

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ  
ДОНЕЦКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМ. А.А.ГАЛКИНА

На правах рукописи

РУМЯНЦЕВ Владимир Васильевич



УДК 539.2+535+  
533.15+621.039

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ЛЕГКИХ  
ЧАСТИЦ С НЕСОВЕРШЕННЫМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМИ СРЕДАМИ**

01.04.07 – Физика твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Донецк - 2007

На правах рукописи

Работа выполнена в Донецком физико-техническом институте им. А.А. Галкина  
НАН Украины, г. Донецк

Научный консультант: доктор физ.-мат. наук, профессор, лауреат Гос. премии Украины в области науки и техники **Пашкевич Юрий Георгиевич**,  
Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина  
НАН Украины, рук. отдела теории динамических свойств сложных систем им. К.Б. Толпыго

Официальные оппоненты: доктор физ.-мат. наук **Лозовский Валерий Зиновьевич**,  
Киевский национальный университет им. Т.Г. Шевченко,  
профессор кафедры полупроводниковой электроники

доктор физ.-мат. наук, профессор **Малюкин Юрий Викторович**,  
Институт сцинтилляционных материалов НАН Украины,  
зам. директора по научной работе

доктор физ.-мат. наук, профессор **Тарасенко Сергей Вадимович**,  
Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН  
Украины, рук. отдела теории магнетизма и фазовых переходов

Защита состоится « 20 » декабря 2007 года в 14-00

на заседании специализированного ученого совета Д 11.184.01 при Донецком физико-техническом институте им. А.А.Галкина НАН Украины  
(83114 Донецк, ул. Р. Люксембург, 72)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Донецкого физико-технического института им. А.А.Галкина НАН Украины

Автореферат разослан « 12 » ноября 2007 года

Ученый секретарь

специализированного ученого совета  
кандидат физико-математических наук



ТАРАСЕНКО Т.М

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Интерес к изучению взаимодействия электромагнитных волн с кристаллами имеет давнюю историю, начиная с работ Г.А.Лоренца [1]. За пятьдесят пять лет со времени экспериментального подтверждения [2] существования экситонных состояний в твердых телах он еще более возрос. Этому способствует и совершенствование методики и техники эксперимента, в результате которого стало возможным наблюдать более «тонкие» явления (например, добавочные волны Пекара [3]), и успехи в области фундаментальных теоретических исследований – на стыке кристаллооптики и теории экситонов возникла теория светоэкситонов (поляритонов) с учетом эффектов запаздывания, дальних кулоновских взаимодействий и сильного обратного воздействия частиц кристалла на электромагнитную волну. Сформировалась обобщенная кристаллооптика, последовательно учитывающая пространственную дисперсию [3,4]. Значительное количество публикаций посвящено исследованию коллективных возбуждений в тонких пленках и слоистых кристаллах [5,6].

Изучение оптических свойств конденсированных сред часто осуществляется в рамках макроскопической электродинамики с использованием тензора диэлектрической проницаемости  $\hat{\epsilon}$ . Вычисление тензора  $\hat{\epsilon}$  – задача микроскопической теории. В частности, в экситонной области спектра кристаллов для нахождения линейного отклика на внешнее электромагнитное поле в качестве нулевого приближения используют экситонные состояния кристалла. Для решения проблем, связанных с распространением света в веществе существует и другой метод – метод действующего поля, который появился еще до создания теории экситонов. С появлением мощной вычислительной техники (в 60-80-х гг. XX века) этот метод испытал второе рождение и успешно применяется сегодня.

Современная кристаллооптика является основой для решения многих частных задач квантовой электроники, фото- и оптоэлектроники диэлектриков и полупроводников [7-10]. Ряд приложений теории уже сегодня нашел свое промышленное использование (интегральные схемы, частотные фильтры, оптические линии задержки и т.п.). Причем при конструировании полупроводниковых устройств, которые в одном кристалле сочетают и оптические, и волноводные элементы (например, в системах обработки оптической информации) необходимо учитывать эффективное взаимодействие фотонов и электронных возбуждений. Расширение возможностей электроники идет за счет использования несовершенных кристаллических сред таких, как квантовые точки, поверхности, тонкие пленки, многослойные структуры, а также – за счет благоприятного сочетания различных дефектов кристаллической структуры. Одновременно ведется поиск новых материалов (таких, например, как высокотемпературные сверхпроводники) и низкоразмерных структур, способных сохранять функциональные свойства в условиях внешних воздействий – разнообразного облучения (легкими частицами, электромагнитным излучением) и механических напряжений.

В связи с появлением в конце XX века нано-науки и нано-технологий объектом изучения стали моноатомные слои, кристаллические кластеры и разнообразные конструкции из них [11-15], экситонные переходы и поляритонные эффекты в таких квазимолекулярных структурах [16], сверхрешетках [17], а также эффекты, индуцированные в пленках в результате облучения высокоэнергетическими частицами [18, 19]. Предметом пристального внимания являются в настоящее время и фотонные кристаллы [20-24], выполнены расчеты запрещенных фотонных зон композитной кристаллической сверхрешетки, составленной из чередующихся слоев кремния и жидкого кристалла. Большой интерес представляют работы, посвященные оптимизации структуры фотонных кристаллов и трансформации поляритонных спектров в результате разупорядочения слоев в фотонных кристаллах [25, 26].

Естественно, в связи с вышесказанным, исследование взаимодействия несовершенных кристаллических систем с электромагнитным излучением и легкими частицами приобретает особую *актуальность*. А, следовательно, представляет интерес и построение теорий, позволяющих объяснить наблюдаемые свойства и различные процессы, моделировать отклик

изучаемых объектов на внешние воздействия, получать соответствующие уровни энергий и дисперсионные соотношения. С получением нано-структур, фотонных кристаллов и началом их технологического использования [27, 28] актуальность обозначенного круга проблем еще более возросла.

**Связь с научными программами, темами, планами.** Работа подготовлена и выполнена в отделе теории динамических свойств сложных систем им. К.Б. Толпыго Донецкого физико-технического института им. А.А.Галкина НАН Украины в рамках плановых госбюджетных тем, утвержденных Президиумом НАН Украины:

- «Теория взаимодействия элементарных возбуждений кристаллов с внешними полями» (№ гос. регистрации 01850082090),
- «Теоретическое исследование влияния структурных несовершенств на физические свойства гетерополярных материалов» (№ гос. регистрации 01.900068148),
- «Электронные состояния, межатомные силы и флуктуации в идеальных и дефектных ВТСП-материалах» (№ гос. регистрации 0194UO11424),
- 
- «Низкоразмерные материалы и структурные несовершенства кристаллов: энергетические состояния и кинетические явления» (№ гос. регистрации 0195U008769),
- «Коллективные явления в твердом теле. Металлы, металлооксиды, низкоразмерные системы» (№ гос. регистрации 0100U003854),
- «Динамические и статические свойства сложных низкоразмерных систем во внешних полях» (№ гос. регистрации 01034005969).

**Цель и задачи исследований.** Основная цель представленного в диссертационной работе теоретического исследования состоит в установлении закономерностей взаимодействия несовершенных кристаллических сред (кристаллов с вакансиями и дефектами изотопического замещения, квазидвумерных слоёв и неидеальных сверхрешеток) с электромагнитным излучением и легкими заряженными частицами (быстрыми  $\beta$ -частицами), численном моделировании экситонных спектров молекулярных кристаллов и поиске условий индуцирования их оптической активности в условиях однородных деформаций.

Для достижения поставленной цели решены следующие конкретные задачи:

1. Исследована *оптическая анизотропия* (объект исследования) атомарных крио-кристаллов и полупроводников с алмазоподобной структурой. Построена в рамках единого подхода микроскопическая теория распространения света в данных кристаллах в окрестности частот экситонных резонансов с учетом пространственной дисперсии, получены законы дисперсии экситонных поляритонов с учетом структуры поверхностных граней. В алмазоподобных полупроводниках исследована генерация экситонных поляритонов полем движущейся  $\beta$ -частицы.
2. Изучен *энергетический спектр* (объект исследования) ориентационно-разупорядоченных молекулярных кристаллов (кристаллов, центры тяжести всех молекул в которых находятся в узлах регулярной трансляционно-инвариантной кристаллической решетки, однако ориентации части молекул не совпадают с равновесными) и смешанных молекулярных кристаллов (кристаллов с дефектами изотопического замещения). Выполнен численный расчет концентрационной зависимости экситонного спектра вышеупомянутых кристаллов, получено дисперсионное соотношение для экситонных поляритонов, отражающее специфику смешанных кристаллов.
3. Разработана модель и исследовано *рассеяние света* (объект исследования) *квазидвумерной кристаллической структурой (моноатомным слоем) и неидеальной топологически упорядоченной сверхрешеткой*.
4. Изучено *взаимодействие высокотемпературных сверхпроводников структуры типа YBaCuO с электромагнитным полем* (объект исследования), исследовано рассеяние света в квазидвумерных YBaCuO-кристаллах (предметом изучения в данном случае являются:

комбинационное рассеяние света, генерация второй оптической гармоники, возбуждение локализованных в тонком слое поляритонов полем движущейся в YBaCuO-слое  $\beta$ -частицы).

- Исследована зависимость *оптической активности* (объект исследования) молекулярных кристаллов - вращательной способности - от внешних механических напряжений. Для кристаллических классов  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$ , симметрия которых допускает существование индуцированной (механическими напряжениями) оптической активности, получены симметричные условия обращения вращательной способности в нуль, изучено ее поведение вблизи экситонных резонансов в случае однородно деформированных молекулярных кристаллов.

В работе использованы стандартные для физики твердого тела **методы исследования** теоретической и математической физики, а также численное моделирование.

**Научная новизна полученных результатов.** В ходе выполнения диссертационных исследований получен ряд оригинальных результатов, математических моделей и расчетных методик, которые важны для более глубокого понимания и описания рассмотренных явлений, для интерпретации экспериментальных данных. Совокупность полученных результатов и их обобщение позволяют значительно продвинуться в решении проблемы *взаимодействия электромагнитного излучения и легких частиц с неидеальными кристаллическими средами*. В частности, среди *основных научных результатов и положений*, имеющих оригинальный характер, выделим следующие:

- Получены законы дисперсии продольных и поперечных экситонов в полубесконечных атомарных криокристаллах с равновесными поверхностными гранями. Применение метода действующего поля для описания распространения светоэкситонов в полубесконечных кристаллах позволило учесть в законах дисперсии поверхностные волны и получить спектры «объемных» светоэкситонов для кристаллов с различной симметрией поверхностных граней. Показано, что добавочные световые волны (ДСВ) для определенных направлений распространения могут наблюдаться только для некоторых поверхностных кристаллографических плоскостей.
- Впервые в рамках единого подхода на основе методики расчета внутрикристаллического поля, развитой для атомарных криокристаллов, получен закон дисперсии экситонных поляритонов в валентных полупроводниках (в квазимолекулярной модели) для кристаллов алмаза и кремния. Найдена спектральная плотность интенсивности излучения, генерируемого распадом экситонных поляритонов, порожденных в алмазоподобном кристалле движущейся в нем  $\beta$ -частицей.
- Получена концентрационная зависимость экситонных энергий ориентационно-разупорядоченных молекулярных кристаллов для малых и больших углов переориентации примесей. Найдены дисперсионные соотношения для экситонных поляритонов в бинарном смешанном кристалле, получена концентрационная зависимость поляритонного спектра, установлено, что величина области «бутылочного горлышка» между поляритонными ветвями определяется неколлинеарностью дипольных моментов молекул матрицы и примеси.
- Предложена модель распространения электромагнитного возбуждения, локализованного в моноатомном слое, и на ее основе разработан обобщенный феноменологический подход, позволяющий свести описание взаимодействия электромагнитного поля с трехмерным слоистым кристаллом к исследованию взаимодействия с ним одномерной цепочки, элементами которой являются квазидвумерные моноатомные плоскости. Найдена связь между частотами, характеризующими полюс и нуль поляризуемости моноатомного слоя, и соответствующими величинами атомной функции отклика. В случае сверхтонкого слоя атомарного криокристалла получено выражение для внутрикристаллического поля и законы дисперсии экситонных поляритонов, локализованных в этом слое.

5. В рамках приближения виртуального кристалла (ПВК) исследована трансформация поляритонного спектра неидеальной сверхрешетки, обусловленная наличием хаотически внедренных инородных (по отношению к идеальной сверхрешетке) немагнитных и магнитных примесей-слоев, причем примесные слои варьируются как по составу, так и по толщине. Особенности концентрационной зависимости величины фотонной энергетической щели и показателя преломления неидеальной сверхрешетки с произвольным числом слоев конкретизированы для случаев алмазно-кремниевой и кремний-жидкокристаллических систем – «одномерного кристалла» с двумя и тремя элементами-слоями в элементарной ячейке.
6. Изучена чувствительность  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ -объектов к радиационному воздействию, вызывающему сдвиг  $A_g$ -моды ( $500 \text{ см}^{-1}$ ), (которое связано со смещениями ионов апексного кислорода  $\text{O}(4)$  в мостиках  $\text{O}(4)$ - $\text{Cu}(1)$ ) по мере возрастания индекса  $x$  дефицита кислорода в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . Оценена скорость введения дефектов в кислородную подрешетку  $\text{YBaCuO}$ -монокристалла, в приближении Плачека получено выражение для дифференциального сечения комбинационного рассеяния света этим кристаллом.
7. Предложена модель влияния поверхности на оптические свойства  $\text{YBaCuO}$ -монокристалла, базирующаяся на учете смешивания четных (КР-активных)  $g$ - и нечетных (ИК-активных)  $u$ -мод в тонком приповерхностном слое. Рассмотрены комбинационное рассеяние света на локализованных в тонком слое поляритонах и генерация второй оптической гармоники. Оценена величина интенсивности сигналов комбинационного рассеяния (спонтанного и вынужденного) и второй оптической гармоники.
8. Получено выражение для дифференциальной характеристики комбинационного рассеяния света (ДХР) тонким слоем  $\text{YBaCuO}$ -кристалла на дипольно активных колебаниях  $\text{O}(4)$  при наличии вакансий в мостиках  $\text{O}(4)$ - $\text{Cu}(1)$ - $\text{O}(4)$ , установлена зависимость ДХР от концентрации кислородных вакансий, оценена величина отличия угла рассеяния светового потока (на фоновых поляритонах) от угла отражения.
9. Выполнено численное моделирование генерации в тонком кристаллическом слое поляритонов, порожденных полем движущейся в нем  $\beta$ -частицы, полученные выражения для спектральной плотности интенсивности излучения «высвечивающихся» поляритонов конкретизированы для алмазоподобной нанопленки и  $\text{YBaCuO}$ -слоя.
10. В рамках экситонной модели впервые получено общее выражение для вращательной способности однородно деформированных внешним механическим напряжением молекулярных кристаллов, выявлены особенности дисперсии этой характеристики оптической активности кристаллов с симметрией  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$  для одноосной и сдвиговой деформаций.

**Достоверность и обоснованность** результатов, полученных в ходе выполнения диссертационной работы, обусловлена следующими обстоятельствами: результаты, достигнуты при соответствующих приближениях и значениях характерных параметров решаемых задач с использованием в расчетах методов и методик математического моделирования, теоретической и математической физики, надежность и обоснованность которых многократно подтверждена.

**Практическое значение полученных результатов.** Полученные в работе результаты важны для развития новых представлений о взаимодействии несовершенных кристаллических систем с электромагнитным излучением и легкими заряженными частицами, а также для интерпретации экспериментов в этой области. В частности:

1. Использование полупроводников как детекторов заряженных частиц, рассмотрение особенностей взаимодействия их с лазерным излучением или облучения потоком электронов, либо, наконец, применение радиационно стимулированной диффузии в технологии создания планарных микроэлектронных устройств – все это предполагает изучение радиационного дефектообразования, обусловленного генерацией и распадом

электронных возбуждений в таких кристаллах. Поэтому проведенное исследование дисперсии электронных возбуждений в алмазоподобных полупроводниках, получение поляритонного спектра и изучение генерации светоэкситонов в них полем заряженной частицы могут оказаться полезными для установления механизмов радиационного дефектообразования в валентных полупроводниках и интерпретации соответствующих экспериментов.

