

ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ



ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΒΑΝΤΙΚΩΝ
ΤΕΛΕΙΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ANNAΣ ΖΩΡΑ

ΑΘΗΝΑ 2007

Στον Γιάννη, στην Αντωνία στον Σπύρο.

Αντί Προλόγου

Το παρόν διδακτορικό εκπονήθηκε στον Τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του Τμήματος Φυσικής του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών υπό την επίβλεψη των κ. Γ. Π. Τριμπέρη, Αναπληρωτή Καθηγητή του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών και κ. Κ. Σιμσερίδη, Επίκουρο Καθηγητή ΠΔ 407 του Τμήματος Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Πατρών.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ στον κ. Γ. Τριμπέρη, τόσο για την ανάθεση του θέματος όσο και την καθοδήγησή του σε όλη την διάρκεια της διατριβής μου. Χωρίς την υποστήριξή του και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε- μετά από δύο χρόνια απουσίας μου από τον χώρο- η παρούσα διατριβή δεν θα είχε καν αρχίσει.

Ευχαριστώ θερμά τον κ. Κ. Σιμσερίδη για την πολύτιμη βοήθειά του όλο αυτό το διάστημα.

Ευχαριστώ πολύ τα δύο άλλα μέλη της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής, τους Αναπληρωτές Καθηγητές του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών κ. Ν. Στεφάνου και κ. Γ. Παπαϊωάννου για το ενδιαφέρον τους στην διάρκεια της διατριβής μου.

Ευχαριστώ πολύ την Δρ. Μαρία Τσέτσερη για πολλές εποικοδομητικές συζητήσεις και συμβουλές. Ευχαριστώ επίσης την Δρ. Μαργαρίτα Τσαουσιδου, για την σημαντική βοήθειά της σε κάποιο σημείο της παρούσας διατριβής.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ στην μητέρα και την αδερφή μου που με βοήθησαν όλο αυτό το διάστημα. Χωρίς αυτές δεν θα τα είχα καταφέρει.

Ευχαριστώ τους γονείς του συζύγου μου και ιδιαίτερα τον ίδιο για την ενθάρρυνσή του, την υποστήριξή του και την υπομονή του όλο αυτό το διάστημα.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους συναδέλφους μεταπτυχιακούς φοιτητές κ. Ν. Φυτά, κ. Χ. Τσερκέζη και κ. Γ. Γκαντζούνη και όλο το προσωπικό του τομέα.

Η παρούσα διδακτορική διατριβή εκπονήθηκε στα πλαίσια του Ερευνητικού Προγράμματος ΗΡΑΚΛΕΙΤΟΣ, “Υποτροφίες Έρευνας με Προτεραιότητα στη Βασική Έρευνα” (ΚΑ: 70/3/7227). Το έργο συγχρηματοδοτήθηκε στα πλαίσια του Ε-ΠΕΑΕΚ από το Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο και Εθνικούς Πόρους.

A. Z.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Σκοπός της διατριβής	1
1.1.1	Συνέδρια και δημοσιεύσεις	7
1.2	Ιστορική αναδρομή	8
2	Μέθοδοι κατασκευής και εφαρμογές κβαντικών τελειών	15
2.1	Μέθοδοι κατασκευής	15
2.1.1	Τεχνικές λιθογραφίας	15
2.1.2	Διαμορφούμενο ηλεκτρικό πεδίο	16
2.1.3	Αντιδιάχυση μεταξύ του φραγμού και του κβαντικού πηγαδιού	18
2.1.4	Επιλεκτική ανάπτυξη	18
2.1.5	Αυτοοργάνωση κβαντικών τελειών	19
2.2	Εφαρμογές	22
2.2.1	Λείζερ	22
2.2.2	Βιολογική απεικόνιση	24
2.2.3	Φωτεινή πηγή μεμονωμένου φωτονίου	27
2.2.4	Μνήμη, κβαντικοί υπολογιστές, κυτταρικά αυτόματα, νανοφω- τονικοί διακόπτες κλπ	30
3	Βασικές έννοιες	36
3.1	Πυκνότητα καταστάσεων	37
3.2	Εποικισμός των καταστάσεων μιας κβαντικής τελείας	38
3.2.1	Σχετικά υψηλές θερμοκρασίες και/ή μικρές ενέργειες εντοπισμού	40
3.2.2	Σχετικά χαμηλές θερμοκρασίες και/ή μεγάλες ενέργειες εν- τοπισμού	42
3.3	Εγκάρσιο περιοριστικό δυναμικό	42
3.4	Εξίσωση ενεργού μάζας	43

3.5	Η έννοια του εξιτονίου	45
3.5.1	Το εξιτόνιο σε τρισδιάστατους ημιαγωγούς	46
3.5.2	Το εξιτόνιο σε κβαντικές τελείες	48
3.6	Μηχανισμοί επανασύνδεσης και εφησυχασμού στις κβαντικές τελείες .	49
3.6.1	Μηχανισμοί εφησυχασμού	50
3.6.2	Ακτινοβολούσα επανασύνδεση	54
4	Υπολογισμός του τοπικού συντελεστή απορρόφησης	56
4.1	Ορισμοί	57
4.2	Η έννοια της συνεκτικότητας	58
4.3	Το φυσικό σύστημα	61
4.4	Οι Hartree-Fock Ημιαγωγικές Εξισώσεις Bloch	64
4.5	Μακροσκοπικός ορισμός πόλωσης	66
4.6	Μικροσκοπικός ορισμός πόλωσης	67
4.7	Η εξίσωση της μικροσκοπικής οπτικής πόλωσης	68
4.7.1	Η μικροσκοπική οπτική πόλωση στην εικόνα του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και οπών	68
4.7.2	Η μικροσκοπική οπτική πόλωση στην εξιτονική εικόνα	69
4.8	Η Μακροσκοπική Πόλωση στην εξιτονική εικόνα	70
4.9	Η Μικροσκοπική έκφραση για την μη τοπική επιδεκτικότητα	72
4.10	Ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης	73
5	Μαγνητοαπορρόφηση εγγύς πεδίου στις κβαντικές τελείες	76
5.1	Μονοσωματιδιακές καταστάσεις	78
5.2	Τα στοιχεία πίνακα Coulomb	80
5.3	Το εξιτονικό πρόβλημα	80
5.4	Ο τοπικός συντελεστής μαγνητοαπορρόφησης	81
5.5	Μονοσωματιδιακές καταστάσεις σε απλές κβαντικές τελείες. Ο ρόλος του χωρικού και του μαγνητικού εντοπισμού	81
5.6	Ο ρόλος της αλληλεπίδρασης Coulomb στην “ιδανική” κβαντική τελεία.	88
5.7	Απλή κβαντική τελεία υποκείμενη σε υψηλά πεδία	93
5.8	Διπλή κβαντική τελεία	97
5.9	Η θεμελιώδης ενέργεια δέσμευσης του εξιτονίου	98
5.10	Περιγραφή του μικροσκοπίου σάρωσης κοντινού πεδίου	101
5.10.1	Λειτουργία φωτισμού	102

5.10.2	Λειτουργία συλλογής	103
5.11	Σύνοψη	106
6	Οι εξισώσεις φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες και η αναλυτική επίλυσή τους	109
6.1	Η έννοια της φωτοφωταύγειας	110
6.2	Το φυσικό σύστημα	114
6.3	Αλληλεπίδραση των φορέων με το πεδίο των φωτονίων	115
6.4	Η μη συνεκτική φωτοφωταύγεια	119
6.5	Οι εξισώσεις φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες	120
6.6	Αναλυτική λύση των εξισώσεων φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή	124
6.7	Σύνοψη	128
7	Σύγκριση με το πείραμα	129
7.1	Αριθμητική εύρεση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων	130
7.1.1	Το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό κβαντικής τελείας σε σχήμα φακού	131
7.2	Το φάσμα εκπομπής	133
7.3	Σύνοψη	137
8	Επίλογος-Ερευνητικές προοπτικές	138
Α'	Η εξίσωση ιδιοτιμών της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης	140
Β'	Η Χαμιλτονιανή του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων	142
Γ'	Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης του συστήματος με το πεδίο του laser	144
Δ'	Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης μεταξύ των φορέων	146
Ε'	Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων	149
Ε'.1	Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στο σύστημα των ελευθέρων φορέων	149

Ε'.2	Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση των φορέων με το συνεκτικό πεδίο του laser	150
Ε'.3	Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση φορέα-φορέα	151
ϛ'	Η εξίσωση ιδιοτιμών του εξιτονικού πίνακα	156
Z'	Μετασχηματισμοί Fourier	158
Z'.1	Της ενέργειας Rabi στην εξιτονική εικόνα	158
Z'.2	Της οπτικής πόλωσης στην εξιτονική εικόνα	159
H'	Έλεγχος ορθογωνιότητας των μονοσωματιδιακών καταστάσεων	160
Θ'	Εφαρμογή της ορθογωνιοποίησης Gram-Schmidt στις μονοσωματιδιακές καταστάσεις	162
Θ'.1	Περιγραφή της μεθόδου	162
Θ'.2	Εφαρμογή της μεθόδου στις μονοσωματιδιακές καταστάσεις που αντιστοιχούν σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο	164
I'	Καταστάσεις Darwin-Fock	167
I'.1	Για μηδενικό μαγνητικό πεδίο	167
I'.2	Για μαγνητικό πεδίο διαφορετικό του μηδενός	168
ΙΑΥ	Υπολογισμός των στοιχείων πίνακα Coulomb	170
ΙΒ'Η	Χρονική μεταβολή του τελεστή $\rho_{\mu\nu}(t)$	172
ΙΒ'.1	Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\rho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στο σύστημα των ελευθέρων φορέων	172
ΙΒ'.2	Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\rho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών	173
ΙΒ'.3	Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\rho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων	175
ΙΒ'.4	Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\rho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων	178
ΙΒ'.5	Η εξίσωση της οπτικής πόλωσης στο ημικλασσικό όριο	180

ΙΓ'Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle$	181
ΙΓ'.1 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle$ που οφείλεται στο σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων	181
ΙΓ'.2 Η χρονική μεταβολή $\langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων	182
ΙΔΗ χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$	184
ΙΔ'.1 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στο σύστημα των ελευθέρων φορέων	184
ΙΔ'.2 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών	185
ΙΔ'.3 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων	188
ΙΔ'.4 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων	191
ΙΔ'.5 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στο σύστημα των ελευθέρων φωτονίων	194
ΙΕ'Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων	195
Ιζ'Ο όρος των μη συνεκτικών διεργασιών στην φωτοφωταύγεια	197
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	199

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Σκοπός της διατριβής

Σκοπός της διδακτορικής διατριβής είναι η συστηματική θεωρητική μελέτη **(A)** της μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου και **(B)** της φωτοφωταύγειας (Photoluminescence ή PL) μεμονωμένων χβαντικών τελειών.

Οι χβαντικές τελείες (quantum dots ή QDs) είναι τεχνητές δομές με μεγέθη από μερικά nm έως μερικά μm και οι οποίες περιέχουν από 10^3 έως 10^9 άτομα με αντίστοιχο αριθμό ηλεκτρονίων. Στις ημιαγωγικές τελείες τα ηλεκτρόνια είναι ισχυρά δέσμια στον πυρήνα, εκτός από ένα μικρό ποσοστό ελεύθερων ηλεκτρονίων που κυμαίνεται από 1 έως μερικές χιλιάδες. Εξαιτίας του τρισδιάστατου περιοριστικού δυναμικού της τελείας, το ενεργειακό φάσμα των ηλεκτρονίων είναι διακριτό όπως των ατόμων και για τον λόγο αυτό, καλούνται τεχνητά άτομα (artificial atoms) στην περίπτωση μεμονωμένων τελειών ή τεχνητά μόρια (artificial molecules) στην περίπτωση πολλαπλών τελειών.

Η δομή της διατριβής είναι η ακόλουθη:

Στο **δεύτερο** κεφάλαιο περιγράφονται οι κυριότερες μέθοδοι κατασκευής καθώς και οι κυριότερες εφαρμογές των χβαντικών τελειών.

Στο **τρίτο** κεφάλαιο δίνονται οι βασικές έννοιες της πυκνότητας καταστάσεων και του εποικισμού καταστάσεων, της εξίσωσης ενεργού μάζας που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των μονοσωματιδιακών καταστάσεων και των καταστάσεων των εξιτονίων. Τέλος, παρουσιάζονται συνοπτικά οι ακτινοβολούσες και μη διαδικασίες επανασύνδεσης, οι διαδικασίες εφρησυχασμού και διαδικασίες μηδενισμού της οπτικής

πόλωσης dephasing που αποτελεί μέτρο της συνεκτικότητας του συστήματος, οι οποίες παίζουν καθοριστικό ρόλο στο φάσμα φωτοφωταύγειας.

Στο **τέταρτο** κεφάλαιο παρουσιάζεται το βασικό θεωρητικό πλαίσιο που καταλήγει στην παραγωγή της γενικής έκφρασης για τον συντελεστή απορρόφησης εγγύς πεδίου.

Στο **πέμπτο** κεφάλαιο παρουσιάζεται η θεωρητική ανάλυση συμπεριλαμβάνοντας την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου ποικίλου μέτρου και προσανατολισμού, η οποία καταλήγει στον υπολογισμό του συντελεστή μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου απλών και διπλών κβαντικών τελειών.

Στο **έκτο** κεφάλαιο παρουσιάζεται η θεωρητική ανάλυση η οποία καταλήγει στην παραγωγή των εξισώσεων φωτοφωταύγειας για κβαντικές τελείες καθώς και στην παραγωγή της αναλυτικής έκφρασης της έντασης της φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή.

Στο **έβδομο** κεφάλαιο παρουσιάζεται η εφαρμογή των θεωρητικών αποτελεσμάτων για την ερμηνεία του φάσματος φωτοφωταύγειας σε θερμοκρασία δωματίου και για ασθενή διέγερση (γραμμική περιοχή), κβαντικής τελείας $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ σχήματος φακού. Υπολογίζονται αριθμητικά οι ακριβείς κυματοσυναρτήσεις και ενέργειες της κβαντικής τελείας σχήματος φακού. Γίνεται σύγκριση θεωρίας και πειράματος.

Στο **όγδοο** κεφάλαιο δίνονται οι ερευνητικές προοπτικές.

(Α) ΜΑΓΝΗΤΟΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗ ΕΓΓΥΣ ΠΕΔΙΟΥ

Το ενεργειακό φάσμα των κβαντικών τελειών είναι εξαιρετικά πλούσιο. Οι ενέργειες των μονοσωματιδιακών καταστάσεων, η αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών, καθώς και η αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ των ηλεκτρονίων με παράλληλα σπίν, είναι όλες της ίδιας τάξης μεγέθους (μερικά meV [1]). Οι αποστάσεις μεταξύ των διαδοχικών ενεργειακών επιπέδων κυμαίνονται από 10-35 meV ενώ η λεπτή υφή (που οφείλεται σε διαχωρισμό Zeeman και σε αλληλεπίδραση ανταλλαγής) είναι της τάξης των μερικών meV. Όταν λοιπόν μελετάται με τις συμβατικές οπτικές μεθόδους ένας μεγάλος αριθμός κβαντικών τελειών (για παράδειγμα 1-100 QDs/ μm^2), η ανομοιογενής διεύρυνση του φάσματος δεν επιτρέπει την ταυτοποίηση της λεπτής υφής καθώς και της μετάβασης μεταξύ των μονοσωματιδιακών καταστάσεων. Είναι λοιπόν απαραίτητη η μελέτη των μεμονωμένων κβαντικών τελειών, η οποία πραγματοποιείται με σύγχρονες μεθόδους φασματοσκοπίας εγγύς πεδίου. Καθώς μικραίνει η έκταση της φωτιζόμενης περιοχής (δηλ. οξύνεται η χωρική ανάλυση), οι οπτικές μέθοδοι εγγύς πεδίου επιτρέπουν την άμεση αποτύπωση της χωρικής και ενεργειακής κατανομής των καταστάσεων της κβαντικής τελείας.

Το 2000 οι Simserides et al. [2], υπολόγισαν έναν τοπικό συντελεστή απορ-

ρόφησης απλών και διπλών χβαντικών τελειών GaAs/AlGaAs υπό μηδενικό μαγνητικό πεδίο και προέβλεψαν ότι η επικάλυψη των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων με το προφίλ του τοπικού πεδίου του ανιχνευτή (probe), απεικονίζεται στο φάσμα απορρόφησης. Κατά συνέπεια στο εγγύς πεδίο είναι δυνατόν να παρατηρηθούν οπτικές μεταβάσεις οι οποίες δεν παρατηρούνται στο μακρινό πεδίο (“ απαγορευμένες”). Επιπρόσθετα έδειξαν ότι, εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων Coulomb, αυξάνοντας την έκταση της φωτιζόμενης περιοχής, παρατηρούνται αυξομειώσεις της έντασης των μεταβάσεων (μη μονότονη συμπεριφορά), όταν η περιοχή που φωτίζουμε γίνει συγκρίσιμη με την εξιτονική ακτίνα Bohr.

Ωστόσο, δεν ήταν δυνατό να γίνει άμεση σύγκριση μεταξύ θεωρίας και πειράματος, γιατί με τις υπάρχουσες τεχνικές φασματοσκοπίας εγγύς πεδίου, η έκταση της φωτιζόμενης περιοχής (χωρική ανάλυση) που είχε επιτευχθεί μέχρι τα τέλη του 1990 ήταν περίπου 130-200 nm [3], ενώ για παράδειγμα η εξιτονική ακτίνα για το GaAs είναι $\rho \approx 12$ nm. Η σύγκριση μεταξύ θεωρίας και πειράματος θα ήταν δυνατή αν οξυνόταν η χωρική ανάλυση με ταυτόχρονη χρησιμοποίηση ημιαγωγικών τελειών με μεγαλύτερη εξιτονική ακτίνα, όπως π.χ. το InAs (του οποίου η εξιτονική ακτίνα Bohr είναι περίπου 39 nm).

Η επίτευξη οξείας χωρικής ανάλυσης (≈ 31 nm = $\lambda/30$ όπου $\lambda = 930$ nm), οδήγησε στην επιτυχή χαρτογράφηση της κυματοσυναρτήσης του κέντρου μάζας του εξιτονίου εντοπισμένου σε χβαντικές τελείες που δημιουργούνται λόγω τοπικών διακυμάνσεων στην επιφάνεια χβαντικών πηγαδιών [4]. Πράγματι, στο όριο του εξαιρετικά λεπτού ανιχνευτή, όπου το προφίλ του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου προσεγγίζει μια δέλτα συνάρτηση, το τοπικό φάσμα απορρόφησης ή φωτοφωταύγειας απεικονίζει την εξιτονική συνάρτηση στην θέση του ανιχνευτή. Η πρόοδος αυτή σε πειραματικό επίπεδο έδωσε το έναυσμα σε πολλές θεωρητικές μελέτες. Αναφέρονται ενδεικτικά ο υπολογισμός του φάσματος απορρόφησης εγγύς πεδίου των εξιτονίων που σχηματίζονται από διακυμάνσεις στην ενδοεπιφάνεια χβαντικών πηγαδιών [5, 6] ή η θεωρητική περιγραφή του μικροσκοπίου σάρωσης κοντινού πεδίου (NSOM) σε μακρομόρια [7].

Οι παραπάνω διερευνήσεις δεν είχαν συμπεριλάβει την επίδραση του μαγνητικού πεδίου στα φάσματα απορρόφησης. Από την άλλη, ο ανταγωνισμός μεταξύ χωρικού (που οφείλεται στα δομικά χαρακτηριστικά) και μαγνητικού εντοπισμού (που οφείλεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο) έχει αναδείξει ενδιαφέροντα φαινόμενα στην περίπτωση των χβαντικών πηγαδιών [8–15].

Στην παρούσα διατριβή μελετάται για πρώτη φορά η επίδραση ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου στο φάσμα απορρόφησης εγγύς πεδίου απλών και διπλών χβαντικών τελειών (Κεφάλαιο 5). Η εφαρ-

μογή του μαγνητικού πεδίου προκαλεί μια αναδιάρθρωση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων των φορέων, η οποία σε συνδυασμό με την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών, εισάγει μια πληθώρα τροποποιήσεων στο φάσμα απορρόφησης εγγύς πεδίου. Οι τροποποιήσεις αυτές μπορούν να παρατηρηθούν με τους σημερινούς ανιχνευτές μεγάλης διακριτικής ικανότητας.

Διερευνάται η σημασία της εφαρμογής του μαγνητικού πεδίου ποικίλου μέτρου και προσανατολισμού. Η διερεύνηση αποκαλύπτει τη σημασία του ανταγωνισμού μεταξύ χωρικού και μαγνητικού εντοπισμού, στην περίπτωση των κβαντικών τελειών. Ταυτόχρονα προσφέρει έναν τρόπο χειρισμού των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων και ειδικότερα της εξιτονικής ενέργειας δέσμευσης της θεμελιώδους κατάστασης. Η μεταβολή των δομικών χαρακτηριστικών της τελείας σε συνδυασμό με την μεταβολή του μαγνητικού πεδίου, δίνει την δυνατότητα κατάλληλης μεταβολής της εξιτονικής ενέργειας δέσμευσης, ώστε να πλησιάζει την θερμική ενέργεια σε θερμοκρασία δωματίου, συνθήκη αναγκαία για την ικανοποιητική λειτουργία των οπτικών διατάξεων σε θερμοκρασία δωματίου.

Η εφαρμογή του μαγνητικού πεδίου ποικίλου μέτρου και προσανατολισμού δίνει την δυνατότητα ανάδειξης των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών του φάσματος εγγύς πεδίου. Η αλληλεπίδραση Coulomb επιφέρει σημαντικές τροποποιήσεις στο φάσμα απορρόφησης, όπως μετατόπιση του φάσματος προς χαμηλότερες ενέργειες λόγω της ελκτικής αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίου και οπής, μεταφορά της ισχύος ταλαντωτή από τις υψηλές στις χαμηλές ενέργειες καθώς και την εμφάνιση νέων κορυφών με μη μονότονη συμπεριφορά στην έντασή τους καθώς οξύνεται η χωρική ανάλυση. Επιπρόσθετα, ανάλογα με τον προσανατολισμό του πεδίου διατηρείται ή καταστρέφεται η "δομική" συμμετρία που υπάρχει υπό μηδενικό μαγνητικό πεδίο. Η ασυμμετρία που εισάγει το μαγνητικό πεδίο, όταν δεν εφαρμόζεται κατά τον/τους άξονες συμμετρίας της κβαντικής τελείας, μπορεί να ανιχνευτεί στο φάσμα εγγύς πεδίου (Near Field σντ NF) αλλά όχι στο φάσμα μακρινού πεδίου (Far Field σντ FF), αναδεικνύοντας την σημασία των φασμάτων μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου.

Η παραπάνω θεωρητική μελέτη αποτελείται από τέσσερα βασικά στάδια κι υποστηρίζεται από ένα υπολογιστικό πρόγραμμα με αντίστοιχα μέρη:

- Υπολογισμός των μονοσωματιδιακών καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών που υπόκεινται σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, μιας κβαντικής τελείας. Ο υπολογιστικός αλγόριθμος δίνει την δυνατότητα εύρεσης των μονοσωματιδιακών καταστάσεων κβαντικών τελειών οποιασδήποτε γεωμετρίας και υπό μαγνητικό πεδίο οποιουδήποτε μέτρου και προσανατολισμού.

- Υπολογισμός των στοιχείων πίνακα της αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών, από τις μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις που υπολογίστηκαν στο πρώτο βήμα. Επιπρόσθετα, επιλέγοντας ορθοκανονικές μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις, αποδεικνύεται μια σχέση που συνδέει τα στοιχεία πίνακα Coulomb συναρτήσεων των συντελεστών του αναπτύγματος των μονοσωματιδιακών καταστάσεων σε επίπεδα κύματα.
- Εύρεση των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων και ενεργειών επιλύοντας το εξιτονικό πρόβλημα ιδιοτιμών.
- Υπολογισμός του συντελεστή απορρόφησης εγγύς πεδίου.

(B) ΦΩΤΟΦΩΤΑΥΓΕΙΑ ΜΕΜΟΝΩΜΕΝΩΝ ΚΒΑΝΤΙΚΩΝ ΤΕΛΕΙΩΝ

Στο δεύτερο μέρος της διατριβής παράγονται για πρώτη φορά στην βιβλιογραφία οι εξισώσεις φωτοφωταύγειας για τις κβαντικές τελείες και παράγεται η αναλυτική έκφραση της έντασης της φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή (Κεφάλαιο 6). Τα φάσματα εκπομπής παρέχουν σημαντικές πληροφορίες για τις διακριτές καταστάσεις εντός της κβαντικής τελείας, καθώς και για την δυναμική των φορέων, τις αλληλεπιδράσεις τόσο μεταξύ τους όσο και με το φως. Σαν αποτέλεσμα, τα τελευταία χρόνια η φωτοφωταύγεια των κβαντικών τελειών αποτελεί αντικείμενο μελέτης πλήθους πειραματικών [16–19] όσο και θεωρητικών [20–24] διερευνήσεων. Το 1999 οι Kira et al. [25] υπολόγισαν θεωρητικά το φάσμα εκπομπής σε κβαντικά πηγάδια. Από την άλλη, σε πειραματικό επίπεδο, το 2000 οι Matsuda et al. [26] κατέγραψαν το φάσμα εκπομπής εγγύς πεδίου σε θερμοκρασία δωματίου, κβαντικών τελειών $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ σχήματος φακού. Τα παραπάνω αποτέλεσαν κίνητρο για το μέρος αυτό της παρούσας διατριβής.

Στην παρούσα διατριβή αναπτύσσεται μια πλήρης κβαντομηχανική περιγραφή της αλληλεπίδρασης του φωτός και των εξιτονικών διεγέρσεων στις ημιαγωγικές κβαντικές τελείες, κατασκευάζοντας την κατάλληλη Χαμιλτονιανή. Η Χαμιλτονιανή αυτή αποτελείται από τον όρο των μη αλληλεπιδρώντων φορέων που είναι εντοπισμένοι στην κβαντική τελεία, από τον όρο αλληλεπίδρασης των φορέων μεταξύ τους, από τον όρο της αλληλεπίδρασης των φορέων με το πεδίο των εκπεμπομένων φωτονίων που παράγεται από την αποδιέγερση του συστήματος και τέλος από τον όρο των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων.

Μελετάται η μη-συνεκτική φωτοφωταύγεια (incoherent photoluminescence) κατά την οποία οι φορείς διεγείρονται όχι σε συντονισμό με τις δέσμιες εξιτονικές καταστάσεις και πολύ πάνω από τις διακριτές καταστάσεις της τελείας. Παύοντας την επίδραση του διεγείροντος φωτός (λέιζερ) μόνο οι φορείς είναι παρόντες στο σύστημα και η οπτική πόλωση που επάγει ο παλμός του λέιζερ, μηδενίζεται λόγω σκέδασης των φορέων είτε μεταξύ τους, είτε με τα φωνόνια, στην διάρκεια ενός χαρακτηριστικού χρόνου ο οποίος καλείται dephasing time. Από την κβαντομηχανική περιγραφή του συστήματος προκύπτει ένα σύνολο εξισώσεων φωτοφωταύγειας, οι οποίες περιγράφουν την χρονική εξέλιξη των συναρτήσεων κατανομής των ηλεκτρονίων και των οπών, του όρου συσχετισμού πεδίου-διεγέρσεων ο οποίος περιλαμβάνει την διαδικασία δημιουργίας ενός φωτονίου με ταυτόχρονη καταστροφή ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής καθώς και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων. Θεωρώντας κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας (σταθερή κατανομή ηλεκτρονίων και οπών), προκύπτει ένα σύνολο δύο εξισώσεων φωτοφωταύγειας, η αναλυτική επίλυση των οποίων οδηγεί στην αναλυτική έκφραση της έντασης της φωτοφωταύγειας. Η έκφραση αυτή είναι γενική και ισχύει για απλές και διπλές κβαντικές τελείες οποιασδήποτε γεωμετρίας.

Τέλος, εφαρμόζονται τα θεωρητικά αποτελέσματα στην γραμμική περιοχή, κι ερμηνεύεται το πειραματικά παρατηρούμενο φάσμα εκπομπής σε θερμοκρασία δωματίου μεμονωμένων αυτοοργανούμενων κβαντικών τελειών σχήματος φακού [26] (Κεφάλαιο 7). Κι εδώ η ανάλυση περιλαμβάνει τέσσερα βήματα:

- Υπολογισμός των μονοσωματιδιακών καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών. Υπολογιστικά υπάρχει η δυνατότητα εύρεσης των μονοσωματιδιακών καταστάσεων κβαντικών τελειών οποιασδήποτε γεωμετρίας. Έτσι, περιγράφοντας κατάλληλα το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό, υπολογίζονται αριθμητικά οι ακριβείς μονοσωματιδιακές καταστάσεις.
- Οι παραπάνω καταστάσεις χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των στοιχείων πίνακα Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών.
- Υπολογισμός των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων και ενεργειών.
- Υπολογισμός της έντασης της φωτοφωταύγειας και επιτυχή αναπαραγωγή του πειραματικά παρατηρούμενου φάσματος εκπομπής στην γραμμική περιοχή. Υπολογίζεται επίσης ο χρόνος dephasing σε συμφωνία με άλλους ερευνητές.

