{\lambda_{l, k'_z}^{\alpha'} - \lambda_{n, k_{0z}}^{\alpha}} \quad /82/$$

gdzie $|k_x, k_z, n, \alpha\rangle$ są funkcjami własnymi hamiltonianu H_0 opisanymi równaniami /72/ i /73/ α, α', β oznaczają "+" albo "-" w przybliżeniu kryształu wirtualnego zaniedbuje się potencjał $V_R/\vec{r}$, wówczas wzór /82/ redukuje się do postaci:

$$W_{|k_{0x}, k_{0z}, n, \alpha\rangle \rightarrow |k_x, k_z, m, \beta\rangle} = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta, m, k_z, k_x | H_+ | k_{0x}, k_{0z}, n, \alpha \rangle|^2 \times \delta(\hbar\omega - (\lambda_{m, k_z}^{\beta} - \lambda_{n, k_{0z}}^{\alpha})) \quad /83/$$

Do policzenia szybkości przejść konieczna jest znajomość kwadratu elementu macierzowego operatora H_+ pomiędzy funkcjami stanu początkowego i końcowego. Elementy te mają postać:

$$\langle +, m, k_z, k_x | H_+ | k_{0x}, k_{0z}, n, - \rangle = -\frac{ieP}{\hbar\omega} \delta_{k_z, k_{0z}} \delta_{k_x, k_{0x}} \cdot A(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{n, k_{0z}}^-) \times \\ \times \left\{ \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2m_c^*}} \delta_{m, n} E_- - (m+1)^{1/2} \left(\frac{\hbar\omega_c}{2}\right)^{1/2} \delta_{m+1, n} E_z \right\} \quad /84/$$

$$\langle -, m, k_z, k_x | H_+ | k_{0x}, k_{0z}, n, + \rangle = -\frac{ieP}{\hbar\omega} \delta_{k_z, k_{0z}} \delta_{k_x, k_{0x}} A(\lambda_{m, k_z}^-; \lambda_{n, k_{0z}}^+) \times \\ \times \left\{ \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2m_c^*}} \delta_{m, n} E_+ - (n+1)^{1/2} \left(\frac{\hbar\omega_c}{2}\right)^{1/2} \delta_{m, n+1} E_z \right\} \quad /85/$$

$$\langle \pm, m, k_z, k_x | H_+ | k_{0x}, k_{0z}, n, \pm \rangle = -\frac{ieP}{\hbar\omega} \delta_{k_z, k_{0z}} \delta_{k_x, k_{0x}} \times \left\{ B(\lambda_{m, k_z}^{\pm}; \lambda_{n, k_{0z}}^{\pm}) \right\} \times$$

$$\times (n+1)^{1/2} \delta_{m,n+1} E_- + B(\lambda_{n,K_{0z}}^{\pm}; \lambda_{m,K_z}^{\pm}) (m+1)^{1/2} \delta_{m,n-1} E_+ + \\ + T(\lambda_{n,K_{0z}}^{\pm}) \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2 m_c^*}} \delta_{m,n} E_z \} , \quad /86/$$

gdzie

$$E_{\pm} = (E_x \pm i E_y) / \sqrt{2} , \quad /87/$$

$$A(x,y) = \frac{\sqrt{E_g}}{D(x,y)} (x-y) , \quad /88/$$

$$B(x,y) = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{E_g \hbar \omega_c}}{D(x,y)} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{3} \beta(x+y+2E_g) + \frac{2\sqrt{3}}{3} \vartheta(x-y) \right) , \quad /89/$$

$$T(x) = \frac{2\sqrt{3}}{3} \vartheta \cdot \frac{\sqrt{E_g}}{2x+E_g} , \quad /90/$$

$$D(x,y) = \left\{ (2x+E_g)(x+E_g)(2y+E_g)(y+E_g) \right\}^{1/2} . \quad /91/$$

Obliczając elementy macierzowe /84/ - /86/ wykorzystano wolnozmienność funkcji obwiedni /61/, w porównaniu z periodycznymi amplitudami S, X, Y, Z , zastępując całkę po całej objętości kryształu iloczynem dwu całek: całki po objętości komórki elementarnej dla funkcji periodycznych, oraz całki po całym kryształzie z iloczynu funkcji oscylatora harmonicznego. W wyrażeniach tych zaniedbano składniki typu $\langle \phi_n | H_{\pm} | \phi_m \rangle$ jako małe [55] w porównaniu ze składnikami typu $\langle S | H_{\pm} | R_{\pm} \rangle$.

Prawdopodobieństwo przejścia ze stanu $|k_{ox}, k_{oz}, n, \alpha\rangle$ do stanu $|k_x, k_z, m, \beta\rangle$ jest proporcjonalne do kwadratu modułu elementu macierzowego operatora H_+ . Wynikające stąd reguły wyboru dla jednofotonowych przejść optycznych w obecności kwantującego pola magnetycznego przedstawiono w tabeli I. Z tabeli tej wynika, że w przypadku absorpcji fotonu możliwe są przejścia o następującej zmianie numeru pasma Landaua:

a/ $\Delta n = 1$ dla polaryzacji prostopadłej lewoskrętnej /CRA/
- rezonans cyklotronowy,
oraz dla polaryzacji równoległej $\vec{E} \parallel \vec{B}$ - rezonans kombinowany,

b/ $\Delta n = 0$ dla polaryzacji prostopadłej prawoskrętnej /CRI/
- rezonans spinowy.

Przejścia, z absorpcją fotonu, dla których możliwa byłaby zmiana numeru pasma o więcej niż jeden nie są w tym przypadku dopuszczalne. Możliwość istnienia przejść o większej niż o jeden zmianie numeru pasma Landaua pojawia się jeżeli uwzględnić odstępstwa od idealnie periodycznej struktury krystalicznej, np. uwzględniając fonony [57 ÷ 60] czy domieszki [61 ÷ 63]. Podobne efekty będą również możliwe w kryształach mieszanych w wyniku istnienia fluktuacji składu molowego [41] oraz nieporządku chemicznego, co zostanie niżej wykazane.

Tabela I

Polaryzacja	Reguły wyboru
Prostopadła a/ prawoskrętna /CRI/ b/ lewoskrętna /CRA/	$n^+ \rightarrow n^-$ $n^\pm \rightarrow (n-1)^\pm$ $n^- \rightarrow n^+$ $n^\pm \rightarrow (n+1)^\pm$
Równoległa $\vec{E} \parallel \vec{B}$	$n^\pm \rightarrow n^\pm$ $n^- \rightarrow (n-1)^+$ $n^+ \rightarrow (n+1)^-$

III Wpływ istnienia nieporządku chemicznego na wewnątrzprasmową magnetoabsorpcję w kryształach mieszanym typu $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{TE}$.

1. Elementy macierzowe potencjału stopowego

Obecność dodatkowego potencjału $V_R/\vec{r}/$ rozpraszającego elektrony umożliwia procesy w których, przy pochłonięciu fotonu, swobodny elektron zostaje wzbudzony dwustopniowo poprzez stan wirtualny. Jeden z tych procesów można opisać jako przejście ze stanu początkowego do stanu wirtualnego wskutek rozproszenia na potencjale $V_R/\vec{r}/$, a następnie przejście ze stanu wirtualnego do stanu końcowego w wyniku oddziaływania elektron-foton.

Drugi proces można opisać jako przejście ze stanu początkowego do wirtualnego w wyniku oddziaływania elektron-foton, a następnie przejście do stanu końcowego w wyniku rozproszenia na potencjale $V_R/\vec{r}/$. Prawdopodobieństwo ich zachodzenia opisane jest wyrażeniem /82/, w którym obecnie pierwszy składnik /element macierzowy operatora H_+ / jest równy zeru ze względu na zmianę wektora falowego elektronu.

Do policzenia prawdopodobieństwa przejścia /82/ konieczna jest znajomość oprócz elementów macierzowych operatora H_+ , także elementów macierzowych potencjału rozpraszającego $V_R/\vec{r}/$. Do policzenia tych elementów macierzowych wygodnie jest przedstawić potencjał $V_R/\vec{r}/$ w postaci rozwinięcia na szereg Fouriera

$$V_R(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{s}_m} e^{i(\vec{q} + \vec{s}_m) \cdot \vec{r}} c_{\vec{q} + \vec{s}_m} \quad , \quad /92/$$

gdzie

$$c_{\vec{q} + \vec{s}_m} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{R}_n} \int e^{-i(\vec{q} + \vec{s}_m) \cdot \vec{r}} \left((\theta_{\vec{R}_n} - x) V_{BA}(\vec{r} - \vec{R}_n) \right) d^3r. \quad /93/$$

Sumowanie we wzorach /92/ i /93/ przebiega po wszystkich wektorach $\vec{G}_m$ sieci odwrotnej oraz po wektorach $\vec{q}$ z pierwszej strefy Brillouina. Wykonując zamianę zmiennych $\vec{r}'' = \vec{r}' - \vec{R}_n$ oraz wykorzystując zależność

$$e^{i\vec{G}_m \vec{R}_n} = 1 \quad /94/$$

otrzymamy

$$C_{\vec{q}+\vec{G}_m} = \frac{1}{V} \left(\sum_{\vec{R}_n} (\Theta_{\vec{R}_n} - x) e^{i\vec{q} \vec{R}_n} \right) \cdot \int e^{-i(\vec{q}+\vec{G}_m) \vec{r}''} V_{BA}(\vec{r}'') d^3 r'' \quad /95/$$

Wstawiając wyrażenie /95/ do /92/ otrzymamy:

$$V_R(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \left\{ e^{i\vec{q} \vec{r}} \left[\sum_{\vec{G}_m} e^{i\vec{G}_m \vec{r}} e^{-i(\vec{q}+\vec{G}_m) \vec{r}'} V_{BA}(\vec{r}') \right] v(\vec{q}) \right\} \quad /96/$$

gdzie

$$v(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}_n} (\Theta_{\vec{R}_n} - x) e^{i\vec{q} \vec{R}_n} \quad /97/$$

Przejdźmy obecnie do obliczenia elementu macierzowego potencjału $V_R/\vec{r}'$, zapisanego w postaci /96/, pomiędzy funkcjami /72/ i /73/. Występować tu będą całki następującej postaci:

$$C_{mn}^{ij} = \int_V \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) e^{-i(k_x - k_{0x} - q_x)x} e^{-(k_z - k_{0z} - q_z)z} e^{iq_y y} u_{i,0} u_{j,0}^* \times$$

$$\times \phi_m\left(\frac{y-y_0}{L}\right) \phi_n\left(\frac{y-y_0}{L}\right) \sum_{\vec{S}_m} e^{i\vec{S}_m \cdot \vec{r}} \left(\frac{1}{V} \int_V e^{-i(\vec{q} + \vec{S}_m) \cdot \vec{r}'} V_{BA}(\vec{r}') d^3r' \right) . \quad /98/$$

Rozdzielmy funkcję podcałkową występującą w równaniu /98/ na iloczyn dwu funkcji: funkcji szybkozmiennej $f_1/\vec{r}/$, periodycznej z okresem sieci,

$$f_1(\vec{r}) = u_{i,0} u_{j,0}^* \sum_{\vec{S}_m} e^{i\vec{S}_m \cdot \vec{r}} \left(\frac{1}{V} \int_V e^{-i(\vec{q} + \vec{S}_m) \cdot \vec{r}'} V_{BA}(\vec{r}') d^3r' \right) , \quad /99/$$

oraz funkcji $f_2/\vec{r}/$

$$f_2(\vec{r}) = e^{-i(k_x - k_{0x} - q_x)x} e^{-i(k_z - k_{0z} - q_z)z} e^{iq_y y} \phi_m\left(\frac{y-y_0}{L}\right) \phi_n\left(\frac{y-y_0}{L}\right) . \quad /100/$$

Funkcja $f_2/r/$ dla małych wartości $\vec{q}$, tzn $|\vec{q}| \ll |G_1|$, jest wolnozmienną funkcją położenia, mało zmieniającą się na obszarze komórki elementarnej.

W naszym przypadku uwzględniamy wpływ potencjału /2/ na magnetoabsorpcję w drugim rzędzie rachunku zaburzeń. Ze względu na mianowniki energetyczne istotny wkład do magnetoabsorpcji będą dawały przejścia z małą zmianą składowej k_z wektora falowego elektronu. Tak więc we wzorach /98/ i /100/ ograniczyć się można do małych wartości q_z .

Istotny wkład do całki /98/ będą dawały również składowe potencjału $V_R(\vec{r})$ z małymi wartościami q_y . Jest to związane z tym że dla dużych wartości q_y funkcja $f_2(\vec{r})$ jest funkcją szybko

oscylującą o okresie oscylacji różnym od okresu oscylacji funkcji $f_1(\vec{r})$. Tak więc dla dużych wartości q_y iloczyn funkcji $f_1 f_2$ będzie mały w porównaniu z iloczynem $f_1 f_2$ dla małych q_y , dla których w obszarze pełnej zmiany funkcji $f_1(\vec{r})$ /obszarze komórki elementarnej/ funkcja $f_2(\vec{r})$ zmienia się nieznacznie.

Ze względu na występowanie w funkcji podcałkowej całki /98/ iloczynu funkcji oscylatora harmonicznego $\phi_m(\frac{y-y_0}{L})$ i $\phi_n(\frac{y-y_0}{L})$ istotne będą rozpraszania elektronów z małą zmianą x-owej składowej wektora falowego $\vec{k}$. Dla dużej różnicy $k_x - k_{ox}$ przekrycie występujących w równaniu /98/ funkcji oscylatora harmonicznego jest małe dając małe wartości całki. Dla małych wartości $k_x - k_{ox}$ istotny wkład do całki /98/ dają składowe fourierowskie potencjału $V_R/\vec{r}/$ z małymi wartościami q_x . Dla dużych wartości q_x wystąpi analogiczna sytuacja jak dla dużych wartości q_y .