2. Полученные в работе поверхности концентрационной зависимости экситонных энергий двухподрешеточного ориентационно-разупорядоченного молекулярного кристалла указывают на возможность значительных изменений физических характеристик рассматриваемых систем, связанных с переориентацией молекул. Это обуславливает актуальность учета эффектов разупорядочения при экспериментальных исследованиях комбинационного рассеяния света, инфракрасного поглощения, естественной оптической активности и целого ряда других оптических явлений в рассматриваемых средах.
3. Проведенное в работе исследование показывает, что внедрением в изучаемую сверхрешетку определенных примесей можно добиться контролируемого изменения ее энергетической структуры и, следовательно, изменения оптических свойств неидеальной сверхрешетки, обусловленных перенормировкой поляритонного спектра в результате присутствия в ней инородных слоев. Варьирование примесных слоев как по составу (в том числе, с включением магнитных частиц), так и по толщине еще больше (по сравнению с идеальными слоистыми структурами) расширяет возможности моделирования композитных материалов.
4. Устойчивая работа установок, применяемых в условиях облучения, возможна лишь при сохранении функциональных свойств ВТСП-материалов. Поэтому полученные в работе результаты по изучению чувствительности ВТСП-объектов к радиационному воздействию, можно использовать при исследовании особенностей деградации сверхпроводников в зависимости от доз облучения, для анализа влияния накопленных радиационных дефектов на сверхпроводящие свойства ВТСП. Кроме того, заметим, что облучение (ионное, нейтронное, электронное, электромагнитное) служит одним из важных инструментов изучения свойств ВТСП.
5. Сопоставление найденной ДХР для YBaCuO-пленки с дефектными позициями мостикового кислорода O(4) с соответствующим выражением для бездефектной пленки позволит оценить концентрацию дефектов в первой пленке.
6. Интерес к изучению влияния потока  $\beta$ -частиц на YBaCuO-кристалл вызван не только тем, что они представляют самостоятельный инструмент исследования ВТСП, но и тем фактом, что они появляются в результате ядерных реакций при облучении кристалла другими частицами ( $n$ ,  $\gamma$ ). Рассмотренный в работе случай высвечивания генерируемых в тонком кристаллическом YBaCuO-слое поляритонов дает возможность по интенсивности вторичного электромагнитного излучения судить об энергии заряженной частицы (то есть позволяет решать одну из задач детектирования частиц). Подобные проблемы возникают также в связи с изучением влияния потоков заряженных частиц (например, протонного «солнечного ветра») на приповерхностный слой полупроводниковых приборов (солнечных батарей) в открытом космическом пространстве. Полученные в работе результаты изучения светоэкситонов полем движущейся в тонком слое  $\beta$ -частицы могут быть применены и при исследовании полупроводниковых структур.
7. Явление гиротропии может быть использовано в качестве тонкого экспериментального метода изучения структурных особенностей кристаллических сред. В ряде случаев гиротропия, как чувствительный индикатор внешних воздействий, является единственным возможным способом определения целого ряда стерео- и кристаллохимических параметров рассматриваемых кристаллов. Поэтому рассмотрение всевозможных оптических эффектов в

молекулярных системах, подверженных внешним механическим воздействиям представляет значительный интерес. В связи с этим заметим, что для кристаллов определенных классов симметрии некоторые из эффектов пространственной дисперсии возможны лишь при наличии внешних полей или механических напряжений (индуцированная гиротропия). Это относится к исследуемым в работе кристаллам с симметрией  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$ , неиндуцированная оптическая активность в которых отсутствует. При экспериментальном изучении оптической активности кристаллов полученная в работе математическая структура каждого из слагаемых вращательной способности – важна, поскольку отражает соответствующий механизм индуцирования гиротропии исследованных в работе кристаллических структур.

Представленные в диссертации результаты могут быть использованы при выполнении аналогичных или близких по тематике исследований в ДонФТИ НАН Украины, г. Донецк, Институте полупроводников НАН Украины, г. Киев, ФТИНТе НАН Украины, г. Харьков, Институте сцинтилляционных материалов НАН Украины, г. Харьков, Донецком национальном университете, Национальном университете им. Т. Шевченко и др.

**Личный вклад соискателя.** В диссертационной работе обобщены результаты исследований, проведенных лично автором, под его руководством или при его участии. В частности, работы [1-3], [6], [11], [15], [17], [23] по теме диссертации выполнены соискателем самостоятельно, в работах [4,5], [7-10], [12,13], [16,18], [21], [22], [24], [26], выполненных в соавторстве с сотрудниками отдела, вклад соискателя был определяющим при выборе объектов, моделей и методов исследования, выполнении расчетов и численного моделирования, анализе результатов и формулировании выводов, в работах [14], [19] и [25] он принимал участие в постановке задачи, выполнении расчетов, анализе результатов и формулировании выводов, в работе [20] – в анализе результатов и формулировании выводов. Соискатель также принимал участие в интерпретации соответствующих экспериментальных данных. Автор сформулировал все научные положения и выводы, выносимые на защиту.

**Апробация результатов работы.** Результаты диссертационной работы прошли апробацию на 43 международных, всесоюзных и республиканских конференциях, симпозиумах, семинарах, в том числе: XIV Всесоюзное совещание по теории полупроводников, (1989, Донецк), XII и XIII Европейская кристаллографическая конференция (1989, Москва, Россия и 1991, Триест, Италия), Всесоюзная конференция по физическим процессам в полупроводниковых гетероструктурах (1990, Калуга, Россия), XXVI, XXIX и XXX совещания по физике низких температур (1990, Донецк, а также 1992, Казань и 1994, Дубна, Россия), III Всесоюзное совещание по оптике анизотропных сред (1990, Москва, Россия), 30, 31 и 32 Всесоюзные семинары по моделированию на ЭВМ радиационных и других дефектов в кристаллах (1990, Одесса, Сумы и 1991, Минск, Беларусь), XIV международная конференция по когерентной и нелинейной оптике, КиНО (1991, С.-Петербург, Россия), XV и XVI Пекаровские совещания по теории полупроводников (1992, Львов и 1994, Одесса), XIII и XV международные конференции по рамановской спектроскопии, ICORS (1992, Вюрцбург, Германия и 1996, Питтсбург, США), 2-й международный симпозиум по высокотемпературной сверхпроводимости и туннельным эффектам IS-HTS-TP-94 (1995, Донецк), 5-й Всемирный конгресс по сверхпроводимости (1996, Будапешт, Венгрия), 10-я международная конференция по сверхрешеткам, микроструктурам и микротехнике, ICSMM-10 (1997, Линкольн, США), 3-я международная летняя школа по высокотемпературной сверхпроводимости (1997, Эгер, Венгрия), международная конференция Euromembrane'99 (1999, Лёвен, Бельгия), международная конференция по люминесценции и спектроскопии конденсированного вещества ICL'02 (2002, Будапешт, Венгрия), 7-я международная конференция по нанофизике и 21-я Европейская конференция по поверхностям, Nano-7/ECOSS-21 (2002, Мальмё, Швеция), 7-я международная конференция по эпитаксиальным полупроводникам и новым индексным поверхностям, ESPS-NIS'2003 (2003, Штуттгарт, Германия), XVII и XVIII Латино-



Американские конференции по физике твердого тела, (2004, Гавана, Куба; 2006, Пуэбла, Мексика), международный семинар «Молекулярное проектирование и структура наноматериалов» (2006, Флоренция, Италия), международный семинар по наноструктурированным материалам (2006, Анталья, Турция), VI международная конференция по лиотропным жидким кристаллам (2006, Иваново, Россия), международная конференция «Мезоскопические явления в твердых телах» (2007, Донецк).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в монографии, 25 статьях в реферируемых научных журналах Украины и зарубежья, 6 статьях в сборниках научных трудов, 2 препринтах и 43 материалах конференций.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, семи разделов, выводов, списка использованных литературных источников (335 наименований) и приложений. Работа изложена на 327 страницах, она включает 33 рисунка и 4 таблицы.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Введение** содержит обоснование актуальности темы, формулирование цели и задач исследования взаимодействия электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами. Во введении определена новизна и практическое значение полученных результатов, связь работы с научными программами и темами.

**Первый раздел**, начинающийся вводным подразделом, посвящен изучению внутрикристаллического поля атомарных кристаллов и валентных полупроводников с алмазоподобной структурой. Кристаллы представляют интерес не только с точки зрения изучения поведения электронных возбуждений, но и как модельные объекты физики твердого тела. Разработанная для них в работе методика позволила использовать метод Эвальда для расчета внутрикристаллического поля алмазоподобных кристаллов в рамках квазимолекулярной модели.

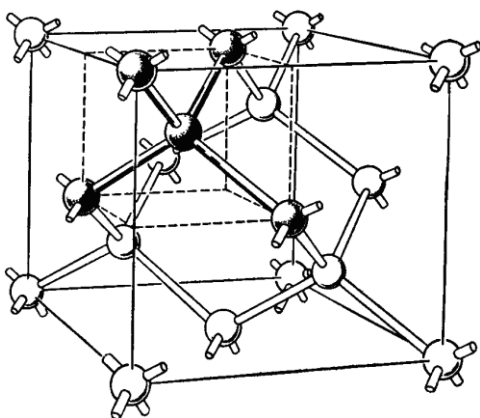


Рис. 1. Элементарная ячейка кристалла со структурой алмаза

Согласно этой модели, каждая пара электронов, образующих  $\sigma$ -связь (см. рис. 1) между ближайшими атомами алмазоподобного кристалла, вместе с соответствующей долей атомных остовов, участвующих в формировании связи, рассматривается как квазимолекула. Состояние  $\sigma$ -связи - квазимолекулы, находящейся в самосогласованном поле других таких же структурных единиц (СЕ), описывается двухэлектронным уравнением Шредингера. Взаимодействие отдельных СЕ диполь - дипольное, за исключением ближайших соседей каждой из них (в последнем случае оно рассчитывается точно, поскольку сильно отличается от взаимодействия точечных диполей, из-за того, что расстояние между центрами соседних связей меньше длины самой  $\sigma$ -связи).

Фурье-компоненты среднего дипольного момента  $\vec{P}_S^{\omega,k}$

квазимолекулы нелокально связаны с напряженностью  $\vec{E}_S^{\omega,k}$  действующего на СЕ поля:

$$\vec{P}_S^{\omega,k} = \sum_{s'} \hat{\alpha}^{ss'}(\omega, \vec{k}) \cdot \vec{E}_{s'}^{\omega,k}. \quad (1)$$

В работе получен явный вид тензора  $\hat{\alpha}^{ss'}(\omega, \vec{k})$  динамической поляризуемости и найдены Фурье-компоненты  $\vec{E}_s^{\omega, k}$  действующего на  $(l, s)$ -ю СЕ ( $l$  – номер кристаллической ячейки,  $s$  – номер СЕ в ячейке) поля:

$$\vec{E}_s^{\omega, k} = \sum_{s'} \hat{\phi}^{ss'}(\omega, \vec{k}) \cdot \vec{P}_{s'}^{\omega, k}. \quad (2)$$

Тензор внутреннего поля кристалла  $\hat{\phi}^{ss'}(\omega, \vec{k})$  получен в длинноволновом приближении при учете запаздывания взаимодействия СЕ.

**Во втором разделе** рассмотрено распространение света в криокристаллах (при учете дипольного и квадрупольного возбуждения молекул) и в алмазоподобных полупроводниках. На основе развитой в работе методики для молекулярных кристаллов в рамках квазимолекулярной модели исследована оптическая анизотропия валентных кристаллов (алмаз, кремний), вытекающая из нелокальности связи дипольного момента СЕ кристалла с напряженностью действующего на СЕ поля, получены законы дисперсии экситонных поляритонов (которые следуют из условия разрешимости системы линейных уравнений (1)-(2)). Микроскопический подход, согласно которому распространение света в кристаллах рассматривается как запаздывающая передача возбуждения между его отдельными молекулами, позволил применить метод действующего поля для расчета законов дисперсии «объемных» светозэкситонов в окрестностях дисперсионных частот, обосновать появление ДСВ и провести анализ оптической анизотропии бесконечных кристаллов кубической симметрии.

При переходе к полубесконечным кристаллам в теории ДСВ необходимо учитывать поверхностные волны [8], поскольку они дают существенный вклад в законы отражения светозэкситонов, а также в законы прохождения и отражения света от поверхности кристалла. В работе проведено обобщение метода действующего поля на двумерно-периодические структуры, что позволило рассчитать поляризацию атомов в поверхностном слое и получить законы дисперсии светозэкситонов с учетом поверхности. Результаты настоящего исследования, в отличие от некоторых работ (см., например, монографию [29], авторы которой считают, что внутри кристалла с «резкой» границей распространяются волны с такой же дисперсией, как и в бесконечном однородном кристалле), свидетельствуют, что метод действующего поля при переходе от бесконечного кристалла к полубесконечному наряду с появлением поверхностных волн позволяет получить изменившиеся законы дисперсии «объемных» светозэкситонов, так как коэффициенты  $\phi^{(i)}$  внутрикристаллического поля (в членах порядка  $(a/\lambda)^2$ , где  $a$  – постоянная решетки кристалла,  $\lambda$  – длина волны света) зависят от структуры поверхности (типа поверхностной кристаллографической плоскости). В данном разделе получены спектры «объемных» светозэкситонов для атомарных криокристаллов с учетом симметрии поверхностных граней: закон дисперсии продольных экситонов

$$\omega_{11} = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}} \cdot \sqrt{\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2}} \cdot \left[ 1 - \frac{1}{32\pi} \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \left( \phi^{(2)} + \phi^{(3)} + \phi^{(4)} \sum_{\beta} s_{\beta}^4 - \sum_{\gamma, \beta} s_{\gamma} s_{\beta} T_{\gamma\beta} \right) k^2 \right], \quad (3)$$

законы дисперсии поперечных экситонов

$$\omega_{\perp 1} = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2}} \cdot \left[ 1 - \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{32\pi} \phi^{(2)} k^2 \right]; \quad (4)$$

$$\omega_{\pm 2} = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{\varepsilon_0 + 2}} \cdot \left[ 1 - \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{32\pi} \left( \varphi^{(2)} + \varphi^{(4)} \left( 1 - \sum_{\beta} s_{\beta}^4 \right) + \sum_{\gamma, \beta} s_{\gamma} s_{\beta} T_{\gamma\beta} \right) k^2 \right]. \quad (5)$$

Учет запаздывания взаимодействия СЕ кристалла позволяет получить закон дисперсии поляритонов в окрестности частоты экситонного перехода  $\omega_{i0}$ :

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \omega_{i0}^2 \left[ \frac{k^2 c^2}{\omega_{i0}^2 \varepsilon_{\infty} a^2} + \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{\infty}} (f + s_{1,2} k^2) \right] \pm \sqrt{\left( \left[ \frac{k^2 c^2}{\omega_{i0}^2 \varepsilon_{\infty} a^2} + \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{\infty}} (f + s_{1,2} k^2) \right]^2 - 4 \frac{k^2 c^2}{\omega_{i0}^2 \varepsilon_{\infty} a^2} (f + w_{1,2} k^2) \right)}, \quad (6)$$

где  $f = \frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{\varepsilon_0 + 2}$ ,  $s_{1,2} = -\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{16\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\infty}} \cdot \frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{\varepsilon_0 + 2} t_{1,2}$ ,  $w_{1,2} = -\frac{\varepsilon_0\varepsilon_{\infty} - 2\varepsilon_{\infty} + 1}{16\pi\varepsilon_{\infty}} \cdot \frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{\varepsilon_0 + 2} t_{1,2}$ ,

$t_1 = \varphi^{(2)}$  и  $t_2 = \varphi^{(2)} + \varphi^{(4)} \left( 1 - \sum_{\beta} s_{\beta}^4 \right) + \sum_{\gamma, \beta} s_{\gamma} s_{\beta} T_{\gamma\beta}$ . Параметры  $\varphi^{(i)}$  кристаллического поля

вычислены для конкретного случая исследуемого криоцисталла,  $\vec{s} = \frac{k}{|k|} = (s_1, s_2, s_3)$ .