1.1.1 Συνέδρια και δημοσιεύσεις

Οι θεωρητικές μελέτες που σχετίζονται με την παρούσα διδακτορική διατριβή παρουσιάστηκαν στα παρακάτω συνέδρια:

1) EXMATEC'04 (7th Expert Evaluation and Control of Compound Semiconductor Materials and Technologies) (Montpellier, France, 1-4 June, **2004**).

2) SEMIMAG16 (16th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics) (Tallahassee, Florida, USA, 2-6 August, **2004**).

3) HETECH'04 (13th European Workshop on Heterostructure Technology) (K-outouloufari, Heraklio, Crete, Greece, 3-6 October **2004**).

4) MMN 2004 (Microelectronics Microsystems and Nanotechnology) (Demokritos, Athens, Greece, 14-17 November, **2004**).

5) LDSD'04 (5th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices), (Cancun-Mayan Riviera, Mexico, 12-17 December, **2004**).

6) ICPS'06 (28th International Conference on the Physics of Semiconductors), (Vienna, Austria, 24-28 July **2006**).

7) HMF'06 (17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics), (Würzburg, Germany, 30 July-4 August **2006**).

8) EP2DS-07 (International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems and Modulated Semiconductor Structures), (Genova, 15-20 July **2007**).

9) MMN 2007 (Microelectronics Microsystems and Nanotechnology) (Demokritos, Athens, Greece, 18-21 November, **2007**).

Δημοσιεύσεις

1) *Magnetic Field effects on the near field spectra of quantum dots*, A. Zora, C. Simserides, and G. P. Triberis, *phys. stat. sol. (a)* **202**, 619 (2005).

2) *Near field spectroscopy of single and coupled quantum dots under magnetic*

field, A. Zora, C. Simserides and G. P. Triberis, *International Journal of Modern Physics B* **18**, 3717 (2004) ; *Proceedings of SEMIMAG16*.

3) *Near-field magnetoabsorption of quantum dots* C. Simserides, A. Zora, and G. Triberis, *Phys. Rev. B* **73**, 155313 (2006).

Επιλέχθηκε για αναδημοσίευση από το περιοδικό *Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology* (<http://www.vjnano.org>), April 24, 2006.

Επιλέχθηκε για αναδημοσίευση από το περιοδικό *Virtual Journal of Biological Physics Research* (<http://www.vjbio.org>), April 15, 2006 τεύχος.

4) *Near-field magneto-optics of quantum dots*, A. Zora, C. Simserides, G. Triberis *Proceedings of the ICPS 2006, published by AIP Conference Proceedings* **893** 893 (2007).

5) *Magneto-optics of quantum dots in the near field*, C. Simserides, A. Zora, G. Triberis, *International Journal of Modern Physics B* **21** 1649 (2007).

6) *Theory of spontaneous emission of quantum dots in the linear regime*, A. Zora, C. Simserides, G. Triberis, *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** 406201 (2007).

7) *Room temperature photoluminescence of individual self-assembled quantum dots*, A. Zora, C. Simserides, G. Triberis, *Physica E* In Press, Available on line 13/10/2007.

1.2 Ιστορική αναδρομή

Τα τελευταία χρόνια εκδηλώνεται ιδιαίτερο ενδιαφέρον στο πεδίο της ηλεκτρονικής και της οπτοηλεκτρονικής σχετικά με τις πιθανές εφαρμογές συστημάτων με πολύ μικρές διαστάσεις της τάξης των 1-100 nm που καλούνται νανοδομές. Το βασικό κίνητρο για την χρησιμοποίησή τους ήταν ότι με μικρότερα στοιχεία των δομών επιτυγχάνονται μεγαλύτερες ταχύτητες και μικρότερες απώλειες. Επιπλέον έχουν το πλεονέκτημα ότι σε αυτές τις μικρές κλίμακες μήκους λαμβάνουν χώρα κβαντομηχανικά φαινόμενα κι έτσι με λίγα σωματίδια (π.χ $N < 10$) οι ιδιότητές τους εξαρτώνται ισχυρά από το N .

Όταν η κίνηση του φορέα σε ένα στερεό περιοριστεί σε ένα στρώμα πάχους της τάξης του μήκους κύματος de Broglie (≈ 10 nm), τότε προκύπτει η δομή -γνωστή ως

κβαντικό πηγάδι (QW)-στην οποία οι φορείς είναι εντοπισμένοι σε μία διάσταση. Το μήκος κύματος de Broglie εξαρτάται από την ενεργό μάζα m^* του φορέα και από την θερμοκρασία T σύμφωνα με την σχέση: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m^*kT}}$. Καθώς η ενεργός μάζα του φορέα στον κρύσταλλο είναι αρκετά μικρότερη από την ελεύθερη ηλεκτρονική μάζα, τα φαινόμενα κβάντωσης παρατηρούνται σε πηγάδι πλάτους 10 – 100 φορές μεγαλύτερο από την πλεγματική σταθερά.

Η ιδέα της χρήσης πολύ λεπτών στρωμάτων για την μελέτη φαινομένων κβάντωσης ήταν ιδιαίτερα δημοφιλής στα τέλη της δεκαετίας του 1950 [27]. Το κύριο αντικείμενο έρευνας εκείνη την εποχή ήταν η παραγωγή λεπτών υμενίων ημιμετάλλων (Bi) σε υποστρώματα μίκας (μαρμαρυγίας) με την μέθοδο εναπόθεσης ατμού. Παράλληλα βέβαια γίνονταν δοκιμές για μελέτη υμενίων μετάλλων και ημιαγωγών. Το 1962 ο Keldysh [28] μελέτησε θεωρητικά την κίνηση των ηλεκτρονίων σε έναν κρύσταλλο με υπέρθεση περιοδικών δυναμικών με περίοδο πολύ μεγαλύτερη από την πλεγματική σταθερά. Στην δουλειά αυτή ο Keldysh έκανε λόγο για τις λεγόμενες “μίνι-ζώνες” καθώς και για το φαινόμενο της αρνητικής διαφορικής αντίστασης. Το 1963 οι Davies και Hosack [29] χρησιμοποίησαν δομές από πέντε διαδοχικά στρώματα (μονωτής - μέταλλο - μονωτής - μέταλλο- μονωτής) με διπλούς διηλεκτρικούς φραγμούς και πολύ λεπτό το ενδιάμεσο στρώμα μετάλλου, προκειμένου να παρατηρήσουν το φαινόμενο διέλευσης σήραγγας.

Το 1963 ο Iogansen [30] χρησιμοποίησε την ιδέα του φαινομένου διέλευσης σήραγγας σε διατάξεις ημιαγωγών με διπλούς διηλεκτρικούς φραγμούς προκειμένου να πετύχει αρνητική διαφορική αντίσταση. Ο ίδιος [31] μελέτησε δομές με μεγάλο αριθμό πηγαδιών. Παρά το γεγονός ότι αυτή η θεωρητική δουλειά έτυχε μεγάλης αναγνώρισης, οι αντίστοιχες πειραματικές μελέτες ήταν περιορισμένες εξαιτίας της μη ανεπτυγμένης τεχνολογίας εκείνη την εποχή. Σημαντικό πρόβλημα αποτελούσε η ποιότητα της ενδοεπιφάνειας η οποία έπρεπε να είναι κατά το δυνατόν απαλλαγμένη ανωμαλιών (“τραχύτητας”).

Με την έλευση νέων τεχνικών ετεροεπιταξιακής κρυσταλλικής ανάπτυξης, όπως η Επιταξία Μοριακής Δέσμης (Molecular Beam Epitaxy) [32] ή λίγο αργότερα η Επιταξία Μεταλ-Οργανικής Αέριας Φάσης (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition συνt MOCVD) [33] ήταν πλέον εφικτή η εισαγωγή στρωμάτων (πάχους μερικών πλεγματικών σταθερών) ενός ημιαγωγού με μικρότερο ενεργειακό χάσμα σε μια μήτρα (matrix) υλικού μεγαλύτερου χάσματος προκαλώντας έτσι εντοπισμό των φορέων στην περιοχή του (κβαντικό πηγάδι). Στο επίπεδο παράλληλα στην ενδοεπιφάνεια ωστόσο, οι φορείς παραμένουν “ελεύθεροι”, έτσι έχουμε να κάνουμε με ένα ψευδοδιδιάστατο σύστημα. Το 1970 οι Tsu και Esaki πρότειναν [34] την χρήση περιοδικών δομών διαδοχικών στρωμάτων δύο διαφορετικών υλικών (υπερπλέγματα).

Κατά την διεύθυνση ανάπτυξης, το πάχος των στρωμάτων παίζει τον ρόλο της πλεγματοτικής σταθεράς σε ένα σύνηθες μονοδιάστατο πλέγμα ατόμων, ενώ τα ατομικά δυναμικά αντικαθίστανται από το δυναμικό των ενεργειακών ζωνών των διαδοχικών στρωμάτων. Έτσι η ζώνη Brillouin περιορίζεται και εκφυλίζεται στις μίνι-ζώνες. Οι φορείς στα υπερπλέγματα μπορούν να κινηθούν με φαινόμενο σήραγγας κατά μήκος του άξονα του υπερπλέγματος.

Μια άλλη ιδιότητα σημαντική σε εφαρμογές, αποτελεί η διαδοχική διέλευση σήραγγας σε υπερπλέγματα, που προτάθηκε αρχικά από τους Kazarinov και Suris το 1970 [35] καθώς και από τους Alferov et al. την ίδια χρονιά [36], σε διάταξη $\text{GaP}_{0.3}\text{As}_{0.7}/\text{GaAs}$. Ωστόσο, η παρατήρηση των φαινομένων κβάντωσης κατέστη εφικτή σε εξαιρετικής ποιότητας ετεροεπαφές $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ (εξαιτίας της πολύ μικρής διαφοράς μεταξύ των πλεγματοτικών σταθερών των συνιστωσών υλικών καθώς και των απαλλαγμένων τραχύτητας ενδοεπιφανειών τους). Το 1974 οι Chang et al. [37] παρατήρησαν το φαινόμενο της συντονισμένης διέλευσης σήραγγας (resonant tunneling), δείχνοντας έτσι τον δρόμο για την περιγραφή των φαινομένων μεταφοράς σε πολύ λεπτές ultrathin διατάξεις ετεροδομών με την βοήθεια της κβαντομηχανικής. Την ίδια εποχή οι Kazarinov και Suris [35] μελέτησαν την δυνατότητα δημιουργίας μονοπολικού μεγάλου μήκους κύματος laser, χρησιμοποιώντας ακτινοβολούσες μεταβάσεις μεταξύ των υποζωνών των ηλεκτρονίων στα παραπάνω συστήματα.

Οι νέες ασυνήθιστες ιδιότητες των διδιάστατων συστημάτων που υπόσχονταν εφαρμογές κυρίως στον τομέα της ηλεκτρονικής και της οπτικοηλεκτρονικής παρουσίασαν έντονο τεχνολογικό ενδιαφέρον. Αυτό με την σειρά του οδήγησε σε μία ταχεία ανάπτυξη της τεχνολογίας κατασκευής τους καθώς και σε εκτεταμένη θεωρητική έρευνα. Στα συστήματα αυτά προσφέρονται περισσότερες ρυθμιστικές παράμετροι, είτε των υλικών, είτε της γεωμετρίας των νέων διατάξεων. Κατανοώντας κι ελέγχοντας τις παραμέτρους αυτές μπορούμε να καθορίσουμε σε μεγαλύτερο βαθμό και πιο εύκολα τις ηλεκτρικές και οπτικές τους ιδιότητες κι έτσι να επιτύχουμε την επιθυμητή λειτουργία.

Εξαιρετικά αποτελέσματα προέκυψαν και από την μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων των κβαντικών πηγαδιών και των υπερπλεγμάτων. Το 1974 οι Dingle et al. [38] παρατήρησαν την κλιμακωτή μορφή στο φάσμα απορρόφησης, η οποία συνδέεται με τον χαρακτήρα της πυκνότητας καταστάσεων σε διδιάστατα συστήματα. Μείωση του πάχους του στρώματος GaAs έχει σαν αποτέλεσμα την μετατόπιση της κλίμακας προς υψηλότερες ενέργειες φωτονίων. Επιπλέον, οι οπτικές ιδιότητες κατέδειξαν τον σημαντικό ρόλο των εξιτονίων [39].

Με τις διδιάστατες δομές προέκυψε βελτίωση των διατάξεων που ήδη υπήρχαν, όπως τα διπολικά τρανζίστορ ετεροεπαφών και τα laser κβαντικών πηγαδιών. Αρ-

χικά αποδείχθηκε θεωρητικά και κατόπιν επιβεβαιώθηκε πειραματικά ότι η μείωση της διαστατικότητας της ενεργού περιοχής στα λέιζερ βελτιώνει σημαντικά τα χαρακτηριστικά λειτουργίας τους με την μείωση του ρεύματος κατωφλίου και την αυξημένη σταθερότητα έναντι της θερμοκρασίας. Σήμερα, τα λέιζερ ημιαγωγών που έχουν ως ενεργή περιοχή κβαντικά πηγάδια, αποτελούν τα κύρια συστατικά των οπτικοηλεκτρονικών και φωτονικών ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και παίζουν σημαντικό ρόλο στην τεχνολογία της μετάδοσης πληροφορίας και στην επικοινωνία.

Περί τα τέλη της δεκαετίας του '80 οι βασικές ιδιότητες τόσο των κβαντικών πηγαδιών όσο και των υπερπλεγμάτων είχαν μελετηθεί διεξοδικά και το ενδιαφέρον των ερευνητών στράφηκε σε δομές με περαιτέρω μειωμένη διαστατικότητα όπως είναι τα κβαντικά σύρματα [40] και οι κβαντικές τελείες [41–44]. Σαν αποτέλεσμα του ισχυρού εντοπισμού των φορέων και στις τρεις διαστάσεις, το κλασικό μοντέλο της δομής ζωνών παύει να ισχύει, και το ενεργειακό φάσμα των κβαντικών τελειών είναι διακριτό όπως των ατόμων. Για τον λόγο αυτό αναφέρονται ως τεχνητά άτομα (artificial atoms) ή υπεράτομα (superatoms). Η πυκνότητα καταστάσεων των κβαντικών τελειών είναι ένα άθροισμα συναρτήσεων δέλτα και εξαιτίας της μορφής της οι δομές αυτές αποτελούν ιδανικούς υποψηφίους για την χρήση τους σε λέιζερ ημιαγωγών όπου εμφανίζουν σημαντικά μειωμένο ρεύμα κατωφλίου και μειωμένη ευαισθησία στην θερμοκρασία, σε σύγκριση με τα λέιζερ κβαντικών πηγαδιών. Τυπικά μεγέθη των κβαντικών τελειών είναι της τάξεως μερικών δεκάδων nm και μπορούν να περιέχουν 10^4 άτομα. Εξαιτίας του μικρού τους μεγέθους περιέχουν περιορισμένο αριθμό ηλεκτρονίων οπότε και όλες οι μακροσκοπικές τους ιδιότητες εξαρτώνται ισχυρά από τον αριθμό των ηλεκτρονίων.

Ο δρόμος για την πραγματοποίηση των δομών αυτών ήταν γεμάτος περιορισμούς και εμπόδια. Η πρώτη απόπειρα αφορούσε στην εμφάνιση ημιαγωγού (πχ. CdSe) διαστάσεων nm σε γυαλί [45]. Οι τελείες που κατασκευάστηκαν χρησιμοποιήθηκαν στο εμπόριο ως φίλτρα χρώματος για πολλές δεκαετίες.

Το φαινόμενο του κβαντικού εντοπισμού στα παραπάνω συστήματα επιβεβαιώθηκε πειραματικά από τους Ekimov και Onushenko [46] το 1984, οι οποίοι παρατήρησαν ασυνήθιστο οπτικό φάσμα σε δείγματα γυαλιού που περιείχαν σουλφίδιο του καδμίου (σχήμα 1.1). Συγκεκριμένα, καθώς η διάσταση των νανοκρυστάλλων έγινε μικρότερη, οι διεγέρσεις των ηλεκτρονίων μετατοπίζονταν προς υψηλότερες ενέργειες και παρατηρήθηκε συγκέντρωση της ισχύος ταλαντωτή (oscillator strength), που αποτελεί αδιάστατη ποσότητα ανάλογη του τετραγώνου των διπολικών στοιχείων πίνακα [47]), σε μερικές μόνο μεταβάσεις. Τα φαινόμενα αυτά που αποτελούν εκδηλώσεις του κβαντικού εντοπισμού, προκύπτουν από τις αλλαγές στην πυκνότητα καταστάσεων. Τα δείγματα είχαν υποβληθεί σε υψηλές θερμοκρασίες και ο Ekimov υποστήριξε-

ε την άποψη ότι η θέρμανση είχε σαν αποτέλεσμα τον σχηματισμό ημιαγωγικών νανοκρυστάλλων εμβαπτισμένων στο γυαλί, κι έτσι αυτή η ασυνήθιστη συμπεριφορά ήταν αποτέλεσμα του κβαντικού εντοπισμού των ηλεκτρονίων στους νανοκρυστάλλους. Παράλληλα, γίνονταν προσπάθειες δημιουργίας νανοκρυστάλλων εμβαπτισμένων σε γυαλί, και άλλων υλικών (πχ GaAs) εκτός των κραμάτων II-VI [48]. Η μέση διάμετρος των τελειών που κατασκευάστηκαν με αυτή την μέθοδο ήταν συνάρτηση του χρόνου θέρμανσης και της θερμοκρασίας.



Σχήμα 1.1: Το φαινόμενο του κβαντικού εντοπισμού είναι υπεύθυνο για τα διαφορετικά χρώματα των μικροκρυστάλλων CdSe [41]. Τα ηλεκτρόνια στους μικροκρυστάλλους σχεδιάζουν φωτόνια που έχουν ενέργεια μεγαλύτερη από μια ενέργεια κατωφλίου, η οποία εξαρτάται από το μέγεθος του μικροκρυστάλλου, και απορροφούν φωτόνια των οποίων η ενέργεια είναι υψηλότερη από την ενέργεια κατωφλίου. Οι μεγαλύτεροι κρυσταλλίτες εμφανίζουν μικρότερη ενέργεια κατωφλίου κι έτσι απορροφούν φωτόνια πιο χαμηλής ενέργειας από ότι οι μικρότεροι κρυσταλλίτες. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να εμφανίζονται οι πρώτοι κόκκινοι και οι δεύτεροι κίτρινοι.

Οι ενδογενείς δυσκολίες που παρουσίαζε η κατασκευή κβαντικών τελειών από συσσωματώματα ατόμων οδήγησαν τους ερευνητές στα μέσα της δεκαετίας του '80 στην αναζήτηση νέων μεθόδων παρασκευής. Το 1986 οι Reed et al. κατασκεύασαν την πρώτη κβαντική τελεία με λιθογραφία. Η μέθοδος συνίστατο στην κατασκευή κυλινδρικών στηλών (εγκάρσιων διαστάσεων περίπου 10 nm) από κβαντικά πηγάδια, με προηγμένες τεχνικές χάραξης παρόμοιες με εκείνες που χρησιμοποιούνται στην

κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Αν η διάμετρος της κυλινδρικής στήλης είναι πολύ μικρή, τότε το I-V φάσμα παρουσιάζει μια αρμονική σειρά οξείων κορυφών που αντιστοιχούν στις διακριτές ενεργειακές στάθμες και είναι εκδήλωση του κβαντικού εντοπισμού. Επιπλέον, είναι δυνατόν να απομονώσουμε μια τέτοια κβαντική τελεία από το περιβάλλον της και έτσι να μελετήσουμε τις ιδιότητες μιας μεμονωμένης τελείας, κάτι που δεν ήταν δυνατόν με τους νανοκρυστάλλους.

Προκειμένου να ελεγχθούν τα φαινόμενα επιφανείας, κατασκευάστηκαν τελείες με εφαρμογή μικροσκοπικών ηλεκτροδίων στην επιφάνεια των κβαντικών πηγαδιών. Η εφαρμογή κατάλληλου δυναμικού εντοπίζει τα ηλεκτρόνια σε μια πολύ μικρή περιοχή. Η μέθοδος αυτή έχει και το πλεονέκτημα ότι με μεταβολή του δυναμικού μπορεί να αλλάζει κατά βούληση ο αριθμός των ηλεκτρονίων που εντοπίζονται στην τελεία. Επιπλέον, το σχήμα του ηλεκτροδίου καθορίζει το σχήμα, το μέγεθος και την συμμετρία του περιοριστικού δυναμικού και τελικά την μορφή των κυματοσυναρτήσεων του ηλεκτρονίου (διαμόρφωση των κυματοσυναρτήσεων ή wavefunctions engineering). Το 1990 οι Ashoori και Störmer κατάφεραν να μετρήσουν την χωρητικότητα μεμονωμένων κβαντικών τελειών κι απέδειξαν ότι είναι δυνατόν να εντοπίσουμε ένα μόνο ηλεκτρόνιο σε κάθε τελεία. Αυτά τα αποτελέσματα κατέδειξαν την δυνατότητα δημιουργίας τεχνητού πλέγματος στο οποίο οι ιδιότητες των συστατικών του (τελειών) μπορούν να ελέγχονται με ακρίβεια. Έτσι όπως οι κβαντικές τελείες παρουσιάζουν φάσμα διακριτών γραμμών, ανάλογο με αυτό των ατόμων, και ένα τεχνητό πλέγμα αποτελούμενο από τελείες θα παρουσίαζε δομή ζώνης ανάλογη με αυτή ενός κρυσταλλικού ημιαγωγού. Ωστόσο, η δυσκολία κατασκευής τεχνητού πλέγματος συνίσταται στην δυσκολία ελέγχου των ατελειών στο υλικό του υποκείμενου κβαντικού πηγαδιού. Τα τελευταία χρόνια κατασκευάζονται συλλογές από κβαντικές τελείες με μηχανισμούς αυτοοργάνωσης. Η αυτοοργάνωση οδηγεί σε μια κατανομή από τελείες διαφορετικών μεγεθών και επομένως και ενεργειακού φάσματος, που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε πλήθος από εφαρμογές.

Η μελέτη των μεμονωμένων κβαντικών τελειών καθώς και συλλογών πολλών τελειών αποτελεί ένα νέο κεφάλαιο στην θεωρητική φυσική. Αυτό που παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον με τις τελείες είναι πρώτα από όλα η **δυνατότητα ελέγχου** (engineering) του σχήματός τους, των διαστάσεών τους, της δομής των ενεργειακών τους σταθμών και του αριθμού των εντοπισμένων σε αυτές ηλεκτρονίων. Είναι για παράδειγμα δυνατή η δημιουργία και η μελέτη “σχολικών” μοντέλων όπως το τετραγωνικό ή το παραβολικό δυναμικό περιορισμού ενός ή περισσοτέρων σωματιδίων, η κβάντωση επιπέδων Landau ενός ηλεκτρονίου, η επανασύνδεση με ταυτόχρονη εκπομπή ακτινοβολίας συστήματος λίγων σωματιδίων και άλλα. Εξαιτίας του μικρού αριθμού ηλεκτρονίων που περιέχουν επιτρέπουν τους αριθμητικούς υπολογισμούς σε πολ-

λά προβλήματα φυσικής πολλών σωματιδίων, διευκολύνοντας έτσι την κατανόησή τους. Για παράδειγμα, κάποια ενδιαφέροντα φαινόμενα που χαρακτηρίζουν τα διδιάστατα συστήματα όπως ο σχηματισμός των σύνθετων φερμιονίων που οδηγούν στο κβαντικό φαινόμενο Hall φαίνεται να ισχύουν και στις τελείες όπου επιπλέον η δυνατότητα αριθμητικής λύσης της εξίσωσης Schrödinger βοηθά στην κατανόηση των φαινομένων αυτών. Επιπλέον, ιδιαίτερο θεωρητικό ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη συζευγμένων κβαντικών τελειών που αναφέρονται ως “τεχνητά μόρια” (artificial molecules).

Σε πειραματικό επίπεδο, η μελέτη των κβαντικών τελειών αφορά κύρια στην διερεύνηση των οπτικών ιδιοτήτων τους (απορρόφηση και εκπομπή στο ορατό ή στο υπέρυθρο με μεγάλα μήκη κύματος της τάξεως των 50 – 1000 μικρόμετρων, καθώς και σκέδαση Raman) και των ηλεκτρικών ιδιοτήτων τους (όπως μελέτη της χωρητικότητας και των φαινομένων μεταφοράς). Οι κβαντικές τελείες απορροφούν και εκπέμπουν φως σε μια πολύ στενή φασματική περιοχή η οποία μπορεί να ελεγχθεί για παράδειγμα με την εφαρμογή κατάλληλου μαγνητικού πεδίου. Για τον λόγο αυτό, μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην κατασκευή πιο αποδοτικών και ακριβέστερα ελεγχόμενων lasers. Τόσο τα πρώτα πειραματικά αποτελέσματα [49, 50] όσο και οι πρώτες θεωρητικές προβλέψεις ήταν πολλά υποσχόμενες. Σήμερα, είναι πλέον εφικτή η κατασκευή λέιζερ κβαντικών τελειών με πολύ καλή απόδοση [51–53]. Μια πολύ σημαντική εφαρμογή των κβαντικών τελειών είναι η χρησιμοποίησή τους ως βιολογικές “σημάνσεις” (labels) σε μόρια [54], η οποία παρουσιάστηκε για πρώτη φορά το 1998. Τέλος, ενδιαφέρον παρουσιάζει και η προοπτική χρησιμοποίησης αυτών των συστημάτων σε υπολογιστές νέας γενιάς. Οι πολύ μικρές διαστάσεις και η πιθανότητα πυκνής διάταξης σε παρατάξεις κβαντικών τελειών, επιτρέπουν την χρησιμοποίησή τους σε στοιχεία μνήμης με τεράστια χωρητικότητα.

Κεφάλαιο 2

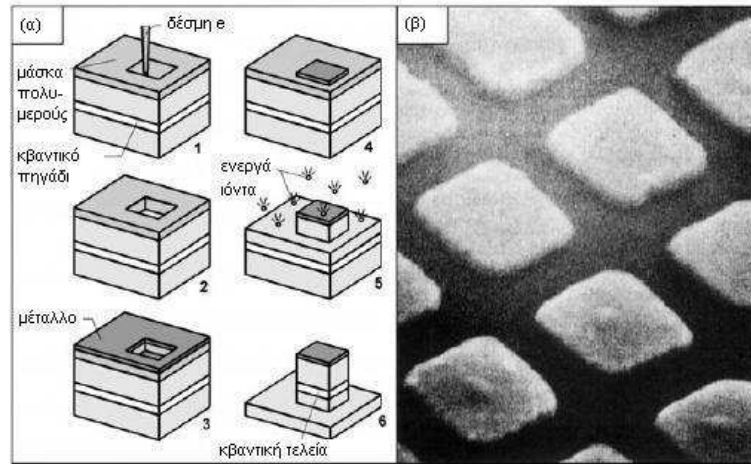
Μέθοδοι κατασκευής και εφαρμογές κβαντικών τελειών

2.1 Μέθοδοι κατασκευής

2.1.1 Τεχνικές λιθογραφίας

Η πρώτη κατασκευή κβαντικής τελείας με λιθογραφία παρουσιάστηκε από τους Reed et al. [41] το 1986. Αρχικά, με την μέθοδο της επιταξίας μοριακής δέσμης (molecular beam epitaxy MBE) κατασκεύασαν τα δείγματα πάνω σε υπόστρωμα (100) GaAs με πρόσμιξη Cr, το οποίο χρησιμεύει ως πηγή ελεύθερων φορέων. Τα δείγματα αποτελούνταν από 20 κβαντικά πηγάδια GaAs πλάτους 2 nm με φραγμούς $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 3$) που αναπτύχθηκαν πάνω σε δύο στρώματα buffer: ένα GaAs πάχους 0.1 μm κι ένα $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ πάχους 1 μm . Η δομή καλύφθηκε με στρώμα GaAs (cap layer) πάχους 10 nm.

Τα πολλαπλά πηγάδια χρησιμεύουν ως καλούπια τα οποία διαμορφώνονται με τεχνικές λιθογραφίας, αλλάζοντας τις πλευρικές (lateral) ιδιότητες της επιφάνειάς τους. Με τον τρόπο αυτό δημιουργούνται είτε παρατάξεις (arrays) από τελείες είτε κβαντικά σύρματα. Τα στάδια της διαδικασίας κατασκευής φαίνονται στο σχήμα 2.1. Η επιφάνεια του δείγματος καλύπτεται με μια μάσκα πολυμερούς (polymethylmethacrylate ή PMMA) η οποία χαράσσεται με δέσμη ηλεκτρονίων (α.1) και μέρος αυτής αφαιρείται (α.2). Κατόπιν, ολόκληρη η επιφάνεια καλύπτεται με ένα λεπτό μεταλλικό στρώμα Au που χρησιμεύει ως μάσκα λιθογραφίας και ως ημιδιαφανές στρώμα (α.3). Χρησιμοποιώντας ένα ειδικό διάλυμα, αφαιρείται τόσο το φιλμ πολυμερούς όσο και το προστατευτικό μεταλλικό στρώμα εκτός της περιοχής που είχε προηγουμένως εκτεθεί



Σχήμα 2.1: (α) Διαδικασία κατασκευής κβαντικής τελείας με χάραξη, (β) απεικόνιση πραγματικής διάταξης κβαντικών τελειών που κατασκευάστηκε με πλευρική διαμόρφωση με χάραξη κβαντικού πηγαδιού GaAs/AlGaAs.