Z powyższych rozważań wynika, że istotny wkład do całki /98/ będą dawały składowe fourierowskie potencjału $V_R(\vec{r})$ z małymi wektorami $\vec{q}$, tzn. $|\vec{q}| \ll |\vec{G}_1|$. W takim przybliżeniu funkcja $f_2(\vec{r})$ mało zmienia się na obszarze komórki elementarnej, dlatego też całkę /98/ można zastąpić iloczynem całki funkcji $f_1(\vec{r})$ i całki funkcji $f_2(\vec{r})$.

Całka funkcji $f_1(r)$ ma postać:

$$C_{mn1}^{ij} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{i0} u_{j0}^* \left\{ \sum_{\vec{S}_m} e^{i\vec{S}_m \cdot \vec{r}} \left(\frac{1}{V} \int_V e^{-i(\vec{q} + \vec{S}_m) \cdot \vec{r}'} V_{BA}(\vec{r}') d^3 r' \right) \right\} d^3 r. \quad /101/$$

Ograniczając się do małych długości wektora $\vec{q}$ można w powyższym wzorze zaniedbać $\vec{q}$ w porównaniu do $\vec{G}$; otrzymamy wówczas

$$C_{mn1}^{ij} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{i0} u_{j0}^* \left\{ \sum_{\vec{S}_m} e^{i\vec{S}_m \cdot \vec{r}} \left(\frac{1}{V} \int_V e^{-i\vec{S}_m \cdot \vec{r}'} V_{BA}(\vec{r}') d^3 r' \right) \right\} d^3 r. \quad /102/$$

Wprowadźmy obecnie potencjał

$$\tilde{V}_{BA}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_n} V_{BA}(\vec{r} - \vec{R}_n) \quad /103/$$

będący różnicą potencjałów sieciowych $V_A/\vec{r}/$ i $V_B/\vec{r}/$ czystych składników /tzn. potencjałów dla $x = 0$ i $x = 1$, odpowiednio/. Rozwijając potencjał /103/ na szereg Fouriera otrzymamy:

$$\tilde{V}_{BA}(\vec{r}) = V \cdot N \sum_{\vec{s}_m} e^{i\vec{s}_m \vec{r}} \left(\frac{1}{V} \int_V e^{-i\vec{s}_m \vec{r}'} V_{BA}(\vec{r}') d^3 r' \right) \quad /104/$$

gdzie N jest całkowitą ilością atomów A lub B w jednostce objętości. Wstawiając /104/ do /102/ otrzymamy ostatecznie wyrażenie na całkę funkcji $f_1/\vec{r}/$ w postaci:

$$C_{mn1}^{ij} = \frac{1}{VN} \cdot \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{j0}^* \tilde{V}_{BA}(\vec{r}) u_{i0} d^3 r \quad . \quad /105/$$

Całka funkcji $f_2/\vec{r}/$ jest równa

$$C_{mn2}^{ij} = \int_V f_2(\vec{r}) d^3 r = \delta_{k_x, k_{ox}+q_x} \delta_{k_z, k_{oz}+q_z} \cdot F(m, n, q_y, q_x) \quad . \quad /106/$$

Funkcja $F/m, n, q_y, q_x/$ jest zdefiniowana następująco:

$$F(m, n, q_y, q_x) = \int \phi_m\left(\frac{y+L^2 q_x}{L}\right) e^{iq_y y} \phi_n\left(\frac{y}{L}\right) dy \quad . \quad /107/$$

Całka ta jest równa [57]

$$F(m, n, q_y, q_x) = 2^{-|m-n|/2} \left(\frac{n!}{m!} \right)^{\text{sgn}(m-n)/2} e^{-\frac{1}{2} i L^2 q_x q_y} \cdot \\ \cdot \left[i L q_y + \text{sgn}(m-n) L q_x \right]^{|m-n|} e^{-\frac{1}{4} L^2 q_x^2} \prod_{\min(m,n)}^{|m-n|} \left(\frac{1}{2} L^2 q_x^2 \right) \quad , \quad /108/$$

gdzie

$$\text{sgn}(m-n) = \begin{cases} (m-n)/|m-n| \\ 0 \end{cases} \quad , \quad /109/$$

$$q_{\perp}^2 = q_x^2 + q_y^2 \quad , \quad /110/$$

L_1^t jest wielomianem Laguerrea

$$L_l^t(x) = \sum_{m=0}^l (-1)^m \binom{l+t}{l-m} \frac{x^m}{m!} \quad . \quad /111/$$

W wyrażeniu /82/ na prawdopodobieństwo przejść występować będą kwadraty modułu całek /106/. Ze względu na czynnik $\exp(-\frac{1}{2}L^2 q_{\perp}^2)$ istotny wkład będą dawać składowe z małymi wartościami $q_{\perp}^2$.

Wykorzystując relacje /105/ i /106/ otrzymamy elementy macierzowe potencjału $V_R/\vec{r}/$ pomiędzy funkcjami /72/ i /73/ w postaci:

$$\langle +, m, k_z, k_x | V_R(\vec{r}) | k_{0x}, k_{0z}, n, - \rangle = \mathcal{U}_V \sum_{q_y} e^{-iL^2 k_{0x} q_y} v(\vec{q}) \times$$

$$\times M(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{n, k_{0z}}^-) \times \left\{ (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar k_{0z}}{\sqrt{2m_c^*}} F(m+1, n, q_y, q_x) - n^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2m_c^*}} F(m, n-1, q_y, q_x) \right\} ,$$

/112/

$$\langle -, m, k_z, k_x | V_R(\vec{r}) | k_{0x}, k_{0z}, n, + \rangle = \mathcal{U}_V \sum_{q_y} e^{-iL^2 k_{0x} q_y} v(\vec{q}) \times$$

$$\times M(\lambda_{m, k_z}^-; \lambda_{n, k_{0z}}^+) \times \left\{ (n+1)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar k_{0z}}{\sqrt{2m_c^*}} F(m, n+1, q_y, q_x) - m^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2m_c^*}} F(m-1, n, q_y, q_x) \right\} ,$$

/113/

$$\begin{aligned} \langle \pm, m, k_z, k_x | V_R(\vec{r}) | k_{0x}, k_{0z}, n, \pm \rangle &= u_v \sum_{q_y} e^{-L^2 k_{0x} q_y} v(\vec{q}) * \\ &* \left\{ G(\lambda_{m, k_z}^{\pm}; \lambda_{n, k_{0z}}^{\pm}) F(m, n, q_y, q_x) + (m+1)^{\frac{1}{2}} (n+1)^{\frac{1}{2}} Z(\lambda_{m, k_z}^{\pm}; \lambda_{n, k_{0z}}^{\pm}) F(m+1, n+1, q_y, q_x) + \right. \\ &\left. + (m \cdot n)^{\frac{1}{2}} J(\lambda_{m, k_z}^{\pm}; \lambda_{n, k_{0z}}^{\pm}) F(m-1, n-1, q_y, q_x) + \frac{\hbar^2 k_z k_{0z}}{2 m_c^*} H(\lambda_{m, k_z}^{\pm}; \lambda_{n, k_{0z}}^{\pm}) F(m, n, q_y, q_x) \right\}, \end{aligned}$$

/114/

gdzie

$$k_x = k_{0x} + q_x, \quad , \quad /115/$$

$$G(x, y) = \frac{(x + E_g)(y + E_g)}{D(x, y)} \cdot \frac{u_c}{u_v}, \quad , \quad /116/$$

$$H(x, y) = \frac{1}{3} \frac{E_g}{D(x, y)} (\beta^2 + 2g^2) \quad , \quad /117/$$

$$Z(x, y) = \frac{1}{12} \frac{E_g \hbar \omega_c}{D(x, y)} (\beta + 2g)^2 \quad , \quad /118/$$

$$J(x, y) = \frac{1}{12} \frac{E_g \hbar \omega_c}{D(x, y)} ((\beta - 2g)^2 + 4g^2) \quad , \quad /119/$$

$$M(x, y) = \frac{1}{6} \frac{E_g (\hbar \omega_c)^{\frac{1}{2}}}{D(x, y)} (4\beta g - \beta^2) \quad , \quad /120/$$

$$u_v = \langle x | \tilde{V}_{BA}(\vec{r}) | x \rangle \quad , \quad /121/$$

$$u_c = \langle S | \tilde{V}_{BA}(\vec{r}) | S \rangle \quad . \quad /122/$$

Przeprowadzając w równaniach /112/ do /114/ sumowanie po q_y należy opuścić wartość $q_y = 0$ jeżeli $q_x = q_z = 0$.

Elementy macierzowe potencjału $V_R/\vec{r}$ pomiędzy dowolnymi stanami Landaua są różne od zera, zatem nie będą występowały w tym przypadku jakiejkolwiek reguły wyboru. Dozwolone są przejścia elektronu między dowolnymi stanami Landaua.

2. Prawdopodobieństwo przejść magneto-optycznych udozwalanych istnieniem nieporządku chemicznego

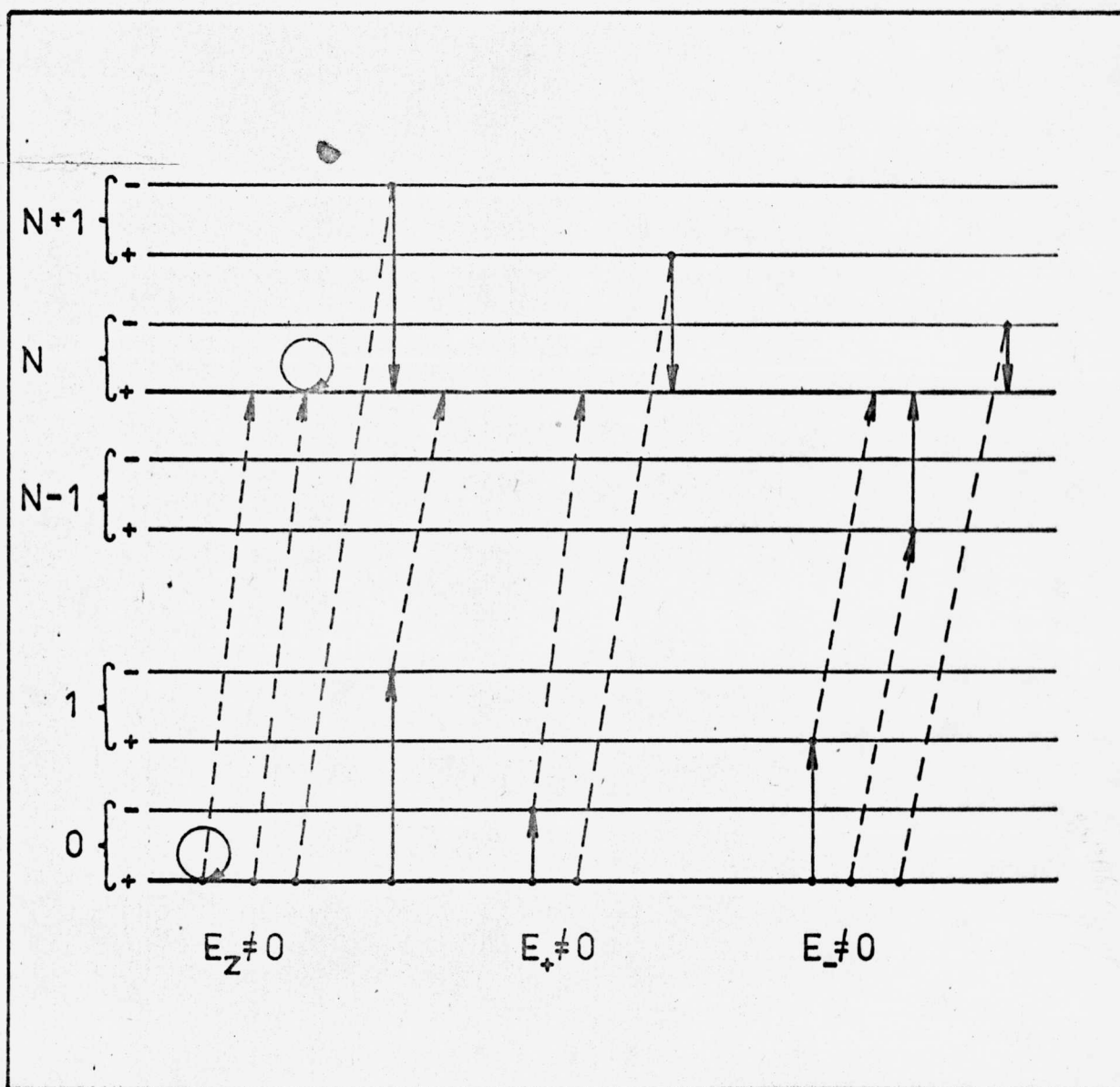
Nasze dalsze rozważania ograniczymy do przypadku ultrakwantowego w niskich temperaturach. Założymy, że wszystkie elektrony zajmują tylko stany w najniższym podpasmie Landaua o numerze $n = 0^+$.

Przy takim założeniu, przy absorpcji fotonów, możliwe są jedynie przejścia $0^+ \rightarrow m^+$ /m jest dowolną liczbą naturalną/. Wszystkie możliwe przejścia dające wkład do absorpcji dla $m \geq 2$ przedstawiono na rys. 3.