Симметричный тензор  $\hat{T}$  позволяет учесть в законах дисперсии симметрию поверхностных граней. В работе его явный вид получен для равновесных поверхностных кристаллографических плоскостей (001), (101), (111) и (121).

В предельных случаях дисперсионные кривые (6) близки к спектрам невзаимодействующих между собой экситонов и поперечных фотонов (см. рис 2).

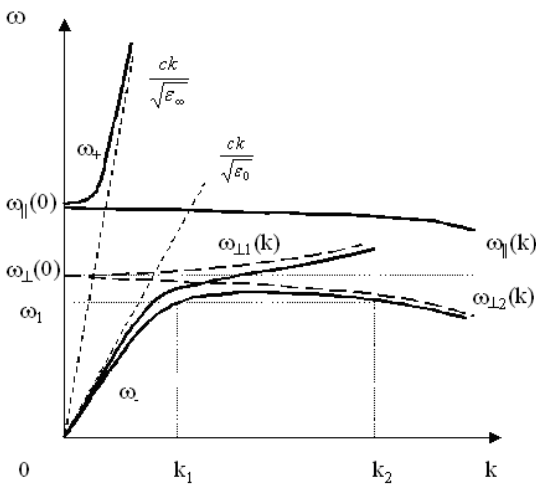


Рис. 2. Дисперсионные кривые светоэкситонов в атомарных криоцисталлах.

Так, при  $k \rightarrow 0$   $\omega_{+} = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{\infty}}} \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{\varepsilon_0 + 2}}$  и

$$\omega_{-} = \frac{k \cdot c}{a\sqrt{\varepsilon_0}}, \text{ а при увеличении } k, \text{ когда}$$

$$\frac{k^2 c^2}{\omega_{i0}^2 \varepsilon_0 a^2} \gg f \quad (\text{при этом } k \ll 1),$$

$$\omega_{+} = \frac{k \cdot c}{a\sqrt{\varepsilon_{\infty}}} \quad \text{и}$$

$$\omega_{-} = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\varepsilon_{\infty} + 2}{\varepsilon_0 + 2}} \left( 1 - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\infty} - 2\varepsilon_{\infty} + 1}{32\pi\varepsilon_{\infty}} t_{1,2} k^2 \right).$$

Таким образом, верхняя поляритонная кривая  $\omega_+ = \omega_+(\vec{k})$  вначале совпадает с частотой продольного экситона  $\omega_{\Pi} = \omega_+(0) = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty}} \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_\infty + 2}{\varepsilon_0 + 2}}$ , а затем, при увеличении  $k$  трансформируется в линейную зависимость  $\omega_+ = \frac{kc}{a\sqrt{\varepsilon_\infty}}$ , описывающую дисперсию высокочастотного фотона. В промежуточной области «бутылочного горла» ( $\frac{k^2 c^2}{\omega_{i0}^2 \varepsilon_0 a^2} \sim f$ ) реализуются поляритонные состояния экситонов (6), где учитывается запаздывание.

Нижняя поляритонная кривая  $\omega_- = \omega_-(\vec{k})$  вначале (в области  $k \rightarrow 0$ ) совпадает с линейной зависимостью  $\omega_- = \frac{kc}{a\sqrt{\varepsilon_0}}$ , описывающей дисперсию низкочастотного фотона, а при увеличении  $k$  трансформируется в спектр, близкий к закону дисперсии поперечных экситонов  $\omega_- = \omega_{i0} \sqrt{\frac{\varepsilon_\infty + 2}{\varepsilon_0 + 2}} \times \left( 1 - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty - 2\varepsilon_\infty + 1}{32\pi\varepsilon_\infty} t_{1,2} k^2 \right)$ .

Из (6) следует, что в окрестности частоты поперечного экситона  $\omega_\perp$ , когда  $\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty - 2\varepsilon_\infty + 1}{32\pi\varepsilon_\infty} t_{1,2} > 0$ , должны наблюдаться две волны (с некоторой частотой  $\omega < \omega_\perp$ ): обычная и добавочная. Эти волны имеют одинаковую поляризацию и направление распространения  $\vec{s}$ , но отличаются величиной волнового вектора. Отметим, что всегда  $t_1 < 0$  для ГЦК и ОЦК решеток (для ПК и некоторых сложных решеток  $t_1 > 0$ ). Значение  $t_2$  изменяется как по величине, так и по знаку в полубесконечных кристаллах для различных поверхностных граней.

Из (3) - (5) следует, что тензор обратной эффективной массы экситона определяется параметрами  $\varphi^{(2)}$ ,  $\varphi^{(3)}$ ,  $\varphi^{(4)}$  и параметрами тензора  $\hat{T}$ , с помощью которого учтена структура поверхности (тензор  $\hat{T}$  различен в зависимости от типа поверхностной кристаллографической плоскости).

Показано также, что ДСВ для определенных направлений распространения света в полубесконечном кристалле отсутствуют.

**Третий раздел** посвящен моделированию экситонных спектров и изучению дисперсии экситонных спектров в несовершенных молекулярных кристаллах.

Полученные в работе законы дисперсии экситонных поляритонов для кристаллов с алмазоподобной структурой использованы для исследования генерации электронных возбуждений полем  $\beta$ -частицы, движущейся со скоростью  $\vec{v}$  в кристалле. На рис. 3 точки 1,2 пересечения прямых  $\omega_{1,2} = \vec{k} \cdot \vec{v}_{1,2}$  (законов дисперсии сопровождающей частицу электромагнитной волны) с поляритонной ветвью, отражающие двойной резонанс (по частоте  $\omega$  и волновому вектору  $\vec{k}$ ), соответствуют возможности передачи энергии и рождению светоэкситона. Рожденный поляритон либо распадается на различных структурных дефектах с образованием подвижных носителей заряда, либо высвечивается после рассеяния в кристаллической решетке. В рассматриваемом случае масса поперечного экситона –

отрицательная, поэтому рассеяние пойдет с поглощением фононов, причем вероятность излучения пропорциональна  $\exp(-\Delta\omega \hbar/kT)$ , то есть уменьшается с ростом  $\Delta\omega$ .

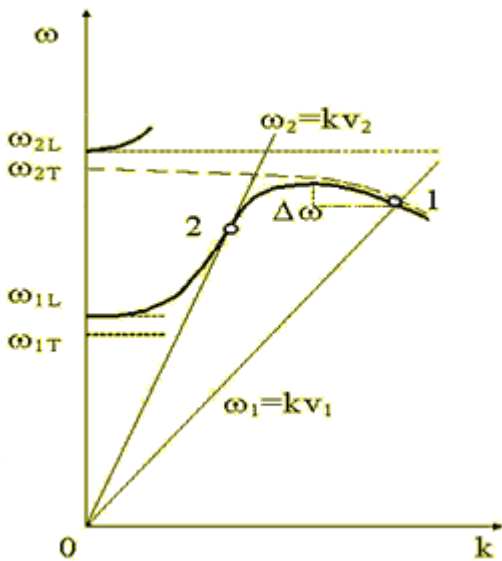


Рис. 3. Взаимное расположение дисперсионных кривых экситонных поляритонов и электромагнитного поля, движущейся в кристалле  $\beta$  - частицы.

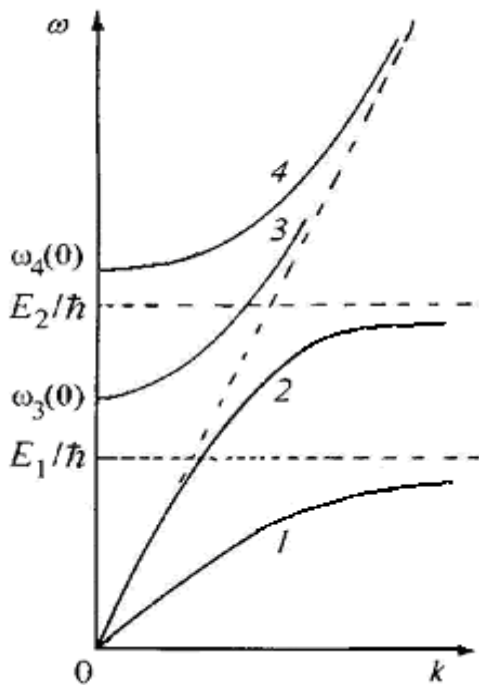


Рис. 4. Дисперсия экситонных поляритонов в смешанном бинарном молекулярном кристалле

Для того, чтобы учесть действие поля  $\beta$  - частицы на колебания дипольных моментов (1) квазимолекул алмазоподобной структуры, локальное (внутреннее) поле (2) кристалла дополнено «внешним» полем частицы  $\vec{E}_e(\omega, \vec{k})$ . Распространяясь в кристалле и достигая его границы, экситонные поляритоны могут при некоторых условиях (на линейном участке дисперсионной кривой, точка 2 на рис. 3) превращаться в обычный свет - «высвечиваться». Полученная в работе интенсивность излучения возбужденных полем  $\beta$  - частицы SE алмазоподобного кристалла следует из

вычисления суммарной работы  $\sum_l \vec{E}_{e\perp}(\vec{r}^l, t) \cdot \frac{d\vec{p}_{\perp}^l}{dt}$ , совершаемой в единицу времени над диполями-квазимолекулами (1) окружающим их электромагнитным полем.

Вычисление энергетических спектров совершенных кристаллов, осуществляемое в рамках концепции экситонных поляритонов (с использованием, например, поляритонных функций Грина), - достаточно хорошо разработанная процедура.

В то же время интерпретация спектроскопических экспериментов реальных кристаллов, имеющих дефекты (примеси, вакансии и пр.), требует изучения поляритонных возбуждений с учетом указанных несовершенств структуры. В настоящем разделе исследовано также распространение экситонных поляритонов в смешанных молекулярных кристаллах - кристаллах с изотопическими примесями замещения. Специфический характер конфигурационной зависимости молекулярных токов, энергий возбуждений, матрицы резонансного межмолекулярного взаимодействия определенным образом структурирует поляритонный спектр смешанных кристаллов, придавая ему черты, присущие только данному типу структур. На примере бинарных смешанных кристаллов нами исследованы особенности дисперсии поляритонов, выполнено численное моделирование экситонных спектров ориентационно-разупорядоченных вухподрешеточных молекулярных кристаллов (с двумя типами ориентации в каждой подрешетке). Численный расчет концентрационной зависимости экситонного спектра вышеупомянутых кристаллов оказался возможным в рамках разработанной авторами методики вычисления

энергетического спектра многоподрешеточных примесных топологически упорядоченных систем с недиагональным беспорядком, основанной на формализме проекционного оператора, а также, благодаря найденной (с помощью соответствующей диаграммной техники) локальной функции и усредненной резольвенты  $\langle \hat{R}(E) \rangle = \left\langle \left( \frac{1}{E - \hat{H}} \right) \right\rangle$  соответствующего квазичастичного гамильтониана  $\hat{H}$  системы в одноузельном приближении. На рис.4 представлен типичный ход дисперсионных кривых для смешанных бинарных молекулярных кристаллов. С увеличением концентрации  $C^{(2)}$  примесных молекул значения предельных частот  $\omega_3(k=0)$  и  $\omega_4(k=0)$ , а следовательно, и соответствующие световые ветви, смещаются в сторону больших частот. Величина области между кривыми 1 и 2 определяется неколлинеарностью дипольных моментов молекул матрицы и примеси.

Предметом исследования в **четвертом разделе** является рассеяние света такой низкоразмерной кристаллической структурой, как моноатомный слой. Общая теория оптических волн в анизотропных кристаллах, в том числе составленных из макроскопических слоев, рассмотрена в [30], подробно изучено распространение электромагнитных волн в структурах, построенных из чередующихся GaAs- и  $Al_xGa_{1-x}As$ -слоев. Электромагнитное поле в каждом слое подобных кристаллов описывается макроскопическими уравнениями Максвелла, на границе поле сшивается стандартной процедурой. Показатель преломления в пластинке малой толщины такой же, как в объеме кристалла. Подобный макроскопический подход справедлив, если толщина слоя  $d$  больше или сравнима с длиной электромагнитной волны  $\lambda$ . Под несколько иным углом зрения встает проблема описания распространения электромагнитных возбуждений в слоистых средах, если  $d \sim a$ , ( $a$  – радиус электронного возбуждения) как, например, в ВТСП-монокристаллах типа  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  (последние можно рассматривать как систему чередующихся перпендикулярных оси  $c$  плоскостей-монослоев:  $Y$ ,  $CuO_2$ ,  $BaO$ ,  $CuO_x$ ,  $BaO$ ,  $CuO_2$ ). Исследование взаимодействия электромагнитной волны с квазидвумерным кристаллическим слоем – первый шаг в изучении кристаллов, структурной единицей в которых является не атом (или другая хорошо локализованная структурная группа), а моноатомный слой.

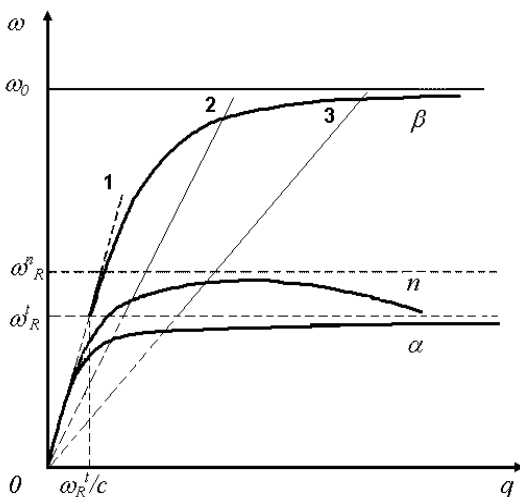


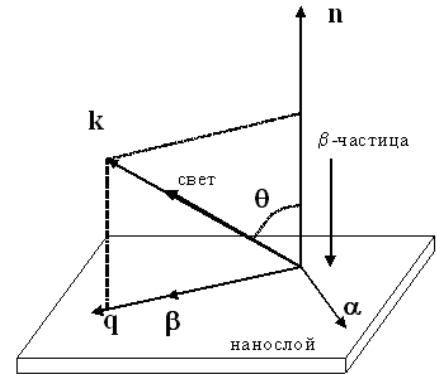
Рис. 5. Законы дисперсии локализованных в монослое электромагнитных  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $n$ -мод.

В рамках развитого в работе «расширенного» феноменологического подхода получены законы дисперсии (см. рис. 5) локализованных в квазидвумерном кристаллическом слое экситонных поляритонов. В случае сверхтонкого кристаллического слоя исследовано внутрикристаллическое поле. Оказалось, что в сверхтонком слое такого кристалла могут распространяться две волны с одной и той же частотой и поляризацией, нормальной к поверхности, но с разными длинами волн. Отличие полученной дополнительной электромагнитной волны от ДСВ Пекара [3] в том, что она определяется спецификой именно сверхтонких кристаллов и связана с формой макрополя в этой задаче, а ДСВ Пекара обусловлены нелокальностью связи между поляризацией и полем.