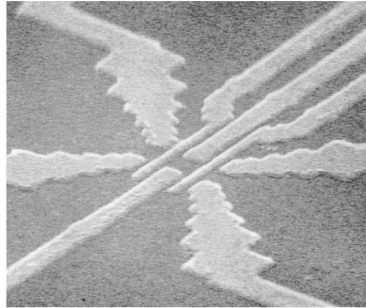
στην δέσμη ηλεκτρονίων και στην οποία η μεταλλική μάσκα διατηρείται (α.4). Τέλος με χημική χάραξη των περιοχών που δεν προστατεύονται από την μεταλλική μάσκα δημιουργούνται στήλες (α.5) που περιέχουν κβαντικές τελείες ή σύρματα. Με τον τρόπο αυτόν, η κίνηση των ηλεκτρονίων που ήταν αρχικά περιορισμένη στο επίπεδο του κβαντικού πηγαδιού, περιορίζεται περαιτέρω και στις μικρές στήλες διαστάσεων της τάξης 10-100 nm. Η μάσκα χρυσού που παραμένει μετά το τέλος της διαδικασίας χρησιμεύει ως ηλεκτρόδιο όπου με εφαρμογή κατάλληλης τάσης σε αυτό, ελέγχεται ο αριθμός των φορέων που εντοπίζονται στην τελεία.

Η ευκολία δημιουργίας λεπτών και ομογενών πηγαδιών GaAs το καθιστούν το πλέον ευρέως χρησιμοποιούμενο υλικό για την κατασκευή τελειών με λιθογραφία [42,44,56,57]. Ωστόσο αναφέρονται κβαντικές τελείες από πηγάδια InGaAs/InP [43]. Οι τεχνικές λιθογραφίας περιλαμβάνουν: 1) οπτική λιθογραφία και ολογραφία 2) λιθογραφία ακτίνων X 3) λιθογραφία δέσμης ηλεκτρονίων (EBL) και εντοπισμένης δέσμης ιόντων (FIBL).

2.1.2 Διαμορφούμενο ηλεκτρικό πεδίο

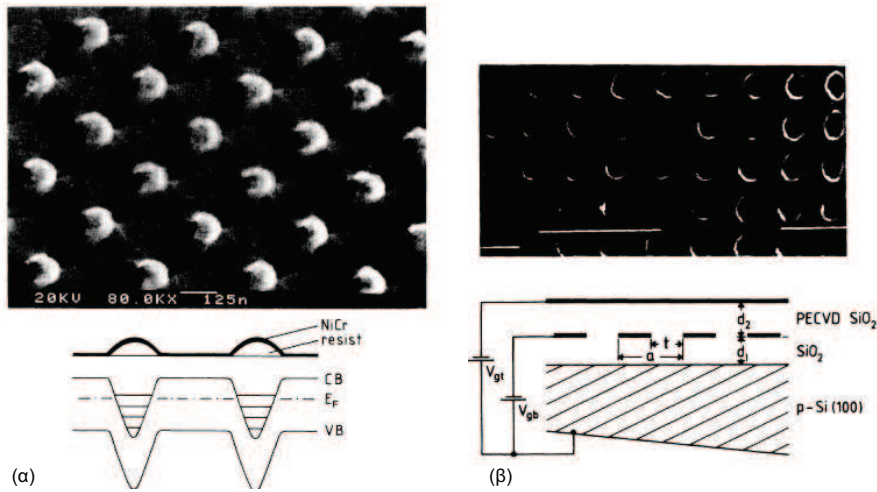
Ένας δεύτερος τρόπος κατασκευής κβαντικών τελειών συνίσταται στην δημιουργία (με την βοήθεια τεχνικών λιθογραφίας) μικροσκοπικών ηλεκτροδίων πάνω στην επιφάνεια ενός κβαντικού πηγαδιού. Στο σχήμα 2.2 απεικονίζεται μια τέτοια

διάταξη. Η εφαρμογή κατάλληλης διαφοράς δυναμικού στα ηλεκτρόδια δημιουργεί



Σχήμα 2.2: Κβαντική τελεία που δημιουργείται στην περιοχή της τομής των ηλεκτροδίων. Τα 4 εσωτερικά ηλεκτρόδια περιορίζουν και εγκάρσια την κίνηση των ηλεκτρονίων που είναι εντοπισμένα στο κβαντικό πηγάδι που βρίσκεται από κάτω, ενώ τα εξωτερικά ηλεκτρόδια λειτουργούν ως επαφές για την μεταφορά των ηλεκτρονίων από και προς την τελεία [58].

ένα χωρικά διαμορφούμενο ηλεκτρικό πεδίο, το οποίο εντοπίζει τα ηλεκτρόνια σε μια πολύ μικρή περιοχή. Με την μέθοδο αυτή μπορούν να κατασκευαστούν είτε απομον-



Σχήμα 2.3: Διδιάστατη παράταξη κβαντικών τελειών που δημιουργούνται: (α) σε InSb [59] (Κάτω δίνεται μια σχηματική παράσταση του ηλεκτροδίου και των ζωνών αγωγιμότητας και σθένους) και (β) σε Si [60].

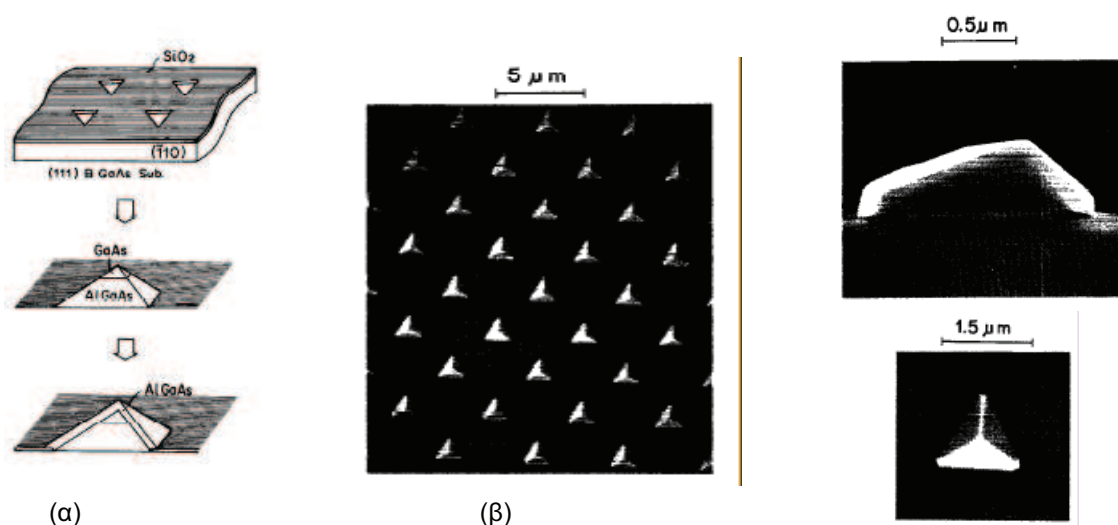
ωμένες τελείες, είτε διδιάστατες παρατάξεις από χβαντικές τελείες (matrices of dots) πάνω σε InSb [59], είτε πάνω σε Si [60], είτε πάνω σε GaAs [61–66]. Ένας τρόπος δημιουργίας μιας τέτοιας διδιάστατης παρατάξης τελειών απεικονίζεται στο σχήμα (2.3α). Με τεχνική λιθογραφίας δημιουργείται μια κανονική διάταξη νησιδίων ενός μη μεταλλικού υλικού (υλικό του φραγμού) στην επιφάνεια του δείγματος. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να διαφοροποιείται η απόσταση μεταξύ του ηλεκτροδίου που καλύπτει την επιφάνεια με τα νησίδια και του επίπεδου του χβαντικού πηγαδιού κι έτσι τα ηλεκτρόνια να εντοπίζονται στις πολύ μικρές περιοχές κάτω από τα νησίδια.

2.1.3 Αντιδιάχυση μεταξύ του φραγμού και του χβαντικού πηγαδιού

Αρχικά, με επιταξία μοριακής δέσμης κατασκευάζεται χβαντικό πηγάδι GaAs πλάτους 3 nm με φραγμούς $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ (πλάτους 20 nm) [67]. Το επάνω στρώμα GaAs πλάτους 10 nm καλύπτεται από στρώμα Si_3N_4 100 nm προς αποφυγήν οξειδωσης ή τήξης της επιφάνειας. Το δείγμα θερμαίνεται τοπικά με δέσμη laser Ar^+ κατά μήκος μιας ορθογώνιας διαδρομής που περιβάλλει μια μη φωτισμένη επιφάνεια διαμέτρου 300–1000 nm. Σε θερμοκρασία περίπου 1000°C συμβαίνει μια απότομη διάχυση ατόμων Ga και As μεταξύ του πηγαδιού και του φραγμού η οποία οδηγεί σε μια τοπική διαμόρφωση του δυναμικού του φραγμού που περιβάλλει την μη φωτισμένη επιφάνεια. Για διαστάσεις της διαδρομής της τάξης των 450 nm το περιοριστικό δυναμικό είναι με καλή προσέγγιση ισότροπη παραβολή.

2.1.4 Επιλεκτική ανάπτυξη

Κατά την μέθοδο αυτή οι χβαντικές τελείες κατασκευάζονται με την επιλεκτική ανάπτυξη ενός ημιαγωγού με μικρότερο χάσμα (πχ. GaAs) στην επιφάνεια ενός δεύτερου ημιαγωγού με μεγαλύτερο χάσμα (AlGaAs). Η επιφάνεια του δείγματος καλύπτεται με μάσκα SiO_2 , η οποία και χαράσσεται σε μικροσκοπικά τρίγωνα. Με τον τρόπο αυτό εμποδίζεται η ανάπτυξη του υλικού σε καθορισμένες περιοχές. Στην επιφάνεια που δεν καλύπτεται με την μάσκα η ανάπτυξη πραγματοποιείται με την μέθοδο της Επιταξίας Μεταλ-Οργανικής Αέριας Φάσης σε θερμοκρασίες 700–800°C. Οι κρύσταλλοι που σχηματίζονται έχουν την μορφή τετραεδρικών πυραμίδων. Τα πρώτα κρυσταλλικά στρώματα είναι από το υλικό της επιφάνειας (AlGaAs), και μόνο η κορυφή της πυραμίδας είναι από GaAs. Με τον τρόπο αυτό προκύπτουν χβαντικές τελείες με μέγεθος μικρότερο από 100 nm. Στο σχήμα 2.4 απεικονίζονται εικόνες τελειών που κατασκευάζονται με επιλεκτική ανάπτυξη.

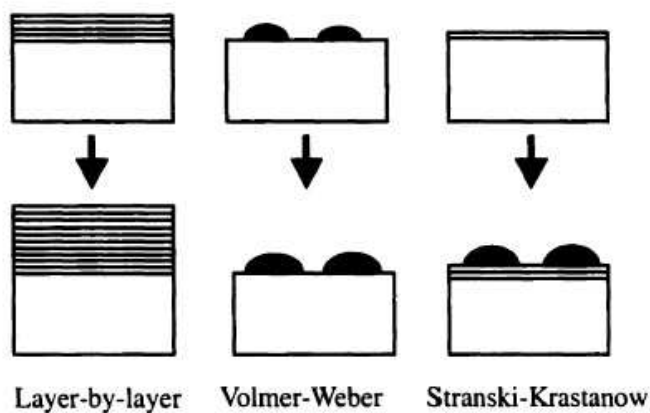


Σχήμα 2.4: (α) Σχηματική παράσταση της διαδικασίας κατασκευής τετραεδρικών κβαντικών τελειών και (β) εικόνες SEM μιας τετραεδρικής δομής GaAs [68].

2.1.5 Αυτοοργάνωση κβαντικών τελειών

Η επιταξιακή ανάπτυξη με αυτοοργάνωση νησιδίων σε δομές που αποτελούνται από υπόστρωμα/ επίστρωμα με μεγάλη διαφορά στις πλεγματικές τους σταθερές, εισήχθη ως μια νέα τεχνική με την οποία ξεπεράστηκαν κάποια προβλήματα που εμφανίζονταν στις προαναφερθείσες μεθόδους. Για παράδειγμα ένα μειονέκτημα των τεχνικών λιθογραφίας είναι η δημιουργία ενός επιρόσθητου στρώματος απογύμνωσης στην επιφάνεια της δομής που προκύπτει, γεγονός που έχει επίδραση στις ηλεκτρικές ιδιότητες κι εμφανίζεται σε μικροσκοπικό επίπεδο με την μορφή μη ακτινοβολουσών ατελειών όπως είναι οι εξαρθρώσεις και τα κενά. Στην περίπτωση των κβαντικών τελειών που δημιουργούνται από διαμορφούμενο ηλεκτρικό πεδίο ή με αντιδιάχυση, προκύπτουν πολύ μικρά δυναμικά εντοπισμού κι έτσι τα φαινόμενα κβάντωσης παρατηρούνται μόνο σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες. Ένα άλλο πρόβλημα που εμφανίζεται είναι η χαμηλή συγκέντρωση και η ανομοιογένεια στο μέγεθος, κι αυτό κάνει ανέφικτη την χρησιμοποίησή τους σε διατάξεις. Οι κβαντικές τελείες που δημιουργούνται σε πλάκες διηλεκτρικών (γυαλιών) χαρακτηρίζονται από μεγάλες συγκεντρώσεις, έχουν όμως το σημαντικό μειονέκτημα της δυσκολίας που παρουσιάζουν στην έγχυση φορέων σ' αυτές.

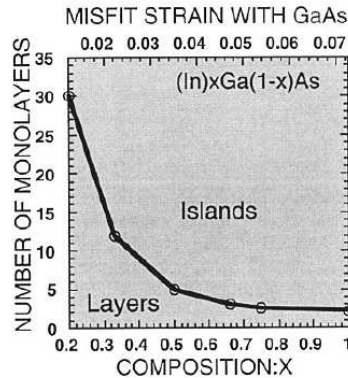
Με την μέθοδο αυτοοργάνωσης κβαντικών τελειών, προκύπτουν τελείες που χαρακτηρίζονται από μεγάλη συγκέντρωση (10^8 - 10^{11} τελείες/cm²) και μεγάλη ο-



Σχήμα 2.5: Οι τρεις τρόποι κρυσταλλικής ανάπτυξης.

μοιογένεια στο μέγεθος (τυπικές διαμέτρους 10-30 nm). Η κρυσταλλική ανάπτυξη πάνω σε ένα υπόστρωμα, μπορεί να συμβεί με έναν από τους τρεις τρόπους που απεικονίζονται στο σχήμα 2.5: τον μηχανισμό Fran-van der Merve [69] ή αλλιώς ανάπτυξη ανά στρώματα, τον μηχανισμό Stranski-Krastanow [70] ή αλλιώς ανάπτυξη σε στρώματα ακολουθούμενη από τον σχηματισμό τρισδιάστατων νησιδίων, και τέλος τον μηχανισμό Volmer-Weber [71] ή αλλιώς σχηματισμό νησιδίων.

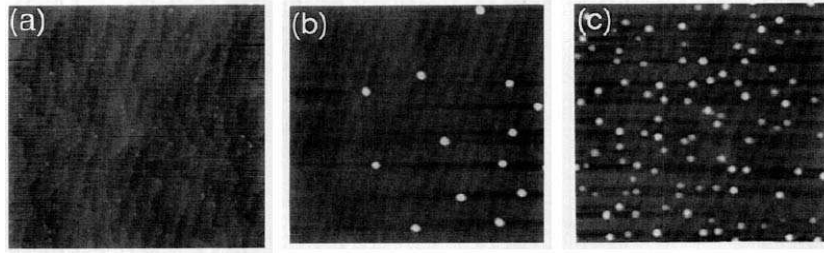
Η επιλογή του κάθε τρόπου εξαρτάται από το επίστρωμα και το υπόστρωμα και συγκεκριμένα από την φύση και την ισχύ των χημικών δεσμών καθώς και την διαφορά των παραμέτρων πλέγματος των δύο αυτών στρωμάτων [72]. Κατά μήκος της ενδοεπιφάνειας, τα άτομα του εναποτιθέμενου στρώματος μπορεί να συνδέονται με πιο ασθενείς (ή πιο ισχυρούς) δεσμούς με τα άτομα της επιφάνειας από ότι με τα άτομα του ίδιου του κρυστάλλου. Σαν αποτέλεσμα, το χημικό δυναμικό των πρώτων στρωμάτων είναι υψηλότερο (ή χαμηλότερο) από το χημικό δυναμικό του άπειρα εκτεινόμενου κρυστάλλου του εναποτιθέμενου υλικού. Η ανάπτυξη Volmer-Weber συμβαίνει όταν οι δεσμοί στην ενδοεπιφάνεια είναι πιο ασθενείς από ότι μεταξύ των ατόμων του εναποτιθέμενου κρυστάλλου, κι έτσι τα άτομα έχουν την τάση να σχηματίσουν νησίδα προκειμένου να μειώσουν την έκταση της ενδοεπιφάνειας. Στην αντίθετη περίπτωση, τα άτομα "διαβρέχουν" όλη την επιφάνεια (ανάπτυξη ανά στρώματα). Στο σημείο αυτό η διαφορά στην πλεγματική σταθερά παίζει καθοριστικό ρόλο στην περαιτέρω ανάπτυξη. Όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά στις πλεγματικές σταθερές, τόσο μεγαλύτερη η τάση σχηματισμού νησιδίων. Στην περίπτωση του GaAs/InAs (το πλέον ευρέως χρησιμοποιούμενο ζευγάρι υλικών), η διαφορά στις



Σχήμα 2.6: Αριθμός των μονοστρωμάτων (monolayers συντ ML) που απαιτούνται για την μετάβαση από 2D→3D ανάπτυξης $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ στην επιφάνεια GaAs, συναρτήσει του κλάσματος συγκέντρωσης In ή της ελαστικής παραμόρφωσης λόγω διαφοράς στις πλεγματικές τους σταθερές [73].

πλεγματικές σταθερές είναι σημαντική (7%) και τότε το επίστρωμα για λίγα μόνο μονοστρώματα (monolayers συντ ML) μπορεί να παραμορφώνεται προσαρμόζοντας την πλεγματική του σταθερά σε αυτήν του υποστρώματος ώστε να μένει κρυσταλλικό και συνεκτικά παραμορφωμένο.

Όταν το πάχος του επιστρώματος υπερβεί μια κρίσιμη τιμή, η ελαστική παραμόρφωση (strain) που δημιουργείται, οδηγεί στην κατάρρευση αυτής της κρυσταλλικής δομής και στην αυθόρμητη δημιουργία τυχαία κατανομημένων νησιδίων με παρόμοια μεγέθη και σχήματα. Το σχήμα και το μέγεθος των νησιδίων που δημιουργούνται εξαρτάται από παράγοντες όπως η ένταση της ελαστικής παραμόρφωσης, η θερμοκρασία και ο ρυθμός ανάπτυξης. Η μετάβαση από την κρυσταλλική (συνεκτικά παραμορφωμένη) φάση στην τυχαία κατανομή νησιδίων καλείται μετάβαση Stranski-Krastanow (SK). Στο σχήμα 2.6 παρουσιάζεται η εξάρτηση του κρίσιμου αριθμού monolayers InGaAs που εναποτίθεται σε υπόστρωμα GaAs, στην οποία συμβαίνει η μετάβαση Stranski-Krastanow, συναρτήσει του κλάσματος x συγκέντρωσης του In ή της ελαστικής παραμόρφωσης λόγω διαφοράς στην πλεγματική σταθερά. Στο σχήμα 2.7 παρουσιάζεται η ανάπτυξη των νησιδίων InAs πάνω σε επιφάνεια GaAs. Η μετάβαση συμβαίνει στα 1.8 ML. Λίγο μετά την μετάβαση, προκύπτουν νησίδια σε κατάσταση κοντά στην ισορροπία, σε σχήμα πυραμίδων [74,75], ή επίπεδων κυκλικών φακών αναπτυγμένων πάνω στο λεπτό στρώμα InGaAs που καλείται στρώμα διαβροχής (wetting layer ή WL) [76–79]. Όταν το ανομοιογενές στρώμα InGaAs καλυφθεί με ένα ακόμη στρώμα GaAs προκύπτει η δομή ενός κβαντικού πηγαδιού με αυξημένο



Σχήμα 2.7: Σχηματική παράσταση του σχηματισμού των αυτοοργανούμενων κβαντικών τελειών InAs πάνω στην επιφάνεια GaAs. Οι διαδοχικές εικόνες αντιστοιχούν σε 1.6, 1.8 και 1.9 monolayers αντίστοιχα [73].

πάχος σε κάποιες πολύ μικρές περιοχές που προκαλεί τον περαιτέρω εντοπισμό των φορέων σε αυτές. Τα πλεονεκτήματα των αυτοοργανούμενων (Self-assembled quantum dots ή SAD) κβαντικών τελειών που προαναφέρθηκαν τις καθιστούν σημαντικούς υποψηφίους σε μελλοντικές εφαρμογές στην ηλεκτρονική και οπτοηλεκτρονική. Τέλος, είναι δυνατόν να κατασκευαστούν κβαντικές τελείες υπό την μορφή μικροκρυστάλλων ημιαγωγών εμβυθισμένων σε διηλεκτρικό πρίσμα γυαλιού [80,81].

2.2 Εφαρμογές

2.2.1 Λείζερ

Η χρησιμοποίηση των κβαντικών τελειών ως υλικό ενίσχυσης στα λέιζερ ημιαγωγών ήταν μια από τις σημαντικότερες κινητήριες δυνάμεις για την έρευνα που σχετίζεται με τις QD, από την ανακάλυψη των πιθανών πλεονεκτημάτων τους (όπως η μη εξάρτηση του ρεύματος κατωφλίου από την θερμοκρασία) το 1982 από τους Arakawa και Sakaki [82]. Μολονότι τα πρώτα μοντέλα, τα οποία βασίζονταν σε ιδανικές, εντελώς ομοιόμορφες συλλογές κβαντικών τελειών έπρεπε να δώσουν την θέση τους σε πιο ρεαλιστικές περιγραφές (συμπεριλαμβανομένων, για παράδειγμα, των φαινομένων ανομοιογενούς διεύρυνσης γραμμής λόγω της ύπαρξης κατανομής διαφόρων μεγεθών QD [83]), είναι αναμενόμενο οι νέες δομές λέιζερ να αποδίδουν καλύτερα από τα μέχρι σήμερα λέιζερ που χρησιμοποιούσαν QWs.

Βασικά χαρακτηριστικά για τις εφαρμογές των λέιζερ αποτελούν το ρεύμα κατωφλίου I_{th} και η χαρακτηριστική θερμοκρασία T_0 . Αυτές οι παράμετροι καθορίζουν το διάστημα θερμοκρασιών στο οποίο μια διάταξη λέιζερ μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Επιπρόσθετα, πολύ σημαντικοί παράγοντες στις εφαρμογές επικοινωνίας είναι η ταχύτητα

διαμόρφωσης, η μέγιστη εξερχόμενη ισχύς καθώς και η ποιότητα της δέσμης. Τα διακριτά ενεργειακά επίπεδα οδηγούν σε σημαντικά χαμηλότερη πυκνότητα ρεύματος κατωφλίου, η οποία με τη σειρά της καταλήγει σε μειωμένη κατανάλωση ενέργειας, χαμηλότερη θέρμανση και σε αύξηση της δυναμικής απόκρισης, η οποία είναι απαραίτητη για την άμεση διαμόρφωση [84]. Το κατώφλι εξαρτάται σε πολύ μικρότερο βαθμό από τη θερμοκρασία σε σχέση με τις 3D δομές ή τις δομές QW, και ιδιαίτερα στην περίπτωση επιλεκτικού εμπλουτισμού p-τύπου [85]. Το ρεύμα κατωφλίου δίνεται από την σχέση: $I_{th}(T) = I_{th}(T_{ref}) \exp[(T - T_{ref})/T_0]$, όπου T η θερμοκρασία της ενεργού περιοχής, T_{ref} μια θερμοκρασία αναφοράς, και T_0 είναι η χαρακτηριστική θερμοκρασία του λέιζερ που εξαρτάται επίσης από την θερμοκρασία και το μήκος της διάταξης και καθορίζεται εμπειρικά. Στα λέιζερ QDs η χαρακτηριστική αυτή θερμοκρασία είναι πολύ μεγάλη κι αυτό εξηγεί την μη εξάρτηση από την θερμοκρασία του ρεύματος κατωφλίου. Επιπλέον, ο εμπλουτισμός p (ή n) προκαλεί εξαιρετικά γρήγορο εφησυχασμό των φορέων, γεγονός σημαντικό για την επίτευξη υψηλών ταχυτήτων διαμόρφωσης.

Ένα άλλο σημαντικό χαρακτηριστικό των λέιζερ κβαντικών τελειών είναι ότι και το μήκος κύματος της εκπομπής εξαρτάται πολύ λιγότερο από τις θερμοκρασιακές μεταβολές, σε σύγκριση με άλλες διατάξεις. Το γεγονός αυτό έχει αποδοθεί στο ευρύ επίπεδο προφίλ ενίσχυσης (gain) των στρωμάτων QD (το οποίο τελικά προέρχεται από την ανομοιογενή διεύρυνση επιπέδου) και μπορεί να εξηγηθεί ως ακολούθως [86]: Από τη μια, το ενεργειακό χάσμα μειώνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας, γεγονός που οδηγεί σε μια μετάθεση του μήκους κύματος προς το ερυθρό. Ταυτόχρονα, οι εσωτερικές απώλειες λόγω αύξησης της απορρόφησης των ελεύθερων φορέων, απαιτούν υψηλότερη συγκέντρωση εγχεόμενων φορέων ώστε να διατηρείται η συνθηκική λειτουργία του λέιζερ. Το γεγονός αυτό με τη σειρά του οδηγεί σε μια άνοδο του επιπέδου Fermi και μετατοπίζει τη μέγιστη τιμή ενίσχυσης (gain) προς υψηλότερες τιμές ενέργειας. Η προκύπτουσα μετάθεση προς το κυανό αντισταθμίζει τουλάχιστον μερικώς τη μετάθεση προς το ερυθρό κι επομένως επεξηγεί την εξαιρετική ευστάθεια του μήκους κύματος που απαντάται στα λέιζερ κβαντικών τελειών. Επιπλέον, το μήκος κύματος εκπομπής εξαρτάται κυρίως από τα διακριτά ενεργειακά επίπεδα των τελειών αντί του ενεργειακού χάσματος (όπως συμβαίνει στις 3D δομές), κι αυτό δίνει την δυνατότητα καθορισμού του με ακρίβεια, μεταβάλλοντας το μέγεθος της τελείας, την σύνθεσή της ή τον αριθμό των εντοπισμένων σε αυτήν ηλεκτρονίων. Η επιλογή του μήκους κύματος του λέιζερ επιτυγχάνεται από πλήθος παραμέτρων. Μια προφανής δυνατότητα επιλογής είναι αυτή των διαφορετικών υλικών. Για την διαδικασία αυτοοργάνωσης των κβαντικών τελειών, (λόγω παραμόρφωσης), υφίστανται περιορισμοί στα διαθέσιμα συστήματα υλικών. Η εκπομπή φωτός από την ορατή

περιοχή (π.χ. AlInAs/AlGaAs) έως την περιοχή υπερύθρου (π.χ. InGaAs/GaAs ή InAs/InP) μπορεί να επιτευχθεί μόνο για δομές III-V.

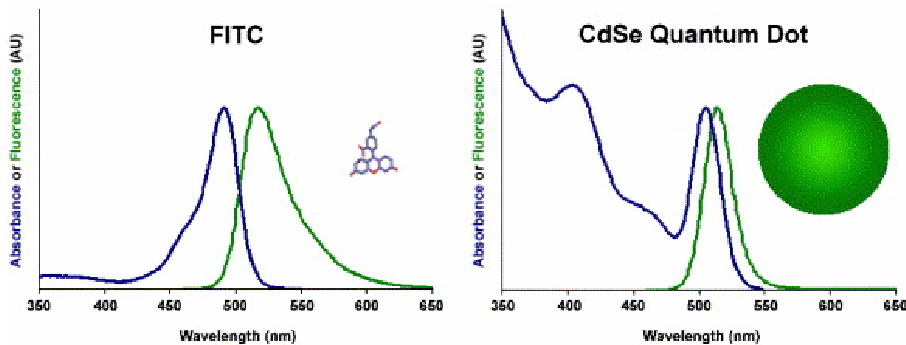
Άλλη παράμετρος είναι το μέγεθος της παραμόρφωσης στο ίδιο το υλικό, εφόσον αυτή καθορίζει τα ενεργειακά επίπεδα σε ένα σημαντικό βαθμό. Η κάλυψη των χβαντικών τελειών με ένα στρώμα μείωσης της παραμόρφωσης κάνει δυνατή την επακριβή ρύθμιση της παραμόρφωσης, ανεξάρτητα της σύνθεσης του υλικού από το οποίο αποτελούνται. Με αυτό τον τρόπο είναι δυνατός ο συντονισμός του μήκους κύματος εκπομπής σε μια περιοχή λίγων εκατοντάδων νανομέτρων, με απλή μεταβολή του πάχους του στρώματος μείωσης της παραμόρφωσης.