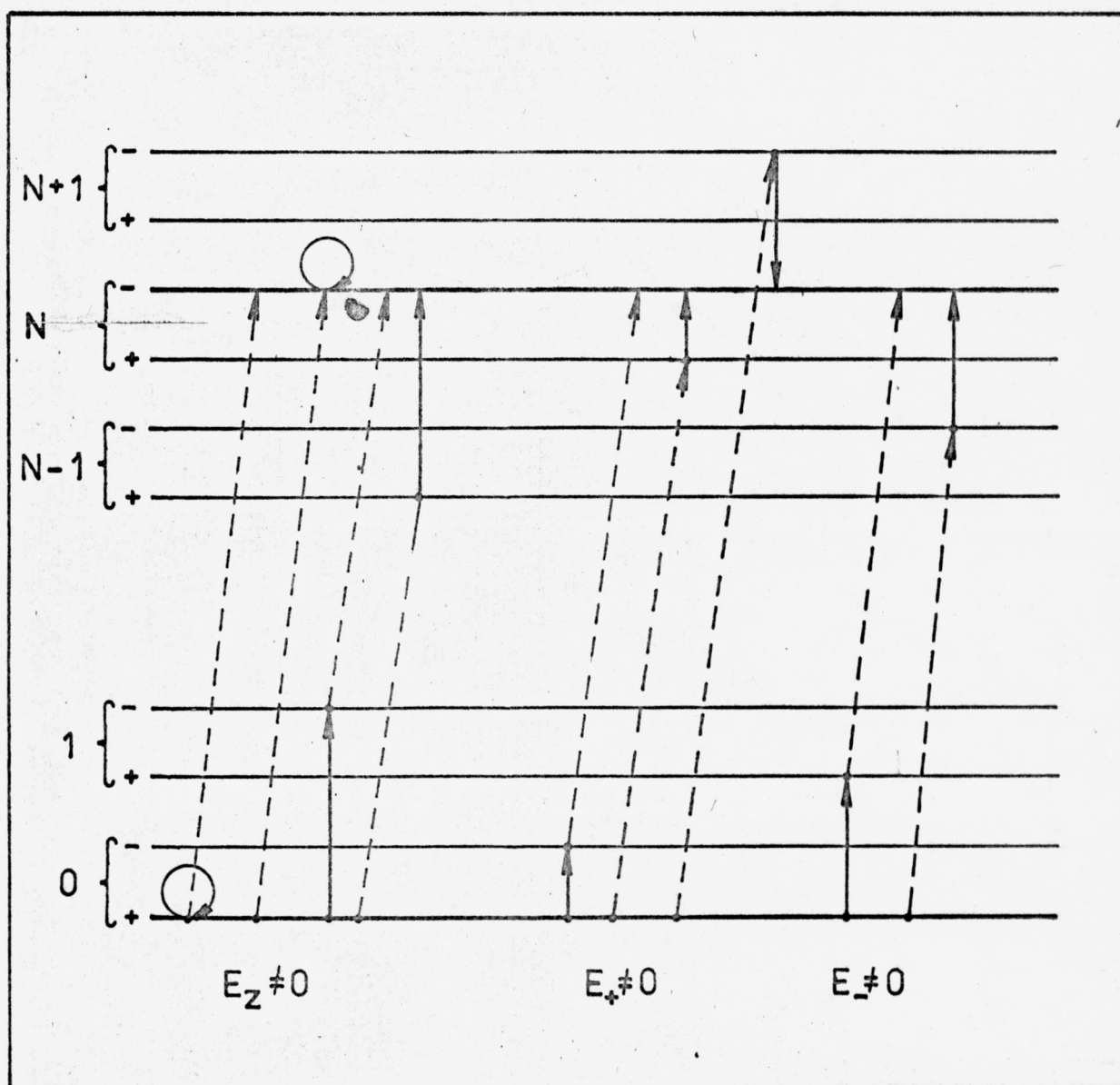
W pierwszej kolejności zostanie obliczona uśredniona po wszystkich wartościach k_{ox} szybkość przejść /82/. Oznaczać ją będziemy przez $\bar{W}(k_{oz}, n^{\pm}, q_x, k_z, m^{\pm})$. W tym celu należy /wykorzystując rysunek 3/ wstawić wyrażenia /84/ + /86/ oraz /112/ - /114/ do /82/. Otrzymane uśrednione wartości $\bar{W}$ przedstawione są zależnościami od /123/ do /128/. Wzory /123/ i /124/ przedstawiają uśrednione wartości $\bar{W}$ dla polaryzacji kołowej prawoskrętnej w układzie Faradaya / $E_+ \neq 0, E_- = 0$ /, wzory /125/ i /126/ dla polaryzacji kołowej lewoskrętnej w układzie Faradaya / $E_- \neq 0, E_+ = E_z = 0$ /, a wzory /127/ i /128/ dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego / $E_z \neq 0, E_+ = E_- = 0$ / ^{$\sqrt{E_z^2}$} . W obliczeniach wykorzystano zależność

$$\exp[iL^2(q'_y - q_y)k_x] = \frac{L_x L_y}{2\pi L^2} \delta_{q_y q'_y}, \quad /130/$$

która jest dokładna gdy $L_x/2\sqrt{\pi}L$ / $\alpha = x, y$ / jest liczbą całkowitą.



Rys. 3a



Rys. 3b.

Rys. 3. Początkowe pośrednie i końcowe stany dla magnetoabsorpcji wywołanej nieporządkiem chemicznym. Linie ciągłe odpowiadają przejściom w wyniku oddziaływania z fotonem, linie przerywane przejściom w wyniku rozpraszania na potencjale stopowym: a/przejścia z zachowaniem spinu, b/przejścia z odwróceniem spinu,

$$W(k_{0z}, 0^+, q_z, k_z, m^+) = \overline{W}_0 \cdot \frac{1}{2} \sum_{q_y} e^{-\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2} (L^2 q_{\perp}^2)^{m+1} |v(\vec{q})|^2 |E_+|^2 \delta(\hbar\omega - (\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{0z}}^+))$$

$$\times \left| \frac{A(\lambda_{0, k_{0z}}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^-) M(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^-)}{\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{0z}}^-} \frac{\hbar k_{0z}^2}{2m_c^*} - \frac{B(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{m+1, k_z}^+)}{\lambda_{m+1, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{0z}}^+} \left\{ g(\lambda_{m+1, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) + \right. \right.$$

$$\left. + H(\lambda_{m+1, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{0z} + Z(\lambda_{m+1, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) L_1^{m+1} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) \right\} \Big|^2$$

$$W(k_{0z}, 0^+, q_x, k_z, m^-) = W_0 \sum_{q_y} e^{-\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2} (L^2 q_{\perp}^2)^m |v(\vec{q})|^2 |E_+|^2 \delta(\hbar\omega - (\bar{\lambda}_{m, k_z}^- \lambda_{q, k_{0z}}^+))$$

$$\left| \frac{A(\bar{\lambda}_{m, k_z}^-; \lambda_{m, k_z}^+)}{\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{0z}}^+} \times \left\{ G(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) + H(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{0z} + Z(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) L_1^m \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) \right\} \frac{\hbar k_z}{\sqrt{2m_c^*}} + \right.$$

$$+ \frac{B(\bar{\lambda}_{m+1, k_z}^-; \bar{\lambda}_{m, k_z}^-) M(\bar{\lambda}_{m+1, k_z}^-; \lambda_{0, k_{0z}}^+)}{\bar{\lambda}_{m+1, k_z}^- - \lambda_{0, k_{0z}}^+} \times \left\{ L_1^m \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) k_z - (m+1) k_{0z} \right\} \frac{\hbar}{\sqrt{2m_c^*}} -$$

$$- \frac{A(\bar{\lambda}_{0, k_{0z}}^-; \lambda_{0, k_{0z}}^+)}{\bar{\lambda}_{m, k_z}^- - \bar{\lambda}_{0, k_{0z}}^-} \times \left\{ G(\bar{\lambda}_{m, k_z}^-; \bar{\lambda}_{0, k_{0z}}^-) + H(\bar{\lambda}_{m, k_z}^-; \bar{\lambda}_{0, k_{0z}}^-) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{0z} + Z(\bar{\lambda}_{m, k_z}^-; \bar{\lambda}_{0, k_{0z}}^-) L_1^m \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) \right\} \frac{\hbar k_{0z}}{\sqrt{2m_c^*}} \Big|^2$$

$$W(k_{oz}, 0^+, q_x, k_z, m^+) = 2 W_0 \sum_{q_y} e^{-\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2} (L^2 q_{\perp}^2) |v(\vec{q})|^2 |E_-|^2 \delta(\hbar\omega - (\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{oz}}^+))$$

$$\left| \frac{B(\lambda_{1, k_{oz}}^+; \lambda_{0, k_{oz}}^+)}{\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{1, k_{oz}}^+} \times \left\{ \left[G(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{1, k_{oz}}^+) + H(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{1, k_{oz}}^+) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{oz} \right] L_1^{m-1} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) + \right. \right.$$

$$\left. + 2 Z(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{1, k_{oz}}^+) L_2^{m-1} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) + m J(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{1, k_{oz}}^+) \right\} -$$

$$- \frac{B(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{m-1, k_z}^+)}{\lambda_{m-1, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{oz}}^+} \times \left\{ m^{1/2} G(\lambda_{m-1, k_z}^+; \lambda_{0, k_{oz}}^+) + m^{1/2} H(\lambda_{m-1, k_z}^+; \lambda_{0, k_{oz}}^+) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{oz} + \right.$$

$$\left. + m^{1/2} Z(\lambda_{m-1, k_z}^+; \lambda_{0, k_{oz}}^+) L_1^{m-1} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) \right\} - \frac{A(\lambda_{m, k_z}^+; \bar{\lambda}_{m, k_z}) M(\bar{\lambda}_{m-1, k_z}; \lambda_{0, k_{oz}}^+)}{\bar{\lambda}_{m, k_z} - \lambda_{0, k_{oz}}^+} \times \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \left\{ k_z^2 L_1^{m-1} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) - m k_z k_{oz} \right\}$$

$$\overline{W}(k_{oz}, 0, q_x, k_z, m^-) = 4 \overline{W}_0 \sum_{q_y} e^{-\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2} (L^2 q_{\perp}^2)^{m-2} |v(\vec{q})|^2 |E_-| \delta(\hbar \omega(\lambda_{m, k_z}^- - \lambda_{0, k_{oz}}^+))$$

$$\times \left| \frac{B(\lambda_{1, k_{oz}}^+; \lambda_{0, k_{oz}}^+) M(\lambda_{m, k_z}^-; \lambda_{1, k_{oz}}^+)}{\lambda_{m, k_z}^- - \lambda_{1, k_{oz}}^+} \times \frac{\hbar}{\sqrt{2m_c^*}} \left\{ 2k_z L_2^{m-2} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) - m k_{oz} L_1^{m-2} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) \right\} - \right.$$

$$\left. - \frac{B(\lambda_{m, k_{oz}}^-; \lambda_{m-1, k_{oz}}^-) M(\lambda_{m-1, k_z}^-; \lambda_{0, k_{oz}}^+)}{\lambda_{m-1, k_z}^- - \lambda_{0, k_{oz}}^+} \times \frac{\hbar}{\sqrt{2m_c^*}} \left\{ m k_z L_1^{m-1} \left(\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2 \right) - m(m-1) k_{oz} \right\} \right|^2$$

/126/

$$W(k_{0z}, 0^+, q_x, k_z, m^+) = W_0 \sum_{q_y} e^{-\frac{1}{2} L^2 q_1^2} (L^2 q_1^2)^m \frac{\hbar^2}{2m^*} |E_z|^2 |v(\vec{q})|^2 \delta(\hbar\omega - (\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{0, k_{0z}}^+))$$

$$\times \left| \frac{1}{\hbar\omega} \left\{ T(\lambda_{0, k_{0z}}^+) k_{0z} - T(\lambda_{m, k_z}^+) k_z \right\} \times \left\{ G(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) + H(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z k_{0z}^+ \right. \right.$$

$$\left. + Z(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{0, k_{0z}}^+) L_1^m \left(\frac{1}{2} L^2 q_1^2 \right) \right\} + \frac{M(\lambda_{m+1, k_z}^-; \lambda_{0, k_{0z}}^+) A(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{m+1, k_z}^-)}{\lambda_{m+1, k_z}^- - \lambda_{0, k_{0z}}^+} \times \left(\frac{\hbar\omega_c}{2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \left\{ k_z L_1^m \left(\frac{1}{2} L^2 q_1^2 \right) - (m+1) k_{0z} \right\} + \frac{M(\lambda_{m, k_z}^+; \lambda_{1, k_{0z}}^-) A(\lambda_{1, k_{0z}}^-; \lambda_{0, k_{0z}}^+)}{\lambda_{m, k_z}^+ - \lambda_{1, k_{0z}}^-} \times \left(\frac{\hbar\omega_c}{2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \left\{ k_{0z} L_1^m \left(\frac{1}{2} L^2 q_1^2 \right) - k_z \right\} \Bigg|^2$$

$$\begin{aligned}
\bar{W}(k_{0z}, 0^+, q_x, k_z, m^-) &= 2^* \bar{W}_0 \sum_{q_y} e^{-\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2} (L^2 q_{\perp}^2)^{m-1} |v(\vec{q})|^2 * |E_z|^2 \delta(\hbar\omega - (\lambda_{m,k_z}^- - \lambda_{0,k_{0z}}^+)) * \\
&* \left| \frac{M(\lambda_{m,k_z}^-; \lambda_{0,k_{0z}}^+)}{\hbar\omega} \left\{ T(\lambda_{0,k_{0z}}^+) k_{0z} - T(\lambda_{m,k_z}^-) k_z \right\} * \left\{ k_z L_1^{m-1} (\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2) - m k_{0z} \right\} \frac{\hbar}{\sqrt{2m_c^*}} - \right. \\
&- \frac{A(\lambda_{0,k_{0z}}^+; \lambda_{1,k_{0z}}^-)}{\lambda_{m,k_z}^- - \lambda_{1,k_{0z}}^-} \left(\frac{\hbar\omega_c}{2} \right)^{\frac{1}{2}} * \left\{ \left[G(\lambda_{m,k_z}^-; \lambda_{1,k_{0z}}^-) + H(\lambda_{m,k_z}^-; \lambda_{1,k_{0z}}^-) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{0z} \right] L_1^{m-1} (\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2) + \right. \\
&+ 2 Z(\lambda_{m,k_z}^-; \lambda_{1,k_{0z}}^-) L_2^{m-1} (\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2) + m J(\lambda_{m,k_z}^-; \lambda_{1,k_{0z}}^-) \left. \right\} + m \left(\frac{\hbar\omega_c}{2} \right)^{\frac{1}{2}} * \frac{A(\lambda_{m-1,k_z}^+; \lambda_{m,k_z}^-)}{\lambda_{m-1,k_z}^+ - \lambda_{0,k_{0z}}^+} * \\
&* \left\{ G(\lambda_{m-1,k_z}^+; \lambda_{0,k_{0z}}^+) + H(\lambda_{m-1,k_z}^+; \lambda_{0,k_{0z}}^+) \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_z k_{0z} + Z(\lambda_{m-1,k_z}^+; \lambda_{0,k_{0z}}^+) L_1^{m-1} (\frac{1}{2} L^2 q_{\perp}^2) \right\} \Bigg|^2, \\
&\quad \quad \quad /128/
\end{aligned}$$

gdzie

$$\bar{W}_0 = 2^{-(m+2)} \frac{L_x L_y}{\hbar L^2} \frac{\rho^2 e^2}{(\hbar\omega)^2} \frac{1}{m!} \mathcal{U}_v \quad . \quad \quad \quad /129/$$

3. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej istnieniem nieporządku chemicznego w kryształach mieszanym.

Przejdźmy do obliczenia współczynnika absorpcji

$$\eta^{\pm} = \frac{2\mu_0 c}{\sqrt{\epsilon_{\infty}} |E|^2} \cdot \frac{\hbar \omega}{V_0} \sum_{k_{0z}, k_z, q_x} \overline{W}(k_{0z}, 0^+, q_x, k_z, m^{\pm}) \quad , \quad /131/$$

gdzie η^+ oraz η^- oznaczają współczynniki absorpcji dla przejść $0^+ \rightarrow m^+$ z zachowaniem "spinu" oraz $0^+ \rightarrow m^-$ z odwróceniem "spinu", odpowiednio.

Rozkład atomów różnego rodzaju w węzłach sieci krystalicznej zmienia się od próbki do próbki. W związku z tym dla każdej próbki z osobna mamy różny zbiór wartości zmiennych losowych $V(\vec{q})$. W celu obliczenia najbardziej prawdopodobnej wartości współczynnika absorpcji η należy uśrednić występującą w wyrażeniach na $\overline{W}$ wartość kwadratu modułu zmiennej losowej $V(\vec{q})$ po wszystkich możliwych konfiguracjach atomów różnego rodzaju w węzłach sieci krystalicznej. Zakładając zupełnie przypadkowy rozkład atomów w węzłach sieci krystalicznej otrzymamy /patrz dodatek A/ uśrednioną wartość kwadratu zmiennej losowej $V(\vec{q})$ w postaci:

$$\langle |V(\vec{q})|^2 \rangle_{av} = \frac{f(1-f)}{NV} \quad , \quad /132/$$

gdzie f jest składem molowym.

Wstawiając kolejno wyrażenia /123/ - /128/ do /131/ oraz zastępując sumowanie po k_{0z} i q_z całkowaniem po energii otrzymamy wyrażenia na współczynniki magnetoabsorpcji dla poszczególnych polaryzacji światła.

Dla polaryzacji prostopadłej prawoskrętnej w układzie Faradaya otrzymamy:

$$\eta_{CRI}^+ = \eta_0^+ \int_{C^+}^{E_F + \hbar\omega} \left\{ (R_{11}^2 K_0^{+2} - 2 R_{11} R_{12}) \frac{Y_0^+}{Y_m^+} \sqrt{\frac{X - \hbar\omega - E_0^+}{X - E_m^+}} + \right. \\ \left. + \frac{(m+2) R_{13}^2 + R_{12}^2 + R_{14}^2}{Y_0^+ Y_m^+} \frac{1}{\sqrt{(X - \hbar\omega - E_0^+)(X - E_m^+)}} \right\} R_0 dX \quad /133/$$

$$\eta_{CRI}^- = \eta_0^- \int_{C^-}^{E_F + \hbar\omega} \left\{ (R_{21}^2 + R_{23}^2 + R_{25}^2) \frac{Y_m^-}{Y_0^+} \sqrt{\frac{X - E_m^-}{X - \hbar\omega - E_0^+}} + \right. \\ \left. + (R_{22}^2 + R_{24}^2 + R_{26}^2) \frac{Y_0^+}{Y_m^-} \sqrt{\frac{X - \hbar\omega - E_0^+}{X - E_m^-}} - \right. \\ \left. - 2(R_{21} R_{26} + R_{25} R_{22}) \right\} R_0 dX \quad /134/$$

Dla polaryzacji prostopadłej lewoskrętnej w układzie Faradaya /CRA/ otrzymamy:

$$\eta_{CRA}^+ = \eta_0^+ \int_{C^+}^{E_F + \hbar\omega} \left\{ \frac{R_{31}^2 + R_{33}^2 + R_{35}^2 + R_{36}^2 + R_{34}^2}{Y_0^+ Y_m^+} \times \frac{1}{\sqrt{(X - E_m^+)(X - \hbar\omega - E_0^+)}} + \right. \\ \left. + \left[(R_{32}^2 - 2 R_{32} R_{34}) K_0^+ K_m^+ + \frac{1}{m^2} R_{32}^2 \right] K_m^{+2} \frac{Y_m^+}{Y_0^+} \sqrt{\frac{X - E_m^+}{X - \hbar\omega - E_0^+}} \right\} R_0 dX, \quad /135/$$

$$\eta_{cRA}^- = \eta_0^- \int_{c^-}^{E_F + \hbar\omega} \left\{ (2R_{41}^2 + mR_{42}^2) \frac{Y_0^+}{Y_m^-} \sqrt{\frac{X - E_m^-}{X - \hbar\omega - E_0^+}} + \right.$$

$$\left. + (mR_{41}^2 + m(m-1)R_{42}^2) \frac{Y_m^-}{Y_0^+} \sqrt{\frac{X - E_0^+ - \hbar\omega}{X - E_m^-}} \right\} R_0 dx . \quad /136/$$

Dla polaryzacji liniowej równoległej do pola magnetycznego

$$\begin{aligned} \eta_{II}^+ = \eta_0^+ \int_{c^+}^{E_F + \hbar\omega} & \left\{ [(R_{56} + R_{52})^2 + (m+1)(R_{55} - R_{54})^2 + \right. \\ & + R_{58}^2 K_m^{+2} K_0^{+2}] \frac{Y_m^+}{Y_0^+} \sqrt{\frac{X - E_m^+}{X - \hbar\omega - E_0^+}} + [(R_{51} - (m+1)R_{55})^2 + \\ & + (m+1)(R_{53} + R_{56})^2 + R_{57}^2 K_m^{+2} K_0^{+2}] \frac{Y_0^+}{Y_m^+} \sqrt{\frac{X - \hbar\omega - E_0^+}{X - E_m^+}} - \\ & \left. - 2[(R_{56} + R_{52})R_{57} + R_{58}(R_{51} - (m+1)R_{55})] K_m^+ K_0^+ \right\} dx , \end{aligned}$$

$$\eta_{11}^- = \eta_0^- \int_{C^-}^{E_F + \hbar\omega} \frac{R_{61}^2 + R_{62}^2 + (m+1)R_{63}^2}{Y_0^+ Y_m^-} \frac{1}{\sqrt{(X-E_m^-)(X-\hbar\omega-E_0^+)}} +$$

$$+ R_{64}^2 (K_m^-)^2 \frac{Y_m^-}{Y_0^+} \sqrt{\frac{X-E_m^-}{X-\hbar\omega-E_0^+}} +$$

$$+ m R_{65}^2 (K_0^+)^2 \frac{Y_0^+}{Y_m^-} \sqrt{\frac{X-\hbar\omega-E_0^+}{X-E_m^-}} +$$

$$+ \left[(R_{65} + R_{66})^2 + \frac{1}{m} (R_{64} \cdot m + R_{67})^2 \right] K_0^+ K_m^- \} R_0 dx ,$$

/138/

gdzie

$$\eta_0^\pm = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\mu_0 c}{\sqrt{\epsilon_\infty}} \frac{u_v^2}{E_g^2} \frac{e^4 p^2 B^2}{\hbar^5} \frac{f(1-f)}{N} \frac{m^*}{\hbar\omega} \epsilon(\hbar\omega \gg E_m^\pm - E_F) ,$$

/139/

$$R_0 = (2X + E_g)(2X - 2\hbar\omega + E_g) ,$$

/140/

$$C^\pm = \max(E_m^\pm, E_0^+ + \hbar\omega) ,$$

/141/

$$E_m^\pm = -\frac{E_g}{2} + \left\{ \left(\frac{E_g}{2} \right)^2 + E_g \left[\hbar\omega_c (M + \frac{1}{2}) \mp \frac{1}{2} |g_e^*| \mu_B B \right] \right\}^{1/2} ,$$

/142/

$$K_m^\pm = \left(\frac{1}{E_g} \right)^{1/2} (X - \hbar\omega \delta_{0,m} + E_g + E_m^\pm)^{1/2} (X - \hbar\omega \delta_{0,m} - E_m^\pm)^{1/2} ,$$

/143/

$$Y_m^\pm = \left(\frac{1}{E_g} \right)^{1/2} (X - \hbar\omega \delta_{0,m} + E_g + E_m^\pm)^{1/2}$$

/144/

$$R_{11} = (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{A(q_0^-; x - \hbar\omega) M(x, q_0^-)}{x - q_0^-} , \quad /145/$$

$$R_{12} = (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{B(t_{m+1}^+; x) \mathcal{G}(t_{m+1}^+; x - \hbar\omega)}{t_{m+1}^+ - x + \hbar\omega} , \quad /146/$$

$$R_{13} = (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{B(t_{m+1}^+; x) Z(t_{m+1}^+; x - \hbar\omega)}{t_{m+1}^+ - x + \hbar\omega} , \quad /147/$$

$$R_{14} = (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{B(t_{m+1}^+; x) H(t_{m+1}^+; x - \hbar\omega)}{t_{m+1}^+ - x + \hbar\omega} K_m^+ K_0^+ , \quad /148/$$

$$R_{21} = \frac{A(x, r_m^+)}{r_m^+ - x + \hbar\omega} \mathcal{G}(r_m^+; x - \hbar\omega) , \quad /149/$$

$$R_{22} = \frac{A(q_0^-; x - \hbar\omega) \mathcal{G}(x, q_0^-)}{x - q_0^-} + (m+1) \frac{B(r_{m+1}^-; x) M(r_{m+1}^-; x - \hbar\omega)}{r_{m+1}^- - x + \hbar\omega} , \quad /150/$$

$$R_{23} = (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{A(x; r_m^+) Z(r_m^+; x - \hbar\omega)}{r_m^+ - x + \hbar\omega} + \\ + (m+1) \frac{B(r_{m+1}^-; x) M(r_{m+1}^-; x - \hbar\omega)}{r_{m+1}^- - x + \hbar\omega} , \quad /152/$$

$$R_{24} = (m+1)^{\frac{1}{2}} \frac{A(q_0^-; x - \hbar\omega) Z(x; q_0^-)}{x - q_0^-} , \quad /153/$$

$$R_{25} = \frac{A(x; r_m^+) H(r_m^+; x - \hbar\omega)}{r_m^+ - x + \hbar\omega} K_0^- K_m^- \quad /154/$$

$$R_{26} = \frac{A(q_0^-; x - \hbar\omega) H(x; q_0^-)}{x - q_0^-} K_0^- K_m^- \quad /155/$$

$$R_{31} = \frac{B(q_1^+; x - \hbar\omega) \zeta(x; q_1^+)}{x - q_1^+} - m^{1/2} \frac{B(x; t_{m-1}^+) Z(t_{m-1}^+; x - \hbar\omega)}{t_{m-1}^+ - x + \hbar\omega} \quad /156/$$

$$R_{32} = m \frac{A(x; t_m^-) M(t_m^-; x - \hbar\omega)}{t_m^- - x + \hbar\omega} \quad /157/$$

$$R_{33} = \frac{B(q_1^+; x - \hbar\omega) J(x; q_1^+)}{x - q_1^+} - m \frac{B(x; t_{m-1}^+) \zeta(t_{m-1}^+; x - \hbar\omega)}{t_{m-1}^+ - x + \hbar\omega} \quad /158/$$

$$R_{34} = m^{1/2} \frac{B(x; t_{m-1}^+) H(t_{m-1}^+; x - \hbar\omega)}{t_{m-1}^+ - x + \hbar\omega} K_0^+ K_m^+ \quad /159/$$

$$R_{35} = 2^{1/2} (m+1)^{1/2} \frac{B(q_1^+; x - \hbar\omega) Z(x; q_1^+)}{x - q_1^+} \quad /160/$$