Использование концепции монослоя позволило описание трехмерного слоистого кристалла свести к исследованию одномерной цепочки, элементами которой являются

моноатомные плоскости. С этой точки зрения, распространение света в кристалле представляет собой перенос поля в вакууме от одного слоя к другому, а также трансформацию поля через слой. Для системы монослоев с толщиной  $d_0 \ll c/\omega$  определена матрица трансформации  $\hat{t}$ , связывающая амплитуды электрического  $E_t$  и магнитного  $H_t$  полей справа и слева от этой системы. Условие эквивалентности полученной матрицы и подобной матрицы, но не для дискретной цепочки монослоев, а для континуума (характеризующегося диэлектрической  $\hat{\epsilon}$  и магнитной  $\hat{\mu}$  проницаемостями) позволило установить связь между функциями отклика сплошной среды и системы монослоев.

Рис. 6. Геометрия рассеяния света (с волновым вектором  $k$ ) нанокристаллической пластинкой. Для описания электромагнитных возбуждений в пленке использован натуральный базис  $(\vec{\alpha}, \vec{\beta}, \vec{n})$ , связанный с  $s$ - и  $p$ -поляризациями световой волны,  $\vec{\beta} = \vec{q}/q$ ,  $\vec{\alpha} = \vec{n} \times \vec{\beta}$ .



В работе исследована генерация экситонных поляритонов в алмазоподобной нанопленке полем движущейся  $\beta$ -частицы. Высвечиваются сразу лишь поляритоны, генерируемые  $\beta$ -частицей (движущейся со скоростью  $v = v_1$ ), которые соответствуют пересечению линейных участков дисперсионных кривых с прямой 1 на рис. 5 (законом дисперсии сопровождающего  $\beta$ -частицу поля).

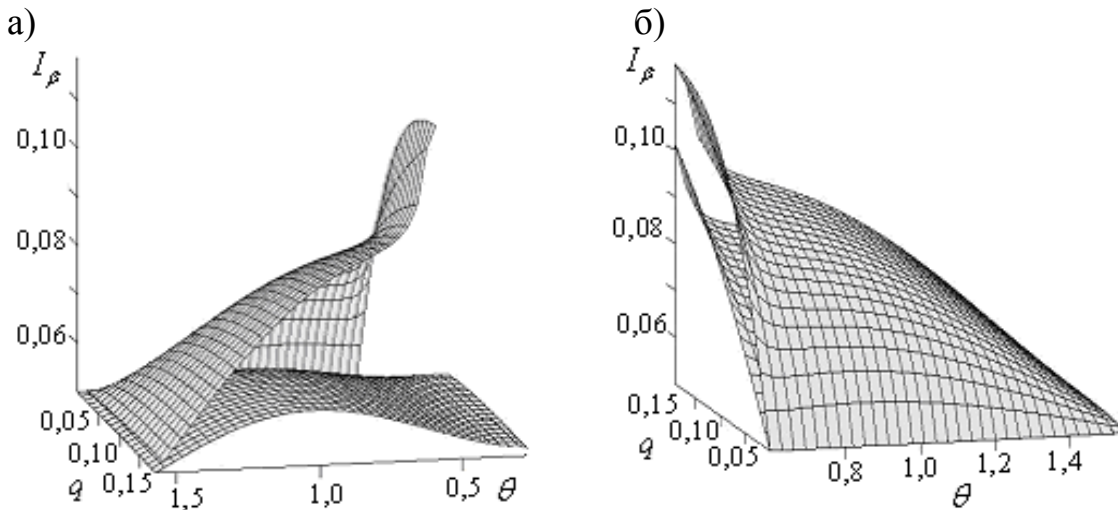


Рис. 7. Спектральная плотность  $I_\beta(q, \{\theta, \gamma, d\})$  излучения в ед. измерения  $(4\pi)^2 e^2 c/a^3$  ( $q$  - в ед.  $10a^{-1}$ ,  $\theta$  - в радианах), генерируемого в квазидвумерном слое  $d=50$  (в ед. постоянной решетки  $a$ ): а) Si: первый лист (снизу) -  $\gamma=0,3$ , второй -  $\gamma=0,7$ , б) первый лист (снизу) - алмаз, второй - Si,  $\gamma=0,7$

Выполнен численный расчет спектральной плотности излучения, генерируемого в квазидвумерных слоях алмаза, кремния (см. рис. 7) и GaAs. Спектральная плотность  $I_{\alpha}(\beta, n) (q, \{\theta, \gamma, d\})$  параметрически зависит от угла  $\theta$  (отражающего геометрию задачи, рис. 6), а также от толщины пластинки  $d$  и параметра скорости частицы  $\gamma \equiv v/c$ .

Интерес к алмазоподобным структурам, изучаемым и в нашей работе, в настоящее время растет. Об этом свидетельствует, в частности, недавно вышедший двухтомник [31, 32], который содержит материалы исследований тонких алмазных пленок, как радиационных детекторов, высокочастотных датчиков, обзор открывающихся возможностей их использования в электронике как нового ожидаемого полупроводника-конкурента кремния.

В **пятом разделе** в приближении виртуального кристалла (ПВК) [33] изучена трансформация поляритонного спектра неидеальной сверхрешетки в связи с наличием в ней примесных слоев. В координатном представлении тензоры диэлектрической  $\hat{\epsilon}$  и магнитной  $\hat{\mu}$  проницаемости кристаллической сверхрешетки с произвольным числом  $\sigma$  слоев, которые перпендикулярны оси  $z$ , выражаются в форме:

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}(z) \\ \hat{\mu}(z) \end{pmatrix} = \sum_{l,s} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{ls} \\ \hat{\mu}_{ls} \end{pmatrix} \left\{ \theta \left[ z - (n-1)d - \left( \sum_{j=1}^s a_{lj} - a_{ls\alpha} \right) \right] - \theta \left[ z - (n-1)d - \sum_{j=1}^s a_{lj} \right] \right\}. \quad (7)$$

В (7)  $\theta(z)$  - функция Хевисайда,  $l = \pm 1, \pm 2, \dots$  - номер ячейки одномерного кристалла, индекс  $s = 1, 2, \dots, \sigma$  нумерует элементы ячейки. Расчет поляритонного спектра неидеальной сверхрешетки с переменным составом осуществлен в рамках ПВК (по аналогии с квазичастичным подходом) путем замены:  $\hat{\epsilon} \rightarrow \langle \hat{\epsilon} \rangle$ ,  $\hat{\mu} \rightarrow \langle \hat{\mu} \rangle$  (угловые скобки обозначают процедуру конфигурационного усреднения). Конфигурационно зависимые материальные тензоры  $\hat{\epsilon}_{ls}$ ,  $\hat{\mu}_{ls}$  слоев в нашей модели неидеальной сверхрешетки представляются через случайные величины  $\eta_{ls}^v$  ( $\eta_{ls}^v = 1$ , если в узле  $(l, s)$  кристаллической цепочки находится слой  $v(s)$ -го сорта,  $\eta_{ls}^v = 0$  - в ином случае):

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{ls} \\ \hat{\mu}_{ls} \end{pmatrix} = \sum_{v(s)} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_s^{v(s)} \\ \hat{\mu}_s^{v(s)} \end{pmatrix} \eta_{ls}^{v(s)} \quad (8)$$

Из (8) и [33] следует, что  $\begin{pmatrix} \langle \hat{\epsilon}_{ls} \rangle \\ \langle \hat{\mu}_{ls} \rangle \end{pmatrix} = \sum_{s,v(s)} \begin{pmatrix} \epsilon_s^{v(s)} \\ \mu_s^{v(s)} \end{pmatrix} C_s^{v(s)}$ , где  $C_s^{v(s)}$  - концентрация примесного слоя  $v(s)$ -го сорта в  $s$ -й подрешетке,  $\sum_{v(s)} C_s^{v(s)} = 1$ .

Из равенства (7) следует, что фурье-амплитуды  $\hat{\epsilon}_l$ ,  $\hat{\mu}_l$  и усредненные диэлектрическая  $\langle \hat{\epsilon}_{n\alpha} \rangle$  и магнитная  $\langle \hat{\mu}_{n\alpha} \rangle$  проницаемости слоев (8) связаны соотношением:



$$\begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_l \\ \hat{\mu}_l \end{pmatrix} = -\frac{i}{2\pi l} \sum_{\alpha} \begin{pmatrix} \langle \hat{\varepsilon}_{n\alpha} \rangle \\ \langle \hat{\mu}_{n\alpha} \rangle \end{pmatrix} \left\{ \exp\left(i \frac{2\pi}{d} l \sum_{j=1}^{\alpha} a_j\right) - \exp\left[i \frac{2\pi}{d} l \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_j - a_{\alpha}\right)\right] \right\}. \quad (9)$$

В варианте сверхрешетки с примесными слоями переменной толщины конфигурационно зависимыми являются величины  $a_{ls}$  толщин слоев. Таким образом, поскольку

$\langle a_{ls} \rangle = \sum_{\nu(s)=1}^{r(s)} a_s^{\nu(s)} C_s^{\nu(s)}$ , то период одномерной сверхрешетки после усреднения имеет вид:

$$\langle d \rangle \equiv d \left\{ C_s^{\nu(s)} \right\} = \sum_{s=1}^{\sigma} \sum_{\nu(s)=1}^{r(s)} a_s^{\nu(s)} C_s^{\nu(s)}. \quad (10)$$

Здесь  $C_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$  - концентрация слоев с толщиной  $\nu(\alpha)$ -го сорта в  $\alpha$ -й подрешетке, причем  $\hat{\varepsilon}_{n\alpha} \equiv \hat{\varepsilon}_{\alpha}$ ,  $\hat{\mu}_{n\alpha} \equiv \hat{\mu}_{\alpha}$ .

Конфигурационное усреднение «восстанавливает» трансляционную симметрию кристаллической системы. В рассматриваемом случае неидеальной сверхрешетки «приобретенная» трансляционная инвариантность одномерной цепочки позволяет представить уравнения Максвелла (в предположении гармонической зависимости напряженностей  $(\vec{E}, \vec{H})$  электромагнитного поля от времени) в форме:

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \langle \hat{\mu}(z) \rangle \cdot \vec{H}(\vec{r}, \omega), \quad \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \langle \hat{\varepsilon}(z) \rangle \cdot \vec{E}(\vec{r}, \omega). \quad (11)$$

Следовательно, согласно теореме Флоке, фурье-амплитуды  $\vec{f}_{K,p}^{(E,H)}$  напряженностей электрического и магнитного полей для периодической среды удовлетворяют соотношению:

$$\left[ \vec{\beta} + \left( K + p \frac{2\pi}{d} \right) \vec{e}_z \right] \times \begin{pmatrix} \vec{f}_{K,p}^{(H)} \\ \vec{f}_{K,p}^{(E)} \end{pmatrix} = \frac{\omega}{c} \begin{bmatrix} -\sum_l \hat{\varepsilon}_l \cdot \vec{f}_{K,p-l}^{(E)} \\ \sum_l \hat{\mu}_l \cdot \vec{f}_{K,p-l}^{(H)} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

$\vec{\beta}$  - произвольный планарный (в плоскости XOY) волновой вектор,  $\vec{e}_z$  - орт оси z,  $\vec{K} = (0, 0, K)$  - блоховский вектор. Система уравнений (12) определяет нормальные моды электромагнитных волн, распространяющихся в рассматриваемой «периодической» среде. Рассмотрен случай с,

$K$  близкими к значениям, определяемым условием Брэгга:  $\left|K - \frac{2\pi}{d}\right| \approx K$ ,  $c^2 K^2 \approx \omega^2 \varepsilon_0$ . Этот случай соответствует резонансу между составляющими плоских волн  $\vec{f}_{K,p}^{(E,H)}$  при  $p=0, -1$  в системе уравнений (12). Дисперсионные соотношения  $\omega_{\pm} = \omega(K)$  получены из условия равенства нулю определителя системы (12).

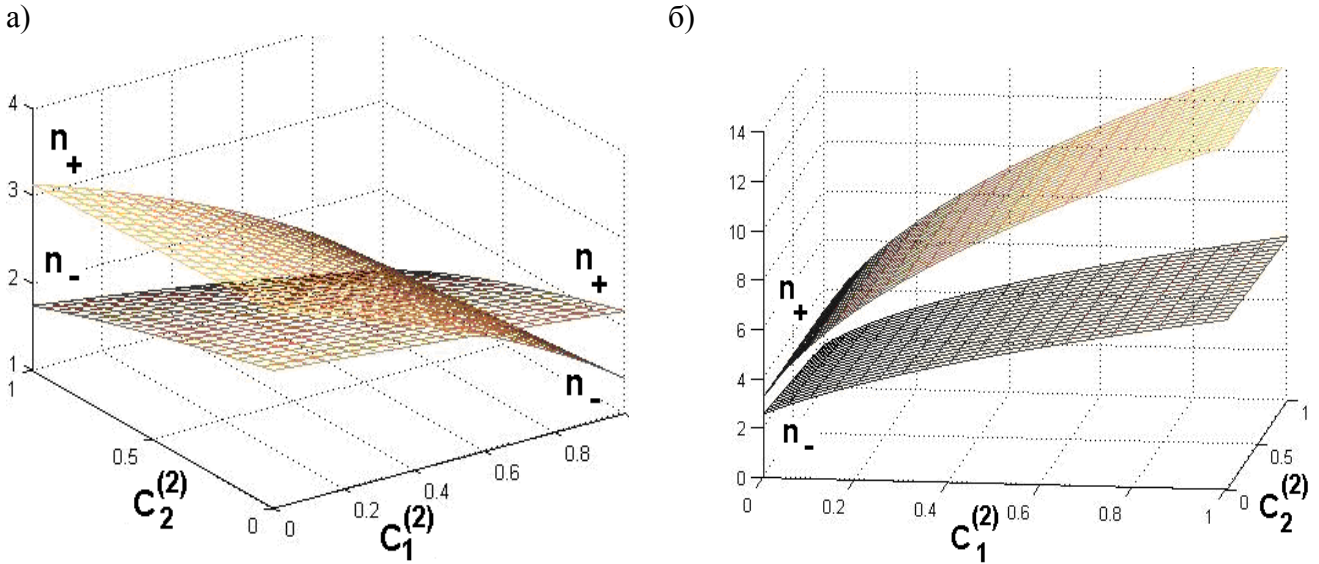


Рис. 8. Зависимость эффективного показателя преломления  $n_{\pm} \equiv cK/\omega_{\pm}$  композитной сверхрешетки (с чередующимися слоями кремния и жидкого кристалла) от концентрации примесных слоев  $C_1^{(2)}$  и  $C_2^{(2)}$ : а)  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 0.1$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 0.2$ ; б)  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 20$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 0.2$ ;  $a_1/a_2 = 1$ .