Ιδιαίτερου ενδιαφέροντος για τις εφαρμογές επικοινωνιών με οπτικές ίνες είναι τα λέιζερ που λειτουργούν στις περιοχές 1,3 μm και 1,55 μm , εντός των οποίων οι κοινές ίνες πυριτίου παρουσιάζουν ελάχιστο στην απορρόφηση. Γνωρίζουμε ότι τα μήκη κύματος εκπομπής των λέιζερ διαφέρουν ανάλογα με τις εφαρμογές τους. Σε εφαρμογές οπτικής επικοινωνίας απαιτούνται μεγάλα μήκη κύματος ($\geq 1300 \text{ nm}$) ενώ για CD ή DVD απαιτούνται μικρά μήκη κύματος ώστε να διασφαλιστεί η μέγιστη δυνατότητα αποθήκευσης δεδομένων. Οι βασισμένες σε GaAs διατάξεις είναι ιδιαίτερα ελκυστικές, κυρίως λόγω της δυνατότητας χρήσης οικονομικών και υψηλής ποιότητας υποστρωμάτων GaAs. Επομένως, γίνονται προσπάθειες κατασκευής και βελτιστοποίησης λέιζερ χβαντικών τελειών μεγάλου μήκους κύματος [85,87,88] που να χρησιμοποιούν τελείες GaAs.

2.2.2 Βιολογική απεικόνιση

Μία ιδιαίτερα σημαντική εφαρμογή των χβαντικών τελειών σήμερα είναι η χρήση τους στη βιολογική απεικόνιση και σήμανση [54,55,89–91]. Η τεχνολογία είναι πολύ ώριμη, ενώ εδώ και αρκετά χρόνια είναι ήδη διαθέσιμος στο εμπόριο ένας αριθμός προϊόντων. Κατά γενικό κανόνα, οι ουσίες που εκπέμπουν φως, οι καλούμενες “δείκτες” (labels), είναι προσαρτημένες στα μόρια, κάνοντας με αυτό τον τρόπο δυνατή την παρακολούθηση κάθε εξέλιξης στην οποία συμμετέχουν τα μόρια. Με αυτό τον τρόπο, είναι δυνατή, για παράδειγμα, η μελέτη του βαθμού αποτελεσματικότητας με τον οποίο τα θεραπευτικά μόρια που περιέχονται στις φαρμακευτικές ουσίες μπορούν να φτάνουν στα κύτταρα στόχους κι επομένως η εύρεση των μέσων βελτιστοποίησης της φαρμακευτικής ουσίας [89].

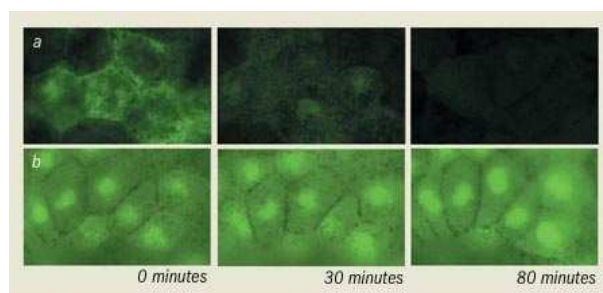
Οι κοινές χρωστικές ουσίες, από την μια πλευρά, παρουσιάζουν έναν αριθμό ανεπιθύμητων χαρακτηριστικών. Πρώτα από όλα, το εκπεμπόμενο φως κατανέμεται σε ένα μάλλον ευρύ φάσμα. Η ταυτόχρονη απεικόνιση διαφορετικών μορίων ή διαφορετικών τμημάτων κυττάρων είναι επομένως πολύ περιορισμένη και μπορεί να είναι δυνατή μόνο



Σχήμα 2.8: Φάσματα εκπομπής (μπλέ) και απορρόφησης (πράσινο) μιας οργανικής χρωστικής (FITC) και μιας κβαντικής τελείας CdSe. Το φάσμα εκπομπής της κβαντικής τελείας είναι στενό και συμμετρικό, ενώ το φάσμα απορρόφησης εκτείνεται έως το υπεριώδες [55].

όταν τα αντίστοιχα φάσματα δεν επικαλύπτονται σημαντικά. Συνήθως, μόνο δύο ή το πολύ τρεις διαφορετικοί βιολογικοί δείκτες μπορούν να χρησιμοποιούνται ταυτόχρονα. Ταυτόχρονα, οι (διαφορετικές) χρωστικές ουσίες πρέπει να διεγείρονται με φως συγκεκριμένου (διαφορετικού) μήκους κύματος, περιορίζοντας περαιτέρω τη δυνατότητα επιλογής δεικτών που να μπορούν να χρησιμοποιούνται ταυτόχρονα. Τέλος, η φωταύγειά τους μειώνεται έντονα με το χρόνο και εξαφανίζεται εντελώς μετά από λίγα μόλις λεπτά, ένα φαινόμενο που είναι γνωστό ως φωτολεύκανση.

Οι κβαντικές τελείες, από την άλλη, εμφανίζουν βελτιωμένες ιδιότητες σε όλα τα ζητήματα που αναφέρονται παραπάνω. Παρουσιάζουν στενό και συμμετρικό φάσμα εκπομπής (Σχήμα 2.8), του οποίου το μήκος κύματος μπορεί να καθοριστεί με ακρίβεια ανάλογα με τη χημική σύσταση και το μέγεθος του νανοκρυστάλλου (engineering). Μεταβάλλοντας την σύνθεση ή το μέγεθος της κβαντικής τελείας, το φάσμα εκπομπής μπορεί να καλύψει όλη την περιοχή από το εγγύς υπεριώδες έως το ορατό και το εγγύς υπέρυθρο, με αντίστοιχα μήκη κύματος στην περιοχή 200-2000 nm. Παρουσιάζουν ευρύ φάσμα απορρόφησης (Σχήμα 2.8). Η ιδιότητα αυτή επιτρέπει την διέγερση πολλαπλών κβαντικών τελειών διαφορετικού χρώματος, άρα και διαφορετικού μεγέθους, από μία μόνο πηγή φωτός. Οι βιολογικοί δείκτες κβαντικών τελειών είναι 100-200 φορές πιο ανθεκτικοί στη φωτολεύκανση από τις συμβατικές χρωστικές ουσίες. Τα αρχικά προβλήματα που υπήρχαν σχετικά με την απόκτηση νανοσωματιδίων τα οποία να είναι μη τοξικά και σταθερά σε βιολογικά περιβάλλοντα δείχνουν να έχουν ξεπεραστεί. Ήδη το 2002 οι Dubertret et al. επέδειξαν την επιτυχή χρήση των βιολογικών δεικτών κβαντικών τελειών για την απεικόνιση ζωντανών κυττάρων [91].



Σχήμα 2.9: Νέες βιοσυμβατές κβαντικές τελείες χρησιμοποιούνται στην βιολογική απεικόνιση. Το σχήμα παρουσιάζει βιολογική απεικόνιση εμβρύου βατράχου: (a) Χρησιμοποιώντας μια οργανική χρωστική ουσία. Φαίνεται καθαρά η μείωση της φωταύγειας με την πάροδο του χρόνου (φωτολεύκανση). (b) Χρησιμοποιώντας κβαντική τελεία. Είναι φανερό ότι η φωταύγεια διαρκεί πολύ περισσότερο [94].

Κβαντικές τελείες CdS καλυμμένες με ένα εξωτερικό στρώμα ZnS τους επέτρεψαν να παρακολουθήσουν την ανάπτυξη ενός εμβρύου βατράχου σε γυρίνο. Οι κβαντικές τελείες που χρησιμοποιούνται στην βιολογία είναι συνήθως σφαιρικές και αποτελούνται από έναν ημιαγωγικό πυρήνα (core) διαστάσεων 1-10 nm ή/και ένα περιβάλλον λεπτό στρώμα ημιαγωγικού υλικού με μεγαλύτερο ενεργειακό χάσμα που καλείται φλοιός (shell). Ο φλοιός αδρανοποιεί την επιφάνεια, προστατεύει τον πυρήνα από την οξείδωση, εμποδίζει τη διαφυγή Cd ή Se στο περιβάλλον διάλυμα και βελτιώνει τη φωταύγεια (αυξάνοντας τη κβαντική απόδοση έως 50από σύνθετους ημιαγωγούς όπως ZnS, CdS, ZnSe, CdTe, PbSe, PbS. Μέχρι τώρα χρησιμοποιούνται ευρέως σε βιολογικές εφαρμογές κβαντικές τελείες με πυρήνα CdSe ή/και φλοιό ZnS ή CdS [92, 93] Τελευταία γίνονται προσπάθειες αλλαγής των συχνά χρησιμοποιούμενων δομών CdS και CdSe σε συστήματα υλικών που εκπέμπουν στο υπέρυθρο τμήμα του φάσματος (π.χ. InP ή InAs) επειδή ο ιστός είναι λίγο-πολύ διαφανής σε αυτά τα μήκη κύματος [89].

Η σημασία στην βιολογία της μελέτης των οπτικών ιδιοτήτων των κβαντικών τελειών σε σχέση με το μέρος της παρούσας διδακτορικής διατριβής που αναφέρεται στην μαγνητοαπορρόφηση απλών και διπλών κβαντικών τελειών, γίνεται εμφανής από το γεγονός ότι η σχετική εργασία [95], εκτός από την επιλογή της για αναδημοσίευση στο Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology: <http://www.vjnano.org>, April 24, 2006 issue, επιλέχθηκε να αναδημοσιευτεί στο Virtual Journal of Biological Physics Research: <http://www.vjbio.org>, April 15, 2006.

2.2.3 Φωτεινή πηγή μεμονωμένου φωτονίου

Τα τελευταία χρόνια η μελέτη της κβαντικής οπτικής των ημιαγωγών αποτελεί ένα σημαντικό πεδίο της βασικής φυσικής με ολοένα και αυξανόμενο ενδιαφέρον. Το ενδιαφέρον αυτό τροφοδοτείται από την ανάπτυξη δομών κβαντικών τελειών υψηλής ποιότητας. Όπως έχει αναφερθεί, οι δομές αυτές συνδυάζουν ιδιότητες ανάλογες με αυτές των ατόμων, όπως το διακριτό φάσμα και οι οξείες κορυφές στα φάσματα φωτοφωταύγειας, με το πλεονέκτημα ότι μπορούν να αποτελέσουν βασικά συστατικά συστημάτων της στερεάς κατάστασης. Επιπλέον, μπορεί να οδηγήσουν στην γένεση μη-κλασσικού φωτός, κάτι που τις καθιστά σημαντικούς υποψηφίους σε νέες εφαρμογές στην κρυπτογραφία στην μετάδοση της πληροφορίας, σε κβαντικούς υπολογιστές κ.α. Πριν προχωρήσουμε στην περιγραφή της φωτεινής πηγής μεμονωμένου φωτονίου, θα αναφέρουμε συνοπτικά κάποια στοιχεία της στατιστικής των φωτονίων [96].

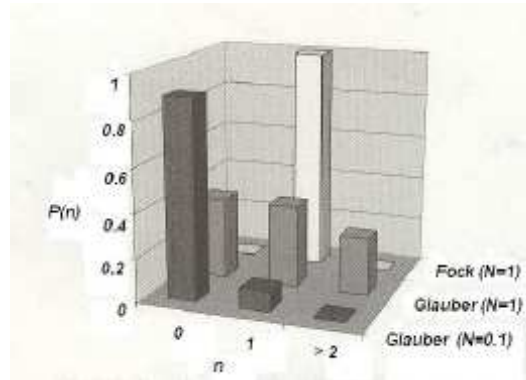
Μια συνεκτική κατάσταση (κατάσταση Glauber), αποτελεί την καλύτερη προσέγγιση μιας πηγής κλασσικού φωτός, με καλά καθορισμένα μέγεθος και φάση στην κβαντομηχανική περιγραφή του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Παράδειγμα μιας τέτοιας πηγής αποτελεί ένα λέιζερ που λειτουργεί πάνω από το κατώφλι. Η κατάσταση Glauber $|a\rangle$ αποτελεί ιδιοκατάσταση του τελεστή καταστροφής \hat{a} , δηλαδή: $\hat{a}|a\rangle = a|a\rangle$. Η μιγαδική ιδιοτιμή του τελεστή καταστροφής $a = |a|\exp(i\phi)$ αντιστοιχεί στο (κλασσικό) μέτρο του ηλεκτρομαγνητικού κύματος με $N = |a|^2$, όπου N είναι ο μέσος αριθμός των φωτονίων σε έναν τρόπο (mode), ενώ η ϕ αντιπροσωπεύει την αναμενόμενη τιμή της φάσης. Ορίζεται η ιδιοκατάσταση του τελεστή αριθμού φωτονίων \hat{n} ή κατάσταση Fock: $\hat{n}|n\rangle = N|n\rangle$. Μια τέτοια κατάσταση δημιουργείται από μια φωτεινή πηγή μεμονωμένου φωτονίου. Μια συνεκτική κατάσταση $|a\rangle$ μπορεί να γραφεί σε όρους συναρτήσεων Fock, δηλαδή

$$|a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{|a|^2}{2}\right) \frac{a^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (2.1)$$

Η κατανομή του αριθμού των φωτονίων που βρίσκονται σε αυτήν την συνεκτική κατάσταση είναι μια κατανομή Poisson, δηλαδή η πιθανότητα να βρεθούν n φωτόνια σε μια συνεκτική κατάσταση $|a\rangle$ με μέσο αριθμό των φωτονίων $N = a^2$ δίνεται από:

$$P_a(n) = |\langle n|a\rangle|^2 = \frac{N^n}{n!} \exp(-N) \quad (2.2)$$

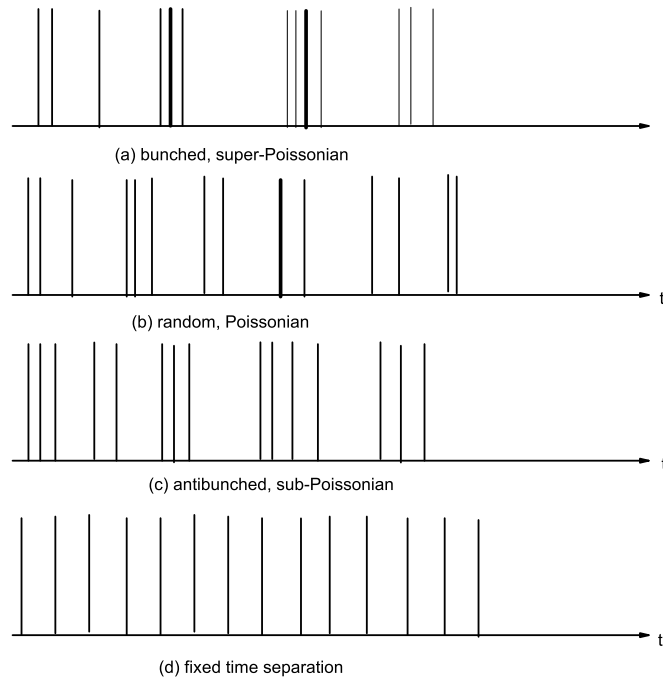
Οι καταστάσεις που έχουν μια πιο στενή ή πιο ευρεία κατανομή από την κατανομή Poisson καλούνται αντίστοιχα sub Poissonian ή super Poissonian και μόνον οι τελευταίες εκπέμπονται από τις κλασσικές πηγές φωτός. Στο σχήμα 2.10 φαίνεται κα-



Σχήμα 2.10: Κατανομή του αριθμού των φωτονίων για μια κατάσταση Fock και δύο καταστάσεις Glauber με $N=1$ και $N=0.1$ [96].

θαρά η διαφορά στην κατανομή των φωτονίων μεταξύ μια κατάστασης Fock και μιας κατάστασης Glauber. Αν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση Fock με $N=1$, τότε ο αριθμός των φωτονίων είναι ακριβώς $n = 1$. Αντίθετα οι δύο συνεκτικές καταστάσεις (Glauber), εμφανίζουν μια ευρεία κατανομή: Για $N=1$: $P(n = 0) = 0.37$, $P(n = 1) = 0.37$ και $P(n > 2) = 0.26$. Εξαιτίας της σημαντικής πιθανότητας ο αριθμός των εκπεμπομένων φωτονίων να είναι μεγαλύτερος του 2, συμπεραίνουμε ότι δεν είναι δυνατή η παραγωγή ασθενών παλμών λέιζερ (κάτι απαραίτητο στην κρυπτογραφία), όταν ο μέσος αριθμός φωτονίων είναι $N=1$. Προκειμένου να μειωθεί σημαντικά η πιθανότητα $P(n > 2)$, για μια συνεκτική πηγή φωτός, θα πρέπει ο μέσος αριθμός των φωτονίων να γίνει $N=0.1$. Αλλά τότε, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.10, το 90 τοις εκατό των παλμών δεν θα περιέχουν καθόλου φωτόνια.

Χαρακτηριστικό γνώρισμα μιας φωτεινής πηγής αποτελεί η χρονική αλληλουχία των εκπεμπόμενων φωτονίων. Τα φωτόνια από τις συνήθεις πηγές φωτός όπως είναι οι φασματικές λάμπες ή οι θερμικές πηγές φωτός φτάνουν σε δέσμες (ομάδες). Το φαινόμενο αυτό καλείται *photon bunching*. Η κατανομή των φωτονίων είναι *super Poissonian* και παρουσιάζεται στο σχήμα 2.11(a). Αντίθετα, η αλληλουχία των φωτονίων που εκπέμπονται από λέιζερ είναι τυχαία, τα φωτόνια είναι πλήρως ασυσχέτιστα και η κατανομή είναι *Poissonian* (σχήμα 2.11b). Ένα άτομο ή μόριο εκπέμπει “αντιδεσμικά φωτόνια” (*antibunched photons*), δηλαδή όταν ανιχνευτεί ένα φωτόνιο, είναι αδύνατον να ανιχνευτεί ένα δεύτερο φωτόνιο αμέσως μετά. Η έννοια του αντιδεσμικού φωτονίου μπορεί να ερμηνευτεί ως εξής: Αν θεωρήσουμε ένα σύστημα δύο καταστάσεων το οποίο εκπέμπει ένα φωτόνιο την χρονική στιγμή $t=0$, είναι αδύνατο να εκπέμπει ένα δεύτερο φωτόνιο αμέσως μετά, εφόσον είναι στην θεμελιώδη



Σχήμα 2.11: Σχηματική παρουσίαση της αλληλουχίας των εκπεμπόμενων φωτονίων σε τέσσερις περιπτώσεις: (a) φωτόνια κατά δέσμες (ομάδες), (b) τυχαία αλληλουχία φωτονίων, (c) αντιδεσμικά φωτόνια και (d) φωτόνια εκπεμπόμενα κατά ίσα χρονικά διαστήματα.

κατάσταση. Το επόμενο φωτόνιο μπορεί να εκπεμφθεί μετά από κάποιο χρόνο ο οποίος εξαρτάται από τους χρόνους διέγερσης και επανασύνδεσης. Η κατανομή των εκπεμπόμενων φωτονίων είναι sub Poissonian και απεικονίζεται στο σχήμα 2.11c. Τέλος, μια φωτεινή πηγή μεμονωμένου φωτονίου μπορεί να εκπέμπει φωτόνια μέσα σε μικρά χρονικά διαστήματα, και με καλά καθορισμένες χρονικές αποστάσεις μεταξύ δύο διαδοχικών γεγονότων εκπομπής (σχήμα 2.11d).

Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατή η κωδικοποίηση πληροφορίας σε ένα μεμονωμένο φωτόνιο, κάτι που μπορεί να χρησιμοποιηθεί μελλοντικά στους κβαντικούς υπολογιστές και στην κρυπτογραφία.

Η πραγματοποίηση μιας φωτεινής πηγής μεμονωμένου φωτονίου απαιτεί τρία βασικά στοιχεία: έναν κβαντικό εκπομπό, ο οποίος να εκπέμπει ένα μόνο φωτόνιο κάθε φορά,

ρύθμιση των διαδικασιών της διέγερσης και της επανασύνδεσης, καθώς και αποτελεσματικό συσχετισμό των φωτονίων που εκπέμπονται.

Αυτοοργανούμενες κβαντικές τελείες InAs, παρότι λειτουργούν σε χαμηλές θερμοκρασίες, αποτελούν ιδανικούς υποψηφίους για χρήση ως εκπομποί, γιατί έχουν μεγάλη κβαντική απόδοση και εκπέμπουν ισχυρά αντιδεσμικά φωτόνια [96]. Η ύπαρξη αντιδεσμικών φωτονίων αποτελεί αναγκαία αλλά όχι ικανή συνθήκη καθώς τα φωτόνια εκπέμπονται τυχαία. Έτσι απαιτείται ένας επιπρόσθετος μηχανισμός που να ελέγχει την διαδικασία εκπομπής και με τον τρόπο αυτό να πετυχαίνεται μια αλληλουχία γεγονότων εκπομπής μεμονωμένων φωτονίων, καλά καθορισμένη. Με διέγερση με παλμούς μιας αυτοοργανούμενης κβαντικής τελείας, είναι δυνατή η εκπομπή ενός φωτονίου λόγω εξιτονικής μετάβασης, με καλά καθορισμένο τρόπο. Τέλος, τα φωτόνια εκπέμπονται από τους κβαντικούς εκπομπούς προς όλες τις κατευθύνσεις, κι έτσι δεν μπορεί να υπάρξει αποτελεσματική παγίδευσή τους για εφαρμογές. Έτσι, για πρακτικούς σκοπούς, ο εκπομπός συζεύγνυται με μια μικροκοιλότητα στην οποία γίνεται επιλογή φωτονίων συγκεκριμένης διεύθυνσης, τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε μελλοντικές εφαρμογές.

2.2.4 Μνήμη, κβαντικοί υπολογιστές, κυτταρικά αυτόματα, νανοφωτονικοί διακόπτες κλπ

Μολονότι το μεγαλύτερο ποσοστό της έρευνας έχει πραγματοποιηθεί για τις διατάξεις που περιγράφονται στις προηγούμενες ενότητες, επενδύθηκαν επίσης σημαντικές προσπάθειες στην διερεύνηση πιο "έξωτικών" εφαρμογών. Οι οπτικές μνήμες που χρησιμοποιούν κβαντικές τελείες, για παράδειγμα, υπόσχονται ότι θα αποφέρουν μέσα αποθήκευσης εξαιρετικά υψηλής πυκνότητας [97].

Σε αυτό το σημείο, η ανομοιογενής διεύρυνση των συλλογών αυτοοργανούμενων QD χρησιμοποιείται για την επίτευξη συνεχούς καύσης φασματικής γραμμής οπών (PSHB ή persistent spectral hole-burning). Με τη PSHB τα φάσματα απορρόφησης των υλικών τροποποιούνται με τέτοιο τρόπο ώστε να επέρχεται κορεσμός της απορρόφησης σε ορισμένα μήκη κύματος (οι καλούμενες φασματικές οπές). Αυτές οι οπές αντιστοιχούν στο δυαδικό "0", ενώ η απουσία μιας οπής θα ήταν το "1". Με τη χρήση πολλαπλών συχνοτήτων σε μια δέσμη λέιζερ είναι επομένως δυνατή η αποθήκευση πολλαπλών ψηφίων (bit) στον εστιακό όγκο του λέιζερ, αυξάνοντας με αυτό τον τρόπο την πυκνότητα αποθήκευσης κατά πολλές τάξεις μεγέθους.

Μια άλλη σύλληψη που χρησιμοποιεί το μεγάλο εύρος των οπτικών μεταβάσεων είναι το φασματόμετρο κβαντικών τελειών, το οποίο προτάθηκε από τους Jimenez et al. [98]. Φως διαφορετικών μηκών κύματος μπορεί να απορροφάται για τη δημιουργία

φορέων εντός των κβαντικών τελειών, ανάλογα με τις ενεργειακές τους καταστάσεις, κι επομένως ανάλογα με το μέγεθός τους. Επομένως, για μια διάταξη ανίχνευσης ευρέων φασματικών περιοχών, θα είναι απαραίτητη μια μεγάλη ανομοιογενής διεύρυνση.

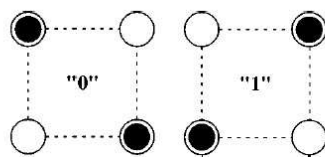
Οι καταστάσεις στροφορμής συζευγμένων κβαντικών τελειών ενός ηλεκτρονίου μπορούν να χρησιμοποιούνται για κβαντικούς υπολογισμούς [99]. Αρκετές πειραματικές μελέτες [100–104] υποστηρίζουν ότι το σπίν του ηλεκτρονίου μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε κβαντικούς υπολογιστές, εξαιτίας του μεγάλου χρόνου ζωής της συνοχής φάσης (dephasing) που εμφανίζει (0.1μs). Στην βιβλιογραφία αναφέρονται μέθοδοι [99] αποτελεσματικού ελέγχου και χειρισμού των καταστάσεων του ηλεκτρονικού σπίν στις μεμονωμένες κβαντικές τελείες καθώς και τρόποι συσχετισμού των σπίν των ηλεκτρονίων σε δύο διαφορετικές τελείες, κάτι που αποτελεί σημαντική προϋπόθεση στον τομέα επεξεργασίας της πληροφορίας. Έτσι, οι προσπάθειες χειρισμού του ηλεκτρονικού σπίν στις μεμονωμένες κβαντικές τελείες κινούνται προς δύο κατευθύνσεις:

- στην βελτίωση της ήδη υπάρχουσας τεχνολογίας των παραδοσιακών υπολογιστών
- στην δημιουργία και εφαρμογή νέων υπολογιστικών αλγόριθμων με qubits (κάθε qubit αντιστοιχεί σε μία εκ των δύο καταστάσεων ενός κβαντικού συστήματος).

Στους παραδοσιακούς υπολογιστές το ηλεκτρονικό σπίν ενδυναμώνει την λειτουργία των κβαντικών ηλεκτρονικών διατάξεων όπως τρανζίστορ που χρησιμοποιούν ρεύματα σπίν και έγχυση σπίν, μη πτητικές μνήμες κλπ [105]. Για την πραγματοποίηση κβαντικών υπολογισμών, το σπίν του εντοπισμένου ηλεκτρονίου αντιστοιχεί σε ένα qubit. Επιπλέον, οι μεγάλες αποστάσεις (μέχρι 100 μm) που τα σπίν μπορούν να μεταφερθούν εν φάση, τα καθιστούν ιδανικούς υποψήφιους για μεταφορά πληροφορίας σε διατάξεις της στερεάς κατάστασης. Σε άλλες περιπτώσεις κβαντικών υπολογισμών (αλλά και στην κβαντική κρυπτογραφία) χρησιμοποιούνται φωτεινές πηγές μεμονωμένου φωτονίου, οι οποίες μπορούν και πάλι να έχουν ως συστατικό τους κβαντικές τελείες [106].

Τα νέα λογικά κυκλώματα που χρησιμοποιούν κυτταρικά αυτόματα κβαντικών τελειών (quantum-dot cellular automata συντ QCA) θα μπορούσαν να είναι το κλειδί για μια αυξημένη πυκνότητα στα ολοκληρωμένα κυκλώματα, λόγω του πολύ μικρού μεγέθους των QD.

Για παράδειγμα, χρησιμοποιώντας QCA κυψελίδες με τελείες διαμέτρου 20 nm, ένα κύκλωμα ανθροιστή (σχήμα 2.14), θα καταλάμβανε επιφάνεια 1 μm². Η βασική



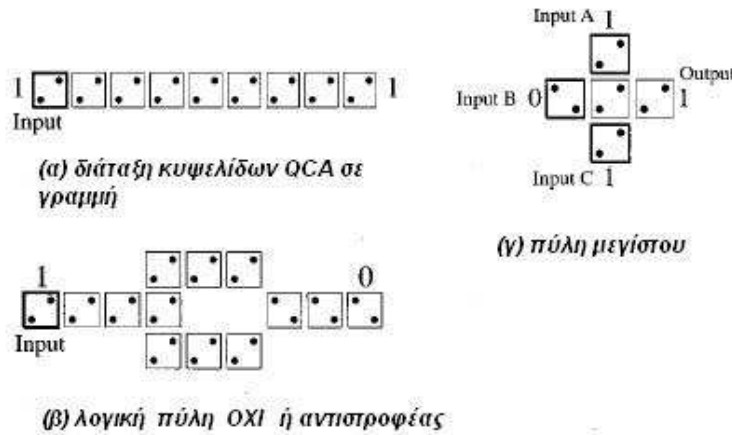
Σχήμα 2.12: Οι δύο ισοδύναμες πολώσεις της θεμελιώδους στάθμης μιας βασικής κυψελίδας που αποτελείται από τέσσερις χβαντικές τελείες στις κορυφές ενός τετραγώνου [107].

κυψελίδα αποτελείται από τέσσερις QD διαταγμένες σε ένα τετράγωνο. Τα ηλεκτρόνια μπορούν να κινούνται μεταξύ των χβαντικών τελειών αλλά δεν μπορούν να εγκαταλείψουν το τετράγωνο [107]. Όταν εισάγονται δύο επιπλέον ηλεκτρόνια, οι δυνάμεις Coulomb τα απωθούν σε αντίθετες γωνίες. Επιλέγοντας τις γωνίες που θα καταλαμβάνονται, προκύπτουν δύο ισοδύναμες ενεργειακά πολώσεις που αντιστοιχούν στις λογικές καταστάσεις "0" και "1" και παρουσιάζονται στο σχήμα 2.12. Αν δύο κυψελίδες βρεθούν σε επαφή, λόγω της αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων, οι κυψελίδες αποκτούν την ίδια πόλωση και άρα αντιστοιχούν στην ίδια λογική κατάσταση. Αν η πόλωση μίας εκ των δύο αλλάξει βαθμιαία, η δεύτερη αλλάζει απότομα πόλωση (σαν διακόπτης).