$$R_{36} = m^{1/2} \frac{B(q_1^+; x - \hbar\omega) H(x; q_1^+)}{x - q_1^+} K_0^+ K_m^+ \quad /161/$$

$$R_{41} = \frac{B(q_1^+; x - \hbar\omega) M(x; q_1^+)}{x - q_1^+} \quad /162/$$

$$R_{42} = \frac{B(x; t_{m-1}^-) M(t_{m-1}^-; x - \hbar\omega)}{t_{m-1}^- - x + \hbar\omega} \quad /163/$$

$$R_{51} = \frac{T(x - \hbar\omega) G(x; x - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \quad /164/$$

$$R_{52} = \frac{T(x) G(x, x - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \quad /165/$$

$$R_{53} = \frac{T(x - \hbar\omega) Z(x; x - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \quad /166/$$

$$R_{54} = \frac{T(x) Z(x; x - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \quad /167/$$

$$R_{55} = \left(\frac{\hbar\omega_c}{2}\right)^{1/2} \frac{A(x; t_{m+1}^-) M(t_{m+1}^-; x - \hbar\omega)}{t_{m+1}^- - x + \hbar\omega} \quad /168/$$

$$R_{56} = \left(\frac{\hbar\omega_c}{2}\right)^{1/2} \frac{A(q_1^-; x - \hbar\omega) M(x; q_1^-)}{x - q_1^-} \quad /169/$$

$$R_{57} = \frac{T(x - \hbar\omega) H(x; x - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \quad /170/$$

$$R_{58} = \frac{T(x) H(x; x - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \quad /171/$$

$$R_{61} = \left(\frac{m \hbar \omega_c}{2} \right)^{1/2} \left\{ \frac{A(x; r_{m-1}^+) G(r_{m-1}^+; x - \hbar \omega)}{r_{m-1}^+ - x + \hbar \omega} - \frac{A(q_1^-; x - \hbar \omega) J(x, q_1^-)}{x - q_1^-} \right\} \quad /172/$$

$$R_{62} = \left(\frac{\hbar \omega_c}{2} \right)^{1/2} \left\{ m \frac{A(x; r_{m-1}^+) Z(r_{m-1}^+; x - \hbar \omega)}{r_{m-1}^+ - x + \hbar \omega} - \frac{A(q_1^-; x - \hbar \omega) G(x; q_1^-)}{x - q_1^-} \right\} \quad /173/$$

$$R_{63} = (\hbar \omega_c)^{1/2} \frac{A(q_1^-; x - \hbar \omega) Z(x; q_1^-)}{x - q_1^-} \quad /174/$$

$$R_{64} = \frac{T(x) M(x; x - \hbar \omega)}{\hbar \omega} \quad /175/$$

$$R_{65} = \frac{T(x - \hbar \omega) M(x; x - \hbar \omega)}{\hbar \omega} \quad /176/$$

$$R_{66} = \left(\frac{\hbar \omega_c}{2} \right)^{1/2} \frac{A(x; r_{m-1}^+) H(r_{m-1}^+; x - \hbar \omega)}{r_{m-1}^+ - x + \hbar \omega} \quad /177/$$

$$R_{67} = \left(\frac{\hbar\omega_c}{2}\right)^{1/2} \frac{A(q_i^-; x - \hbar\omega) H(x; q_i^-)}{x - q_i^-} \quad /178/$$

$$q_M^\pm = -\frac{E_g}{2} + \left\{ \left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + M E_g \hbar\omega_c + (x - \hbar\omega)(x - \hbar\omega + E_g) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} E_g |g_e^*| \mu_B B (1 \mp 1) \right\}^{1/2} \quad /179/$$

$$r_M^\pm = -\frac{E_g}{2} + \left\{ \left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + E_g \hbar\omega_c (M - m) + x(x + E_g) - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} E_g |g_e^*| \mu_B B (1 \pm 1) \right\}^{1/2} \quad /180/$$

$$t_M^\pm = -\frac{E_g}{2} + \left\{ \left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + E_g \hbar\omega_c (M - m) + x(x + E_g) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} E_g |g_e^*| \mu_B B (1 \mp 1) \right\}^{1/2} \quad /181/$$

4. Zależność współczynnika magnetoabsorpcji od energii oraz polaryzacji absorbowanego fotonu.

Rozpatrzmy zachowanie się współczynnika magnetoabsorpcji dla przejść z zachowaniem spinu, dla polaryzacji prostopadłej prawoskrętnej w układzie Faradaya, przedstawionego równaniem /133/. Wyrażenie to posiada osobliwość dla energii absorbowanego fotonu $\hbar\omega^+ = E_m^+ - E_o^+$ /m jest dowolną liczbą naturalną większą od 1/. Związane jest to z występowaniem w tym wyrażeniu składnika

$$L_1 = \frac{f_1(x, \hbar\omega)}{\sqrt{(x - \hbar\omega - E_o^+)(x - E_m^+)}} \quad , \quad /182/$$

gdzie

$$f_1(x, \hbar\omega) = \frac{(m+2) R_{13}^2 + R_{12}^2 + R_{14}^2}{Y_o^+ Y_m^+} \cdot R_o \quad . \quad /183/$$

Dla każdego $\hbar\omega \neq \hbar\omega_R^+$ całkę funkcji L_1 można zapisać w postaci:

$$\begin{aligned} \int_{c^+}^{E_F + \hbar\omega} L_1 dx &= f_1(d_1, \hbar\omega) \int_{c^+}^{E_F + \hbar\omega} \frac{dx}{\sqrt{(x - \hbar\omega - E_o^+)(x - E_m^+)}} = \\ &= 2 \cdot f_1(d_1, \hbar\omega) \cdot \ln \frac{\sqrt{E_F - E_o^+} + \sqrt{E_F + \hbar\omega - E_m^+}}{\sqrt{|E_o^+ + \hbar\omega - E_m^+|}} \quad , \quad /184/ \end{aligned}$$

gdzie d_1 jest zawarte w przedziale $[c^+, E_F + \hbar\omega]$.

Wartość d_1 zmieniać się może wraz ze zmianą parametru $\hbar\omega$. Całka /184/ ma skończoną wartość dla każdej wartości energii absorbowanego fotonu większej od $\hbar\omega = E_m^+ - E_F$ i różnej od $\hbar\omega_R^+$. Dla energii fotonu $\hbar\omega = \hbar\omega_R^+$ jest ona nieokreślona.

Całka pierwszego składnika z równania /133/ jest ograniczoną funkcją parametru $\hbar\omega$.

Z powyższej analizy wynika, że współczynnik magnetoabsorpcji dla polaryzacji prostopadłej prawoskrętnej w układzie Faradaya jest ograniczoną funkcją energii absorbowanego fotonu $\hbar\omega$ z wyjątkiem wartości energii równej $\hbar\omega_R^+$, dla której występuje rezonans.

Rozpatrzmy obecnie zachowanie się współczynnika magnetoabsorpcji $\eta_{CRI}^+(\hbar\omega)$ w pobliżu rezonansu. Funkcje R_{ij} , Y_m^+ oraz R_0 są wolnozmiennymi funkcjami zarówno zmiennej x , jak i parametru $\hbar\omega$. Zastąpmy w pobliżu rezonansu funkcję $f/x, \hbar\omega$ / funkcją $f/x, \hbar\omega_R^+$ /, wówczas z równania /187/ otrzymamy, że w pobliżu rezonansu

$$\eta_{CRI}^+ \approx -f(d_1, \hbar\omega_R^+) \ln |E_0^+ + \hbar\omega - E_m^+| \quad . \quad /185/$$

Tak więc w pobliżu rezonansu współczynnik magnetoabsorpcji $\eta_{CRI}^+(\hbar\omega)$ posiada osobliwość typu logarytmicznego. Analogicznie wyrażenie /135/ posiada osobliwość typu logarytmicznego gdy $\hbar\omega = \hbar\omega_R^+$ oraz wyrażenie /138/ posiada osobliwość tego samego typu w pobliżu punktu $\hbar\omega_R^- = E_m^- - E_0^+$.

Współczynnik magnetoabsorpcji dla przejść z odwróceniem spinu, dla polaryzacji prostopadłej prawoskrętnej w układzie Faradaya, dany jest równaniem /134/. Całkę dwu pierwszych składników wyrażenia /134/ można zapisać w postaci:

$$\begin{aligned} (\eta_{CRI}^-)_1 = & \eta_0^- \left(f_2(d_2, \hbar\omega) + f_3(d_3, \hbar\omega) \right) (E_F - E_0^+)^{1/2} (E_F + \hbar\omega - E_m^-)^{1/2} + \\ & + \eta_0^- \left(f_3(d_3, \hbar\omega) - f_2(d_2, \hbar\omega) \right) (E_m^- - E_0^+ - \hbar\omega) \ln \frac{\sqrt{E_F - E_0^+} + \sqrt{E_F + \hbar\omega - E_m^-}}{\sqrt{|E_0^+ + \hbar\omega - E_m^-|}} \quad , \end{aligned}$$

/186/

gdzie

$$f_2(x, \hbar\omega) = (R_{21}^2 + R_{23}^2 + R_{25}^2) \frac{Y_m^-}{Y_0^+} R_0 \quad ,$$

/187/

$$f_3(x, \hbar\omega) = (R_{22}^2 + R_{24}^2 + R_{26}^2) \frac{Y_0^+}{Y_m^-} R_0 \quad ,$$

d_2 oraz d_3 są pewnymi, ściśle określonymi dla danego $\hbar\omega$, wartościami z przedziału $[c^-, E_F + \hbar\omega]$.

Jak wynika ze wzoru /186/ współczynnik magnetoabsorpcji posiada osobliwość typu $\ln x$ /osobliwość typu Kohna/ w otoczeniu punktu $\hbar\omega_R^- = E_m^- - E_0^+$.

Rozpatrzmy obecnie zachowanie się pierwszej pochodnej wyrażenia /186/ w pobliżu punktu $\hbar\omega_R^-$. Ponieważ funkcje R_{ij}, R_0 oraz Y_m^+ są wolnozmiennymi funkcjami zarówno zmiennej x jak i parametru $\hbar\omega$ to w pobliżu $\hbar\omega_R^-$ zastąpmy wartości tych funkcji wartościami w punkcie $\hbar\omega_R^-$. Wówczas w otoczeniu tego punktu

$$\frac{d\eta_{CRI}^-}{d(\hbar\omega)} \approx \eta_0^- (f_3(d_3, \hbar\omega) - f_2(d_2, \hbar\omega)) \ln(|E_m^- - E_0^+ - \hbar\omega|) \quad . \quad /188/$$

Tak więc w otoczeniu punktu $\hbar\omega_R^-$ pierwsza pochodna współczynnika magnetoabsorpcji η_{CRI}^- posiada osobliwość typu logarytmicznego.

Analogicznie wyrażenia /136/ oraz /137/ są ciągłymi funkcjami energii fotonu, jednakże ich pierwsze pochodne po $\hbar\omega$ posiadają osobliwość typu logarytmicznego w punktach $\hbar\omega_R^+$ i $\hbar\omega_R^-$, odpowiednio.

Tak więc dla przejść z zachowaniem spinu współczynnik magnetoabsorpcji związanej z istnieniem w kryształach mieszanych nieporządku chemicznego posiada dla obydwu polaryzacji prostopadłych osobliwość typu logarytmicznego we wszystkich punktach

$\hbar\omega_R^+ = E_m^+ - E_o^+ \quad /m = 2, 3, 4 \dots/$. Dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego współczynnik magnetoabsorpcji jest funkcją ciągłą, a jego pochodne po $\hbar\omega$ posiada osobliwość we wszystkich punktach $\hbar\omega = \hbar\omega_R^+$.

Dla przejść z odwróceniem spinu współczynnik magnetoabsorpcji związanej z istnieniem w kryształach mieszanych nieporządku chemicznego posiada, dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego, osobliwość typu logarytmicznego we wszystkich punktach $\hbar\omega_R^- = E_m^- - E_o^+$. Dla polaryzacji prostopadłej współczynnik magnetoabsorpcji jest funkcją ciągłą i nie posiada osobliwości, natomiast jego pierwsza pochodna po $\hbar\omega$ posiada osobliwość typu logarytmicznego we wszystkich punktach $\hbar\omega_R^-$.

5. DYSKUSJA OTRZYMANYCH REZULTATÓW. PRZYKŁADY NUMERYCZNE.

Istnienie nieporządku chemicznego w makroskopowo jednorodnym kryształach mieszanym produkuje mikroskopowe fluktuacje składu. Wpływ takich fluktuacji na wewnątrzpasmową magnetoabsorpcję na swobodnych nośnikach w półprzewodnikach mieszanych o parabolicznym równaniu dyspersji przedyskutowano w pracy [41]. Otrzymany w pracy [41] charakter osobliwości współczynnika magnetoabsorpcji jest identyczny z charakterem osobliwości współczynnika magnetoabsorpcji otrzymanego w niniejszej pracy dla przejść z zachowaniem spinu. W obu przypadkach dla polaryzacji prostopadłej w konfiguracji Faradaya występuje osobliwość typu logarytmicznego, natomiast dla polaryzacji równoległej ($\vec{E} \parallel \vec{B}$) osobliwość typu Kohna. Uwzględnienie w obliczeniach oddziaływania spin-orbita oraz trzech pasm (Γ_6 , Γ_7 , i Γ_8) prowadzi natomiast do pojawienia się na krzywej magnetoabsorpcji dodatkowych punktów osobliwych związanych z przejściami z odwróceniem spinu. W przypadku polaryzacji równoległej jest to osobliwość typu logarytmicznego, natomiast dla polaryzacji prostopadłej w konfiguracji Faradaya jest to osobliwość typu Kohna. Uwzględnienie wpływu pasm Γ_7 i Γ_8 prowadzące do nieparabolicznej zależności energii od wektora falowego zmienia również położenie punktów osobliwych na krzywej magnetoabsorpcji.