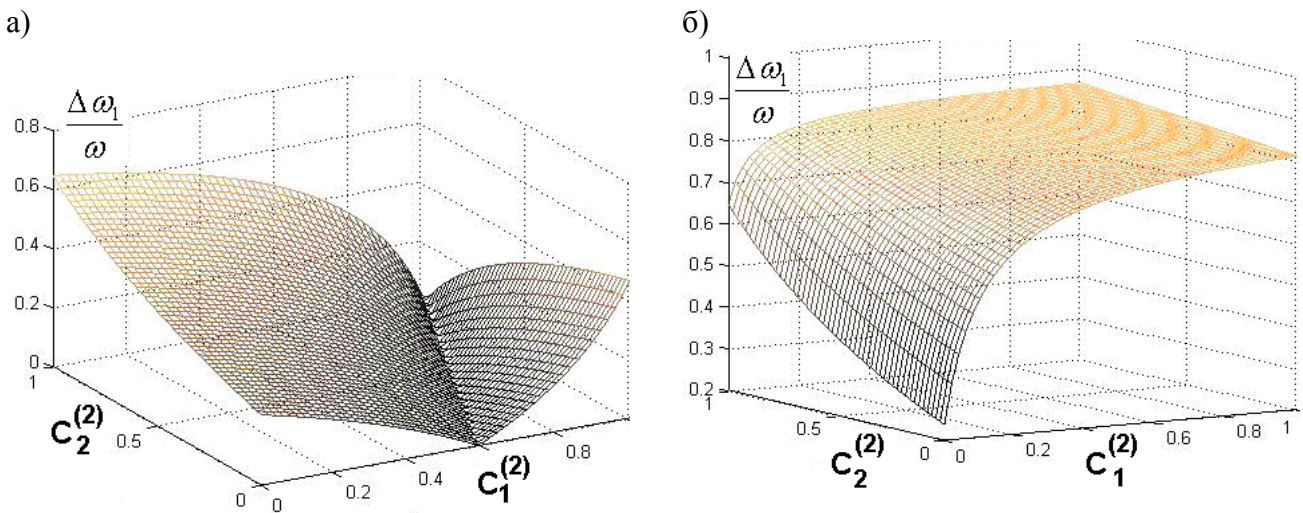


Рис. 9. Зависимость относительной ширины щели нижней запрещенной зоны  $\Delta\omega_1/\omega$  композитной сверхрешетки (с чередующимися слоями кремния и жидкого кристалла) от концентрации примесных слоев  $C_1^{(2)}$  и  $C_2^{(2)}$ : а)  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 0.1$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 0.2$ ; б)  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 20$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 0.2$ ;  $a_1/a_2 = 1$ .

Два корня  $\omega_{\pm}$  этого дисперсионного уравнения определяют границы спектральной зоны: при частотах  $\omega_{-}(K) < \omega < \omega_{+}(K)$  (запрещенная зона) корни комплексные, электромагнитные волны – затухающие (брэгговское отражение), частоты  $\omega < \omega_{-}$ ,  $\omega > \omega_{+}$  соответствуют распространяющимся волнам.

Исследовано распространение электромагнитных возбуждений в немагнитных алмазно-кремниевых и кремний-жидкокристаллических сверхрешетках с переменным составом и/или толщиной слоев, изучены особенности концентрационной зависимости величины фотонной энергетической щели и показателя преломления такой слоистой системы (см., например, рис. 8, 9), в том числе, при наличии в ней магнитных примесных слоев (см. рис. 10). Варьирование примесных слоев с включением магнитных частиц еще больше (по сравнению с идеальными слоистыми структурами) расширяет возможности моделирования композитных материалов.

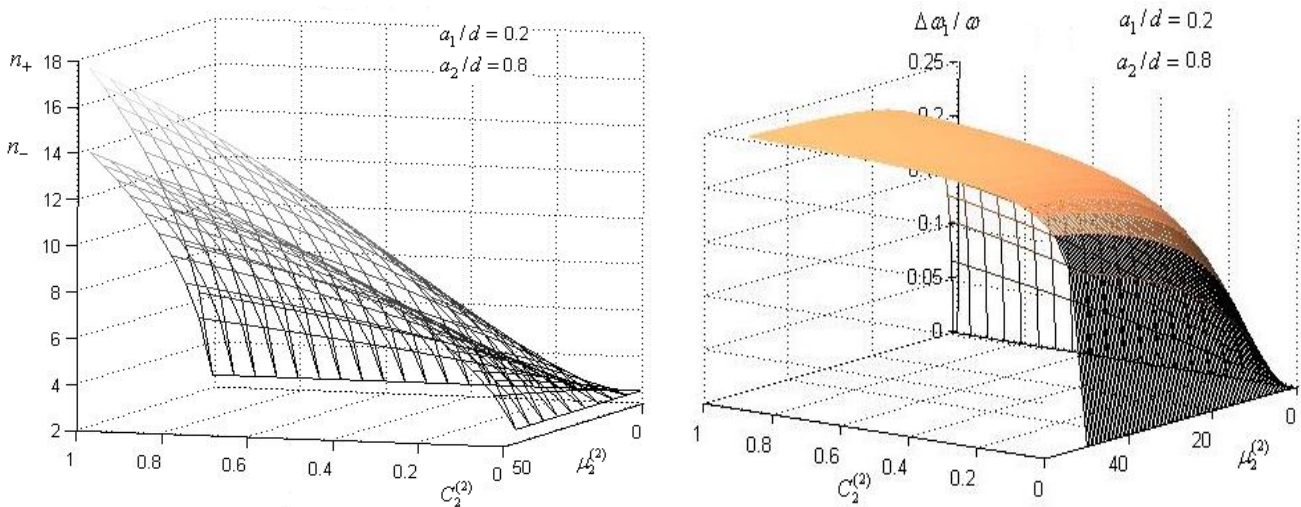


Рис. 10. Зависимость а) эффективного показателя преломления  $n_{\pm}$  и б) относительной ширины щели нижней запрещенной зоны  $\Delta a_1 / \omega$  композитной сверхрешетки (с чередующимися слоями кремния и жидкого кристалла) от концентрации  $C_2^{(2)}$  примесных слоев ферронематика  $C_2^{(2)}$  и их магнитной проницаемости  $\mu_2^{(2)}$ .

ПВК-приближение, выбранное в работе для описания трансформации поляритонного спектра достаточно простой модели сверхрешетки, оказалось адекватным. Однако исследование особенностей поляритонного спектра (и определяемых им физических величин, например, плотности состояния элементарных возбуждений и характеристик нормальных электромагнитных волн) более сложных неидеальных систем требует привлечения и более сложных методов описания (в зависимости от поставленной задачи): метода когерентного потенциала (одно- или многоузельного), [33], метода усредненной Т-матрицы, [34], и их модификаций. Тем не менее, примененное в работе ПВК-приближение – первый шаг к изучению сложных объектов.

Предметом исследования в **шестом разделе** является рассеяние света в YBaCuO-кристаллической структуре. Проведен симметричный анализ колебаний атомов в таком кристалле, выделены ИК-активные  $u$ -моды и КР-активные  $g$ -моды. При исследовании колебательного спектра монокристаллов типа 1:2:3 мы исходили из представления, согласно которому, наиболее сильным является взаимодействие Cu(1)-O(4) вдоль оси  $c$  и комплексов Cu(1)-O(1) из одномерных цепочек, затем - Cu(2)-O(2 и 3) в медно-кислородных плоскостях  $\text{CuO}_2$ . Причем атомы кислорода O(2 и 3) в плоскостях  $\text{CuO}_2$  практически эквивалентны и довольно сильно связаны с ионами меди Cu(2). В то же время, ионы кислорода O(4) имеют

существенно разные длины связей с ионами Cu(1) и Cu(2). Химическая связь Cu(2) с O(4) практически отсутствует, - можно ожидать, что пара атомов кислорода O(4) на оси *c* достаточно легко замещается на другие элементы (например, фтор или азот). Среди обнаруженных в спектрах комбинационного рассеяния (КР) мод (см. рис. 11), связанных со смещениями ионов кислорода специально отметим  $A_g$ -моду ( $500\text{ см}^{-1}$ ), соответствующую колебаниям апексного кислорода O(4) в мостиках O(4)-Cu(1). Наблюдается существенное смягчение этой моды по мере возрастания индекса *x* дефицита кислорода в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ , вплоть до  $475\text{ см}^{-1}$  (в тетрагональной фазе, при  $x=1$ ).

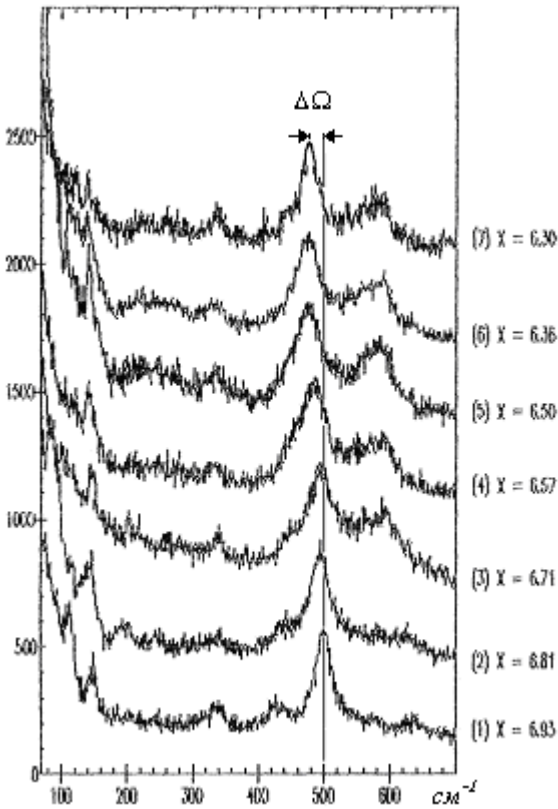


Рис. 11. КР спектры (*cc*-поляризация)  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  керамики для различных значений кислородного индекса *x*, [35]

Повышенное внимание к изучению рассеяния света на колебаниях мостикового (апекального) кислорода O(4) обусловлено тем, что именно с флуктуацией позиций последнего связывают сверхпроводящее спаривание в 1:2:3-соединениях.

В работе рассмотрены особенности взаимодействия электромагнитного излучения с подрешеткой апекального кислорода O(4) в квазидвумерном слое  $\text{YBaCuO}$  кристалла. Предполагалось, что на площадку *S* за промежуток времени  $T_0$  падает под углом  $\Theta_i$  световая волна (частоты  $\omega_i$ ) с энергией  $W_i = \int_{S, T_0} dt d\sigma (c/4\pi) [\vec{E}_i \times \vec{B}_i] \cdot \vec{n}$ . Эта волна генерирует в рассматриваемом слое токи и поляризацию, которые создают под углом  $\Theta_s$

поле рассеянной волны (с напряженностями  $\delta\vec{E}_s$  и  $\delta\vec{B}_s$ , электрической и магнитной соответственно, частоты  $\omega_s$ ), энергия которой описывается аналитическим выражением:

$W_s = \int_{S, T_0} dt d\sigma (c/4\pi) [\delta\vec{E}_s \times \delta\vec{B}_s] \cdot \vec{n}$ . Электронная поляризуемость  $\hat{\chi}$  кристаллического слоя

модулируется фоновыми возбуждениями и, следовательно, представима в виде  $\hat{\chi}(\vec{u}) = \hat{\chi}(0) + \hat{\alpha} \cdot \vec{u} \cdot d$ . Таким образом, осуществляется КР света, обусловленное смещениями  $\vec{u}$  ионов O(4) в слое ( $\hat{\alpha}$  - тензор КРС). Исходя из того, что в планарной системе характеристикой рассеяния является безразмерная величина  $W = W_s / W_i$ , в работе найдена дифференциальная характеристика рассеяния (ДХР)  $d^2W / dO d\omega_s$  света ( $dO$  - элемент телесного угла рассеяния) на фоновых поляритонах в тонком слое (толщины *d*)  $\text{YBaCuO}$ -кристалла с кислородными вакансиями в мостиках O(4)-Cu(1)-O(4):

$$\frac{d^2W}{dO d\omega_s} = \frac{\omega_s^4 \cos \theta_s}{c^4 \cos \theta_i} \vec{e}_0 \hat{\alpha}^i \hat{M} \hat{M} \hat{\alpha}^i \vec{e}_0 \langle u_i u_i \rangle^{\Omega, \vec{q}}, \quad (13)$$

где  $\vec{e}_0$  - единичный вектор поляризации падающей волны, матрица  $\hat{M}$  :  
 $\hat{M} = \left( \vec{\alpha}\vec{\alpha} + \vec{\beta}\vec{\beta} \cos^2 \theta_s + \vec{n}\vec{n} \sin^2 \theta_s \right) \cos^{-1} \theta_s$  - геометрический фактор.  $\vec{\alpha}, \vec{\beta}, \vec{n}$  - орты (см. рис.

б),  $\langle u_i u_i \rangle^{\Omega, \vec{q}}$  - фурье-компоненты корреляционной функции смещений  $\vec{u}$  ионов пленки, явный вид которых определяется динамикой элементарных возбуждений, модулирующих электронную поляризуемость.

В рамках обсуждаемой модели отношение интенсивности рассеянного света в слое с вакансиями к аналогичной характеристике бездефектной пленки оказалось порядка концентрации дефектов (вакансий).

Выше рассмотрено рассеяние света на дипольно активных колебаниях O(4) при наличии вакансий в мостиках O(4)-Cu(1)-O(4). Подобное явление, связанное со смешиванием  $g$ - и  $u$ -мод колебаний ионов вдоль оси  $c$  (но не в объеме, а в приповерхностном слое), должно наблюдаться на границе (110), так как симметрия этой поверхности ниже симметрии пространственной группы кристалла. Особый интерес к рассеянию света приповерхностным слоем 1:2:3-соединений, которому посвящена дальнейшая часть раздела работы, обусловлен тем фактом [36], что дефицит кислорода и кристаллическая структура вблизи поверхности и в объеме YBaCuO-монокристалла отличаются друг от друга. Последнее затрудняет интерпретацию экспериментов по электронному туннелированию и фотоэмиссии, осложняет выбор методики для определения индекса кислородного дефицита. В то же время, вследствие малой длины когерентности  $\xi$  ВТСП типа YBaCuO экспериментальные данные часто определяются именно приповерхностным слоем  $d$  порядка  $\xi$ . Смешивание  $g$ - и  $u$ -мод в тонком приповерхностном слое YBaCuO монокристалла имеет ряд следствий: комбинационное рассеяние (КР) света на локализованных в слое поляритонах и генерацию второй оптической гармоники.