Χρησιμοποιώντας κατάλληλες διατάξεις QCA, κατασκευάζονται λογικές πύλες Boole. Η πιο απλή διάταξη QCA, είναι μια γραμμή αποτελούμενη από βασικές κυψελίδες, που απεικονίζεται στο σχήμα 2.13. Η κατάσταση με την χαμηλότερη ενέργεια, είναι αυτή κατά την οποία όλες οι κυψελίδες έχουν την ίδια πόλωση. Το αριστερό άκρο της γραμμής χρησιμοποιείται για την είσοδο δεδομένου (input) (σχήμα 2.13), το οποίο αίρει τον εκφυλισμό της θεμελιώδους κατάστασης της πρώτης κυψελίδας. Η πρώτη κυψελίδα αποκτά μια συγκεκριμένη πόλωση. Εφόσον τώρα η πρώτη και η δεύτερη κυψελίδα έχουν διαφορετική πόλωση το σύστημα βρίσκεται σε διηγευμένη κατάσταση και όλες οι ακόλουθες κυψελίδες πρέπει να αλλάξουν πόλωση ώστε το σύστημα να βρεθεί και πάλι σε ισορροπία. Με τον τρόπο αυτό συνεχίζονται οι υπολογισμοί μέχρι την έξοδο που είναι η κυψελίδα στο δεξί άκρο.

Στο σχήμα 2.13 απεικονίζονται κάποιες λογικές πύλες που έχουν δημιουργηθεί από διατάξεις κυτταρικών αυτόματων χβαντικών τελειών.

Η οπτική μεταφορά εγγύς πεδίου μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων συντονισμού σε ένα σύστημα τριών τελειών (QDin, QDout και QDcontrol) μπορεί να αξιοποιείται για *νανοφωτονικούς διακόπτες*. Οι M. Ohtsu et al. [108], χρησιμοποίησαν κυβικές χβαντικές τελείες CuCl σε μήτρα NaCl για να περιγράψουν την αρχή λειτουργίας



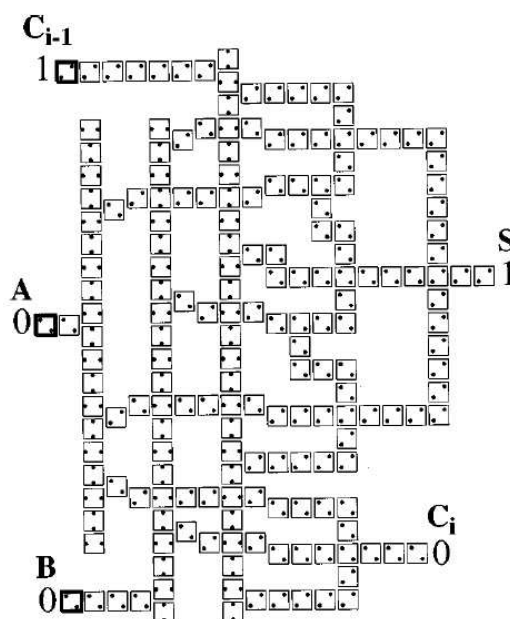
Σχήμα 2.13: Μια διάταξη (σε γραμμή) κυτταρικών αυτομάτων κβαντικών τελειών και διάφορες λογικές πύλες [107].

ενός νανοφωτονικού διακόπτη. Οι εξιτονικές ενέργειες του επιπέδου (n_x, n_y, n_z) μιας κυβικής τελείας CuCl μήκους πλευράς L , δίνονται από:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2M\alpha^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (2.3)$$

όπου $\alpha = L - a_B$ η ενεργός ακμή, a_B η εξιτονική ακτίνα Bohr, και M η μάζα του εξιτονίου που αντιστοιχεί στην μεταφορική του κίνηση. Στο σχήμα 2.15(a) απεικονίζονται δύο κυβικές κβαντικές τελείες QDI και QDO. Σύμφωνα με την Εξ.(2.3), οι καταστάσεις $(1,1,1)$ της QDI και $(2,1,1)$ της QDO έχουν την ίδια ενέργεια, λαδ'η βρίσκονται σε συντονισμό. Για τις καταστάσεις με την ίδια ενέργεια η οπτική αλληλεπίδραση εγγύς πεδίου δίνεται από ένα Uukava δυναμικό $V(r) = A \frac{\exp(-\mu r)}{r}$, όπου r η απόσταση των δύο τελειών μεταξύ τους, A η σταθερά σύζευξης που εξαρτάται από τις πειραματικές συνθήκες και μ η ενεργός μάζας της συνάρτησης Uukava η οποία εξαρτάται από την ενέργεια του εξιτονίου της τελείας και την ενέργεια του εξιτονίου του πίνακα NaCl [108].

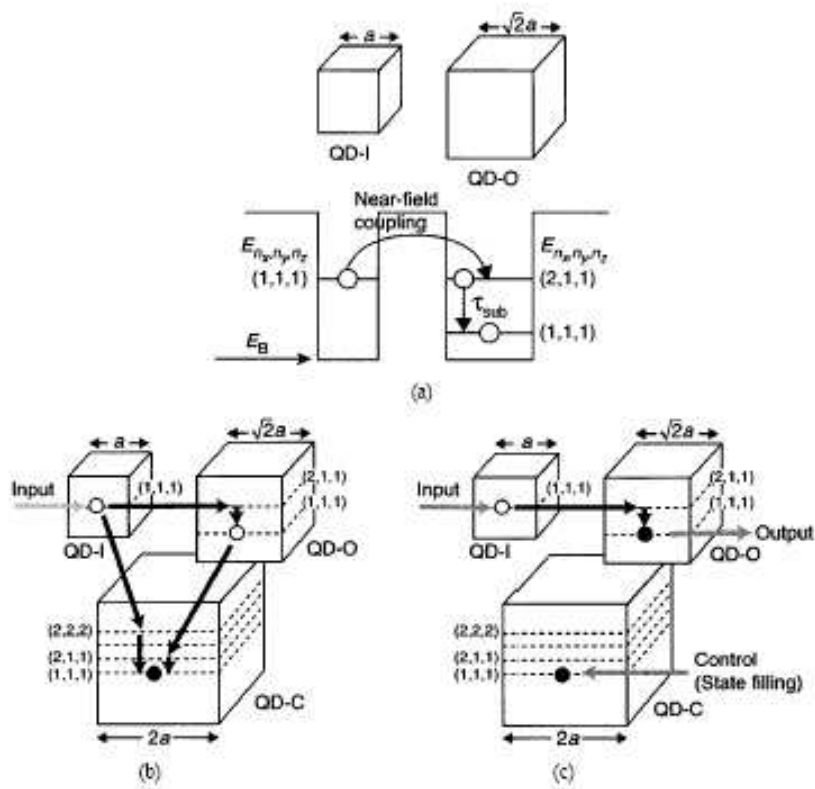
Η ενέργεια της οπτικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο τελειών εκτιμάται περίπου 10^{-4} eV, η οποία αντιστοιχεί σε χρόνο μετάβασης της ενέργειας $\tau_{optical}=20$ ps που είναι πολύ μικρότερος του χρόνου ζωής του εξιτονίου (ns). Επιπλέον ο χρόνος μετάβασης μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών της τελείας είναι μικρότερος (μερικά ps)



Σχήμα 2.14: Μια διάταξη κυτταρικών αυτομάτων κβαντικών τελειών που υπολογίζει ολικό άθροισμα [107].

Έτσι, το μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας του εξιτονίου της τελείας QDI μεταφέρεται τελικά στην κατώτερη στάθμη (1,1,1) της QDO, όπου το εξιτόνιο επανασυνδέεται. Στα σχήματα 2.15(b) και (c), παρουσιάζονται οι καταστάσεις OFF και ON ενός νανοφωτονικού διακόπτη που αποτελείται από τρεις κβαντικές τελείες: QDI (input), QDO (output) και QDC (control). Οι καταστάσεις (1,1,1) της QDI, (2,1,1) της QDO και (2,2,2) της QDC είναι σε συντονισμό. Επίσης σε συντονισμό είναι οι (1,1,1) της QDO και (2,1,1) της QDC. Όταν ο διακόπτης είναι στην κατάσταση OFF, τα εξιτόνια μεταφέρονται από την QDI στο κατώτερο επίπεδο (1,1,1) της QDO και από εκεί μπορούν να διαφύγουν στο επίπεδο (1,1,1) της QDC, κι έτσι το σήμα στην έξοδο διακόπτεται. Εφαρμόζοντας ένα σήμα ελέγχου στο επίπεδο QDC, η πλήρωση όλων των σχετικών καταστάσεων φράζει αυτή τη δίοδο διαφυγής και το εξιτόνιο παραμένει στο επίπεδο QDO όπου και επανασυνδέεται (κατάσταση ON του διακόπτη). Άλλη εφαρμογή των κβαντικών τελειών είναι η χρήση τους σε φωτοανιχνευτές [109, 110] και φωτοενισχυτές [111].

Πρέπει να τονιστεί ότι η παραπάνω λίστα δεν επιδιώκει να είναι εκτενής ή ολοκληρωμένη. Παραμένει να εξεταστεί ποιες άλλες ιδέες θα διατυπωθούν και τελικά θα μπορέσουν να υλοποιηθούν σε πραγματικές εφαρμογές.



Σχήμα 2.15: Αρχή λειτουργίας ενός νανοφωτονικού διακόπτη [108].

Κεφάλαιο 3

Βασικές έννοιες

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται κάποιες βασικές έννοιες που χρησιμοποιούνται στην ανάπτυξη της παρούσας διατριβής. Η τροποποίηση της μορφής της πυκνότητας καταστάσεων (DOS), ανάλογα με την διαστατικότητα παίζει ουσιώδη ρόλο στις οπτικές ιδιότητες. Όπως θα φανεί στο κεφάλαιο 5, το φάσμα απορρόφησης μιας απλής παραβολικής τελείας, που περιλαμβάνει μια σειρά από οξείες κορυφές, συνδέεται άμεσα με την μορφή της DOS στα μηδενοδιάστατα συστήματα.

Οι ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοενέργειες ηλεκτρονίων και οπών που είναι εντοπισμένοι σε μια τελεία, εξαρτώνται από το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό της τελείας. Η μορφή του περιοριστικού δυναμικού εξαρτάται από την μέθοδο κατασκευής της κβαντικής τελείας. Παρουσιάζονται κάποια θεωρητικά μοντέλα περιοριστικών δυναμικών που έχουν χρησιμοποιηθεί. Ωστόσο, στα πλαίσια του δικού μας υπολογιστικού προγράμματος, έχουμε την δυνατότητα να βρίσκουμε τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις για οποιοδήποτε ρεαλιστικό δυναμικό.

Ο υπολογισμός των μονοσωματιδιακών καταστάσεων γίνεται λύνοντας την εξίσωση ενεργού μάζας στα πλαίσια της προσέγγισης των περιβαλλουσών συναρτήσεων.

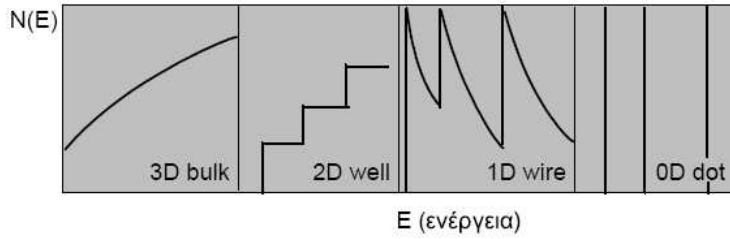
Εξαιτίας των διακριτών καταστάσεων της τελείας, οι συναρτήσεις κατανομής ηλεκτρονίων και οπών (οι οποίες χρησιμοποιούνται στις οπτικές ιδιότητες) δεν μπορούν να προσεγγιστούν από συναρτήσεις Fermi-Dirac, παρά μόνο σε υψηλές θερμοκρασίες. Κατά συνέπεια, παρουσιάζουμε στο κεφάλαιο αυτό, τις συνθήκες που καθορίζουν τον εποικισμό των καταστάσεων μιας κβαντικής τελείας.

Η έννοια του εξιτονίου στους τρισδιάστατους (bulk) ημιαγωγούς τροποποιείται στην περίπτωση των κβαντικών τελειών. Τα εξιτονικά φαινόμενα είναι πολύ σημαντικά αφενός μεν γιατί μελετάμε τις οπτικές ιδιότητες κοντά στο χάσμα, αφετέρου δε γιατί στις κβαντικές τελείες λόγω του τρισδιάστατου περιοριστικού δυναμικού η

αλληλεπίδραση Coulomb είναι ενισχυμένη. Τέλος, παρουσιάζουμε τις διαδικασίες εφηρευαζμού και επαναζύνδεζης ζτις κβαντικές τελείες, οι οποίες παίζουζ καθοριζτικό ρόλο ζτα φάζματα φωτοφωταύγειας.

3.1 Πυκνότητα καταζτάζεων

Το ενεργειακό φάζμα των ηλεκτροζίων που είναι εντοπιζμένα ζε μια κβαντική τελεία είναι διακριτό λόγω του τριζδιάζατου περιοριζτικού δυναμικού. ζτις δομές αυτέζ, που η τυπική τουζ διάζαζη κυμαίνετα από 10-100 nm, η απόζαζη μεταζύ των γειτοζικών ενεργειακών τουζ επιπέδων είναι της τάζης των μερικών meV. Όπως φαίνετα ζτο ζχήμα 3.1, η μείωζη της διαζατακίότηζ του ζυζτήματου, αλλάζει δραστικά την πυκνότητα των καταζτάζεων.



ζχήμα 3.1: Η πυκνότητα καταζτάζεων του ηλεκτροζικού αερίου ζυναρτήζει της ενεργειαζ ζε: τριζδιάζατουζ ημιαγωγοζ (3D ή bulk), και ζε διζδιάζατα (2D ή κβαντικά πηγάδια), μονοδιζάατα (1D ή κβαντικά ζύρματα) και μηδενοδιζάατα ζυζτήματα (0D ή κβαντικές τελείες).

ζτουζ τριζδιάζατουζ ημιαγωγοζ η πυκνότητα καταζτάζεων έχει την μορφή:

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} E^{3/2} = E^{1/2} \quad (3.1)$$

ζε ένα απειρόβαθο πηγάδι πλάτουζ L_z , ο εντοπιζμόζ προκαλεί την κβάντωζη των ενεργειακών καταζτάζεων κατά την διεζύθυνζη ανάπτυζηζ z και η δομή των ζωνών είναι [112]:

$$E(n, k_x, k_y) = E_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2m^*L_z^2} + \frac{\hbar^2k_{\parallel}^2}{2m^*} \quad (3.2)$$

Υπάρχουν δηλαδή διακριτές υποζώνες για τιμές του $n = 1, 2, 3, \dots$. Η πυκνότητα καταστάσεων έχει την μορφή κλιμακας και δίνεται από την σχέση:

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} \sum_{E_n < E} (E - E_n) = \sum_{E_n < E} 1 \quad (3.3)$$

Σε ένα απειρόβαθο κβαντικό σύρμα διατομής $L_z \times L_x$ η δομή των ζωνών είναι:

$$E(n, m, k_y) = E_{n,m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left[\left(\frac{n}{L_z} \right)^2 + \left(\frac{m}{L_x} \right)^2 \right] + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (3.4)$$

Δηλαδή υπάρχουν διακριτές υποζώνες για τιμές των $n, m = 1, 2, 3, \dots$

Στην μονοδιάστατη περίπτωση η πυκνότητα των καταστάσεων έχει την μορφή οξειών κορυφών και δίνεται από την σχέση:

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} \sum_{E_n < E} (E - E_n)^{1/2} = \sum_{E_n < E} (E - E_n)^{-1/2} \quad (3.5)$$

Τέλος στο μηδενοδιάστατο σύστημα (κβαντική τελεία), το ενεργειακό φάσμα αποτελείται από διακριτές στάθμες:

$$E(n, m, l) = E_{n,m,l} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left[\left(\frac{n}{L_z} \right)^2 + \left(\frac{m}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{l}{L_y} \right)^2 \right] \quad (3.6)$$

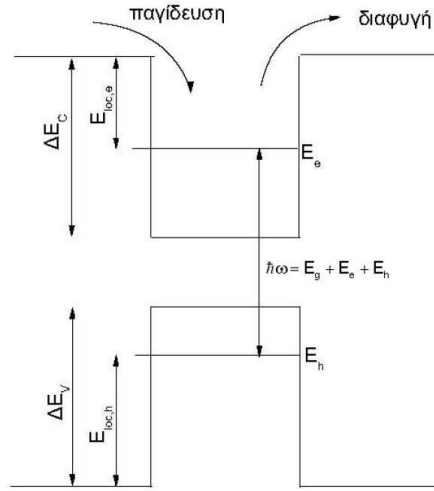
ενώ η πυκνότητα καταστάσεων έχει την μορφή δέλτα κορυφών και δίνεται ως:

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} \sum_{E_n < E} \Theta(E - E_n) = \sum_{E_n < E} \delta(E - E_n) \quad (3.7)$$

όπου Θ είναι η συνάρτηση βήματος του Heaviside, ενώ δ η συνάρτηση δέλτα του Dirac.

3.2 Εποικισμός των καταστάσεων μιας κβαντικής τελείας

Ως ενέργεια εντοπισμού (E_{loc}) μιας τελείας ορίζουμε την διαφορά ενέργειας μιας εντοπισμένης κατάστασης της τελείας από τον φραγμό. Εξαιτίας των πεπερασμένων τιμών των ενεργειών εντοπισμού της τελείας, οι φορείς μπορούν να δραπετεύσουν



Σχήμα 3.2: Σχηματική παράσταση του ενεργειακού διαγράμματος μιας κβαντικής τελείας [113].

από την τελεία. Η διαδικασία αυτή, που απεικονίζεται στο σχήμα 3.2 γίνεται ολοένα και πιο σημαντική καθώς αυξάνει η θερμοκρασία και μειώνεται η ενέργεια εντοπισμού. Στην στάσιμη κατάσταση ο μέσος ρυθμός επανασύνδεσης στις τελείες ισούται με τον καθαρό ρυθμό παγίδευσης των φορέων σε αυτές (rate balance equations):

$$\frac{1}{\tau_D} \langle f_n f_p \rangle = \nu_n [n(1 - \langle f_n \rangle) - n_1 \langle f_n \rangle] = \nu_p [p(1 - \langle f_p \rangle) - p_1 \langle f_p \rangle] \quad (3.8)$$

όπου: τ_D είναι ο χρόνος ακτινοβολούσας επανασύνδεσης, f_n, f_p είναι οι πιθανότητες κατάληψης για τα ηλεκτρόνια και τις οπές αντίστοιχα, $\langle \dots \rangle$ δηλώνει την μέση τιμή τους σε όλη την συλλογή τελειών, n, p είναι οι πυκνότητες των φορέων στους φραγμούς, n_1, p_1 είναι οι ρυθμοί διαφυγής λόγω της θερμοκρασίας των φορέων από τις τελείες στους φραγμούς και ν_n, ν_p είναι οι ρυθμοί παγίδευσης των φορέων στις τελείες από τους φραγμούς. Για τους ρυθμούς παγίδευσης ισχύει: $\nu = \sigma v_{th}$ όπου σ η ενεργός διατομή παγίδευσης και v_{th} η θερμική ταχύτητα του φορέα.

Κατ' αναλογία με τα κέντρα παγίδευσης Shockley- Read, οι χαρακτηριστικοί χρόνοι διαφυγής ενός ηλεκτρονίου ή μιας οπής από την τελεία, δίνονται από τις σχέσεις [114]:

$$\tau_{e,n} = \frac{1}{\nu_n n_1}$$

$$\tau_{e,p} = \frac{1}{\nu_p p_1} \quad (3.9)$$

όπου οι δείκτες n και p αναφέρονται στα ηλεκτρόνια και στις οπές αντίστοιχα. Στη θερμική ισορροπία, ο χρόνος διαφυγής από την τελεία εξαιτίας της θερμοκρασίας (δεχόμενοι ότι δεν υπάρχει άλλος μηχανισμός απώλειας φορέων) δίνεται από την σχέση [115]:

$$\tau_{e,n/p} \approx 10^{-11} \exp\left(\frac{E_{loc}}{k_B T}\right) \quad (3.10)$$

Οι τυπικοί χρόνοι ακτινοβολούσας επανασύνδεσης είναι περίπου $\tau_D = 1$ ns. Ο λόγος των χρόνων επανασύνδεσης προς τους χρόνους διαφυγής καθορίζει το κατά πόσο οι τελείες θα έχουν εποικισμό σε θερμική ισορροπία. Διακρίνουμε δύο ακραίες περιπτώσεις:

3.2.1 Σχετικά υψηλές θερμοκρασίες και/ή μικρές ενέργειες εντοπισμού

Αν ο χαρακτηριστικός χρόνος διαφυγής τ_e είναι μικρός συγκρινόμενος με τον ρυθμό επανασύνδεσης τ_D , δηλ.

$$\begin{aligned} \tau_e &\ll \tau_D \\ 10^{-11} \exp\left(\frac{E_{loc}}{k_B T}\right) &\ll 10^{-9} \\ E_{loc} &\ll 4.61 k_B T \end{aligned} \quad (3.11)$$

τότε ο φορέας σκεδάζεται πίσω στον φραγμό πολλές φορές πριν να επανασυνδεθεί. Στην περίπτωση αυτή οι φορείς μπορούν και επανακατανέμονται στις διαφορετικές τελείες και έτσι αποκτούν θερμική ισορροπία. Στο όριο αυτό των υψηλών θερμοκρασιών ο εποικισμός των καταστάσεων της τελείας δίνεται από συναρτήσεις κατανομής Fermi-Dirac [113]:

$$f(E_{e/h}) = \frac{1}{1 + \exp((E_{e/h} - E_f)/(k_B T))} \quad (3.12)$$

όπου E_f είναι quasi-Fermi levels. Υπό αυτές τις συνθήκες, στην εξίσωση (3.8) ο πρώτος όρος που περιέχει τον χρόνο επανασύνδεσης είναι αμελητέος και οι πυκνότητες των ελεύθερων φορέων γράφονται:

$$\frac{n}{n_1} = \frac{\langle f_n \rangle}{1 - \langle f_n \rangle}$$

$$\frac{p}{p_1} = \frac{\langle f_p \rangle}{1 - \langle f_p \rangle} \quad (3.13)$$

Η τρισδιάστατη ηλεκτρονιακή πυκνότητα είναι [116]:

$$n = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(\frac{E_f - \Delta E_C}{k_B T} \right) \quad (3.14)$$

όπου

$$N_C = 2 \left(\frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (3.15)$$

είναι η ενεργός πυκνότητα καταστάσεων στην ζώνη αγωγιμότητας, $F_{1/2}$ το ολοκλήρωμα Fermi τάξης 1/2 και m^* η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου. Αν ισχύει η προσέγγιση Boltzmann δηλ. η στάθμη Fermi βρίσκεται αρκετά $k_B T$ κάτω από τον φραγμό, η τρισδιάστατη πυκνότητα φορέων σε έναν μη εκφυλισμένο αγωγό γράφεται:

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_e - \Delta E_C}{k_B T}\right) \quad (3.16)$$

Κι εδώ διακρίνουμε δύο υποπεριπτώσεις [117]:

(α) Οι φορείς σε όλες τις τελείες βρίσκονται στην **ίδια κατάσταση θερμοικής ισορροπίας**. Τότε ο πληθυσμός των φορέων δίνεται από συναρτήσεις κατανομής Fermi-Dirac

$$f(E_{n,i}) = \frac{1}{1 + \exp((E_{n,i} - E_f)/(k_B T))} \quad (3.17)$$

όπου $E_{n,i}$ είναι η ενέργεια του ηλεκτρονίου που βρίσκεται στην κατάσταση i της n -οστής κβαντικής τελείας και E_f η ομοιόμορφη ενέργεια Fermi της συλλογής των τελειών, η οποία για ασθενή ισχύ διέγερσης βρίσκεται κοντά στο μέσο του χάσματος. Αντίστοιχη σχέση ισχύει για τον εποικισμό των καταστάσεων των οπών.

(β) Οι τελείες έχουν τον ίδιο πληθυσμό φορέων N . Τότε η συνάρτηση κατανομής των φορέων θα είναι:

$$f(E_{n,i}) = \frac{1}{1 + \exp((E_{n,i} - E_{f,n})/(k_B T))} \quad (3.18)$$

όπου $E_{f,n}$ είναι η **τοπική** συνάρτηση Fermi της n -οστής τελείας. Αν N ο αριθμός των φορέων που περιέχονται στην τελεία, τότε η τοπική ενέργεια Fermi προσδιορίζεται από την συνθήκη:

$$\sum_i f(E_{n,i}) = N \quad (3.19)$$

3.2.2 Σχετικά χαμηλές θερμοκρασίες και/ή μεγάλες ενέργειες εντοπισμού

Ο χρόνος επανασύνδεσης είναι πολύ μικρότερος από τον χαρακτηριστικό χρόνο διαφυγής τότε προκύπτει μια κατάσταση **μη ισορροπίας** όπου ο πληθυσμός στις τελείες δεν εξαρτάται από την ενέργεια και κατ'επέκταση από το μέγεθος τους. Η πυκνότητα των φορέων στον τρισδιάστατο φραγμό δίνεται από:

$$np = \frac{1}{\tau_D} \frac{1}{\nu_n \nu_p} \frac{f_n^2 f_p^2}{(1 - f_n)(1 - f_p)} \quad (3.20)$$

Είναι προφανές ότι η μελέτη της ενδιάμεσης κατάστασης όπου παίζουν ρόλο τόσο ο χρόνος διαφυγής από τον φραγμό όσο και ο χρόνος επανασύνδεσης είναι πιο πολύπλοκη. Επιπλέον πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι οι ενέργειες εντοπισμού είναι διαφορετικές για τα ηλεκτρόνια και τις οπές.

Εν γένει, στην περίπτωση όπου η απόσταση μεταξύ των διαδοχικών διακριτών καταστάσεων της τελείας είναι μεγαλύτερη ή ίση με την θερμική ενέργεια, η συνάρτηση κατανομής $F_{eq}\{E_n|N\}$ των N ηλεκτρονίων της τελείας δίνεται από την μεγαλοκανονική κατανομή Gibbs [118]. Για παράδειγμα, στην περίπτωση συστήματος δύο καταστάσεων $\{E_1, E_2\}$ με $N=1$ ηλεκτρόνιο στην τελεία, η συνάρτηση κατανομής δίνεται από:

$$F_{eq}\{E_n|1\} = \frac{e^{-E_n/kT}}{e^{-E_1/kT} + e^{-E_2/kT}} \quad (3.21)$$

3.3 Εγκάρσιο περιοριστικό δυναμικό

Οι διάφορες τεχνικές κατασκευής των κβαντικών τελειών που αναφέρθηκαν, καθορίζουν την έκταση και το σχήμα του τρισδιάστατου περιοριστικού δυναμικού. Εφόσον οι κβαντικές τελείες προκύπτουν από ένα κβαντικό πηγάδι περιορίζοντας επιπλέον εγκάρσια τους φορείς, έχουν συνήθως το σχήμα επίπεδων δίσκων με εγκάρσιες διαστάσεις πολύ μεγαλύτερες του πάχους τους. Ανάλογα με την μέθοδο κατασκευής της τελείας, το εγκάρσιο δυναμικό μπορεί να προσεγγιστεί από ένα πρότυπο δυναμικό. Για παράδειγμα το δυναμικό μιας κβαντικής τελείας που κατασκευάστηκε με λιθογραφία, με αρκετά μεγάλη ακτίνα, μπορεί να προσεγγιστεί με ένα τετραγωνικό πηγάδι με στρογγυλεμένα όρια. Όταν η τελεία είναι πολύ μικρή (δηλαδή η ακτίνα της είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μήκος της μεταβολής του δυναμικού κοντά στα όρια), τότε μπορούν να χρησιμοποιηθούν ομαλά δυναμικά όπως ένα Gaussian δυναμικό

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 \exp(-r^2/L^2) \quad (3.22)$$

ή ένα Pöschl-Teller δυναμικό

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 \cosh^{-2}(-r^2/L^2) \quad (3.23)$$

Άλλο είδος πρότυπου δυναμικού είναι το παραβολικό πηγάδι

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + ar^2 \quad (3.24)$$

Το παραβολικό δυναμικό έχει μια μοναδική ιδιότητα: η θέση των κορυφών του μακρινού υπέρυθρου (FIR) φάσματος απορρόφησης [119]-είναι ανεξάρτητες από τον αριθμό N των ηλεκτρονίων που είναι εντοπισμένα στην τελεία. Κατά συνέπεια από την σύγκριση για διαφορετικά N των FIR φασμάτων, μπορεί κανείς να διαπιστώσει αν το παραβολικό δυναμικό είναι καλή προσέγγιση του πραγματικού περιοριστικού δυναμικού. Το 1990 οι A. Kumar, S. E. Laux και F. Stern [120] εφάρμοσαν μια αριθμητική αυτοσυνεπή λύση των εξισώσεων Schrödinger και Poisson στην προσέγγιση Hartree για μια χβαντική τελεία που παράγεται με την εφαρμογή κατάλληλης διαφοράς δυναμικού σε μεταλλικό ηλεκτροδίο που καλύπτει ένα ορθογώνιο στρώμα GaAs 300x300 nm πάχους 30 nm στην επιφάνεια χβαντικού πηγαδιού GaAs /Al-GaAs. Στους υπολογισμούς θεώρησαν μικρό αριθμό ηλεκτρονίων ($N < 10$). Από τους υπολογισμούς προκύπτει ότι παρά το τετραγωνικό σχήμα του ηλεκτροδίου, το περιοριστικό δυναμικό είναι κυκλικά συμμετρικό με διάμετρο ≈ 100 nm που είναι πολύ μικρότερη από το μέγεθος του ηλεκτροδίου. Το αποτέλεσμα αυτό είναι σύμφωνο με την απουσία εξάρτησης της ενέργειας διέγερσης από τον αριθμό των σωματιδίων που παρατηρήθηκε σε πλήθος πειραμάτων [56, 65].