W pracy [64] badano magnetoabsorpcję na swobodnych nośnikach w wąskoprzerwowych półprzewodnikach o strukturze energetycznej

typu JnSb wywołaną rozpraszaniem na zjonizowanych domieszkach. Otrzymany w pracy [64] charakter osobliwości oraz energie punktów osobliwych współczynnika magnetoabsorpcji otrzymane dla poszczególnych polaryzacji są identyczne z rezultatami niniejszej pracy. Tak więc zjonizowane domieszki oraz nieporządek chemiczny dają identyczne jakościowo efekty.

W celu oszacowania wielkości opisywanego efektu policzono numerycznie współczynniki magnetoabsorpcji wywołanej nieporządkiem chemicznym stopu dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego dla przejść $0^+ \rightarrow 2^+$ oraz $0^+ \rightarrow 2^-$. Obliczenia numeryczne wykazano dla n- typu $\text{Hg}_{0,75}\text{Cd}_{0,25}\text{Te}$ w niskich temperaturach w obszarze ultrakwantowym. Parametry zastosowane do obliczeń przedstawiono w tabeli 2. Dla porównania policzono również, na podstawie prac [41] i [64], wartości współczynników magnetoabsorpcji wywołanej fluktuacjami składu i rozpraszaniem na zjonizowanych domieszkach. Zastosowane w pracy [41] parametry α_0 , β_0 wyrażono poprzez U_V i U_C wykorzystując rezultaty pracy [65]. Otrzymane wyniki przedstawiono na rys. 4 - 9.

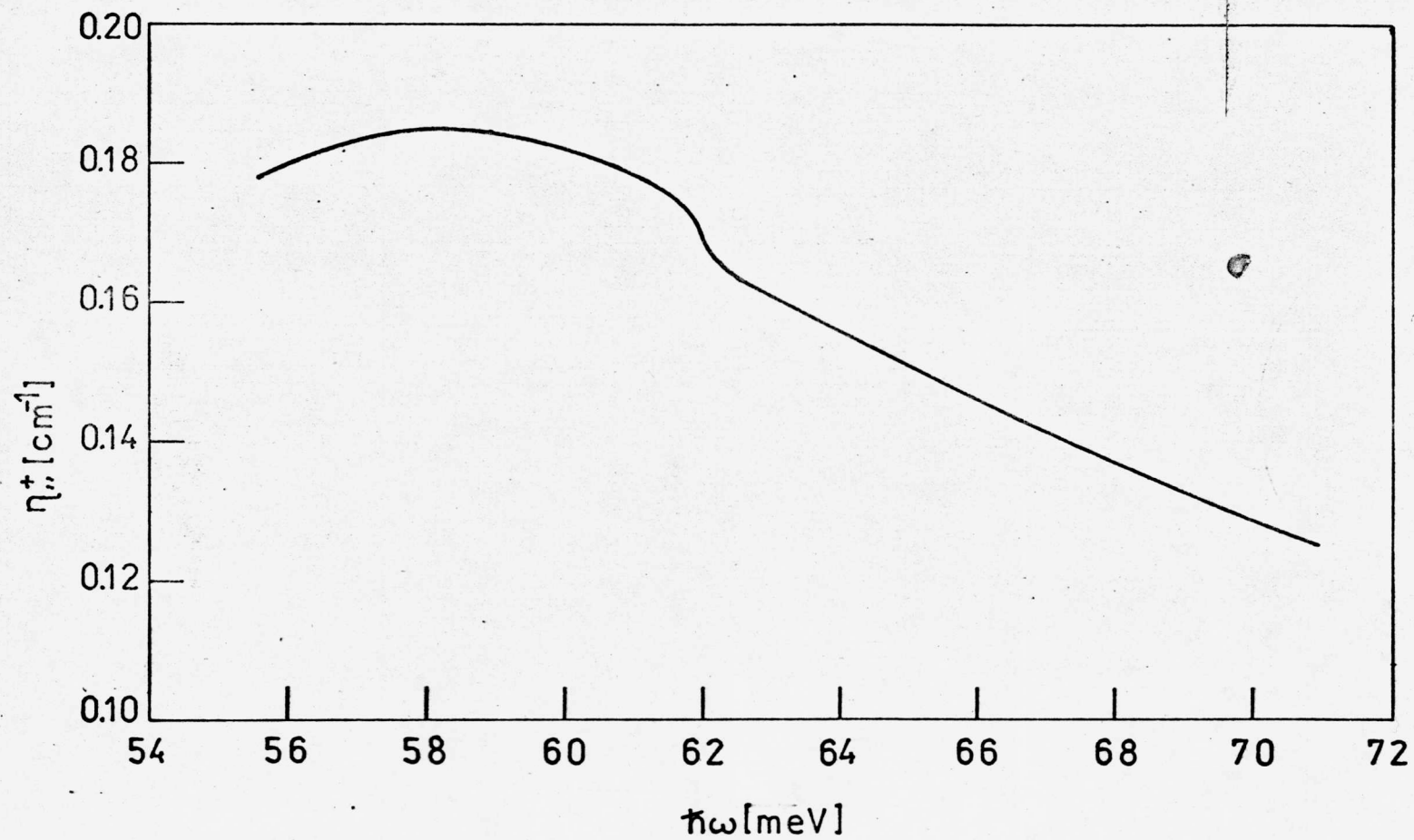
Tabela II

X	0,25
$n(\text{cm}^{-3})$	10^{16}
$P(\text{eVcm})$	$8,3 \cdot 10^8$
$N(\text{cm}^{-3})$	$1,5 \cdot 10^{22}$
$B(\text{T})$	5
$U_C(\text{eV})$	1,33
$U_V(\text{eV})$	- 0,43
m_c^*/m_0	0,012
E_∞	10
$E_g(\text{eV})$	0,157

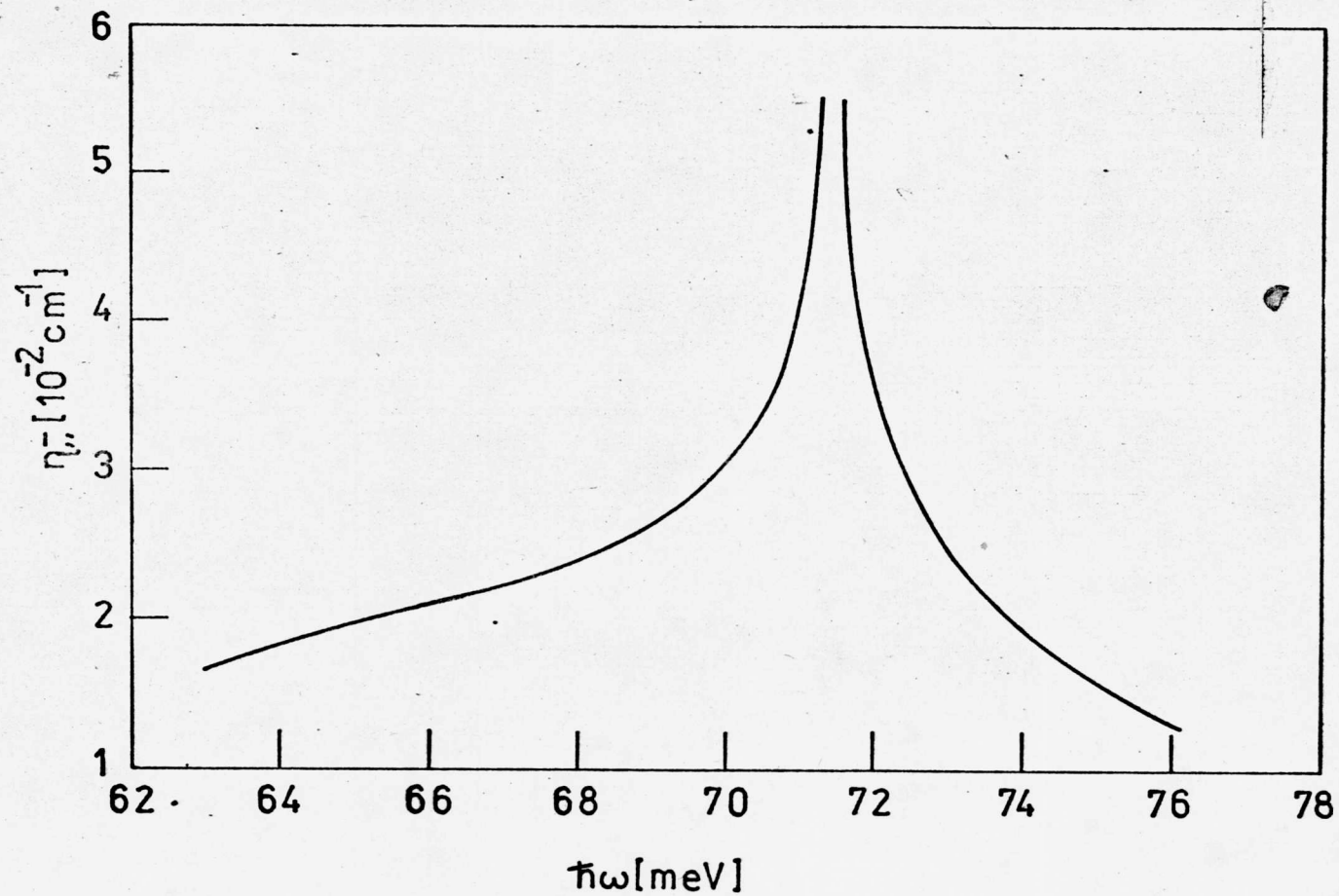
Jak wynika z otrzymanych wartości numerycznych dla magnetoabsorpcji wywołanej nieporządkiem chemicznym wkład przejść z zachowaniem spinu η_{II}^{+} (rys.4) jest w przybliżeniu trzy razy większy od wkładu przejść z odwróceniem spinu - η_{II}^{-} (rys.5). Osobliwość na krzywej η_{II}^{+} w otoczeniu punktu $\hbar\omega_R^{+} = 61 \text{ meV}$ jest słabo widoczna, podczas gdy osobliwość jej pierwszej pochodnej w otoczeniu tego punktu jest wyraźna (rys.6.).

Na rys.7. przedstawiono zależność współczynnika (η_{II}^{ν}) magnetoabsorpcji wywołanej fluktuacjami składu od energii absorbowanego fotonu policzonego wg pracy [41] dla przejść $0 \rightarrow 2$. Zachowanie się krzywych η_{II}^{+} i η_{II}^{ν} w funkcji $\hbar\omega$ jest odmienne. W okolicy punktu osobliwego η_{II}^{+} jest funkcją malejącą podczas gdy η_{II}^{ν} jest funkcją rosnącą.

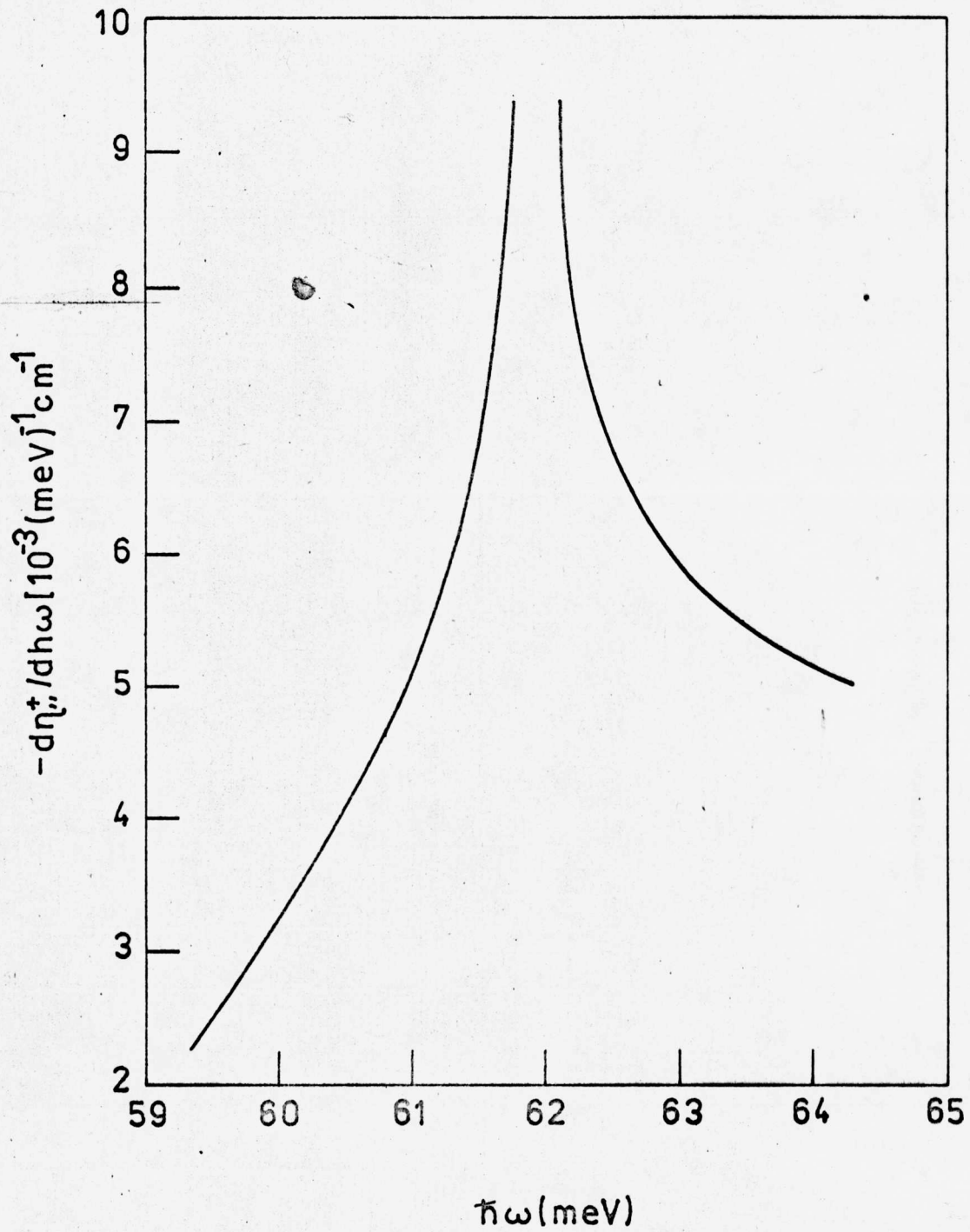
Obliczone na podstawie pracy [64] wkłady do całkowitej magnetoabsorpcji wywołanej rozpraszaniem na zjonizowanych domieszkach pochodzące od przejść z zachowaniem i odwróceniem spinu przedstawiono na rys.8 i 9, odpowiednio. Wartości ich są porównywalne z odpowiednimi wkładami do magnetoabsorpcji wywołanej nieporządkiem chemicznym stopu.