У поверхности кристалла энергия связи меди Cu(1) с кислородом O(4) отличается от своего объемного значения. В случае даже малой поправки  $\Delta\Omega$  к частотам  $\Omega_u, \Omega_g$  колебаний кислорода, вызванной искажением симметрии решетки (из-за наличия вакансий, поверхностей и пр.), теряют смысл симметричные  $g$  и антисимметричные  $u$  комбинации координат. Оба нормальные колебания как растягивают связь Cu(1)-O(4), то есть проявляются в рамановских спектрах, так и создают дипольный момент, то есть активны в ИК-поглощении. Доля  $g$ - и  $u$ -компонент в новых нормальных модах  $Q_{\tilde{u}} = Q_u - \alpha Q_g$  и  $Q_{\tilde{g}} = Q_g + \alpha Q_u$ , существенно зависит от отношения  $\alpha = (\Delta\Omega)^2 / (\Omega_g^2 - \Omega_u^2)$ . Падающая на поверхность кристаллического слоя световая волна ТМ-поляризации порождает поверхностную плотность дипольного момента  $\vec{\Delta}\vec{\Pi}$ , которая генерирует на стоксовой и антистоксовой частотах поле рассеяния  $E_s = 2\pi\vec{k}_s \cdot \vec{\Delta}\vec{\Pi}$  (имеющее также  $p$ -поляризацию). При этом интенсивность  $I_s$  рассеянного светового потока определяется выражением:

$$I_s = I_i 4\pi^2 Q_g^2(0) \left( \frac{\partial \chi_{zz}}{\partial Q_g} \right)^2 \left( \frac{\omega_s d}{c} \right)^2 \text{tg}^2 \Theta_s. \quad (14)$$

В рамках адиабатического приближения в данном разделе работы рассмотрено КРС на локализованных в YBaCuO-слое поляритонах  $\vec{n}$ -поляризации. На языке квазичастиц элементарный КР-процесс сводится либо к реакции распада возбуждающего фотона  $(\omega_i, \vec{k}_i)$  на другой фотон  $(\omega_s, \vec{k}_s)$  и фононный поляритон  $(\Omega_n, \vec{q})$  - в случае стоксова процесса, либо к

рождению фотона  $(\omega_s, \vec{k}_s)$  в результате столкновения фотона  $(\omega_i, \vec{k}_i)$  и поляритона  $(\Omega_n, \vec{q})$  - для антистоксова процесса. Соответствующие этим процессам законы сохранения энергии и импульса имеют вид:

$$\omega_s(\vec{k}_s) = \omega_i(\vec{k}_i) \pm \Omega_n(\vec{q}), \quad \vec{k}_s = \vec{k}_i \pm \vec{q}. \quad (15)$$

В рассматриваемой ИК-области спектра закон дисперсии фононных  $n$ -поляритонов в квазидвумерном кристаллическом слое соединений типа YBaCuO выражается уравнением:

$$\sqrt{q^2 - \Omega^2 / c^2} = 2\pi q^2 \chi_n(\Omega). \quad (16)$$

Для конкретизации модели поляризуемость слоя  $\hat{\chi}$  выбрана в однорезонансном приближении:

$$\chi_n(\Omega) = \chi(\infty) (\Omega_0^2 - \Omega^2) / (\Omega_r^2 - \Omega^2). \quad (17)$$

Здесь  $\Omega_r$  - резонансная частота,  $\Omega_0 = \Omega_r \sqrt{\chi(0) / \chi(\infty)}$  - частота прозрачности слоя. Анализ уравнений (16) и (17) показал, что дисперсионная кривая – немонотонна (см. подобный закон дисперсии фононных  $n$ -поляритонов на рис. 5). Особенность ее в полученной дополнительной волне (см. раздел 4). Таким образом, рамановский сдвиг частоты  $\Omega(\Theta) = \omega_s - \omega_i$  резко уменьшается как при уменьшении угла рассеяния  $\Theta_s$  от значения  $\Theta_s = \Theta_i$ , так и при его увеличении от того же значения. Приняв во внимание, что дифференциальная характеристика рассеяния света (13) достигает максимального значения при  $\Omega \rightarrow \Omega_r$ , в работе исследован максимальный рамановский сдвиг для  $\Omega$  вблизи  $\Omega_r$  (соответственно  $q \rightarrow q_m$ ). Для частоты

$\omega_i = 1.1 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$  падающего под углом  $\pi/3$  на поверхность рассматриваемого кристаллического слоя светового пучка, рассеянного на колебаниях решетки частоты  $\Omega_r = 500 \text{ см}^{-1}$ , получено численное значение величины  $\Delta\Theta = \pm \frac{\sqrt{2}\Omega_r}{\omega_i \cos\Theta_i}$  отклонения угла

рассеяния от угла отражения, равное  $\Delta\Theta \approx \pm 0.75^\circ$ .

В рамках модели ангармонического осциллятора исследован случай вынужденного комбинационного рассеяния света квазидвумерным слоем YBaCuO-кристалла. Смещения ионов O(4), формирующие поверхностную плотность дипольного момента и, следовательно, генерирующие на стоксовой и антистоксовой частотах поле рассеяния, равны:

$$Q_u = Q_{\tilde{u}}^{(1)} + \alpha Q_{\tilde{g}}^{(2)}. \quad (18)$$

$Q_{\tilde{u}}^{(1)}, Q_{\tilde{g}}^{(2)}$  - установившееся решение системы динамических уравнений ангармонического осциллятора (колебаний ионов кислорода O(4)) с точностью до слагаемых, квадратичных по полю. Таким образом, поскольку интенсивность светового потока пропорциональна  $|Q_u|^2$ ,

равенство (18) позволило сделать оценки интенсивности, проявления особенностей КР-спектров сверхтонких YBaCuO-кристаллов. Наблюдение рассеяния когерентных электромагнитных волн на стоксовой и антистоксовой частотах становится возможным в окрестности резонансной частоты.

Высокоэффективным средством исследования ВТСП-материалов (керамики, пленок, монокристаллов) являются нелинейно-оптические методы, в частности, метод генерации второй гармоники (ГВГ). Метод ГВГ позволяет проводить диагностику поверхности, структуры ВТСП-кристалла (в том числе его кислородной подсистемы), осуществлять неразрушающий контроль за фазовыми переходами. Механизм генерации можно представить следующим образом. Электромагнитное поле раскачивает  $u$ -моды, поскольку последние дипольно активны.

Благодаря кубическому анггармонизму  $\mu Q_g Q_u^2$  ( $\mu$  - константа кубического анггармонизма), возбуждается  $g$ -мода на удвоенной частоте. Но так как ее симметрия нарушена,  $g$ -колебание с удвоенной частотой содержит примесь  $u$ -моды, обладающей дипольным моментом. Если на поверхность кристалла падает волна с частотой  $\Omega$  под углом  $\Theta_i$ , то в направлении отраженного света можно наблюдать сигнал с удвоенными частотой и волновым вектором, возникший в результате нелинейного взаимодействия  $g$ - и  $u$ -мод. Найденная в работе величина интенсивности  $I_{2\Omega}$  сигнала второй гармоники, генерированной согласно предложенному механизму, сравнима с интенсивностью сигналов, полученных за счет других возможных механизмов (например, квадрупольного).

Особенности рассматриваемого в данном подразделе рассеяния света на колебаниях апикального кислорода  $O(4)$  вытекают из специфики дисперсии локализованных в тонком слое 1:2:3-соединения фононных поляритонов (рис. 5), допускающей для  $n$ -поляризации существование дополнительной волны. Выбранная модель не учитывает смешивание в полносимметричных модах колебаний ионов кислорода, принадлежащих  $CuO_2$ -плоскости и мостику  $O(4)$ - $Cu(1)$ - $O(4)$  или смешивание колебаний комплекса:  $CuO_x$ -плоскость -  $O(4)$ - $Cu(1)$ - $O(4)$ -мостик. Тем не менее, предложенный пример (рассеяние  $p$ -поляризованного светового потока, генерирующего  $n$ -поляритоны) позволяет проанализировать следствия смешивания  $u$ - и  $g$ -фононных мод. Отметим, что изложенная методика применима и при изучении рассеяния  $s$ -поляризованной электромагнитной волны, генерирующей  $\alpha$ -компоненту поверхностной поляризации и, следовательно, представляет интерес при исследовании КР на колебаниях  $O(1)$ - $Cu(1)$ - $O(1)$ -цепочек (расположенных вдоль  $b$ -оси YBaCuO-кристалла, в этом случае  $\vec{\alpha} \parallel b$ ).

Облучение кристалла потоками фотонов, нейтронов или электронов - один из методов исследования его структуры [37], В работе исследован один из эффектов, связанных с реакцией YBaCuO нанопленки на поток электронов. Интерес к изучению влияния  $\beta$ -частиц на подобную структуру вызван не только тем, что они представляют самостоятельный инструмент исследования кристаллов, но и тем фактом, что они появляются в результате ядерных реакций при облучении их другими частицами ( $n$ ,  $\gamma$ ). Учет трансмутационного канала изменения свойств соединений типа YBaCuO также связан с изучением взаимодействия  $\beta$ -частиц с этими кристаллами. При этом ввиду того, что заряженные частицы сильно взаимодействуют с веществом, глубина их проникновения в кристалл сравнительно невелика. Последнее определяет актуальность моделирования возбуждения электронной подсистемы тонкого кристаллического YBaCuO-слоя полем  $\beta$ -частицы.

При исследовании возбуждения фононных поляритонов, локализованных в тонком слое YBaCuO-кристалла, полем движущейся  $\beta$ -частицы, и вычислении интенсивности (рис. 12) соответствующего сигнала использована методика, разработанная в работе для расчета интенсивности излучения, порожденного в результате распада экстонных поляритонов, возбужденных  $\beta$ -частицей, движущейся в алмазоподобном кристаллическом слое.

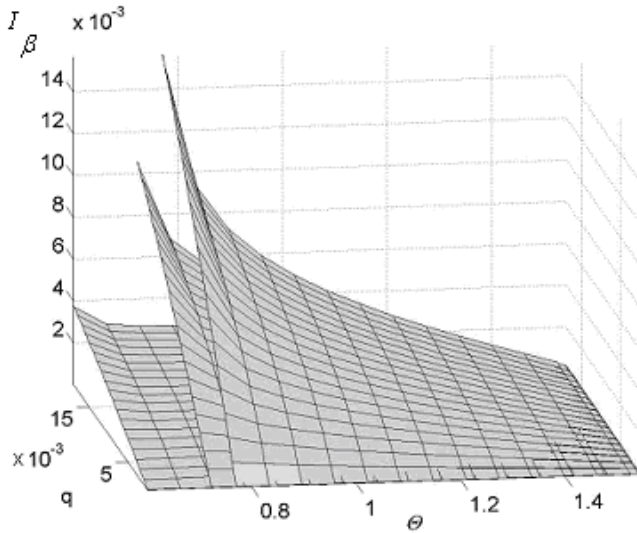


Рис. 12. Спектральная плотность  $I_{\beta}(q, \{\theta, \beta, d\})$  излучения в ед. измерения  $(4\pi)^2 e^2 c/a^3 q$  - в ед.  $a^{-1}$ ,  $\theta$  - в радианах), генерируемого в квазидвумерном YBaCuO-слое: первый лист (снизу) -  $\gamma = 0,7$ , второй -  $\gamma = 0,9$ , третий -  $\gamma = 0,99$   $d = 50$  (в ед. постоянной решетки  $a$ )

**Седьмой раздел** посвящен исследованию оптической активности молекулярных кристаллов, гиротропии молекулярных кристаллов, индуцированной внешними механическими напряжениями.

Основное внимание в работах, посвященных теоретическому изучению гиротропных свойств (эффектов пространственной дисперсии) молекулярных кристаллов уделено разработке и развитию микроскопического описания гиротропии, выявлению различных ее механизмов, анализу их связи с микропараметрами среды и частотной дисперсии. Такие исследования дают возможность использовать явление гиротропии в качестве тонкого экспериментального метода изучения структурных особенностей кристаллических сред. Вместе с тем, хорошо известно, что для кристаллов определенных классов симметрии некоторые из эффектов пространственной дисперсии (например, оптическая активность) возможны лишь при наличии внешних полей или механических напряжений. Микроскопическое рассмотрение всевозможных оптических эффектов в системах, подверженных внешним воздействиям, предполагает известной зависимости характеристик нормальных электромагнитных волн в кристалле от величины этих воздействий. В свою очередь, нахождение такой зависимости требует решения вопросов, связанных с перестройкой энергетического спектра рассматриваемой среды и последующим расчетом оптических материальных тензоров, определяющих указанные характеристики. В данном разделе эти вопросы решены для однородно деформированных (внешним механическим напряжением) молекулярных кристаллов с использованием экситонной модели [38]. В рамках этой модели получено микроскопическое выражение для поперечного тензора диэлектрической проницаемости и с помощью последнего найдена важная в теории гиротропии количественная характеристика - вращательная способность  $\rho(\hat{\epsilon}, \vec{s}, \omega)$  деформированного кристалла с произвольным числом подрешеток (здесь  $\hat{\epsilon}$  - тензор деформаций). Гамильтониан  $H^{(ex)}(\hat{\epsilon})$ , определяющий состояния кулоновских экситонов, которые необходимы для вычисления указанных оптических характеристик имеет вид:

$$\begin{aligned}
 H^{(ex)}(\hat{\epsilon}) &= \\
 &= \sum_{\vec{n}\alpha f} E_{f\alpha}(\hat{\epsilon}) B_{\vec{n}\alpha f}^+ B_{\vec{n}\alpha f} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\alpha f, \vec{m}\beta g} V_{\vec{n}\alpha \vec{m}\beta}^{fg}(\hat{\epsilon}) (B_{\vec{n}\alpha f}^+ + B_{\vec{n}\alpha f}) (B_{\vec{m}\beta g}^+ + B_{\vec{m}\beta g}) = \\
 &= \sum_{\vec{k}} H^{(ex)}(\hat{\epsilon}, \vec{k})
 \end{aligned} \tag{19}$$



Здесь  $V_{\bar{n}\alpha\bar{m}\beta}^{fg}(\hat{\varepsilon}) = \langle \varphi_{\bar{n}\alpha}^f(\hat{\varepsilon}) \varphi_{\bar{m}\beta}^g(\hat{\varepsilon}) | \hat{V}_{\bar{n}\alpha\bar{m}\beta}(\hat{\varepsilon}) | \varphi_{\bar{n}\alpha}^0(\hat{\varepsilon}) \varphi_{\bar{m}\beta}^g(\hat{\varepsilon}) \rangle$ , где  $V_{\bar{n}\alpha\bar{m}\beta}(\varepsilon)$  - зависящий от тензора  $\hat{\varepsilon}$  деформаций оператор кулоновского взаимодействия молекул  $\bar{n}\alpha$  и  $\bar{m}\beta$ ,  $\varphi_{\bar{n}\alpha}^f(\hat{\varepsilon})$  и  $\varepsilon_{f\alpha}(\hat{\varepsilon})$  - соответственно волновые функции и собственные значения энергии молекул в кристаллическом поле;  $E_{f\alpha}(\hat{\varepsilon}) = \varepsilon_{f\alpha}(\hat{\varepsilon}) - \varepsilon_{0\alpha}(\hat{\varepsilon})$ .  $B_{\bar{n}\alpha f}^+$ ,  $B_{\bar{n}\alpha f}$  - Бозе-операторы рождения и уничтожения молекулярных возбуждений. Гамильтониан (19) определяет состояния кулоновских экситонов, необходимые для вычисления поперечного тензора диэлектрической проницаемости  $\hat{\chi}^\perp(\hat{\varepsilon}, \vec{k}, \omega)$ , а с его помощью и всех основных оптических характеристик, включая искомую вращательную способность деформированной среды. Так как  $H^{(ex)}(\hat{\varepsilon} \neq 0)$  и  $H^{(ex)}(\hat{\varepsilon} = 0)$  по форме совпадают (в силу сохранения трансляционной инвариантности кристалла при однородных деформациях), то тензор  $\hat{\chi}^\perp(\hat{\varepsilon}, \vec{k}, \omega)$  можно найти путем замены:  $\varphi_{\bar{n}\alpha}^f \rightarrow \varphi_{\bar{n}\alpha}^f(\hat{\varepsilon})$ ,  $\varepsilon_{\bar{n}\alpha}^f \rightarrow \varepsilon_{\bar{n}\alpha}^f(\hat{\varepsilon})$ ,  $v_0 \rightarrow v_0(1 + Sp\hat{\varepsilon})$ , где  $v_0$  - объем элементарной ячейки свободного кристалла. В результате выполнения этой простой процедуры для зависящей от  $\vec{k}$  части  $\hat{\chi}^\perp(\hat{\varepsilon}, \vec{k}, \omega)$  получено выражение для вращательной способности

$$\rho(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega) = -\frac{i\omega^2}{4c^2} \left[ \partial \chi_{il}^\perp(\hat{\varepsilon}, \vec{k}, \omega) / \partial \vec{k} \right]_{\vec{k}=0} e_{ilt} S^t \quad (\text{по дважды повторяющимся декартовым}$$

индексам подразумевается суммирование,  $e_{ilt}$  - полностью антисимметричный единичный тензор). В общем виде зависимость вращательной способности от  $\hat{\varepsilon}$  не представима в аналитическом виде и формально вопрос о нахождении этой зависимости для произвольных деформаций может решаться в каждом конкретном случае с учетом специфики рассматриваемой системы с использованием наиболее подходящей аппроксимации (с подгоночными параметрами  $V_{\bar{n}\alpha\bar{m}\beta}^{fg}(\hat{\varepsilon})$ ). В то же время, очевидно, что при достаточно малых деформациях кристалла (какими являются упругие деформации, не приводящие к необратимым изменениям его структуры)  $\rho(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega)$  с достаточно хорошей точностью может быть записана в линейном по  $\hat{\varepsilon}$  приближении при использовании стандартных формул теории возмущений.