Στα πλαίσια του δικού μας υπολογιστικού προγράμματος, έχουμε την δυνατότητα να βρίσκουμε τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις για πολύπλοκες γεωμετρίες και οποιοδήποτε ρεαλιστικό περιοριστικό δυναμικό.

3.4 Εξίσωση ενεργού μάζας

Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των ηλεκτρονικών καταστάσεων ανήκουν σε δύο βασικές κατηγορίες:

α) Μέθοδοι που περιγράφουν το σύνολο των ζωνών σθένους και αγωγιμότητας Στην κατηγορία αυτή ανήκουν η μέθοδος των ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων [121], η μέθοδος των συναρτησιακών της πυκνότητας, η μέθοδος των ψευδοδυναμικών κ.α. Η τελευταία εφαρμόστηκε από τους Wang και Zunger σε χβαντικές τελείες Si [122] και CdSe [123] με 10^3 άτομα, και επεκτάθηκε σε συστήματα με διαφορετικό είδος ατόμων ($N = 10^5$) χρησιμοποιώντας μια -βασισμένη σε ψευδοδυναμικά- $k.p$ μέθοδο πολλαπλών ζωνών [124].

β) Μέθοδοι που περιγράφουν περιοχές κοντά στα ακρότατα των ζωνών. Στην κατηγορία αυτή ανήκει η μέθοδος των περιβαλλουσών συναρτήσεων η οποία εφαρμόστηκε για παράδειγμα σε σφαιρικές τελείες από τους Sercel και Vahala το 1990 [125].

Στην παρούσα διατριβή για την εύρεση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών, χρησιμοποιούμε την μέθοδο των περιβαλλουσών συναρτήσεων και την προσέγγιση ενεργού μάζας μιας ζώνης. Στα πλαίσια της μεθόδου αυτής η μονοηλεκτρονική εξίσωση του Schrödinger γράφεται:

$$[H_0 + U(\mathbf{r})]\psi = E\psi \quad (3.25)$$

όπου H_0 η Χαμιλτονιανή του ηλεκτρονίου στο περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου, και $U(\mathbf{r})$ το διαταραχτικό δυναμικό (περιλαμβάνει την δυναμική ενέργεια του κρυστάλλου, την δυναμική ενέργεια σκέδασης λόγω ατελειών, προσμίξεων, φωνονίων καθώς και την δυναμική ενέργεια λόγω εξωτερικά εφαρμοζόμενων πεδίων). E είναι οι ιδιοενέργειες και ψ οι ιδιοκαταστάσεις του ηλεκτρονίου. Ο τελεστής H_0 έχει ιδιοτιμές $E_n(\mathbf{k})$ και ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (συναρτήσεις Bloch), όπου n είναι ο δείκτης της ζώνης και \mathbf{k} το κυματάνυσμα που παίρνει τιμές στην πρώτη ζώνη Brillouin. Η συνάρτηση ψ μπορεί να αναπτυχθεί συναρτήσει των $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ οι οποίες αποτελούν μια πλήρη και ορθοκανονική βάση. Οι συναρτήσεις Bloch μπορούν να γραφούν ως:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.26)$$

Η συνάρτηση $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ έχει την περιοδικότητα του πλέγματος. Θεωρώντας μια ζώνη με ακρότατο στο σημείο $\mathbf{k} = 0$, αποδεικνύεται [126], ότι η κυματοσυνάρτηση ψ του ηλεκτρονίου μπορεί να αναπτυχθεί σε βάση συναρτήσεων Bloch ($\psi_{n0}(\mathbf{r})$ κοντά στο άκρο της n -οστής ζώνης, δηλαδή:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n F_n(\mathbf{r}) \psi_{n0}(\mathbf{r}) \quad (3.27)$$

όπου η συνάρτηση $F_n(\mathbf{r})$ είναι η περιβάλλουσα συνάρτηση που καθορίζεται από την εξίσωση ενεργού μάζας στο χώρο των θέσεων της n ζώνης:

$$[E_n(-i\nabla) + U(\mathbf{r})]F_n(\mathbf{r}) = EF_n(\mathbf{r}) \quad (3.28)$$

Για την περίπτωση μίας ζώνης (όπως χρησιμοποιούμε στην παρούσα διατριβή τόσο για τα ηλεκτρόνια όσο και για τις οπές), η Εξ. (3.27) γράφεται:

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r})\psi_{c/v}(\mathbf{r}) \quad (3.29)$$

όπου $\psi_{c/v}(\mathbf{r})$ η συνάρτηση Bloch στο άκρο της ζώνης αγωγιμότητας/σθένους. Στην περίπτωση ηλεκτρονίων κοντά στο σημείο Γ της ζώνης αγωγιμότητας, και για ιστροπική ενεργό μάζα m_e^* (όπως συμβαίνει στο GaAs) έχουμε σφαιρικές ισοενεργειακές επιφάνειες της μορφής:

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.30)$$

Τότε η εξίσωση ενεργού μάζας μιας ζώνης έχει την μορφή

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}) \quad (3.31)$$

Στην περίπτωση των οπών θα πρέπει να ληφθούν υπόψη οι ζώνες (hh, lh, so) της ζώνης σθένους. Τότε η εξίσωση ενεργού μάζας γράφεται:

$$(H^{LK})\mathbf{F}(\mathbf{r}) = E\mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (3.32)$$

όπου η H^{LK} είναι η 6x6 Luttinger-Kohn Χαμιλτονιανή [127] και $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ η εξαδιάστατη περιβάλλουσα συνάρτηση.

Στην παρούσα διατριβή για την μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων των κβαντικών τελειών GaAs θεωρούμε τις ζώνες αποσυζευγμένες κι έτσι τις προσεγγίζουμε από παραβολικές σχέσεις διασποράς ανάλογες της Εξ.(3.30). Οι περιβάλλουσες συναρτήσεις των οπών δίνονται από σχέσεις ανάλογες της Εξ.(3.31).

3.5 Η έννοια του εξιτονίου

Η περιγραφή που προηγήθηκε έγινε στα πλαίσια της εικόνας του ανεξάρτητου ηλεκτρονίου, όπου το ενεργειακό φάσμα των ηλεκτρονίων δεν εξαρτάται από την παρουσία των υπολοίπων. Η επίδραση των άλλων ηλεκτρονίων εμπεριέχεται μόνο στις πιθανότητες κατάληψης των ενεργειακών καταστάσεων, χωρίς να τροποποιεί το πρόβλημα ιδιοτιμών όπως αυτό προκύπτει από την εξίσωση ενεργού μάζας στα πλαίσια των περιβαλλουσών συναρτήσεων. Αυτή η προσέγγιση είναι ακριβής για την μελέτη ορισμένων φαινομένων όπως είναι τα φαινόμενα μεταφοράς σε μη εκφυλισμένους ημιαγωγούς ή η απορρόφηση μακριά από τα όρια των ζωνών.

Ωστόσο, πολλές σημαντικές ιδιότητες τροποποιούνται από την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου ή ηλεκτρονίου-οπής. Στην περίπτωση που ένα ηλεκτρόνιο έχει μεταβεί στην ζώνη αγωγιμότητας δημιουργώντας μια οπή στην ζώνη σθένους,

η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το σύστημα περιλαμβάνει έναν επιπρόσθετο όρο, την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ τους. Αυτή η αλληλεπίδραση τροποποιεί την δομή των ζωνών. Έχουμε κάτι ανάλογο με την περίπτωση όπου η εισαγωγή προσμίξεων τροποποιεί τις ηλεκτρονικές καταστάσεις, εισάγοντας στάθμες προσμίξεων μέσα στο ενεργειακό χάσμα. Το συζευγμένο ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής αποτελεί το εξιτόνιο [128]. Στους τρισδιάστατους ημιαγωγούς τα εξιτόνια μπορούν να παρατηρηθούν οπτικά μόνο σε πολύ καθαρά δείγματα, λόγω των πολύ μικρών ενεργειών σύζευξης που έχουν. Έτσι, στους τρισδιάστατους ημιαγωγούς τα εξιτονικά φαινόμενα μελετήθηκαν στα πλαίσια του χαρακτηρισμού των υλικών.

Ωστόσο, με την ανάπτυξη των ετεροδομών τα εξιτονικά φαινόμενα απέκτησαν ιδιαίτερο ενδιαφέρον, τόσο από πλευράς φυσικής όσο και τεχνολογικών εφαρμογών. Εξαιτίας του περιοριστικού δυναμικού η ενέργεια δέσμευσης του εξιτονίου αυξάνεται σημαντικά. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με τη βελτιωμένη ισχύ ταλαντωτή (oscillator strength) επιτρέπει την παρατήρηση πολύ οξείων συντονισμών στο οπτικό φάσμα.

3.5.1 Το εξιτόνιο σε τρισδιάστατους ημιαγωγούς

Η εξίσωση ενεργού μάζας που περιγράφει τα εξιτόνια στους τρισδιάστατους (bulk) ημιαγωγούς γράφεται ως:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \Psi_{ex} = E \Psi_{ex} \quad (3.33)$$

όπου m_e^* (m_h^*) η ενεργός μάζα ηλεκτρονίου (οπής), Ψ_{ex} η εξιτονική κυματοσυνάρτηση και $r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ η απόσταση ηλεκτρονίου-οπής. Εφαρμόζοντας τους μετασχηματισμούς

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h \\ \mathbf{R} &= \frac{m_e^* \mathbf{r}_e + m_h^* \mathbf{r}_h}{m_e^* + m_h^*} \end{aligned} \quad (3.34)$$

η εξίσωση ενεργού μάζας γράφεται:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m_e^* + 2m_h^*)} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} \right] \Psi_{ex} = E \Psi_{ex} \quad (3.35)$$

όπου $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ η ανηγμένη μάζα του συστήματος. Η γενική λύση γράφεται:

$$\Psi_{ex} \equiv \Psi_{n\mathbf{K}ex}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{K}_{ex}\mathbf{R}) F_n(\mathbf{r}) \phi_c(\mathbf{r}_e) \phi_v(\mathbf{r}_h) \quad (3.36)$$

όπου $\phi_e(\mathbf{r}_e)$ ($\phi_v(\mathbf{r}_h)$) είναι η συνάρτηση Bloch στο ακρότατο της Ζ.Α (Ζ.Σ) οι οποίες χρησιμοποιούνται στην εξίσωση ενεργού μάζας. Αντικαθιστώντας την γενική λύση στην (3.35) προκύπτει η εξίσωση:

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon|\mathbf{r}|}\right)F(\mathbf{r}) = E_n F(\mathbf{r}) \quad (3.37)$$

όπου

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{K}_{ex}^2}{2(m_e^* + m_h^*)} \quad (3.38)$$

Οι εξιτονικές περιβάλλουσες συναρτήσεις έχουν την μορφή συναρτήσεων υδρογονοειδούς με θεμελιώδη κατάσταση της μορφής:

$$F_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha_{ex}^3}} e^{-r/\alpha_{ex}} \quad (3.39)$$

όπου $\alpha_{ex} = (\epsilon m_0/\mu)\alpha_B$, α_B η ακτίνα Bohr και m_0 η μάζα του ελεύθερου ηλεκτρονίου. Οι αντίστοιχες ιδιοτιμές του προβλήματος του υδρογονοειδούς είναι:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (3.40)$$

Έτσι τελικά οι εξιτονικές ενέργειες γράφονται:

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}_{ex}^2}{2(m_e^* + m_h^*)} - \frac{G_{exc}}{n^2} \quad (3.41)$$

όπου $G_{exc} = \frac{\mu e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2}$ η εξιτονική ενέργεια Rydberg.

Προκειμένου να μελετήσουμε το φάσμα απορρόφησης λόγω των εξιτονικών μεταβάσεων, λαμβάνουμε την Coulomb αλληλεπίδραση των ζευγών ηλεκτρονίων-οπών ως διαταραχή και εκφράζουμε την νέα κυματοσυνάρτηση συναρτήσει των κυματοσυναρτήσεων των μη αλληλεπιδρώντων φορέων. Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το σύστημα είναι:

$$H = H_0 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\epsilon|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (3.42)$$

H_0 είναι η Χαμιλτονιανή του συστήματος των ανεξαρτήτων ηλεκτρονίων και οπών. Το παραπάνω άθροισμα αναφέρεται σε όλα τα ζεύγη $e-e$, $e-h$ και $h-h$. Η εξιτονική κυματοσυνάρτηση αναπτύσσεται σε όρους κυματοσυναρτήσεων βάσης $\Phi_{c, \mathbf{k}_e, s_e; v, \mathbf{k}_h, s_h}$

οι οποίες περιγράφουν την κατάσταση όπου ένα ηλεκτρόνιο με ορμή \mathbf{k}_e και σπιν s_e είναι στην ζώνη αγωγιμότητας, ενώ μια οπή με \mathbf{k}_h και σπιν s_h είναι στην ζώνη σθένους. Εξαιτίας του θεωρήματος Bloch ο συνδυασμός $\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h$ στο ανάπτυγμα της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης πρέπει να είναι σταθερός για μια δεδομένη εξιτονική κατάσταση. Αυτή η συνθήκη απλοποιεί την εξιτονική κυματοσυνάρτηση η οποία γράφεται:

$$\Psi_{ex}^{nlm}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} A_{nlm}(\mathbf{k}) \Phi_{c, \mathbf{k} + \mathbf{K}_{ex}/2, s_e; v, \mathbf{k} - \mathbf{K}_{ex}/2, s_h} \quad (3.43)$$

Ο μετασχηματισμός Fourier των συντελεστών του αναπτύγματος (3.43) είναι:

$$F_{nlm}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} A_{nlm}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (3.44)$$

Η περιβάλλουσα συνάρτηση (3.44) όπως και στη περίπτωση ενός ηλεκτρονίου στην ζώνη αγωγιμότητας (Z.A) και μιας οπής στην ζώνη σθένους (Z.Σ) που είδαμε παραπάνω, έχει την μορφή υδρογονοειδούς κι ικανοποιεί την εξίσωση:

$$[E_{cv}(-i\nabla, \mathbf{K}_{ex}) - \frac{e^2}{\epsilon}] F_{nlm}(\mathbf{r}) = E_{ex} F_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (3.45)$$

όπου $E_{cv}(-i\nabla, \mathbf{K}_{ex})$ είναι ο τελεστής που λαμβάνεται αναπτύσσοντας την διαφορά $E_c(\mathbf{k} + \mathbf{K}_{ex}/2) - E_v(\mathbf{k} - \mathbf{K}_{ex}/2)$ σε δυνάμεις του \mathbf{k} και κατόπιν αντικαθιστώντας το \mathbf{k} με $-i\nabla$. Η διηλεκτρική σταθερά έχει εν γένει πολύπλοκη μορφή. Ωστόσο, σε μικρές συγκεντρώσεις ελεύθερων φορέων ($n < 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), εκφράζεται από την στατική διηλεκτρική σταθερά ϵ .

3.5.2 Το εξιτόνιο σε κβαντικές τελείες

Σε αναλογία προς την επίλυση του εξιτονικού προβλήματος στα κβαντικά πηγάδια [128], η εξιτονική συνάρτηση στον \mathbf{k} χώρο γράφεται σαν ανάπτυγμα με όρους μονοσωματιδιακές καταστάσεις ηλεκτρονίων και οπών [2]:

$$\Psi^\lambda(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu}^\lambda \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}_h) \quad (3.46)$$

όπου $\Phi^{\mu e}$ και $\Phi^{\nu h}$ είναι οι περιβάλλουσες συναρτήσεις των ηλεκτρονίων και των οπών αντίστοιχα, οι οποίες λαμβάνονται λύνοντας την εξίσωση ενεργού μάζας. Για μια απλή παραβολική ζώνη, απουσία μαγνητικού πεδίου, η εξίσωση ενεργού μάζας για τα ηλεκτρόνια και τις οπές γράφεται:

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_i^*} + V_c^i(\mathbf{r}_i) \right] \Phi^{\nu i}(\mathbf{r}_i) = E^{\mu i} \Phi^{\nu i}(\mathbf{r}_i) \quad (3.47)$$

όπου $i = e, h$, και $V_c^i(\mathbf{r}_i)$ το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό για τα ηλεκτρόνια και τις οπές.

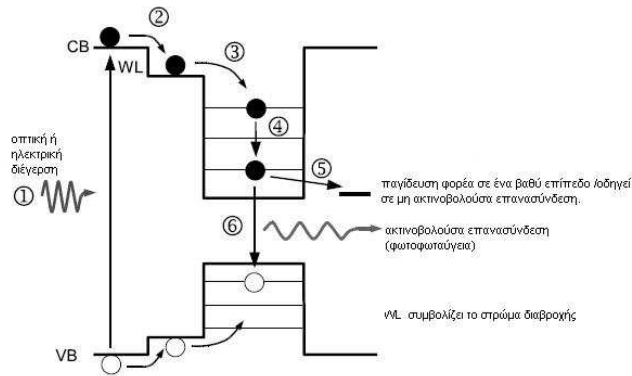
Όπως αποδεικνύεται στο Παράρτημα Α', οι συντελεστές C_ℓ^λ του αναπτύγματος της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης υπολογίζονται από την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\Sigma_{\ell'} [T_{\ell'} \delta_{\ell\ell'} - V_{\ell\ell'}^{eh} - E^\lambda \delta_{\ell\ell'}] C_{\ell'}^\lambda = 0 \quad (3.48)$$

όπου με $T_\ell = E^{\mu e} + E^{\nu h}$ συμβολίζουμε το άθροισμα των μονοσωματιδιακών ενεργειών.

3.6 Μηχανισμοί επανασύνδεσης και εφησυχασμού στις κβαντικές τελείες

Εξαιτίας της ενδοεπιφάνειας των δύο υλικών και των διάκριτων καταστάσεων της τελείας, η δυναμική των φορέων είναι πιο σύνθετη απ' ότι στους τρισδιάστατους ημιαγωγούς. Στο σχήμα 3.3 απεικονίζεται ένα απλοποιημένο διάγραμμα ζώνης μιας



Σχήμα 3.3: Σχηματική παράσταση του ενεργειακού διαγράμματος κατά μήκος της διεύθυνσης ανάπτυξης. Φαίνονται τα στάδια της οπτικής διέγερσης εκτός συντονισμού (non-resonant excitation) στον φραγμό, η παγίδευση των φορέων στις καταστάσεις της τελείας, ο εφησυχασμός μεταξύ των καταστάσεων της τελείας, και μηχανισμοί ακτινοβολούσας ή μη επανασύνδεσης.

ημιαγωγικής κβαντικής τελείας μετά από οπτική διέγερση. Διακρίνουμε τις ακόλουθες διεργασίες:

(1) Διέγερση των ηλεκτρονίων και μετάβασή τους απευθείας από την ζώνη σθένους στην ζώνη αγωγιμότητας του φραγμού, με ταυτόχρονη δημιουργία ελευθέρων φορέων στις αντίστοιχες ζώνες.

(2) Εφησυχασμός από τον φραγμό στο στρώμα διαβροχής (wetting layer- WL). Μπορεί να συμβεί επίσης επανασύνδεση των φορέων στο στρώμα διαβροχής (η ακτινοβολούσα επανασύνδεση εκδηλώνεται ως wetting layer photoluminescence).

(3) Παγίδευση των φορέων στις διακριτές καταστάσεις της τελείας.

(4) Διαδοχικός εφησυχασμός μεταξύ των καταστάσεων της τελείας, είτε μέσω σκέδασης φορέα-φορέα (μη ακτινοβολούσα επανασύνδεση Auger), είτε μέσω σκέδασης από φωνόνια.

(5) Μεταφορά φορέα από μια κατάσταση της τελείας σε ένα γειτονικό βαθύ επίπεδο, οδηγώντας είτε σε παγίδευση του φορέα είτε σε μη ακτινοβολούσα επανασύνδεση.

(6) Ακτινοβολούσα επανασύνδεση ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής.

3.6.1 Μηχανισμοί εφησυχασμού

Ένα από τα πιο σημαντικά εργαλεία στην μελέτη της δυναμικής των φορέων είναι η φωτοφωταύγεια. Μετά τον εντοπισμό τους στις καταστάσεις της τελείας, οι φορείς οι οποίοι βρίσκονται αρχικά στις ανώτερες στάθμες, αρχίζουν να εφησυχάζουν και να επανασυνδέονται όπως ακριβώς συμβαίνει και στα στερεά. Η πιθανότητα να παρατηρήσουμε κορυφές από υψηλότερες ενέργειες εξαρτάται από την σχέση ανάμεσα στις δύο ανταγωνιστικές διαδικασίες: την μη ακτινοβολούσα διαδικασία εφησυχασμού των φορέων και την ακτινοβολούσα επανασύνδεση ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής.

Γεννιέται όμως το ερώτημα πώς η διαστατικότητα επηρεάζει τους μηχανισμούς εφησυχασμού. Ένας αριθμός πειραμάτων κατέδειξε μικρές διαφορές στους ρυθμούς εφησυχασμού σε 1D και πολύ μεγαλύτερες σε 0D από ότι στα χβαντικά πηγάδια. Ο λόγος είναι ότι εξαιτίας των διακριτών καταστάσεων των ηλεκτρονίων και των οπών στις τελείες, η εκπομπή ενός διαμήκους οπτικού (longitudinal optical ή LO) φωνονίου είναι μη πιθανή, εκτός από την περίπτωση όπου οι διαδοχικές στάθμες απέχουν $\hbar\omega_{LO}$. Επιπλέον, η πιθανότητα εκπομπής ενός διαμήκους ακουστικού (longitudinal acoustic ή LA) φωνονίου, ήδη πολύ μικρή στους bulk ημιαγωγούς, μειώνεται δραστικά καθώς μειώνεται το μέγεθος της τελείας και συγκεκριμένα όταν η διαφορά των διαδοχικών σταθμών ξεπεράσει μόλις λίγα meV. Σαν αποτέλεσμα, ο χρόνος σκέδασης σε αυτούς τους δύο μηχανισμούς είναι κατά πολύ μεγαλύτερος από τους τυπικούς χρόνους επανασύνδεσης (1 ns) στις τελείες. Το φαινόμενο καλείται phonon-bottleneck effect και έχουν μελετηθεί τόσο η απουσία όσο και η παρουσία αυτού στις χβαντικές τελείες [129–134]. Συμπερασματικά, μπορούμε να πούμε ότι η διαδικασία του εφησυχασμού επιβραδύνεται καθώς μειώνεται η αποτελεσματικότητα σκέδασης από τα φωνόνια [135], αλλά όχι τόσο όσο είχε προβλεφθεί. Το φαινόμενο

παρατηρείται καθαρά σε περιπτώσεις ισχυρού εντοπισμού των φορέων, σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες και σε χαμηλές συγκεντρώσεις φορέων. Στις παρακάτω ενότητες αναφέρονται οι πιο σημαντικοί μηχανισμοί εφησυχασμού φορέων, όπως η σκέδαση από τα LO και LA φωνόνια, ο μηχανισμός Auger, ο εφησυχασμός εξιτονίου, η σκέδαση πολλών φωνονίων (multiphonon emission), και η εκπομπή φωτονίου με πολύ χαμηλή ενέργεια (emission of an FIR photon [136]).

σκέδαση από φωνόνια

Με βάση την θεωρία διαταραχών πρώτης τάξης, ο ρυθμός σκέδασης από φωνόνια δίνεται από τον χρυσό κανόνα Fermi:

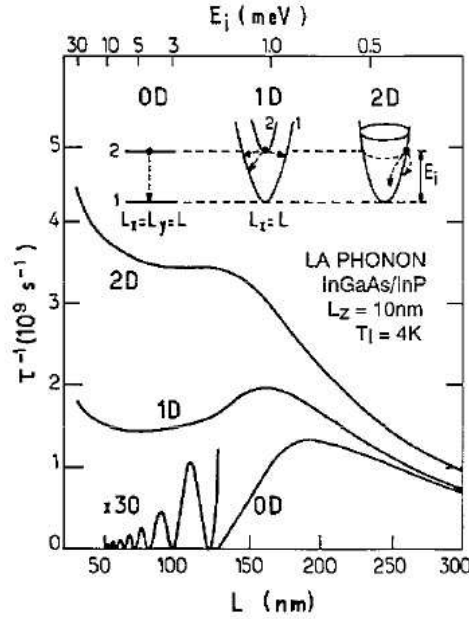
$$\tau^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f,q} | \langle \psi_f | W | \psi_i \rangle |^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega_q) \times (n_B(\hbar\omega_q, T) + \{ \begin{matrix} 1 \\ 0 \end{matrix} \}) \quad (3.49)$$

όπου $q = \omega_q/c_s$ το κυματόνισμα του φωνονίου, c_s η ταχύτητα του ήχου (3700m/sec στο GaAs), n_B η συνάρτηση Bose-Einstein των φωνονίων σε κρυσταλλικό πλέγμα θερμοκρασίας T , και

$$W = a(q) \exp(\mp iqr) \quad (3.50)$$

Η πάνω (κάτω) περίπτωση αντιστοιχεί σε εκπομπή (απορρόφηση) φωνονίου. Τα $| \langle \psi_f | W | \psi_i \rangle |$ είναι τα στοιχεία πίνακα της αλληλεπίδρασης. Γενικά, για την σκέδαση από LO φωνόνια θεωρούμε την αλληλεπίδραση Frölich ($a \propto q^{-1}$), ενώ για την σκέδαση από LA φωνόνια $a \propto q^{1/2}$. Η έλλειψη διασποράς του ενεργειακού φάσματος των οπτικών φωνονίων σε συνδυασμό με τις διακριτές ηλεκτρονικές καταστάσεις στις τελείες, εμποδίζει την πρώτης τάξης (Fröhlich) αλληλεπίδραση, εκτός από την πολύ ειδική περίπτωση κατά την οποία η διαφορά των δύο ηλεκτρονιακών σταθμών ισούται με την ενέργεια του φωνονίου. Κατά συνέπεια η σκέδαση από οπτικά φωνόνια έχει αμελητέα πιθανότητα. Ωστόσο, μπορεί να προκύψει ένας πεπερασμένος χρόνος σκέδασης αν με κάποιο τρόπο διευρυνθεί το φάσμα των φωνονίων ή των ηλεκτρονίων, ή λόγω ανώτερης τάξης αλληλεπίδρασης (π.χ. ταυτόχρονη αλληλεπίδραση με ένα οπτικό κι ένα ακουστικό φωνόνιο).

Από τη άλλη, η σκέδαση από τα ακουστικά φωνόνια είναι πιθανή στην ενεργειακή περιοχή που καλύπτουν, μια και έχουν συνεχές φάσμα. Στο σχήμα παρουσιάζονται οι ρυθμοί σκέδασης από ακουστικά φωνόνια για 0D, 1D, 2D συναρτήσει της διαφοράς ενέργειας E_i αρχικής και τελικής κατάστασης του ηλεκτρονίου και της χαρακτηριστικής διάστασης L . Στην τελεία, η ενέργεια E_i είναι η διαφορά ενέργειας αρχικής και τελικής κατάστασης λόγω του εγκάρσιου περιοριστικού δυναμικού. Παρατηρούμε



Σχήμα 3.4: Ρυθμοί εφησυχασμού λόγω σκέδασης ηλεκτρονίου από LA φωνόνια σε μηδενοδιάστατα, μονοδιάστατα και διδιάστατα συστήματα [137].

ότι για $L > 200 \text{ nm}$, και οι τρεις ρυθμοί σκέδασης τείνουν να ταυτιστούν. Οι διαφορές μεταξύ των δομών διαφορετικής διαστατικότητας είναι μικρές για πολύ ασθενή εγκάρσια περιοριστικά δυναμικά. Επιπλέον, στην περιοχή αυτή οι ρυθμοί σκέδασης αυξάνονται με αύξηση της εγκάρσιας διαφοράς ενέργειας E_i . Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στο γεγονός ότι ο ρυθμός σκέδασης είναι ανάλογος του τετραγώνου των στοιχείων πίνακα της αλληλεπίδρασης και κατά συνέπεια ανάλογος της ενέργειας του φωνονίου ($\hbar\omega_q = E_i$). Ωστόσο, όταν το μήκος κύματος του φωνονίου πέσει κάτω από την μικρότερη χαρακτηριστική διάσταση της τελείας, ή ισοδύναμα η ενέργεια του φωνονίου που ταυτίζεται με την E_i , γίνει μεγαλύτερη από μια τιμή κατωφλίου [136]:

$$E_{\text{threshold}} = \frac{\hbar 2\pi c_s}{L} \quad (3.51)$$

τότε το στοιχείο πίνακα $\langle \psi_f | e^{iqr} | \psi_i \rangle$ που εμφανίζεται στην Εξ.(3.50) μειώνεται ραγδαία (ολοκλήρωμα πολύ γρήγορα ταλαντούμενης συνάρτησης). Κατά συνέπεια, και ο ρυθμός σκέδασης μειώνεται κατά πολλές τάξεις μεγέθους και εμφανίζει ταλαντώσεις. Αντίθετα, στην περίπτωση των 1D και 2D δομών, οι τελικές καταστάσεις του ηλεκτρονίου και οι ενέργειες του φωνονίου είναι συνεχείς, κι έτσι ακόμα και κάτω

από την τιμή κατωφλίου η εξάρτηση των ρυθμών σκέδασης από την ενέργεια E_i είναι ασθενέστερη από ότι συμβαίνει στις μηδενοδιάστατες δομές.