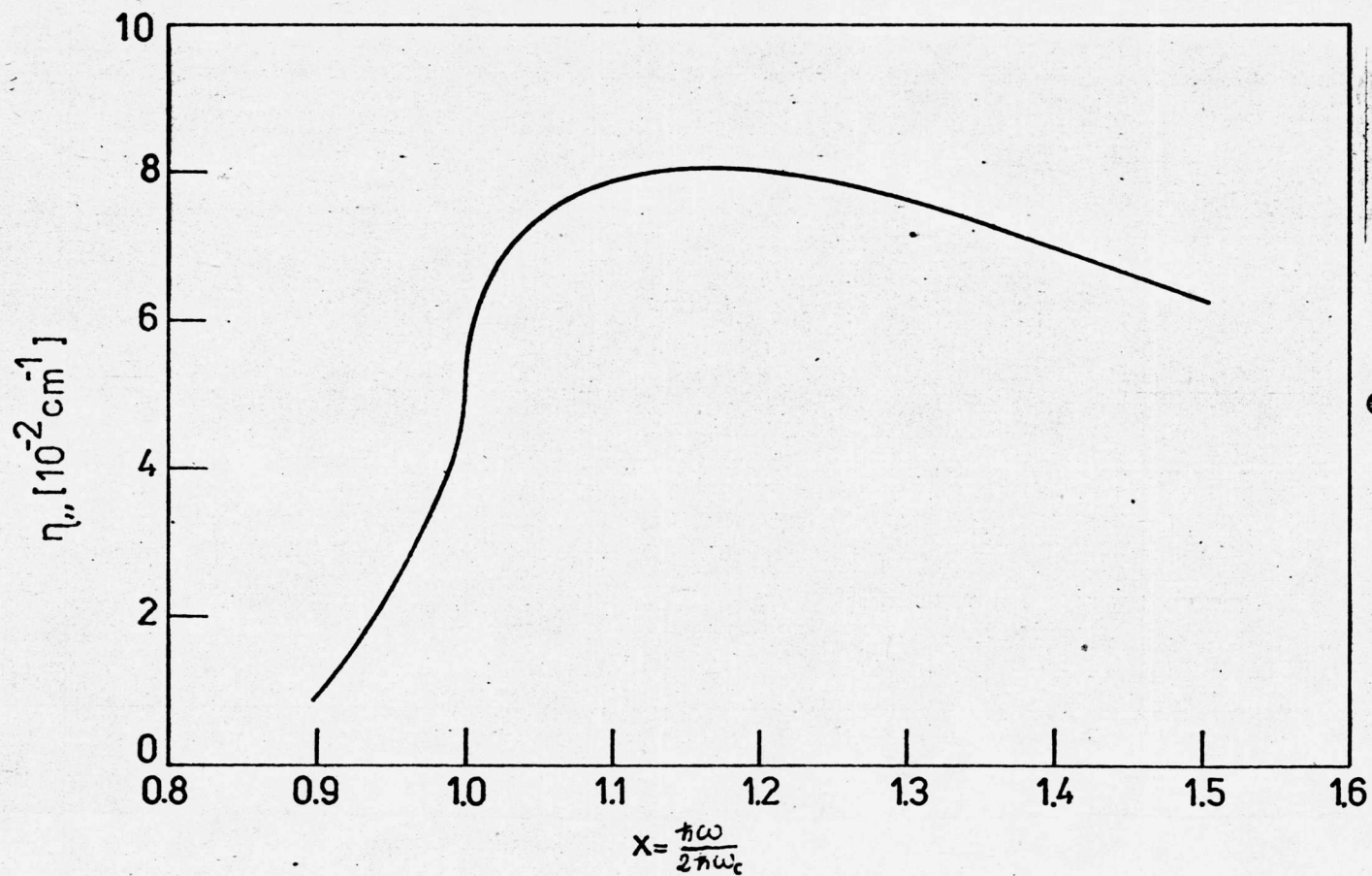
Rys.4. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej nieporządkiem chemicznym stopu dla przejść $0^+ \rightarrow 2^+$ dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego.



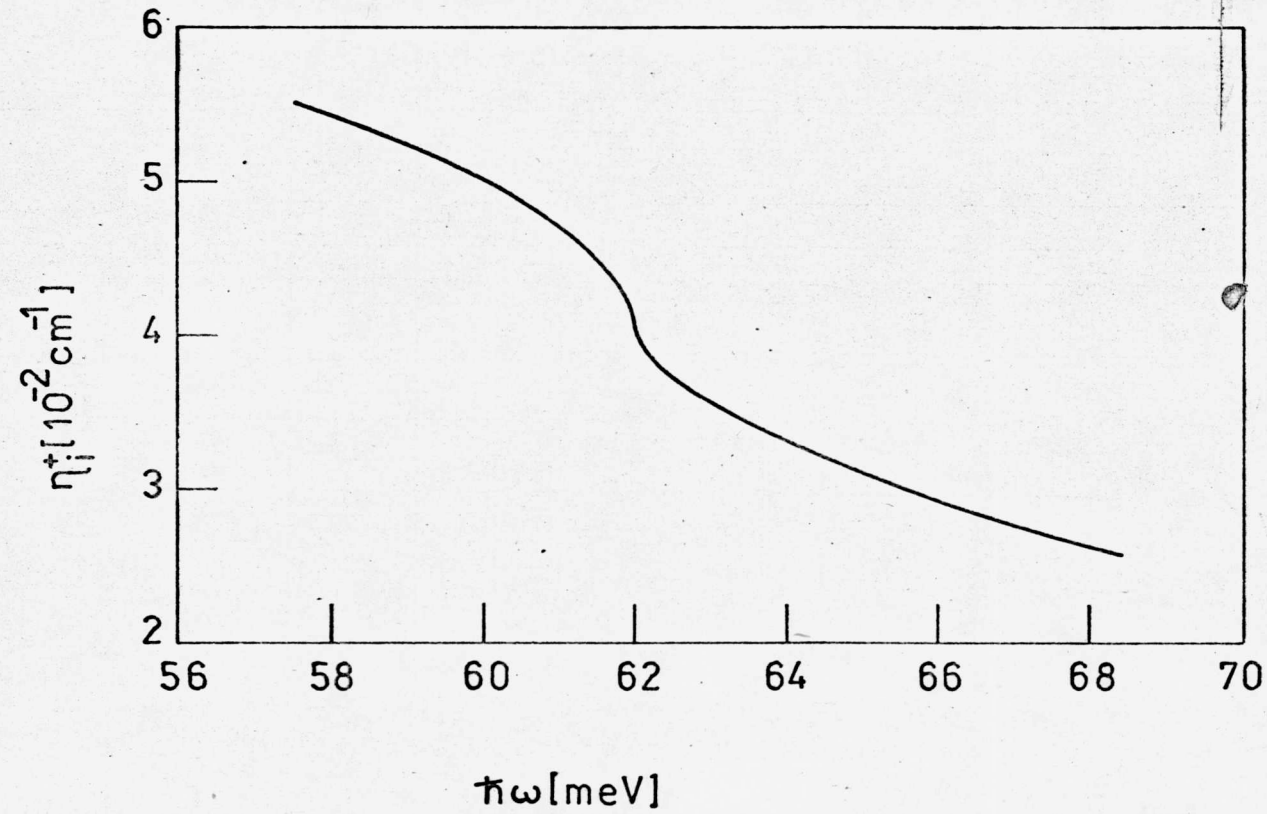
Rys. 5. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej nieporządkiem chemicznym stopu dla przejść $0^+ \rightarrow 2^-$ dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego.



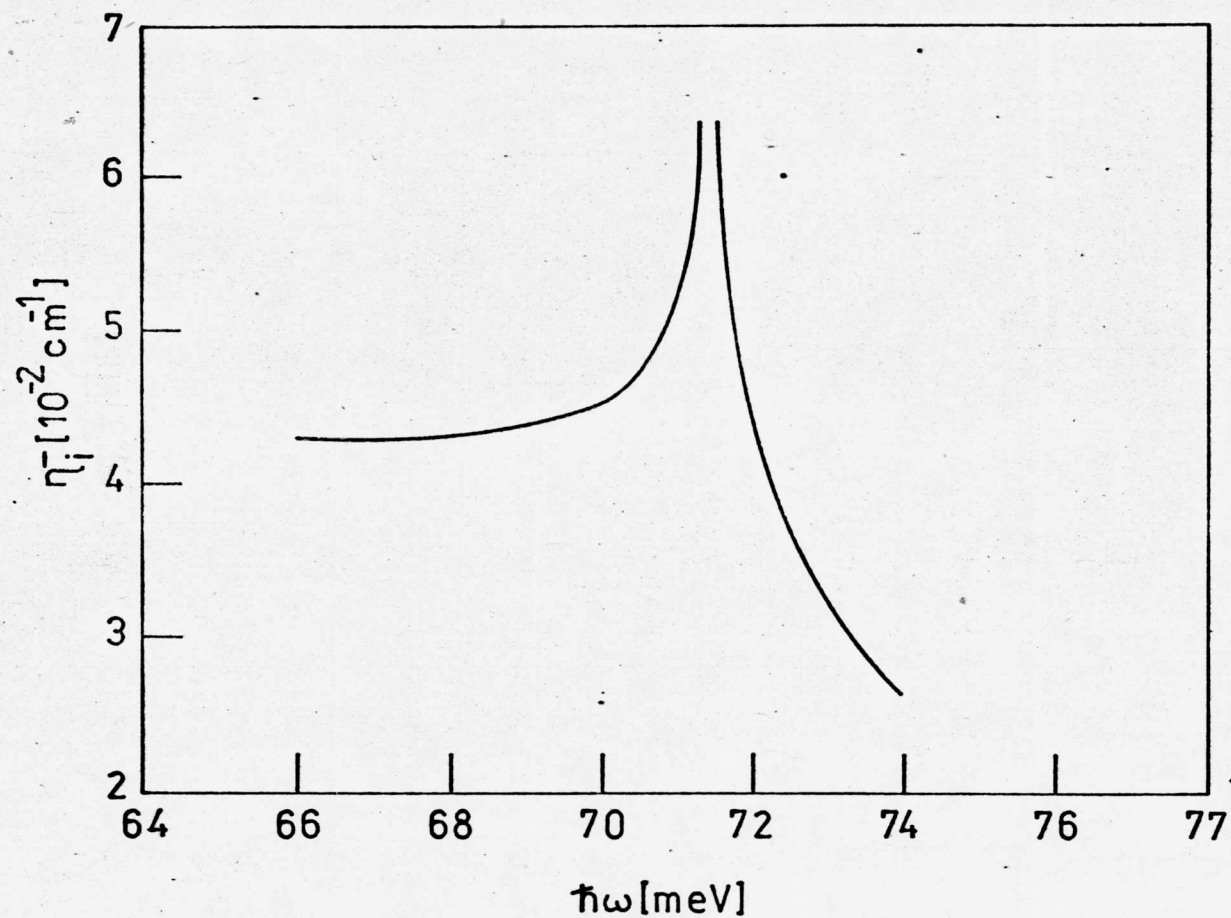
Rys. 6. Pierwsza pochodna po energii fotonu współczynnika magnetoabsorpcji przedstawionego na rys. 5.



Rys. 7. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej fluktuacjami składu.



Rys.8. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej rozpraszaniem na zjonizowanych domieszkach dla przejść $0^+ \rightarrow 2^+$.



Rys. 9. Współczynnik magnetoabsorpcji wywołanej rozpraszaniem na zjonizowanych domieszkach dla przejść $0^+ \rightarrow 2^-$.

IV PODSUMOWANIE

Podsumowując nasze rezultaty należy podkreślić, że dla dowolnej polaryzacji współczynnik magnetoabsorpcji na swobodnych nośnikach związanej z istnieniem w kryształach mieszanych nieporządku chemicznego jest nieznikającą funkcją częstości. Dla wszystkich trzech polaryzacji (CRI, CRA, $\vec{E} \parallel \vec{B}$) oraz dla wszystkich częstości fotonu $\hbar\omega > E_2^+ - E_F$ będzie występowała w kryształach mieszanych magnetoabsorpcja związana z istnieniem nieporządku chemicznego. Na krzywej zależności współczynnika magnetoabsorpcji od częstości (energii fotonu) wystąpią dwa rodzaje osobliwości: osobliwość typu logarytmicznego oraz osobliwość typu Kohna. Pierwsza z tych osobliwości wystąpi dla obu polaryzacji prostopadłych w punktach $\hbar\omega_R^+ = E_m^+ - E_o^+$ /m = 2, 3, 4 .../, oraz dla polaryzacji równoległej w punktach $\hbar\omega_R^- = E_m^- - E_o^+$.