Полученные в разделе результаты позволили провести детальный анализ частотной дисперсии вращательной способности всех возможных типов однородных деформаций. При достаточно малых упругих деформациях кристалла приближенное микроскопическое выражение для вращательной способности  $\rho(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega) \cong \rho^{(0)}(\vec{s}, \omega) + \rho^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega)$  имеет универсальный вид для каждого класса кристаллических систем с одинаковым числом подрешеток. При этом  $\rho^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega)$  представляется суммой слагаемых, математическая структура каждого из которых отражает соответствующий механизм индуцированной гиротропии. Для систем с примитивной решеткой функция  $\rho^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega)$  записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega) &= -Sp\hat{\varepsilon}\rho^{(0)}(\vec{s}, \omega) + \rho_M^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega) + \rho_C^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega) \\ &\equiv \frac{\omega^2}{2c} s_i s_l g_{ilpt}^\perp(\vec{s}, \omega) \varepsilon_{pt} \end{aligned} \quad (20)$$

Первое слагаемое в (20) обусловлено изменением постоянных решетки при деформации кристалла и для оптически неактивных свободных сред оно равно нулю для  $\vec{s}$ , направленном вдоль оптической оси. Функция  $\rho_M^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega)$  связана с разложением по  $\hat{\varepsilon}$  молекулярных характеристик, она определяется, в основном, гиротропией молекул. Третье слагаемое в (20) обусловлено зависимостью от  $\hat{\varepsilon}$  экситонных характеристик - в модели ориентированного газа оно также равно нулю.  $g_{ilpt}^\perp(\vec{s}, \omega)$  - псевдотензор четвертого ранга. Более детальный анализ  $\rho^{(1)}(\hat{\varepsilon}, \vec{s}, \omega)$  требует конкретизации характера внешних воздействий. Для систем, подверженных одноосному (вдоль единичного вектора  $\vec{q}$ ) сжатию, тензор деформации имеет вид  $\varepsilon_{il} = \sigma s_{ilpt} q_p q_t$ , где  $\sigma$  - напряжение,  $s_{ilpt}$  - тензор коэффициентов упругой податливости. Для систем, подверженных сдвиговым напряжениям тензор деформации имеет вид  $\varepsilon_{il} = \sigma s_{ilrt} (p_r q_t + q_r p_t)$ ,  $\vec{p}, \vec{q}$  - единичные векторы, соответствующие касательным и нормальным напряжениям.

В работе выполнен симметричный анализ оптической активности, вызванной одноосной деформацией и сдвиговыми напряжениями молекулярных кристаллов с симметрией  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$ .

## ВЫВОДЫ

В работе обобщены результаты теоретических исследований взаимодействия несовершенных кристаллических систем с электромагнитным излучением и легкими заряженными частицами. Установленные в рамках диссертационной работы закономерности и взаимосвязи между исследуемыми величинами расширяют представления о природе и механизмах изучаемых процессов, способствуют возможностям их практического использования. В целом основные результаты диссертации позволяют утверждать, что:

1. Обобщение метода действующего поля на двумерно-периодические структуры позволило рассчитать поляризацию атомов в поверхностном слое, получить законы дисперсии «объемных» светоэкситонов в ограниченных атомарных криокристаллах с учетом симметрии поверхностных граней и условия наблюдения ДСВ в полубесконечных кристаллах кубической симметрии. В рамках феноменологического описания взаимодействия электромагнитного поля с сверхтонким кристаллическим слоем, толщина которого - порядка радиуса электронного возбуждения в слое, получены три типа локализованных в слое мод, и законы дисперсии, описывающие соответственно: продольный поляритон и два поперечных поляритона (один ориентирован вдоль нормали к слою, а другой – в плоскости слоя).
2. Установлено дисперсионное соотношение, характеризующее метастабильные экситонные поляритоны в валентных полупроводниках с алмазоподобной структурой, найдена спектральная плотность интенсивности излучения, генерируемого распадом экситонных поляритонов, порожденных в алмазоподобном кристалле движущейся в нем  $\beta$ -частицей.
3. Выполнено численное моделирование экситонных спектров ориентационно-разупорядоченных молекулярных кристаллов и исследована концентрационной зависимости экситонного спектра двухподрешеточных примесных молекулярных кристаллов.
4. Впервые для бинарных молекулярных кристаллов с изотопическими примесями замещения проведен расчет поляритонных энергий, исследованы их дисперсия и концентрационная зависимость. Показано, что с увеличением концентрации примесных молекул предельные

значения частот ( $k=0$ ) высокочастотных поляритонных ветвей смещаются в сторону больших частот, а величина области «бутылочного горлышка» определяется неколлинеарностью дипольных моментов молекул матрицы и примеси.

5. Исследован неидеальный слоистый композитный материал в модели неидеальной сверхрешетки – «одномерного кристалла» с хаотически внедренными примесными слоями. Изучены особенности концентрационной зависимости величины нижней энергетической щели и показателя преломления такой слоистой системы. Показано, что внедрением в изучаемую сверхрешетку определенных примесей-слоев переменного состава и/или толщины можно добиться изменения ее энергетической структуры в достаточно широких пределах.

6. Показано, что радиационное воздействие на  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ -объекты вызывает возрастание индекса  $x$  дефицита кислорода и ведет к смягчению  $A_g$ -моды ( $500 \text{ см}^{-1}$ ) в спектре

комбинационного рассеяния, оценена скорость введения вакансий кислорода в подрешетку  $YBaCuO$ -монокристалла. В приближении Плачека получено выражение для дифференциального сечения комбинационного рассеяния света этим кристаллом. Установлена зависимость полученной дифференциальной характеристики комбинационного рассеяния света на дипольно активных колебаниях  $O(4)$  при наличии вакансий в мостиках  $O(4)$ - $Cu(1)$ - $O(4)$  в тонком слое  $YBaCuO$ -кристалла от концентрации кислородных вакансий, оценена величина отличия угла рассеяния светового потока (на фононных поляритонах) от угла отражения.

7. Предложена модель влияния поверхности на оптические свойства  $YBaCuO$ -монокристалла, базирующаяся на учете смешивания четных (КР-активных)  $g$ - и нечетных (ИК-активных)  $u$ -мод в тонком приповерхностном слое. Оценена величина интенсивности сигналов комбинационного рассеяния (спонтанного и вынужденного) и второй оптической гармоники. Полученная интенсивность светового сигнала, рассеянного локализованными в тонком слое фононными поляритонами, значительно меньше интенсивности света, рассеянного объемными фонами кристалла, поскольку область  $YBaCuO$ -кристалла, в которой происходит смешивание фононных мод противоположной четности пропорциональна толщине приповерхностного слоя. Исследовано резонансное усиление эффекта рассеяния и генерации второй гармоники.

8. Выполнено численное моделирование генерации в тонком кристаллическом слое поляритонов, порожденных полем движущейся в нем  $\beta$ -частицы. Получены выражения для спектральной плотности интенсивности излучения «высвечивающихся» поляритонов для  $Si$ ,  $GaAs$  и алмазной нанопленки, а также  $YBaCuO$ -слоя. Показано, что интенсивность спектральной плотности излучения продольных поляритонов немонотонно зависит от угла рассеяния  $\theta$  и слабо зависит от толщины слоя для  $\beta$ -частицы, движущейся со сравнительно малой скоростью ( $v=0,3c$ ). С ростом скорости  $\beta$ -частицы спектральная плотность интенсивности излучения резко возрастает при приближении угла  $\theta$  к значению  $arcctg(c/v)$ . Для поперечных светоекситонов плотность интенсивности излучения квазидвумерного кристалла убывает с расстоянием (в плоскости слоя), как  $1/r$ .

9. В рамках экситонной модели впервые получено общее выражение для вращательной способности однородно деформированных внешним механическим напряжением молекулярных кристаллов с примитивной решеткой, выявлены особенности дисперсии этой характеристики оптической активности кристаллов для одноосной и сдвиговой деформаций. Проведен анализ частотной дисперсии вращательной способности однородно деформированных молекулярных кристаллических систем с симметрией  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$ .

## СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Румянцев В.В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами. – Донецк: Норд-Пресс, 2006. – 347с.
2. Румянцев В.В. Оптическая анизотропия и добавочные световые волны в кристаллах структуры алмаза // УФЖ. – 1989. – Т.34, № 9. – С. 1316-1321.
3. Румянцев В.В. Дисперсия экситонных поляритонов в атомарных криокристаллах // УФЖ. – 1990. – Т.35, №12. – С. 1783-1791
4. Румянцев В.В., Шуняков В.Т. Распространение электромагнитных возбуждений в слоистых кристаллических средах // Кристаллография. – 1991. – Т.36, вып. 3. – С. 535-540.
5. Румянцев В.В., Шуняков В.Т. Распространение электромагнитного возбуждения сверхтонком кристаллическом слое // Кристаллография. – 1991. – Т.36, вып. 6. – С. 1342-1345.
6. Румянцев В.В. Оптическая анизотропия атомарных криокристаллов в окрестности экситонного перехода. // Кристаллография. – 1991. – Т.36, вып. 6. – С. 1346-1351.
7. Румянцев В.В., Шуняков В.Т. Генерация электромагнитных мод, локализованных в сверхтонком кристаллическом слое // Электронная техника. Серия: материалы. – 1991. - N 3 (257). – С. 9-12.
8. Rumyantsev V.V., Shunyakov V.T. Exciton-polariton dispersion in ultrathin atomic cryocrystals // Physica B. – 1992. – V.176, N 1-2. – P. 156-158.
9. Румянцев В.В., Шуняков В.Т. Рассеяние света в сверхтонкой кристаллической пленке типа YBaCuO с кислородными вакансиями. // Сверхпроводимость: физика, химия, техника. – 1992. – Т.5, №5. – С. 829-835.
10. Румянцев В.В., Шуняков В.Т. Генерация второй оптической гармоники в приповерхностном слое соединений типа YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> // Известия РАН. Сер. Физическая. – 1992. - Т.56, N 8. – С. 178-181.
11. Румянцев В.В. Рассеяние света в приповерхностном слое соединений 1:2:3 // УФЖ. – 1995. – Т.40, №7. – С. 745-747.
12. Румянцев В.В., Штаерман Э.Я. Распространение света в кристалле со структурой типа 1:2:3 // ФТВД. – 1996. – Т.6, №3. – С. 74-80.
13. Rumyantsev V.V., Yampolskii S.V. Spectroscopy of the apex sublattice in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> single crystals. // Spectroscopy of Superconductivity Materials / ed. E.Faulques, Washington: ACS, 1999. – P.131-138.
14. Румянцев В.В., Федоров С.А. Распространение светоекситонов в смешанных молекулярных кристаллах. // ФТВД. – 2001. - Т.11, № 4. – С.112-117.
15. Румянцев В.В. Генерация поляритонов в алмазоподобном полупроводнике движущейся β-частицей. // Вісник Донецького університету. Сер. А. Природничі науки. – 2002 - №2. – С. 295-298.
16. Румянцев В.В., Федоров С.А. Гиротропия молекулярных кристаллов в условиях одноосной деформации // Вісник Донецького університету. Сер. А. Природничі науки. – 2003 – № 1. – С.241-246.
17. Rumyantsev V.V. Study of YBaCuO quasy-two-dimensional crystalline structure by light scattering // Physica E. – 2004. – V.23, N 3-4. – P.487-490.
18. Румянцев В.В., Пашкевич Ю.Г. Рассеяние света подрешеткой апикального кислорода в тонком слое YBaCuO-кристалла // ЖТФ. – 2004. – Т.74, вып.10. – С.80-83.
19. Федоров С.А., Румянцев В.В. Численное моделирование экситонных спектров ориентационно-разупорядоченных двухподрешеточных молекулярных кристаллов // Математичне моделювання. – 2004 – № 1(11). – С.64-69.
20. Пашкевич Ю.Г., Федоров С.А., Румянцев В.В., Белоусова Е.С. Метод оператора проектирования в теории многоподрешеточных неупорядоченных систем с недиагональным

- беспорядком // Вісник Донецького університету. Сер. А. Природничі науки. – 2004 – №.1, ч. 2. – С.313-323.
21. Румянцев В.В., Федоров С.А. Индуцированная внешним механическим напряжением гиротропия молекулярных кристаллов. // ФТВД. – 2005. – Т.15, № 2. – С.12-20.
  22. Румянцев В.В., Журавлев А.В., Штаерман Э.Я. Моделирование возбуждения экситонных поляритонов в тонком слое YBaCuO-кристалла полем движущейся в нем  $\beta$ -частицы // Математичне моделювання – 2005. – N 1 (13). – С. 38-43.
  23. Romyantsev V.V. Exciton polariton generation by the field of beta-particle moving into ultrathin diamond-like layer // C.R. Physique. – 2006. – V. 7, N 2. – P. 277-285.
  24. Пашкевич Ю.Г., Румянцев В.В., Федоров С.А., Поляритонные возбуждения в неидеальных топологически упорядоченных жидкокристаллических сверхрешетках // Жидкие кристаллы. – 2006. - Вып. 1-2 (15-16). - С. 7-14.
  25. Румянцев В.В., Федоров С.А. Трансформация поляритонного спектра неидеальных топологически упорядоченных сверхрешеток // Оптика и спектроскопия. – 2007. – Т. 102, №1. – С. 75-79.
  26. Румянцев В.В., Федоров С.А. Поляритонный спектр неидеальной лиотропной ламеллярной системы // Жидкие кристаллы. – 2007. - Вып. 1. - С. 67-74.

### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Лорентц Г.А. Теория электронов. – М: Гостехиздат, 1956. - 472с.
2. Гросс Е.Ф., Каррыев Н.А. Поглощение света кристаллом закиси меди в инфракрасной и видимой части спектра // ДАН СССР. – 1952. – Т.84, №2. – С. 261-266.
3. Пекар С.И. Кристаллооптика и добавочные световые волны. – К.: Наукова думка, 1982. – 296с.
4. Агранович В.М., Гинзбург В.Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. – М.: Наука, 1979. – 432с.
5. Покатилов Е.П., Фомин В.М., Берил С.И. Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных системах и сверхрешетках. – Кишинев: Штиинца, 1990. - 278с..
6. S.Nebel (Ed.) Thin-Film Diamond. - New York: Academic Press, 2004. - 400p.
7. Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетервов А.П. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. – М.: Наука, 1989. - 288с.
8. Дмитрук Н.Л., Литовченко В.Г., Стрижевский В.Л. Поверхностные поляритоны в полупроводниках и диэлектриках. – К.: Наукова думка, 1989. – 376с.
9. Волноводная оптоэлектроника: Пер. с англ. / Под ред. Т. Тамира. – М.: Мир, 1991. – 575с.
10. Гуртов В.А. Твердотельная электроника. – М.: Техносфера, 2005. – 408с.
11. Jinfeng Jin, Qi-Kun Xue. Spontaneous Assembly of Perfectly Ordered Identical-Size Nanocluster Arrays. // Pico. The Omicron Nanotechnology Newsletter. – 2002. – V.7, N2. – P. 6-7.
12. Dianoux R., H. Smilde H. J., Marchi F. et all. Kinetic roughening of charge spreading in a two-dimensional silicon nanocrystal network detected by electrostatic force microscopy. // Phys. Rev. B. – 2005. – V.71. – P.125303.
13. Wang Y. L., Gao H.-J., Guo H. M. Bonding Configurations and Collective Patterns of Ge Atoms Adsorbed on Si(111)-(7×7). // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V.94. – P. 106101.
14. Valentini L., Cantalini C., Armentano I. et all. Highly sensitive and selective sensors based on carbon nanotubes thin films for molecular detection. // Diamond and Related Materials. – 2005. – V.13, N 4-8. – P.1301-1305.