Στις περισσότερες χβαντικές τελείες, οι ενέργειες που αντιστοιχούν στο εγκάρσιο περιοριστικό δυναμικό (μερικά meV), δεν είναι πολύ μεγαλύτερες συγκρινόμενες με τις ενέργειες δέσμησης των εξιτονίων. Στην περίπτωση αυτή, τόσο το ενεργειακό φάσμα όσο και οι ιδιότητες εφησυχασμού εξαρτώνται από τα εξιτονικά φαινόμενα και τότε αναφερόμαστε σε εφησυχασμό εξιτονίου λόγω σκέδασης από φωνόνια [137].

εφησυχασμός με εκπομπή πολλών φωνονίων

Όπως είδαμε στις χβαντικές τελείες η αλληλεπίδραση πρώτης τάξεως με τα οπτικά ή ακουστικά φωνόνια μπορεί να είναι μη αποτελεσματική. Ωστόσο, μπορεί να συμβεί εφησυχασμός με εκπομπή ή/και απορρόφηση περισσοτέρων από ένα φωνονίων διαφορετικού είδους. Έχουν μελετηθεί θεωρητικά [138] διαδικασίες εφησυχασμού δύο φωνονίων όπως για παράδειγμα η σκέδαση από δύο ακουστικά φωνόνια, ή η ταυτόχρονη αλληλεπίδραση με ένα LO και ένα LA φωνόνιο (όπου αναφέρονται ρυθμοί της τάξης του 10^9 s^{-1}). Στην περίπτωση εκπομπής ενός LO φωνονίου με επιπρόσθετη εκπομπή ή απορρόφηση ενός LA φωνονίου σε αναλογία με την 3.49 ο ρυθμός σκέδασης γράφεται:

$$\tau_{q,k}^{-1} \propto \sum_q \sum_k (N_q + 1)(N_k + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \delta(\Delta - \hbar\omega_q \mp \hbar\omega_k) \quad (3.52)$$

Οι μηχανισμοί $LO \pm LA$ διευρύνουν το “ ενεργειακό παράθυρο ” γύρω από την ενέργεια του οπτικού φωνονίου, για αποτελεσματικό εφησυχασμό (6 meV σε θερμοκρασία δωματίου). Και πάλι όμως, το ενεργειακό παράθυρο είναι στενό συγκριτικά με άλλους μηχανισμούς.

μηχανισμός εφησυχασμού Auger

Υπάρχουν διαδικασίες επανασύνδεσης ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής, που δεν συνοδεύονται από εκπομπή φωτονίου. Οι παραπάνω μηχανισμοί διακρίνονται σε μηχανισμούς επανασύνδεσης Auger και σε μηχανισμούς επανασύνδεσης σε ατέλειες. Η ενεργειακή δομή των μηδενοδιάστατων συστημάτων αποτελείται από διακριτές κατώτερες στάθμες που εξελίσσονται σε ψευδο-συνεχείς (quasi-continuum) καταστάσεις στην κορυφή του περιοριστικού δυναμικού. Σε πολλές εφαρμογές διατάξεων ή σε πειράματα φωτοφωταύγειας, απαιτούνται μεγάλες συγκεντρώσεις φορέων. Τα ζεύγη ηλεκτρονίων-οπών δημιουργούνται πάνω από τους φραγμούς. Ανάλογα με την ισχύ διέγερσης και αποτελεσματικότητα των μηχανισμών παγίδευσης και εφησυχασμού, μπορεί να

εμφανιστεί στην περιοχή του συνεχούς ένα πλάσμα ηλεκτρονίων-οπών σημαντικής πυκνότητας. Στην περίπτωση αυτή συμβαίνει σκέδαση Coulomb μεταξύ των εντοπισμένων στις διακριτές καταστάσεις ηλεκτρονίων και στο πλάσμα [134], το οποίο ανταλλάσσει ενέργεια με το πλέγμα. Θεωρώντας ένα διδιάστατο πλάσμα ηλεκτρονίων-οπών ο ρυθμός σκέδασης Coulomb μεταξύ του 0D ηλεκτρονίου και του 2D ηλεκτρονίου του πλάσματος είναι:

$$\begin{aligned} \tau_{i,j}^{-1} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m,n,q} |V_{eff}(\mathbf{q}, i, j)|^2 |\langle n | \hat{\rho}_q | m \rangle|^2 \\ &\times \delta(E_n - E_m - \hbar\omega_{ij}) \exp(-E_m/kT)/Z \end{aligned} \quad (3.53)$$

όπου

$$\hat{\rho}_q = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \quad (3.54)$$

είναι ο τελεστής πυκνότητας του διδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου, E_m , E_n η ενέργεια της αρχικής και τελικής κατάστασης του διδιάστατου πλάσματος, V_{eff} τα στοιχεία πίνακα του δυναμικού Coulomb που υπολογίζονται από τις περιβάλλουσες συναρτήσεις των αρχικών και τελικών καταστάσεων της τελείας και του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων, και $\hbar\omega_{i,j}$ είναι η ενεργειακή διαφορά μεταξύ των διακριτών καταστάσεων i και j της κβαντικής τελείας.

Το στατιστικό βάρος της αρχικής κατάστασης εισάγεται μέσω του τελευταίου όρου της Εξ. (3.53), που περιλαμβάνει την συνάρτηση επιμερισμού Z . Οι ρυθμοί εφησυχασμού που προκύπτουν είναι της τάξεως των 10^{12} s^{-1} . Τέλος, άλλοι μηχανισμοί που αναφέρονται είναι ο εφησυχασμός με ταυτόχρονη εκπομπή ενός φωτονίου πολύ μικρής ενέργειας (FIR photon) [136], ή ο εφησυχασμός από σκέδαση σε ατέλειες [133].

3.6.2 Ακτινοβολούσα επανασύνδεση

Η πιθανότητα μετάβασης μεταξύ των καταστάσεων των ηλεκτρονίων και των οπών, δίνεται από το τετράγωνο του ολοκληρώματος επικάλυψης:

$$P \propto |\langle \Psi^e | \Psi^h \rangle|^2 \quad (3.55)$$

Η ομοιογενής διεύρυνση κορυφής (homogeneous broadening) στο φάσμα εκπομπής μεμονωμένης κβαντικής τελείας, είναι ενδογενής ιδιότητα και οφείλεται στον πεπερασμένο χρόνο ζωής των φορέων, στη σκέδαση των φορέων από τα φωνόνια και στην

σκέδαση φορέα-φορέα. Η κατώτερη τιμή του πλάτους της κορυφής στο φάσμα εκπομπής συνδέεται με τον χρόνο ακτινοβολούσας επανασύνδεσης με την σχέση [139]:

$$\Gamma_{min} \approx \frac{\hbar}{\tau_{rad}} \quad (3.56)$$

Τυπική τιμή του χρόνου ακτινοβολούσας επανασύνδεσης είναι περίπου 300 ps κι αυτό αντιστοιχεί σε 2.2 meV. Ωστόσο, στην πράξη είναι πολύ δύσκολο να επιτευχθούν μετρήσεις τόσο μικρού εύρους κορυφής, εκτός από την περίπτωση φασματοσκοπίας μεμονωμένης τελείας. Αιτία αποτελεί η μη ομοιογενής διεύρυνση κορυφής που είναι της τάξης των μερικών meV και που οφείλεται σε υπέρθεση διαφορετικών μεταβάσεων σε μια συλλογή κβαντικών τελειών.

Κεφάλαιο 4

Υπολογισμός του τοπικού συντελεστή απορρόφησης

Στο κεφάλαιο αυτό δίνεται το θεωρητικό πλαίσιο που καταλήγει στον υπολογισμό του τοπικού συντελεστή απορρόφησης, ο οποίος χρησιμοποιείται στην θεωρητική ανάλυση φαινομένων όπως η οπτική απορρόφηση εγγύς πεδίου. Αρχικά γίνεται μία σύντομη ανασκόπηση των φαινομένων συνοχής [140]. Τα φυσικά φαινόμενα που κυριαρχούν στην πολύ γρήγορη (“ultrafast”) δυναμική των φορέων σε οπτικά διεγερμένους ημιαγωγούς, μπορούν να χωριστούν σε δύο κατηγορίες:

- τα **συνεκτικά (coherent)** φαινόμενα που σχετίζονται με την κβαντομηχανική συνοχή φάσης που επάγει η διέγερση με το laser και
- τα **μη-συνεκτικά (incoherent)** φαινόμενα τα οποία επάγουν οι διάφοροι μηχανισμοί σκέδασης, που καταστρέφουν την συνοχή φάσης (phase-breaking mechanisms)

Ένας υψηλής συχνότητας παλμός laser διαταράσσει από την ισορροπία τις συναρτήσεις κατανομής των φορέων αλλά δημιουργεί ταυτόχρονα και μια συνεκτική πόλωση. Η μελέτη της coherent δυναμικής ξεκίνησε το 1980 με φαινόμενα όπως το οπτικό φαινόμενο Stark [141], οι ταλαντώσεις φορτίου σε διπλά πηγάδια [142] ή σε υπερπλέγματα [143], φαινόμενα πολλών σωματιδίων [144–147] καθώς και εκπομπή ακτινοβολίας THz [148].

Τα παραπάνω φαινόμενα δεν μπορούν να αναλυθούν θεωρητικά εφαρμόζοντας την εξίσωση Boltzmann. Ο λόγος είναι ότι η μικροσκοπική οπτική πόλωση αντανακλά μια καλά ορισμένη συνοχή φάσης μεταξύ ηλεκτρονίου και οπής η οποία δεν λαμβάνεται υπόψη στην ημικλασική θεωρία Boltzmann. Απαιτείται επομένως μια κβαντομηχανική

περιγραφή, όπου να λαμβάνει κανείς υπόψη εκτός των συναρτήσεων κατανομής και την οπτική πόλωση σαν ανεξάρτητη μεταβλητή. Διάφορες προσεγγίσεις αναφέρονται στην βιβλιογραφία όπως μετασχηματισμοί Bogoliubov [149], συναρτήσεις Green σε μη-ισορροπία [150,151] ή η θεωρία του πίνακα πυκνότητας (density-matrix formalism [152,153]. Η τελευταία μέθοδος καταλήγει στις Hartree-Fock Ημιαγωγικές Εξισώσεις Bloch που περιγράφουν την χρονική εξέλιξη τόσο των συναρτήσεων κατανομής ηλεκτρονίων και οπών όσο και της οπτικής πόλωσης, σε οπτικά διηγεμένους ημιαγωγούς. Κατόπιν, δίνεται η μικροσκοπική έκφραση για την *μη τοπική* επιδεκτικότητα χ σαν συνάρτηση των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων και των οπών [154], η οποία προκύπτει από την σύγκριση της μικροσκοπικής και μακροσκοπικής εικόνας της οπτικής πόλωσης του συστήματος. Η γνώση της επιδεκτικότητας επιτρέπει τον υπολογισμό του τοπικού συντελεστή απορρόφησης.

4.1 Ορισμοί

- **Dephasing time:** Είναι ο χρόνος ζωής της συνεκτικής κβαντομηχανικής υπέρθεσης που δημιουργείται από μια ταχεία διέγερση με laser. Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο ενός πολύ γρήγορου οπτικού παλμού, δημιουργεί μια μακροσκοπική πόλωση στον ημιαγωγό. Οι φορείς έχουν μια συνοχή φάσης τόσο μεταξύ τους όσο και με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Αυτή η συνεκτικότητα χάνεται εξαιτίας των διαφόρων μηχανισμών σκέδασης, όπως σκέδαση φορέα-φορέα, σκέδαση φορέων από φωνόνια, στην διάρκεια ενός χρόνου της τάξεως μερικών δεκάδων έως εκατοντάδων fs. Οι χρόνοι dephasing στις τελείες κυμαίνονται σε μερικές εκατοντάδες ps σε χαμηλές θερμοκρασίες [155], ενώ αντίστοιχα σε υψηλές θερμοκρασίες αναφέρονται χρόνοι της τάξης των εκατοντάδων fs [156]. Για τον καθορισμό του χρόνου αυτού πειραματικά, μετριέται ο ρυθμός εξασθένισης της οπτικής πόλωσης που επάγει διέγερση με λέιζερ, με τεχνικές α) αυτεπαγόμενης φασματικής καύσης οπής (Self-induced spectral hole-burning ή SI-SHB) και β) ανάμιξης τεσσάρων κυμάτων (Four-wave mixing ή FWM) [156].
- **Οπτική πόλωση (optical polarization):** Η διέγερση με λέιζερ ενός ημιαγωγού δημιουργεί μια κβαντομηχανική “συνεκτική” υπέρθεση αρχικής και τελικής κατάστασης της μετάβασης που καλείται “οπτική πόλωση”.

4.2 Η έννοια της συνεκτικότητας

Θεωρούμε την απλούστερη περίπτωση ενός συστήματος δύο καταστάσεων [157]: μιας θεμελιώδους a με ενέργεια E_a και μιας διηγεργμένης b με ενέργεια E_b . Οι δύο καταστάσεις συζεύγνυται αμοιβαία με κατάλληλο εξωτερικό πεδίο ή/και με την μεταξύ τους Coulomb αλληλεπίδραση. Η Hamiltonian του συστήματος είναι:

$$H = H_0 + H^I \quad (4.1)$$

όπου στη δεύτερη κβάντωση η Χαμιλτονιανή του μη αλληλεπιδρώντος συστήματος γράφεται

$$H_0 = \epsilon_a a_a^\dagger a_a + \epsilon_b a_b^\dagger a_b \quad (4.2)$$

ενώ ο όρος σύζευξης είναι

$$H^I = U_{ba} a_b^\dagger a_a + U_{ab} a_a^\dagger a_b \quad (4.3)$$

Εδώ, a_a^\dagger (a_b^\dagger) είναι ο τελεστής δημιουργίας ενός ηλεκτρονίου στην κατάσταση a ή b αντίστοιχα. Οι δύο όροι της Χαμιλτονιανής H^I επάγουν μεταβάσεις από την θεμελιώδη στάθμη στην διηγεργμένη και αντίστροφα σύμφωνα με την σταθερά σύζευξης $U_{ba} = U_{ab}^*$.

Αρχικά, θεωρούμε ένα σύστημα που αποτελείται από ένα μόνο ηλεκτρόνιο. Απουσία του όρου σύζευξης έχουμε δύο στάσιμες λύσεις:

$$\begin{aligned} |a(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i\epsilon_a t}{\hbar}\right) a_a^\dagger |0\rangle \\ |b(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i\epsilon_b t}{\hbar}\right) a_b^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

Οι δύο λύσεις αντιστοιχούν σε ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση a ή b αντίστοιχα. Στην αντίθετη περίπτωση που υπάρχει σύζευξη μεταξύ των δύο ενεργειακών σταθμών (δηλ. $U_{ba} \neq 0$), η κατάσταση του συστήματος θα είναι εν γένει ένας γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων (4.4):

$$|\psi(t)\rangle = c_a(t)|a(t)\rangle + c_b(t)|b(t)\rangle \quad (4.5)$$

όπου οι συντελεστές $c_a(t)$, $c_b(t)$ ικανοποιούν τις παρακάτω εξισώσεις κίνησης:

$$\begin{aligned} \frac{dc_a(t)}{dt} &= \frac{U_{ab}}{i\hbar} \exp\left(\frac{i(\epsilon_a - \epsilon_b)t}{\hbar}\right) c_b \\ \frac{dc_b(t)}{dt} &= \frac{U_{ba}}{i\hbar} \exp\left(\frac{i(\epsilon_b - \epsilon_a)t}{\hbar}\right) c_a \end{aligned} \quad (4.6)$$

Από τις παραπάνω λύσεις είναι φανερό ότι αν $U = 0$, οι συντελεστές δεν μεταβάλλονται χρονικά. Έτσι, αν για παράδειγμα το σύστημα βρισκόταν αρχικά στην κατάσταση $|a\rangle$, θα συνεχίσει να βρίσκεται στην ίδια κατάσταση. Η σύζευξη μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων επάγει την χρονική μεταβολή των συντελεστών και κατά συνέπεια της πιθανότητας να βρεθεί το σύστημα σε κάθε μια από τις δύο καταστάσεις. Το μοντέλο των δύο καταστάσεων αποτελεί μια απλούστευση της αλληλεπίδρασης του φωτός με την ύλη είτε σε μοριακά συστήματα [157] είτε σε στερεά [158]. Ο όρος σύζευξης στην Εξ.(4.3), έχει την μορφή αλληλεπίδρασης μεταξύ δίπολου και φωτός και ειδικότερα ενός συνεκτικού πεδίου φωτός. Θεωρούμε δύο οριακές περιπτώσεις:

α) Εφαρμογή ενός πολύ σύντομου οπτικού παλμού. Μια τέτοια διέγερση μπορεί να θεωρηθεί ως δέλτα συνάρτηση, δηλαδή $U_{ab}(t) = \eta\delta(t)$. Στην περίπτωση αυτή το σύστημα των εξισώσεων (4.6) έχει αναλυτική λύση. Εξαιτίας της διέγερσης το σύστημα μεταβαίνει στιγμιαία από την θεμελιώδη ($c_a = 1$, $c_b = 0$) στην διηγευμένη ($c_a = \cos\varphi$, $c_b = -i\sin\varphi$) με $\varphi = \eta/\hbar$. Έτσι, μετά τον παλμό το σύστημα θα παραμείνει στην διηγευμένη κατάσταση:

$$|\psi(t)\rangle = \cos\varphi|a(t)\rangle - i\sin\varphi|b(t)\rangle \quad (4.7)$$

Η κατάσταση (4.7) είναι μια συνεκτική κβαντομηχανική υπέρθεση των δύο καταστάσεων. Υπάρχει μια συνοχή φάσης μεταξύ των συνεισφορών της θεμελιώδους και της διηγευμένης κατάστασης, οι συντελεστές c_a και c_b διαφέρουν κατά $\pi/2$. Αυτό εννοούμε εν γένει με τον όρο οπτικά επαγόμενη συνοχή φάσης.

β) Εφαρμογή ενός συνεχούς παλμού σε συντονισμό με το σύστημα των δύο καταστάσεων, δηλ. $U_{ab}(t) = U_0 e^{i\omega_L t}$, με $\hbar\omega_L = \epsilon_b - \epsilon_a$. Στην περίπτωση το σύστημα (4.6) έχει αναλυτική λύση. Αν θεωρήσουμε αρχικές συνθήκες: $c_a(0) = 1$, $c_b(0) = 0$, το σύστημα λόγω της διέγερσης θα βρεθεί στην κατάσταση:

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right)|a(t)\rangle - i\sin\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right)|b(t)\rangle \quad (4.8)$$

όπου $\omega_R = 2U_0/\hbar$ καλείται συχνότητα Rabi. Εδώ έχουμε έναν περιοδικό εποικισμό και αποικισμό της διηγευμένης κατάστασης που εκφράζεται από την $|c_b|^2 = \sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right)$. Ο όρος σύζευξης μεταξύ των καταστάσεων U_{ab} περιγράφει όχι μόνο οπτική διέγερση αλλά και αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ των δύο καταστάσεων του συστήματος. Και σε αυτή την περίπτωση, η κατάσταση του συστήματος προκύπτει ως μια "συνεκτική" υπέρθεση των δύο στάσιμων λύσεων $|a(t)\rangle$ και $|b(t)\rangle$. Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι τα φαινόμενα συνοχής διακρίνονται σε αυτά που επάγει η οπτική διέγερση και σε αυτά που επάγει η αλληλεπίδραση Coulomb.

Προκειμένου να περιγράψουμε την αλληλεπίδραση του ηλεκτρονικού νέφους ημιαγωγικού κρυστάλλου με το φως, θα πρέπει το σύστημα των δύο καταστάσεων να αντικατασταθεί από μια στατιστική συλλογή που να αποτελείται από πολλά τέτοια ανεξάρτητα συστήματα δύο καταστάσεων. Για την περιγραφή της στατιστικής συλλογής χρησιμοποιείται ο πίνακας πυκνότητας ενός σωματιδίου:

$$\rho_{nn'} = \langle a_n^\dagger a_n \rangle \quad (4.9)$$

όπου n σύνολο κβαντικών αριθμών. Τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας $f_n = \rho_{nn}$ αντιστοιχούν στους μέσους αριθμούς κατάληψης, ενώ τα μη διαγώνια στοιχεία εκφράζουν την συνοχή φάσης μεταξύ των καταστάσεων n και n' . Στην περίπτωση στατιστικής συλλογής που αποτελείται από συστήματα δύο καταστάσεων, ο πίνακας πυκνότητας είναι πίνακας 2×2 . Τα διαγώνια στοιχεία ρ_{aa} , ρ_{bb} περιγράφουν τις πιθανότητες κατάληψης των καταστάσεων a και b αντίστοιχα, ενώ τα μη διαγώνια στοιχεία $p \equiv \rho_{ba}$ εκφράζουν την συνεκτικότητα φάσης μεταξύ της θεμελιώδους και της διηγερμένης κατάστασης. Εφαρμόζοντας τις εξισώσεις Heisenberg για τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής του ηλεκτρονίου στις καταστάσεις a και b , δηλαδή $i\hbar \frac{d}{dt} a_n^\dagger = [a_n^\dagger, H]$ και $i\hbar \frac{d}{dt} a_n = [a_n, H]$, λαμβάνουμε τις ακόλουθες εξισώσεις κίνησης για τα στοιχεία του πίνακα πυκνότητας:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_b &= -\frac{d}{dt} f_a = \frac{2}{\hbar} \text{Re}(iU_{ab}p) \\ \frac{d}{dt} p &= \frac{\epsilon_b - \epsilon_a}{i\hbar} p + \frac{U_{ba}}{i\hbar} (f_a - f_b) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Οι παραπάνω είναι γνωστές ως οπτικές εξισώσεις Bloch. Οι οπτικές εξισώσεις Bloch αποτελούν την απλούστερη περίπτωση περιγραφής της αλληλεπίδρασης του φωτός με την ύλη. Αν θεωρήσουμε την περίπτωση ενός συνεχούς παλμού κεντρικής συχνότητας ω_L (όπως κάναμε και στην περίπτωση του συστήματος δύο καταστάσεων),

$$U_{ab}(t) = U_0 e^{i\omega_L t} \quad (4.11)$$

με αρχικές συνθήκες: $f_a(0) = f_0$, $f_b(0) = 0$, $p(0) = 0$ οι παραπάνω εξισώσεις για την στατιστική συλλογή έχουν σαν λύση:

$$\begin{aligned} f_a(t) &= f_0 \cos^2\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right) \\ f_b(t) &= f_0 \sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right) \\ p(t) &= -\frac{if_0}{2} \exp(-i\omega_L t) \sin(\omega_R t) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Το μέτρο των μη διαγώνιων στοιχείων είναι:

$$|p(t)|^2 \propto \sin^2(\omega_R t) \propto \cos^2\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right) \sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_R t\right) \propto f_a(t)f_b(t) \quad (4.13)$$

Παρατηρούμε ότι το τετράγωνο του μέτρου των διαγώνιων στοιχείων είναι ανάλογο του γινομένου των πιθανοτήτων κατάληψης και κατά συνέχεια εκφράζει την ολική (ή μακροσκοπική) διπολική ροπή του συστήματος την χρονική στιγμή t .

Έτσι φαίνεται καθαρά ότι η οπτική διέγερση επάγει μια συνεκτική κβαντομηχανική υπέρθεση των δύο καταστάσεων, η οποία με την σειρά της δημιουργεί μια μακροσκοπική πόλωση. Η οπτική αυτή πόλωση εκφράζεται από τα μη διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας. Πρέπει να τονιστεί ωστόσο ότι η διάκριση ανάμεσα στα διαγώνια και μη στοιχεία του πίνακα πυκνότητας εξαρτάται ρητά από την αναπαράσταση που έχουμε θεωρήσει. Τα στοιχεία που είναι διαγώνια σε μια συγκεκριμένη επιλογή βάσης, μπορεί σε κάποια άλλη βάση να μην είναι, και το αντίστροφο. Αν θεωρήσουμε σαν σύνολο συναρτήσεων βάσης τις ιδιοσυναρτήσεις της συνολικής Χαμιλτονιανής (4.1) τότε ο πίνακας πυκνότητας είναι πάντοτε διαγώνιος και δεν μπορούμε να κάνουμε λόγο για συνοχή φάσης. Έτσι, η συνολική Χαμιλτονιανή του συστήματος θα πρέπει να γραφεί ως άθροισμα δύο όρων: της Χαμιλτονιανής του υπό μελέτη συστήματος (H_0) και της Χαμιλτονιανής που περιέχει την αλληλεπίδραση (H^I). Στην περίπτωση αυτή, τα μη διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας στην αναπαράσταση που ορίζεται από τις ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής H_0 του αδιατάραχτου συστήματος (όχι της συνολικής) θα περιγράφουν τον βαθμό συνοχής του συστήματος που επάγει η οδηγός δύναμη H^I .

4.3 Το φυσικό σύστημα

Η Hamiltonian που περιγράφει το σύστημα των φορέων οι οποίοι διεγείρονται από ένα laser και υπόκεινται σε ένα εξωτερικό ΗΜ πεδίο δίνεται ως [140]:

$$H = H_c + H_{cc} + (H_p + H_{cp} + H_{pp}) \quad (4.14)$$

Ο όρος H_{cc} εκφράζει την Coulomb αλληλεπίδραση μεταξύ των φορέων, ενώ ο όρος H_c εκφράζει το σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φορέων παρουσία του εξωτερικού ΗΜ πεδίου και δίνεται από την σχέση:

$$H_c = \frac{[-i\hbar\nabla_r - \frac{q^*}{c}\mathbf{A}_{tot}(\mathbf{r}, t)]^2}{2m} + e\phi_{tot}(\mathbf{r}, t) + V^l(\mathbf{r}) \quad (4.15)$$

όπου $V^l(\mathbf{r})$ το περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου (ή το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό στην περίπτωση της κβαντικής τελείας). Οι τρεις τελευταίοι όροι αφορούν το σύστημα των φωνονίων και δεν θα ληφθούν υπόψη στην παρούσα μελέτη. Η αλληλεπίδραση του συστήματος με το πλέγμα, η οποία οδηγεί σε καταστροφή της συνοχής (dephasing), λαμβάνεται υπόψη μέσω ενός φαινομενολογικού όρου που βασίζεται στην προσέγγιση του χρόνου εφησυχασμού. Εισάγοντας τους τελεστές πεδίου ("second quantization field operators") $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ και $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, οι οποίοι περιγράφουν μικροσκοπικά την χρονική εξέλιξη του συστήματος των φορέων [158], η σχέση (4.15) γράφεται:

$$H_c = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left[\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c}\mathbf{A}_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + e\phi_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) + V^l(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (4.16)$$

Στην περίπτωση των κβαντικών τελειών (ή εν γένει στην περίπτωση των οπτικών μεταβάσεων), οι τελεστές πεδίου εκφράζονται στην εικόνα ηλεκτρονίου-οπής ως:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mu} c_{\mu}(t)\Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu} d_{\nu}^{\dagger}(t)\Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) \quad (4.17)$$

όπου $c_{\mu}^{\dagger}(c_{\mu})$ ο τελεστής δημιουργίας (καταστροφής) ενός ηλεκτρονίου στην κατάσταση μ , $d_{\nu}^{\dagger}(d_{\nu})$ ο τελεστής δημιουργίας (καταστροφής) μιας οπής στην κατάσταση ν και $\Phi^{\mu e}(\mathbf{r})$ και $\Phi^{\nu h}(\mathbf{r})$ οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις ηλεκτρονίων και οπών. Το HM πεδίο και κατ' επέκταση τα αντίστοιχα δυναμικά είναι άθροισμα δύο συνεισφορών:

- της υψηλής συχνότητας HM πεδίου του laser, $\mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t)$ η οποία εκφράζει την ultrafast οπτική διέγερση κι
- ενός επιπρόσθετου εξωτερικού HM πεδίου $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ που δρά στους φωτοδιηγερμένους φορείς σε μεγαλύτερη κλίμακα χρόνου.