Osobliwość typu Kohna wystąpi dla polaryzacji równoległej w punktach $\hbar\omega_R^+ = E_m^+ - E_o^+$, oraz dla obu polaryzacji prostopadłych w punktach $\hbar\omega_R^- = E_m^- - E_o^+$. W otoczeniu tych punktów współczynnik magnetoabsorpcji jest funkcją ciągłą, a pierwsza pochodna po $\hbar\omega$ posiada osobliwość typu logarytmicznego.

Uwzględnienie nieparaboliczności prowadzi do pojawienia się dodatkowych, w porównaniu z modelem parabolicznym, osobliwości na krzywej magnetoabsorpcji związanych z przejściami z odwróceniem spinu. Osobliwości te dla polaryzacji prostopadłej prawoskrętnej w układzie Faradaya będą trudne do zaobserwowania, ich wkład do całkowitej absorpcji jest zanedbywalnie mały w porównaniu do wkładu przejść z zachowaniem spinu. Natomiast dla polaryzacji równoległej do pola magnetycznego oba przejścia dają wkład porównywalny i osobliwość związana z przejściami z odwróceniem spinu powinna być łatwo obserwowana.

Otrzymany charakter osobliwości i punkty ich występowania są identyczne z charakterem osobliwości i punktami ich występowania dla magnetoabsorpcji związanej z rozpraszaniem na zjon-

zowanych domieszkach. Obliczenia numeryczne dla polaryzacji równoległej pokazują, że dla $\text{Hg}_{0,75}\text{Cd}_{0,25}\text{Te}$ przy koncentracji elektronów równej koncentracji zjonizowanych donorów $N_d = n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ współczynnik magnetoabsorpcji na swobodnych nośnikach wywołanej nieporządkiem chemicznym stopu jest porównywalny ze współczynnikiem magnetoabsorpcji związanej z rozpraszaniem na zjonizowanych domieszkach. Tak więc w półprzewodnikowych kryształach mieszanych wpływ rozpraszania na potencjale stopowym na magnetoabsorpcję na swobodnych nośnikach może być równie istotny jak rozpraszanie na zjonizowanych domieszkach. W półprzewodnikowych kryształach mieszanych należy brać pod uwagę oba powyższe mechanizmy.

DODATEK A

W wyrażeniu /53/ występuje wielkość losowa

$$v(\vec{q}) = \sum_{\vec{R}_n} (NV)^{-1} (\Theta_{\vec{R}_n} - f) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \quad /A1/$$

której wartość zależna będzie od konkretnego rozkładu atomów w sieci krystalicznej i zmieniać się będzie od próbki do próbki.

W celu określenia wartości oczekiwanej badanej wielkości fizycznej konieczne jest uśrednienie $\langle v(\vec{q}) \rangle$ po wszystkich możliwych konfiguracjach atomów. W naszych obliczeniach interesować nas będzie uśredniona wielkość $|v(\vec{q})|^2$.

Dla $\vec{q} \neq 0$

$$\begin{aligned} \langle |v(\vec{q})|^2 \rangle_{av} &= (VN)^{-2} \sum_{\vec{R}_n} \langle (\Theta_{\vec{R}_n} - f)^2 \rangle_{av} + \\ &+ (VN)^{-2} \sum_{\substack{\vec{R}_n, \vec{R}'_n \\ \vec{R}_n \neq \vec{R}'_n}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}'_n)} \langle (\Theta_{\vec{R}_n} - f)(\Theta_{\vec{R}'_n} - f) \rangle_{av} . \end{aligned} \quad /A2/$$

Zakładając, że wystąpienie każdej z możliwych konfiguracji atomów jest jednakowo prawdopodobne drugi składnik w (A2) jest równy zero.

W tym przypadku

$$\langle |v(\vec{q})|^2 \rangle = (VN)^{-2} \sum_{\vec{R}_n} \left(\langle \Theta_{\vec{R}_n} \rangle_{av} - 2\langle \Theta_{\vec{R}_n} \rangle \cdot f + f^2 \right) . \quad /A3/$$

Biorąc pod uwagę fakt, że

$$f = \sum_{\vec{R}_n} \frac{\langle \Theta_{\vec{R}_n} \rangle_{av}}{N \cdot V} \quad /A4/$$

otrzymamy ostatecznie

$$\langle |v(\vec{q})|^2 \rangle_{av} = (VN)^{-1} f(1-f) \quad /A5/$$

LITERATURA

1. Pawlikowski J.M., Infrared Phys. 20, 257 /1980/
2. Moss T.S., Infrared Phys. 16, 29 /1976/
3. Moss T.S., Burrell G.J., and Ellis B., Semiconductor Opto-Electronics Butterworth and Co /Publishers/ Ltd, 1973
4. Nordheim L., Ann.Phys. /Leipzig/ 9, 607 and 641 /1931/
5. Parmenter R.H., Phys.Rev. 97, 587 /1955/
6. Parmenter R.H., Phys.Rev. 99, 1759 /1955/
7. Soven P., Phys.Rev. 156, 809 /1967/
8. Taylor D.W., Pys.Rev. 156, 1017 /1967/
9. Onodera Y., Toyozawa Y., Journ.Phys.Soc.Jap. 24, 341 /1968/
10. Velicki B., Kirhpatrick S., Ehrenreich H., Phys.Rev. 157, 747 /1968/
11. Yonozawa F., Progr.Theor. Phys. 40, 734 /1968/
12. Soven P., Phys.Rev. 157, 1136 /1969/
13. Yonezawa F., Morgaki K., Progr.Theor.Phys.Suppl. 53, 1 /1973/
14. Schwartz L., Brouers F., Vedyayev A., V., Ehrenreich H., Phys.Rev. B4, 3383 /1971/
15. Korringa J., J.Phys.Chem. Solids 7, 252 /1958/
16. Beeby J., Proc.Roy.Soc.Lond. A302, 113 /1967/
17. Pant M.M., Joshi S.K., Phys.Rev. B1, 2532 /1970/
18. Pant.M.M., Joshi S.K., Pys.Rev. B2, 1704 /1970/
19. Elliot R.J., Taylor D.W., Proc.Roy.Soc.Lond. A296, 161 /1967/
20. Lax M., Rev.Mod.Phys. 23, 287 /1951/
21. Lax M., Phys.Rev. 85, 621 /1952/
22. Sigga E.D, Phys.Rev. B10, 5147 /1974/
23. Ehrenreich H., Schwartz L., Solid State Physics Vol.31 /ed.Seitz F., Turnbull D., Academic Press, Nev York, 1976/
24. Elliot P., Krumhansl J.A., Leath P.,L., Rev.Mod.Phys. 46, 465 /1974/
25. Van Vechten J.A., Bergstresser T.K., Pys.Rev. B1, 3351 /1970/
26. Hill R., J.Phys.C. Solid State Phys. 7, 521 /1974/
27. Baldareshi A., Masche K., Solid State Commun. 16 99 /1975/
28. Blinowski J., Leibler L. Proc.11 Intern.Conf.Phys.Semicond. Warsaw Polish Scient. Publ. p.239
29. Glickman M., Phys.Rev. 100, 1146 /1955/
30. Glicksman M., Phys.Rev. 111, 125 /1958/

31. Makowski L., Glicksman M., J.Phys.Chem.Solids 34, 487 /1973/
32. Kossut J., Phys.Stat.Sol. B86, 593 /1978/
33. Dubowski J.J., Phys.Stat.Sol. B85, 663 /1978/
34. Dubowski J.J., Dietl T., Szymańska W., Gałązka R.R.,
J.Phys.Chem.Solids. 42 351 /1981/
35. Popov A.S., Yancher I.Y., Phys.Stat.Sol. A41, 687 /1971/
36. Holzhütter H.G., Phys.Stat.Sol. B79, K13 /1977/
37. Takita K., Thong Dinh Thanh, Tanaka S., Phys.Stat.Sol.
B80, 149 /1977/
38. Sierański K., Szatkowski J., Phys.Stat.Sol. B 104, 57 /1981/
39. Kurowska A., Phys.Stat.Sol. B 92, 327 /1979/
40. Gora T., Williams F., Phys.Rev. 177, 1179 /1969/
41. Mycielski J., Bastard G., Rigaux C., Phys.Rev. B 12, 4356
/1975/
42. Kurowska A., Phys.Stat.Sol. B 87, 69 /1978/
43. Groves S., Paul W., Phys.Rev.Letters 11, 194 /1964/
44. Scot M.W.J., Appl.Phys. 40, 4077 /1969/
45. Schmit J.L., Stelzer E.L., J.Appl.Phys. 40, 4865 /1969/
46. Moritani A., Taniguchi K., Hamaguchi C., Nakai J.,
J.Phys.Soc.Jap. 34, 79 /1973/
47. Guldner Y., Rigaux C., Mycielski A., Conder Y., Phys.Stat.
Sol. B 82, 149 /1977/
48. Kane E.O., J. Phys.Chem.Solids 1, 249 /1957/
49. Zawadzki W., Szymańska W., Phys.Stat.Sol. B 45, 415 /1971/
50. Szymańska W., Bogusławski P., Zawadzki W., Phys.Stat.Sol. B
65, 641 /1974/
51. Bir G.L., Pikus G.E., Symetria i odkształcenia w półprze-
wodnikach, PWN, Warszawa 1977
52. Luttinger J.M., Kohn W., Phys.Rev. 97, 869 /1955/
53. Löwdin P., Journ.Phys. 19, 1369 /1951/
54. Bowers R., Yafet Y., Phys.Rev. 115, 1165 /1959/
55. Kacman P., Zawadzki W., Phys.Stat.Sol. B 47, 629 /1971/
56. Zawadzki W., w "New developments in semiconductors", ed.
Wallace P., Noordhoff International Publishing, Leyden.
1973, str.441
57. Bass F.G., Lewnson I.B., ZETF 49, 914 /1965/
58. Enck R.C., Saleh A.S., Fan H.Y., Phys.Rev. 182, 790 /1960/

59. Zawadzki W., Grisar R., Wacherning H., Bauer G.,
Solid State Commun. 25, 775 /1978/
60. Margulis V.A., Kudelski N.N., ZETF 78, 1523 /1980/
61. Zawadzki W., Własak J., Proc.14 Intern.Conf.Phys.Semicon.
Edinburgh, 1978, ed.Wilson B.L., Inst.Physics, str.413
62. Grisar R., Wacherning H., Bauer G., Własak J., Kowalski J.,
Zawadzki W., Phys.Rev., B 18, 4355 /1978/
63. Bastard G., Mycielski J., Rigaux C., Phys.Rev.B 12, 6990
/1978/
64. Własak J., Komunikaty Instytutu Fizyki Politechniki Wroc-
ławskiej, Komunikat nr 491, Wrocław 1978
65. Leibler L., Phys.Rev.B 16 863(1977).

Lista odbiorców

1. Biblioteka Główna PWr. - 1
2. Biblioteka I-9 - 1
3. Recenzenci - 2
4. Promotor - 1

5. Doc J.M. Pawlikowski - 1
6. Dr J. Misiewicz - 1
7. Dr J. Własak - 1
8. Mgr K. Sierański - 1
9. Autor - 1

Analiza dokumentacyjna

<D

W pracy policzono prawdopodobieństwo przejść wzbronionych w rezonansie cyklotronowym, udozwalanych przez oddziaływanie elektronów z potencjałem wywołanym nieporządkiem chemicznym stopu, oraz związany z tymi przejściami współczynnik magnetoabsorpcji

Imię i Nazwisko autora analizy

Jan Szatkowski

Słowa kluczowe

<S

półprzewodniki z wąską przerwą, magnetoabsorpcja na swobodnych nośnikach, stopy półprzewodnikowe

* * 0480 * 00 * _____

<A _____ * B _____ * C _____ * D _____

* E _____ * F _____ * G _____ * H _____ ←←

Tylko PRL	CINTE	APW	Podpis red.	Podpis asyst. d/s badań	Potwierdzenie przyjęcia poprawki	Potwierdzenie przyjęcia karty w Oddziale Dokumentacji
Wpisać TAK lub NIE						

		1	2	3	4	5	6	7	8	9
	* N *									
		0.7.0.6								
	Rozpocz. pr.	Zakończ. pr.	Opisbl. pr.		Instytut		Nr tematu.			
	1 1 7 9				I 0 9					
Nr zlecenia.		Nr archiwalny								
		I. 0 9 / S - / / 9 / 8.2 *								
Symbol UKD.		82: Inst.Fiz. PWr MNSzWiT								
		pol.								
Opis bibliograficzny.										
Szatkowski Jan Wewnątrzprasmowa magnetoabsorpcja w wąskoprzerwowych półprzewodnikach typu $Hg_{1-x}Cd_xTe$. Wywołana nieporządkiem chemicznym stopu. Raporty Inst.Fiz.PWr 1982 ser.SPR nr 119 79 s. 9 rys. 2 tabl. bibliogr. 65 poz. /maszyn. powiel./ Rozprawa doktorska/ / Politechnika Wrocławska, Instytut Fizyki, Wrocław Promotor: prof.dr hab. Jerzy Mycielski 79,7										
Charakter pracy: Materiały odpłatne: Rozpowszechnienie:										