15. Sellers R., Semond F., Zamfirescu M. et al. From evidence of strong light-matter coupling to polariton emission in GaN microcavities // *Physica status solidi (b)*. – 2007. – V.244, N6. – P.1882-1886.
16. Merle d'Aubigne Y., Wasiela A., Mariette H., Dietsch T. Polariton effects in multiple-quantum-well structures of  $CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe$ . // *Phys. Rev. B*. – 1996. – V.54, N19. – P. 14003-14011.
17. Liu H., Zhu S. N., Dong Z. G., et al. Coupling of electromagnetic waves and superlattice vibrations in a piezomagnetic superlattice: Creation of a polariton through the piezomagnetic effect. // *Phys. Rev. B*. – 2005. – V.71. – P. 125106.
18. Arnoldbik W. M., Tomozeiu N., van Hattum E. D. et al. High-energy ion-beam-induced phase separation in  $SiO_x$  films. // *Phys. Rev. B*. – 2005. – V. 71. – P. 125329.
19. Newton R.L., Davidson J.L. Lance M. J. Raman microscopic characterization of proton-irradiated polycrystalline diamond films. // *Diamond and Related Materials*. – 2005. – V.14, N 2. – P. 173-178.
20. Lourtioz J.-M., Benisty H., Berger V., Gerard J.-M., Maystre D., Tcheltnokov A. *Photonic Crystals: Towards Nanoscale Photonic Devices* - N.Y.: Springer, 2005. – 426p.
21. Ford A.d., Morris S.M., Coles H.J. Photonics and lasing in liquid crystals // *Materials Today*. – 2006. – V.9, N 7-8. – P.36-42.
22. Герасимов В.П., Гуняков В.А., Мысливец С.А. и др. Оптическое пропускание одномерного фотонного кристалла при наклонном падении излучения // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. – 2007. – Вып. 1 (19). – С. 22-29.
23. Vetrov S.Ya., Timofeev I.V., Shabanov A.V. Influence of cubic nonlinearity on laser radiation transmission in a photonic crystal with spatially modified media properties // *Physica status solidi (RRL)*. – 2007. - V. 4, N 3. - P.92-94.
24. Ruda H.E., Polanyi J. C., Yang J.S.Y., Wu Z. et al. Developing 1D nanostructure arrays for future nanophotonics // *Nanoscale research letters*. – 2006. - V. 1, N2. – P. 99-119.
25. Smajic J., Hafner C., Xudong C., Vahidieck R. Numerical optimization of photonic crystal structures // *J. of computational and theoretical nanoscience*. – 2007. – V.4, N 3. – P.675-685.
26. Nau D., Schonhardt A., Chigrin D.N. et al. Polariton bandstructure of disordered metallic photonic crystal slabs // *Physica status solidi (b)*. – 2007. – V.244, 4. – P.1262-1269.
27. *Nanomaterials. Research Towards Applications* / Hideo Hosono – Ed. – Elsevier Science, 2006. – 474p.
28. *Нанотехнологии в электронике* / Под ред. Ю.А. Чаплыгина. – М.: Техносфера, 2005. – 446с.
29. Бродин М.С., Мясников Э.Н., Марисова С.В. *Поляритоны в кристаллооптике*. К.: Наук. думка, 1984. – 200 с.
30. Ярив А., Юх П. *Оптические волны в кристаллах*. – М.: Мир, 1987. – 616с.
31. C.Nebel, J.Ristein (Eds.) *Thin-Film Diamond I*. – New York: Academic Press, 2003. – 400p.
32. C.Nebel (ed.), *Thin Film Diamond II*, Academic Press. - New York, 2004. – 400p.
33. Займан Дж. *Модели беспорядка*. - М.: Мир, 1982. - 592 с.
34. Лось В. Ф. Метод проекционного оператора в теории неупорядоченных систем // *ТМФ*. - 1987. - Т. 73, N1. - С. 85-102.
35. Коноплева Р.Ф., Тележкин В.А., Румянцев В.В. и др. Интерпретация ИК и КР спектров облученных ВТСП на основе неэмпирических расчетов точечных радиационных дефектов (Отчет по х/д 39-91 от 02.01.91). – Донецк: ЦНТУ Сигма, 1991. – 33с.
36. Гинзберг Д.М. Введение, история открытия и обзор свойств высокотемпературных сверхпроводников // *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*. Под ред. Д.М. Гинзберга - М.: Мир, 1990. - С.8-38.

37. Лейман К. Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. М.: Атомиздат, 1979, 296с.
38. Агранович В.М. Теория экситонов. – М.: Наука. 1968. –382с.

## АНОТАЦІЇ

**Румянцев В.В. Взаємодія електромагнітного випромінювання та легких частинок із неідеальними кристалічними середовищами.** – Рукопис. Дисертація на здобуття вченого ступеня доктора фізико-математичних наук за фахом 01.04.07 –Фізика твердого тіла. – Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України, 2007, Донецьк, Україна.

В дисертації представлено результати систематичних теоретичних досліджень взаємодії неідеальних кристалічних середовищ з електромагнітним випромінюванням і легкими зарядженими частинками, чисельного моделювання екситонних спектрів молекулярних кристалів (орієнтаційно-разупорядкованих та з ізотопічними домішками заміщення). Узагальнення методу діючого поля на двовимірні-періодичні структури дозволило одержати закони дисперсії «об'ємних» світлоекситонів з урахуванням симетрії поверхневих граней. Установлено дисперсійне співвідношення, що характеризує метастабільні екситонні поляритони в валентних напівпровідниках з алмазоподібною структурою, знайдено спектральну щільність інтенсивності випромінювання, що генерується розпадом екситонних поляритонів, які породжені в алмазоподібному кристалі  $\beta$ -часткою, що рухається в ньому. Вивчено особливості концентраційної залежності величини найнижчої енергетичної щільності й показника заломлення неідеального шаруватого композитного матеріалу з довільним числом хаотично впроваджених домішкових шарів змінної сполуки й/або товщини. Установлено залежність отриманої диференціальної характеристики комбінаційного розсіювання світла на дипольно активних коливаннях кисню O(4) при наявності вакансій у містках O(4)-Cu(1)-O(4) у тонкому шарі YBaCuO-кристала від концентрації кисневих вакансій. Запропоновано модель впливу поверхні на оптичні властивості YBaCuO-монокристалу, що базується на врахуванні змішування парних (КР-активних)  $g$ - і непарних (ІЧ-активних)  $u$ -мод у тонкому приповерхневому шарі. Оцінено величину інтенсивності сигналів комбінаційного розсіювання (спонтанного й змушеного) та другої оптичної гармоніки. У рамках екситонної моделі вперше отримано загальний вираз та особливості частотної дисперсії обертальної здатності однорідно деформованих зовнішньою механічною напругою молекулярних кристалів із примітивною решіткою із симетрією  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$ .

Ключові слова: просторова дисперсія, екситонні поляритони, наночар, фотонний кристал, неідеальна супергратка, індукована оптична активність.

**Румянцев В.В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами.** – Рукопись. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика твердого тела. – Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины, 2007, Донецк, Украина.

В диссертации представлены результаты систематических теоретических исследований взаимодействия несовершенных кристаллических сред (кристаллов с вакансиями и дефектами изотопического замещения, квазидвумерных слоёв и неидеальных сверхрешеток) с электромагнитным излучением и легкими заряженными частицами (быстрыми  $\beta$ -частицами). Проведено численное моделирование экситонных спектров неидеальных молекулярных

кристаллов и поиск условий индуцирования оптической активности молекулярных кристаллов в условиях однородных деформаций. В работе изложены оригинальные результаты микроскопической теории пространственной дисперсии света в атомарных кристаллах (в том числе с учетом симметрии поверхности) и алмазоподобных структурах в области частот экситонных переходов. Исследована генерация экситонных поляритонов полем движущейся в кристаллических системах бета-частицей. Проведенное исследование дисперсии электронных возбуждений в алмазоподобных полупроводниках, получение поляритонного спектра и изучение генерации светоекситонов в них полем заряженной частицы могут оказаться полезными для установления механизмов радиационного дефектообразования в валентных полупроводниках и интерпретации соответствующих экспериментов.

Изучен энергетический спектр ориентационно-разупорядоченных и смешанных молекулярных кристаллов. Выполнен численный расчет концентрационной зависимости экситонного спектра вышеупомянутых кристаллов, получено дисперсионное соотношение для экситонных поляритонов, отражающее специфику смешанных кристаллов. Полученные в работе поверхности концентрационной зависимости экситонных энергий двухподрешеточного ориентационно-разупорядоченного молекулярного кристалла указывают на возможность значительных изменений физических характеристик рассматриваемых систем, связанных с переориентацией молекул кристалла. Это обуславливает актуальность учета эффектов разупорядочения при экспериментальных исследованиях комбинационного рассеяния света, инфракрасного поглощения, естественной оптической активности и целого ряда других оптических явлений в рассматриваемых средах.

Исследовано рассеяние света квазидвумерным кристаллом. Модель такой низкоразмерной структуры, как моноатомный слой, применена к описанию распространения света в слоистой кристаллической среде, представленной набором тонких слоев. Разработан обобщенный феноменологический подход, в рамках которого осуществлено феноменологическое описание взаимодействия электромагнитного поля со сверхтонким кристаллическим слоем (толщина которого - порядка радиуса электронного возбуждения в слое) без конкретизации микроскопической модели вещества. Установлена связь между слоевыми и атомными функциями отклика и характерными частотами. Получены три типа локализованных в слое мод, и законы дисперсии, описывающие соответственно: продольный поляритон и два поперечных поляритона (один ориентирован вдоль нормали к слою, а другой – в плоскости слоя). В случае сверхтонкого кристаллического слоя исследовано внутрикристаллическое поле. Оказалось, что в сверхтонком слое кристалла могут распространяться две волны с одной и той же частотой и поляризацией, нормальной к поверхности, но с разными длинами волн. Отличие полученной дополнительной электромагнитной волны от ДСВ Пекара в том, что она определяется спецификой именно сверхтонких кристаллов и связана с формой макрополя в этой задаче, а ДСВ Пекара обусловлены нелокальностью связи между поляризацией и полем. Найдена матрица трансформации для монослоя и системы монослоев, показано, как связаны характеристики  $\hat{\epsilon}$ ,  $\hat{\mu}$  одноосного кристалла с поляризуемостью слоя. Из проведенного анализа следует, что отличие полученных оптических характеристик непроводящих кристаллов от соответствующих объемных характеристик станет заметным лишь в том случае, когда доля периферийных слоев кристалла окажется сравнимой с общим числом слоев сверхтонкого кристалла.

Рассмотрена модель фотонной кристаллической сверхрешетки как системы макроскопически однородных слоев с хаотически внедренными инородными (по отношению к идеальной сверхрешетке) слоями с переменным составом и/или толщиной. Полученный в приближении виртуального кристалла поляритонный спектр такой неидеальной сверхрешетки с произвольным числом слоев в элементарной ячейке конкретизирован для алмазно-кремниевой, кремний-жидкокристаллической систем (в том числе с ферронематическими примесными слоями). Проанализированы особенности зависимости ширины запрещенной зоны и показателя преломления от концентрации примесных слоев. Проведенное исследование указывает на



возможность значительных изменений оптических свойств кристаллической сверхрешетки, которые обусловлены трансформацией ее поляритонного спектра в результате присутствия инородных слоев. Последнее расширяет возможности моделирования композитных материалов. Представлены результаты изучения рассеяния электромагнитного излучения тонким кристаллическим слоем, в частности, приповерхностным слоем соединений типа  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  с кислородными вакансиями в мостиках  $\text{O}(4)\text{-Cu}(1)\text{-O}(4)$ , установлена зависимость дифференциальной характеристики рассеяния от концентрации кислородных вакансий, оценена величина отклонения угла рассеяния светового потока (на фононных поляритонах) от угла отражения. Предложена модель влияния поверхности на оптические свойства  $\text{YBaCuO}$ -монокристалла, базирующаяся на учете смешивания четных (КР-активных)  $g$ - и нечетных (ИК-активных)  $u$ -мод в тонком приповерхностном слое, оценена величина интенсивности сигналов комбинационного рассеяния (спонтанного и вынужденного) и второй оптической гармоники.

Выполнено численное моделирование генерации в тонком кристаллическом слое поляритонов, порожденных полем движущейся в нем  $\beta$ -частицы, полученные выражения для спектральной плотности интенсивности излучения «высвечивающихся» поляритонов конкретизированы для алмазоподобной нанопленки и  $\text{YBaCuO}$ -слоя.

В рамках экситонной модели получено общее выражение и выявлены особенности частотной дисперсии вращательной способности однородно деформированных внешним механическим напряжением молекулярных кристаллов с примитивной решеткой. Вращательная способность представлена суммой слагаемых, математическая структура каждого из которых отражает соответствующий механизм индуцированной гиротропии (первое слагаемое обусловлено изменением постоянных решетки при деформации кристалла, второе - определяется, в основном, гиротропией молекул, а третье - обусловлено зависимостью экситонных характеристик от тензора деформаций). Последнее позволило свести симметричный анализ частотной дисперсии вращательной способности однородно деформированных молекулярных кристаллических систем с симметрией  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$  к анализу каждого из полученных в работе слагаемых.

Ключевые слова: пространственная дисперсия, экситонные поляритоны, нанослой, фотонный кристалл, неидеальная сверхрешетка, индуцированная оптическая активность.

**Rumyantsev V.V. Interaction of the electromagnetic radiation and light particles with imperfect crystalline media.** – Manuscript. Thesis for a Doctor's degree in physics and mathematics, 01.04.07 speciality – Solid State Physics. A.A. Galkin Donetsk Physical Technical Institute of the National Academy of Sciences of Ukraine, Donetsk, 2007.

In the thesis the results of systematic studies of the interaction of electromagnetic radiation and light charged particles ( $\beta$ -particles) with imperfect crystalline media are presented. Dispersion of polaritons in bulk cryocrystals and diamond-like structures is investigated. Dispersion laws for bulk light-excitons in semi-infinite atomic cryocrystals are studied in framework of the local field method with account of crystal surface structure. Effect associated with response of a quasi-two-dimensional diamond-like layer to the moving electron field is considered too. Beta-particle field induces exciton modes to arise in the layer. Coupled with the beta-particle electromagnetic modes they generate polaritons. Spectral density of the radiation intensity of the flashed polaritons has been estimated as a function of the layer thickness as well as of the scattering angle and the beta-particle velocity. Excitonic spectra of molecular crystals with defects such as two-sub-lattice orientationally disordered crystals obtained by the way of the numerical calculation. In the thesis a photonic crystalline superlattice is modeled as a set of macroscopically homogeneous layers with randomly included extrinsic (with respect to the ideal superlattice) layers of a variable thickness and composition. The

polariton spectrum of a non-ideal superlattice with an arbitrary number of layers per elementary cell and dependence of the band gap width upon concentration of admixture layers and refractive index peculiarities is analyzed. We have investigated light scattering by c-oscillations of the apical oxygen O(4) ion, which has a specific role since the superconductive pairing mechanism is due to the fluctuation of O(4) positions in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ -type crystals. When oxygen vacancies are in the O(4)-Cu(1)-O(4) bridges (or another distortions of lattice symmetry) the c-vibrations of O(4) result in initiation of a dipole moment and at the same time they are associated with the Cu(1)-O(4) bond deformation. Thus Raman scattering by dipole-active O(4)-oscillations is caused. Calculations of intensities of both Raman light scattering (spontaneous and stimulated) and second optical harmonic generated by the surface layers of a  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  single crystal are presented. Features of characteristics of normal electromagnetic waves in a molecular crystal, caused by an external mechanical pressure are investigated. In framework of an exciton model microscopic expression for dielectric permeability tensor of the homogeneously deformed crystals and rotational ability of the crystals (having  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $C_{3h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$  symmetries) is received.

Key words: spatial dispersion, exciton polariton, nanolayer, photonic crystal, imperfect superlattice, induced gyrotropy.