Έτσι για το διανυσματικό και το βαθμωτό δυναμικό γράφουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ \phi_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) &= \phi_l(\mathbf{r}, t) + \phi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (4.18)$$

ενώ για τις αντίστοιχες συνιστώσες του HM πεδίου γράφουμε:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{B}_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{B}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Γιά το υψηλής συχνότητας πεδίο laser θεωρούμε ότι $\mathbf{A}_l = 0$ και

$$\phi_l(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{E}_l(t) \cdot \mathbf{r} \quad (4.20)$$

όπου

$$\mathbf{E}_l(t) = E^+(t) + E^-(t) = E_0(t)e^{i\omega_L t} + E_0^*(t)e^{-i\omega_L t} \quad (4.21)$$

Εδώ, $E_0(t)$ το πλάτος του ηλεκτρικού πεδίου του laser, ενώ ω_L η κεντρική του συχνότητα. Για την θεωρητική μελέτη της φασματοσκοπίας εγγύς πεδίου near field, το πεδίο δεν είναι ομογενές, ωστόσο δεχόμαστε για το τοπικό πεδίο τη σχέση (4.20), ώστε στο όριο του μακρινού πεδίου (far field) να ισχύει η διπολική προσέγγιση. Μ' αυτήν την επιλογή των δυναμικών του πεδίου η Hamiltonian του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων παρουσία του πεδίου 'σπάει' σε δύο όρους:

$$H_c = H_{sp} + H_{cl} \quad (4.22)$$

όπου ο όρος H_{sp} περιγράφει το μη αλληλεπιδρών σύστημα των φορέων παρουσία του εξωτερικού "αργού" πεδίου και δίνεται από την σχέση:

$$H_{sp} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left[\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - q^*\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^*\phi(\mathbf{r}, t) + V^l(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (4.23)$$

ενώ ο όρος H_{cl} περιγράφει την αλληλεπίδραση με το πεδίο laser και δίνεται από την σχέση:

$$H_{cl} = q^* \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \phi_l(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (4.24)$$

Τέλος, ο όρος που περιγράφει την αλληλεπίδραση των φορέων μεταξύ τους γράφεται [140]:

$$H_{cc} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V_{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (4.25)$$

όπου V_{cc} το δυναμικό Coulomb.

Στα Παραρτήματα Β'-Δ' δίνονται οι εκφράσεις για τις παραπάνω Χαμιλτονιανές στην περίπτωση των κβαντικών τελειών. Πρέπει να τονιστεί ότι οι όροι της Hamiltonian που περιγράφουν τους μη αλληλεπιδρώντες φορείς καθώς και την μεταξύ τους Coulomb αλληλεπίδραση αποτελούν την συνεκτική δυναμική των φορέων. Έτσι προκειμένου να μελετήσουμε την μη συνεκτική δυναμική (σχέδαση), θα πρέπει να πάρουμε στους διαταραχτικούς όρους της many body Hamiltonian και όρους ανώτερης τάξης [153].

4.4 Οι Hartree-Fock Ημιαγωγικές Εξισώσεις Bloch

Ορίζουμε τις:

$$f_{\mu\mu'}^e \equiv \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle \quad (4.26)$$

όπου οι διαγώνιοι όροι (για $\mu = \mu'$) εκφράζουν την συνάρτηση κατανομής των ηλεκτρονίων ενώ για οι μη διαγώνιοι όροι (για $\mu \neq \mu'$) εκφράζουν τις intraband πολώσεις. Όμοια για τις οπές,

$$f_{\nu\nu'}^h \equiv \langle d_{\nu}^{\dagger} d_{\nu'} \rangle \quad (4.27)$$

Τέλος, τα στοιχεία

$$p_{\nu\mu} \equiv \langle d_{\nu} c_{\mu} \rangle \quad (4.28)$$

καλούνται interband density-matrix elements και εκφράζουν την οπτική πόλωση.

Προκειμένου να παραχθούν οι εξισώσεις κίνησης για τις παραπάνω μεταβλητές [140], οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των ηλεκτρονίων και των οπών εκφράζονται συναρτήσει των τελεστών του πεδίου που έχουν οριστεί στην σχέση (4.17).

$$c_{\mu} = \int d\mathbf{r} \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (4.29)$$

και

$$d_{\nu} = \int d\mathbf{r} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \quad (4.30)$$

Εφαρμόζοντας την εξίσωση Heisenberg για τον τελεστή πεδίου $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, λαμβάνονται οι παρακάτω εξισώσεις κίνησης για τους τελεστές καταστροφής (ή δημιουργίας) των φορέων:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_{\mu} &= \frac{1}{i\hbar} [c_{\mu}, H] + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'} Z_{\mu\mu'}^e c_{\mu'} \\ \frac{d}{dt} d_{\nu} &= \frac{1}{i\hbar} [d_{\nu}, H] + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\nu'} Z_{\nu\nu'}^h d_{\nu'} \end{aligned} \quad (4.31)$$

όπου τα στοιχεία πίνακα

$$Z_{\ell\ell'}^{e/h} = i\hbar \int d\mathbf{r} \frac{d}{dt} [\Phi^{\ell e/h*}(\mathbf{r}) \Phi^{\ell' e/h}(\mathbf{r})] \quad (4.32)$$

περιέχουν την χρονική μεταβολή των μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων, η οποία επίσης επάγει μεταβάσεις μεταξύ των διαφορετικών καταστάσεων. Εδώ, θεωρούμε

ότι οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων και οπών δεν εξαρτώνται από το χρόνο και ότι η χρονική μεταβολή των τελεστών του πεδίου εμπεριέχεται αποκλειστικά στους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των φορέων. Έτσι μπορούμε να γράψουμε:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{\mu\mu'}^e &= \langle [c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'}, H] \rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_{\nu\nu'}^h &= \langle [d_{\nu}^{\dagger} d_{\nu'}, H] \rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{\mu\nu}^h &= \langle [d_{\nu}^{\dagger} c_{\mu}, H] \rangle \end{aligned} \quad (4.33)$$

Στο Παράρτημα Ε' έχουν υπολογιστεί αναλυτικά οι χρονικές μεταβολές της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων, $\frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t}|_{sp}$, $\frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t}|_{cl}$ και $\frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t}|_{ee}$, που αντιστοιχούν στο σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φορέων, της αλληλεπίδρασης με το συνεκτικό πεδίο του laser και της αλληλεπίδρασης φορέα-φορέα.

Στις περιπτώσεις των οπτικών διεγέρσεων, οι όροι $\langle c_{\mu}^{\dagger}(t) c_{\mu'}(t) \rangle$ για $\mu \neq \mu'$ και $\langle d_{\nu}^{\dagger}(t) d_{\nu'}(t) \rangle$ για $\nu \neq \nu'$ που αντιστοιχούν στις ενδοζωνικές πολώσεις (intraband polarizations) είναι αμελητέοι [154]. Όμοια υπολογίζονται οι χρονικές μεταβολές της συνάρτησης κατανομής των οπών, καθώς και της οπτικής πόλωσης. Προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις για τις συναρτήσεις κατανομής και την οπτική πόλωση:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f^{\mu e} &= \sum_{\nu'} (U_{\mu\nu'}^{\text{renorm}} p_{\mu\nu'}^* - U_{\mu\nu'}^{\text{renorm}*} p_{\mu\nu'}) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f^{\nu h} &= \sum_{\mu'} (U_{\mu'\nu}^{\text{renorm}} p_{\mu'\nu}^* - U_{\mu'\nu}^{\text{renorm}*} p_{\mu'\nu}) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{\mu\nu} &= \sum_{\mu'\nu'} (E_{\mu\mu'}^{e,\text{renorm}} \delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,\text{renorm}} \delta_{\mu\mu'}) p_{\mu'\nu'} \\ &+ U_{\mu\nu}^{\text{renorm}} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Στις παραπάνω σχέσεις, με $E_{\mu\mu'}^{e,\text{renorm}}$, $E_{\nu\nu'}^{h,\text{renorm}}$, και $U_{\mu\nu}^{\text{renorm}}$ συμβολίζουμε τις επανακανονικοποιημένες (renormalized) μονοσωματιδιακές ενέργειες ηλεκτρονίων και οπών και την επανακανονικοποιημένη ενέργεια Rabi που ορίζονται από τις σχέσεις:

$$U_{\mu\nu}^{\text{renorm}} = U_{\mu\nu} - \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh} p_{\mu'\nu'} \quad (4.35)$$

και

$$E_{\ell_1\ell_2}^{e/h,\text{renorm}} = E_{\ell_1} \delta_{\ell_1\ell_2} - \sum_{\ell_3} V_{\ell_1\ell_3\ell_2\ell_3}^{ee/hh} f^{\ell_3,e/h} \quad (4.36)$$

Το σύνολο εξισώσεων (4.34) αποτελούν τις *Hartree-Fock-Ημιαγωγικές Εξισώσεις Bloch* (συντ. *HF-SBE*) για τις κβαντικές τελείες. Οι Ημιαγωγικές Εξισώσεις *Bloch* χρησιμοποιούνται ευρύτατα για την μελέτη των φαινομένων συνοχής στους bulk ημιαγωγούς [140,159].

4.5 Μακροσκοπικός ορισμός πόλωσης

Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο $E(\mathbf{r}, t)$ συνδέεται με την επαγόμενη μακροσκοπική πόλωση $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ με την σχέση:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \int dt' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t) \quad (4.37)$$

όπου $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$ είναι ο τανυστής της μη τοπικής (τόσο στον χώρο όσο και στον χρόνο) επιδεκτικότητας. Για ένα σύστημα που διατηρείται αμετάβλητο στο χρόνο, η χρονική εξάρτηση της επιδεκτικότητας υπεισέρχεται μέσω μόνο της διαφοράς $t - t'$, δηλαδή $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t')$ (stationary regime). Τότε η παραπάνω εξίσωση μετασχηματίζεται σε μια "τοπική" στο χώρο των συχνοτήτων εξίσωση. Πράγματι, λαμβάνοντας τον μετασχηματισμό Fourier και των δύο μελών της Εξ. (4.37) προκύπτει:

$$\begin{aligned} \int dt \exp(-i\omega t) \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= \int d\mathbf{r}' \int \int dt' dt \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t') \exp(-i\omega t) \Rightarrow \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) &= \int d\mathbf{r}' \int dt - dt' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') \exp(-i\omega(t - t')) \\ &\quad \int dt' \mathbf{E}(\mathbf{r}', t') \exp(-i\omega t') \Rightarrow \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) &= \int d\mathbf{r}' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) \end{aligned} \quad (4.38)$$

όπου $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ και $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega)$ ο μετασχηματισμός Fourier του χρονικά μεταβαλλόμενου ηλεκτρικού πεδίου και της πόλωσης αντίστοιχα. Σε αρκετές περιπτώσεις όπως για παράδειγμα στην περίπτωση ενός ομογενούς ηλεκτρομαγνητικού πεδίου όπου $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(\omega)$, η Εξ. (4.38) γράφεται $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(\omega) \int d\mathbf{r}' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \mathbf{E}(\omega) \chi(\mathbf{r}, \omega)$ κι έτσι όπως είναι φανερό, μπορούμε να αμελήσουμε την μη τοπικότητα της επιδεκτικότητας [160]. Στην περίπτωση όμως που θέλουμε να περιγράψουμε την απόκριση των εξιτονικών καταστάσεων σε ηλεκτρομαγνητικό πεδίο με χωρική έκταση συγκρίσιμη με την ακτίνα Bohr θα πρέπει να διατηρηθεί πλήρως ο μη τοπικός χαρακτήρας της επιδεκτικότητας.

Πρέπει να τονιστεί ότι αντίθετα με τα στερεά (bulk), οι εξιτονικές καταστάσεις στις νανοδομές δεν έχουν μεταφορική συμμετρία. Αυτό σημαίνει ότι η επιδεκτικότητα εξαρτάται χωριστά από τις συντεταγμένες \mathbf{r} και \mathbf{r}' και όχι από την μεταξύ τους απόσταση.

4.6 Μικροσκοπικός ορισμός πόλωσης

Η τοπική πόλωση ορίζεται ως:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = q \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (4.39)$$

όπου οι $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ και $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ είναι οι τελεστές πεδίου που δίνονται από τις σχέσεις (4.17). Εισάγοντας τους τελεστές πεδίου στην πόλωση προκύπτει:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= q \langle \left(\sum_{\mu} c_{\mu}^{\dagger}(t) \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \right. \\ &+ \sum_{\nu} d_{\nu}(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \left(\sum_{\mu'} c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \right. \\ &+ \left. \left. \sum_{\nu'} d_{\nu'}^{\dagger}(t) \Phi^{\nu' h^*}(\mathbf{r}) \right) \right) \rangle \\ &= q \langle \sum_{\mu\mu'} c_{\mu}^{\dagger}(t) \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \mathbf{r} c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \rangle \\ &+ q \langle \sum_{\nu\nu'} d_{\nu}(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \mathbf{r} d_{\nu'}^{\dagger}(t) \Phi^{\nu' h^*}(\mathbf{r}) \rangle \\ &+ q \langle \sum_{\mu\nu} c_{\mu}^{\dagger}(t) \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \mathbf{r} d_{\nu}^{\dagger}(t) \Phi^{\nu h^*}(\mathbf{r}) \rangle \\ &+ q \langle \sum_{\mu\nu} c_{\mu}(t) \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) \mathbf{r} d_{\nu}(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (4.40)$$

Στην έκφραση για την πόλωση δεν λαμβάνουμε [154] υπόψη τα στοιχεία $\langle c_{\mu}^{\dagger}(t) c_{\mu'}(t) \rangle$ και $\langle d_{\nu}(t) d_{\nu'}^{\dagger}(t) \rangle$ του πίνακα της πυκνότητας, τα οποία αντιστοιχούν σε μεταβάσεις μέσα στην ίδια ζώνη (intraband). Έτσι η σχέση (4.40) γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= q \sum_{\mu\nu} \langle c_{\mu}^{\dagger}(t) d_{\nu}^{\dagger}(t) \rangle \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi^{\nu h^*}(\mathbf{r}) \rangle \\ &+ q \sum_{\mu\nu} \langle c_{\mu}(t) d_{\nu}(t) \rangle \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \sum_{\mu\nu} [p_{\mu\nu}(t) \mathbf{M}_{\mu\nu}^*(\mathbf{r}) + p_{\mu\nu}^*(t) \mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (4.41)$$

όπου τα

$$\mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = q\Phi^{\mu e*}(\mathbf{r})\mathbf{r}\Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) \quad (4.42)$$

καλούνται “τοπικά” διπολικά στοιχεία πίνακα (local dipole matrix elements) [154].

4.7 Η εξίσωση της μικροσκοπικής οπτικής πόλωσης

4.7.1 Η μικροσκοπική οπτική πόλωση στην εικόνα του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και οπών

Θα υπολογίσουμε τις στάσιμες λύσεις των ημιαγωγικών εξισώσεων Bloch θεωρώντας ότι οι συναρτήσεις $f^{\mu e}$ και $f^{\nu h}$ είναι οι συναρτήσεις κατανομής στην ισορροπία (quasi-equilibrium regime), κι επομένως δεν εξαρτώνται από τον χρόνο. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση της οπτικής πόλωσης (4.34) την επανακανονικοποιημένη ενέργεια Rabi ($U_{\mu\nu}^{\text{renorm}}$) από την Εξ. (4.35) και χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό $\ell \equiv \mu\nu$, προκύπτει τελικά:

$$\frac{\partial p_\ell}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\ell'} S_{\ell\ell'} p_{\ell'}(t) + \frac{1}{i\hbar} \bar{U}_\ell(t) \quad (4.43)$$

όπου θέσαμε:

$$\begin{aligned} T_{\ell\ell'} &\equiv E_{\mu\mu'}^{e,\text{renorm}} \delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,\text{renorm}} \delta_{\mu\mu'} \\ W_{\ell\ell'} &\equiv V_{\mu\mu'\nu\nu'}^{eh} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\ S_{\ell\ell'} &\equiv T_{\ell\ell'} - W_{\ell\ell'} \\ \bar{U}_\ell(t) &= U_\ell(t) (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Γενικά οι ιδιοτιμές Σ^λ του πίνακα \hat{S} είναι μιγαδικοί. Όμως, στην γραμμική περιοχή ($1 - f^{\mu e} - f^{\nu h} \approx 1$) ο πίνακας αυτός είναι ερμιτιανός και ισούται με τον εξιτονικό πίνακα. Οι δε πραγματικές ιδιοτιμές ($\Sigma^\lambda = E^\lambda$) είναι οι εξιτονικές ενέργειες. Αν θεωρήσουμε ένα ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής (οπότε αμελείται η αλληλεπίδραση $e-e$ και $h-h$), η μικροσκοπική οπτική πόλωση δίνεται από την (4.43), αλλά με:

$$\begin{aligned} T_\ell &\equiv E^{\mu e} + E^{\nu h} \\ W_{\ell\ell'} &\equiv V_{\mu\mu'\nu\nu'}^{eh} \\ S_{\ell\ell'} &\equiv T_\ell \delta_{\ell\ell'} - W_{\ell\ell'} \\ \bar{U}_\ell(t) &= U_\ell(t) \end{aligned} \quad (4.45)$$

4.7.2 Η μικροσκοπική οπτική πόλωση στην εξιτονική εικόνα

Ορίζεται έναν μοναδιαίος μετασχηματισμός που συνδέει την αρχική βάση $|\mu\nu\rangle \equiv |\ell\rangle$ των μη αλληλεπιδρώντων φορέων με την εξιτονική βάση $|\lambda\rangle$:

$$|\lambda\rangle = \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda} |\ell\rangle \quad (4.46)$$

Οι συντελεστές του παραπάνω αναπτύγματος είναι τα στοιχεία πίνακα αυτού του μοναδιαίου μετασχηματισμού (δηλ. $C_{\ell}^{\lambda} = \langle \ell | \lambda \rangle$). Εφαρμόζουμε τον μοναδιαίο μετασχηματισμό στην εξίσωση της μικροσκοπικής οπτικής πόλωσης:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_{\ell}}{\partial t} C_{\ell}^{\lambda*} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\ell'} S_{\ell\ell'} p_{\ell'}(t) C_{\ell}^{\lambda*} + \frac{1}{i\hbar} \bar{U}_{\ell}(t) C_{\ell}^{\lambda*} \Rightarrow \\ \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \frac{\partial p_{\ell}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\ell'} p_{\ell'}(t) (\sum_{\ell} S_{\ell\ell'} C_{\ell}^{\lambda*}) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \bar{U}_{\ell}(t) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (4.6) η παραπάνω γράφεται:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} p_{\ell}(t) = \frac{1}{i\hbar} \Sigma^{\lambda} (\sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} p_{\ell}(t)) + \frac{1}{i\hbar} (\sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \bar{U}_{\ell}(t)) \quad (4.48)$$

Ορίζοντας την οπτική πόλωση στην εξιτονική εικόνα:

$$p^{\lambda}(t) = \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} p_{\ell}(t) \quad (4.49)$$

προκύπτει τελικά η εξίσωση της μικροσκοπικής οπτικής πόλωσης στην εξιτονική εικόνα:

$$\frac{\partial p^{\lambda}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \Sigma^{\lambda} p^{\lambda}(t) + \frac{1}{i\hbar} \bar{U}^{\lambda}(t) \quad (4.50)$$

όπου:

$$\bar{U}^{\lambda}(t) = \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \bar{U}_{\ell}(t) \quad (4.51)$$

Λαμβάνοντας τον μετασχηματισμό Fourier της εξίσωσης (4.50) βρίσκουμε τελικά:

$$p^{\lambda}(\omega) = -\frac{\bar{U}^{\lambda}(\omega)}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega} \quad (4.52)$$

4.8 Η Μακροσκοπική Πόλωση στην εξιτονική εικόνα

Εφαρμόζοντας στην σχέση (4.41) τον μοναδιαίο μετασχηματισμό που συνδέει την εικόνα του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων με την εξιτονική εικόνα και χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό $\ell \equiv \mu\nu$, προκύπτει:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\ell} [p_{\ell}(t) \mathbf{M}_{\ell}^*(\mathbf{r}) + p_{\ell}^*(t) \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r})] \\ &= \sum_{\ell} \sum_{\ell'} p_{\ell'}(t) \mathbf{M}_{\ell}^*(\mathbf{r}) \delta_{\ell\ell'} + \sum_{\ell} \sum_{\ell'} p_{\ell}^*(t) \mathbf{M}_{\ell'}(\mathbf{r}) \delta_{\ell\ell'} \end{aligned} \quad (4.53)$$

Λαμβάνοντας υπόψη την σχέση ορθογωνιότητας των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων

$$\sum_{\lambda} C_{\ell}^{\lambda} C_{\ell'}^{\lambda*} = \delta_{\ell\ell'} \quad (4.54)$$

η μακροσκοπική πόλωση γράφεται:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} [\sum_{\ell'} C_{\ell'}^{\lambda*} p_{\ell'}(t) \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell}^*(\mathbf{r}) + \sum_{\ell'} C_{\ell'}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell'}(\mathbf{r}) \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda} p_{\ell}(t)] \quad (4.55)$$

Η παραπάνω σχέση καταλήγει στην:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} [p^{\lambda}(t) \mathbf{M}^{\lambda*}(\mathbf{r}) + \mathbf{M}^{\lambda}(\mathbf{r}) p^{\lambda*}(t)] \quad (4.56)$$

όπου:

$$\mathbf{M}^{\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r}) \quad (4.57)$$

Εισάγοντας τους μετασχηματισμούς Fourier (Z.4) στην (4.56) και λαμβάνοντας υπόψη την σχέση (4.52) προκύπτει για την μακροσκοπική πόλωση:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\lambda} [\mathbf{M}^{\lambda*} \frac{-\bar{U}^{\lambda}(\omega)}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega} + \mathbf{M}^{\lambda}(\mathbf{r}) \frac{-\bar{U}^{\lambda*}(-\omega)}{\Sigma^{\lambda} + \hbar\omega}] \quad (4.58)$$

Το μέτρο του ηλεκτρικού πεδίου έχει την μορφή:

$$E(\mathbf{r}, t) = E(\mathbf{r}) [E_0(t) \exp(-i\omega_L t) + E_0^*(t) \exp(i\omega_L t)] \quad (4.59)$$

όπου $E_0(t)$ το πλάτος και ω_L η κεντρική συχνότητα του laser. Λαμβάνοντας τον μετασχηματισμό Fourier του ηλεκτρικού πεδίου προκύπτει:

$$E(\mathbf{r}, \omega) = E(\mathbf{r}) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt E_0(t) \exp[-i(\omega - \omega_L)t] + \int_{-\infty}^{+\infty} dt E_0^*(t) \exp[i(\omega + \omega_L)t] \right] \quad (4.60)$$

Η συζυγής της παραπάνω σχέσης γράφεται:

$$E^*(\mathbf{r}, -\omega) = E(\mathbf{r}) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt E_0^*(t) \exp[i(\omega + \omega_L)t] + \int_{-\infty}^{+\infty} dt E_0(t) \exp[i(\omega - \omega_L)t] \right] \quad (4.61)$$

Συγκρίνοντας τις (4.60) και (4.61) προκύπτει:

$$E^*(\mathbf{r}, -\omega) = E(\mathbf{r}, \omega) \quad (4.62)$$

Ο μετασχηματισμός Fourier της μακροσκοπικής πόλωσης γράφεται:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\lambda} \left[\mathbf{M}^{\lambda*} \frac{-\bar{U}^{\lambda}(\omega)}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega} + \mathbf{M}^{\lambda}(\mathbf{r}) \frac{-\bar{U}^{\lambda*}(-\omega)}{\Sigma^{\lambda} + \hbar\omega} \right] \quad (4.63)$$

Αντικαθιστώντας στην (4.58) τις εκφράσεις της ενέργειας Rabi στην εξιτονική εικόνα (σχέση Z.2) και των τοπικών διπολικών στοιχείων πίνακα στην εξιτονική εικόνα (σχέση 4.57), και λαμβάνοντας υπόψη την σχέση (4.62) για το ηλεκτρικό πεδίο προκύπτει για την μακροσκοπική πόλωση:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = & \int d\mathbf{r}' \sum_{\lambda, \ell, \ell'} \left[\frac{C_{\ell}^{\lambda} C_{\ell'}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}^*(\mathbf{r}) \mathbf{M}_{\ell'}(\mathbf{r}')}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega} \right. \\ & \left. + \frac{C_{\ell}^{\lambda*} C_{\ell'}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r}) \mathbf{M}_{\ell'}^*(\mathbf{r}')}{\Sigma^{\lambda*} + \hbar\omega} \right] \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) (1 - f^{\mu'e} - f^{\nu'h}) \end{aligned} \quad (4.64)$$

Στην παραπάνω έκφραση αμελούμε τον εκτός συντονισμού όρο $E^{\lambda*} + \hbar\omega$ (Rotating Wave Approximation). Η Rotating Wave Approximation [161–164] είναι μια προσέγγιση που χρησιμοποιείται στην ατομική φυσική και στον μαγνητικό συντονισμό. Με βάση αυτή την προσέγγιση, αμελούνται οι όροι της Χαμιλτονιανής που ταλαντώνονται γρήγορα, δηλαδή με συχνότητες $\omega_{\ell} + \omega_0$, όπου ω_{ℓ} η συχνότητα των απορροφούμενων ή εκπεμπόμενων φωτονίων και ω_0 η συχνότητα της μετάβασης. Έτσι τελικά η έκφραση για την μακροσκοπική πόλωση γράφεται:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{r}' \sum_{\lambda, \ell, \ell'} \frac{C_{\ell}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell}^*(\mathbf{r}) C_{\ell'}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell'}(\mathbf{r}') (1 - f^{\mu'e} - f^{\nu'h})}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega} \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) \quad (4.65)$$

4.9 Η Μικροσκοπική έκφραση για την μη τοπική επιδεκτικότητα

Συγκρίνοντας την μακροσκοπική έκφραση της πόλωσης (σχέση 4.38) με την μικροσκοπική έκφραση που καταλήξαμε στην προηγούμενη παράγραφο, προκύπτει η μικροσκοπική έκφραση για την μη τοπική επιδεκτικότητα $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$ συναρτήσεως των μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων ηλεκτρονίων και οπών:

$$\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \sum_{\lambda, \ell, \ell'} \frac{C_{\ell}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell}^*(\mathbf{r}) C_{\ell'}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell'}(\mathbf{r}') (1 - f_{\mu'e} - f_{\nu'h})}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega}. \quad (4.66)$$

Η παραπάνω γενική έκφραση περιγράφει την απόκριση του συστήματος σε μικροσκοπικό επίπεδο, υπό την προϋπόθεση ότι είναι γνωστές οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις ηλεκτρονίων και οπών που εμπεριέχονται στα τοπικά διπολικά στοιχεία πίνακα.

Για την περιγραφή της απόκρισης του συστήματος σε έναν τοπικό ανιχνευτή με έκταση συγκρίσιμη με την εξιτονική ακτίνα Bohr ενός τυπικού ημιαγωγού όπως το GaAs οι καταστάσεις τόσο των ηλεκτρονίων όσο και των βαρέων οπών υπολογίζονται με την προσέγγιση της περιβάλλουσας συνάρτησης θεωρώντας ότι οι διακυμάνσεις σε ατομική κλίμακα των κυματοσυναρτήσεων εμπεριέχονται στις bulk παραμέτρους. Αμελώντας valence band mixing και θεωρώντας ισοτροπική σχέση διασποράς και για τα ηλεκτρόνια και για τις οπές [165] οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις ηλεκτρονίων και οπών γράφονται ως:

$$\Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) = u_c(\mathbf{r}) \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) \quad (4.67)$$

$$\Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) = u_v(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \quad (4.68)$$

όπου $\Phi^{\mu e}(\mathbf{r})$ και $\Phi^{\nu h}(\mathbf{r})$ είναι οι περιβάλλουσες κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων και των οπών αντίστοιχα, και $u_c(\mathbf{r})$, $u_v(\mathbf{r})$ είναι οι ατομικές bulk συναρτήσεις στα όρια των ζωνών αγωγιμότητας και σθένους αντίστοιχα. Τα τοπικά διπολικά στοιχεία πίνακα λόγω των (4.67) γράφονται:

$$\mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = q u_c^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} u_v^*(\mathbf{r}) \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) \quad (4.69)$$

Θεωρούμε ότι τα τοπικά διπολικά στοιχεία του bulk μέρους των κυματοσυναρτήσεων στα άκρα των ζωνών ισούνται προσεγγιστικά με την μέση τιμή τους σε μια μοναδιαία κυψελίδα όγκου Ω_c :

$$q u_c^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} u_v^*(\mathbf{r}) \approx q \Omega_c^{-1} \int_{\Omega_c} u_c^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} u_v^*(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{M}_{bulk} \quad (4.70)$$

όπου τα \mathbf{M}_{bulk} καλούνται bulk διπολικά στοιχεία πίνακα. Έτσι τα τοπικά διπολικά στοιχεία γράφονται:

$$\mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_{bulk} \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h^*}(\mathbf{r}) \quad (4.71)$$

Αντίστοιχα, τα ολικά διπολικά στοιχεία πίνακα δίνονται από:

$$\mathbf{M}_{\mu\nu}^0(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_{bulk} \int d^3\mathbf{r}' \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h^*}(\mathbf{r}') \quad (4.72)$$

Με βάση την παραπάνω προσέγγιση ο τελεστής της επιδεκτικότητας χ γίνεται διαγώνιος, με στοιχεία

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = & |M_{bulk}|^2 \sum_{\lambda, \mu, \mu', \nu'} C_{\mu\nu}^{\lambda} C_{\mu'\nu'}^{\lambda*} \times \\ & (1 - f^{\mu'e} - f^{\nu'h}) \frac{\Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu' e^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu' h^*}(\mathbf{r}')}{\Sigma^{\lambda} - \hbar\omega} \end{aligned} \quad (4.73)$$

4.10 Ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης

Η συνολική απορροφούμενη ισχύς σε έναν ημιαγωγό δίνεται από [154]:

$$W(\omega) \propto \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Im[E(\mathbf{r}, \omega) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) E(\mathbf{r}', \omega)] \quad (4.74)$$

Στην συνήθη περίπτωση ομογενούς κατανομής του HM πεδίου του ανιχνευτή, ο μη τοπικός χαρακτήρας της επιδεκτικότητας αμελείται και $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Στην αντίθετη περίπτωση, προκειμένου να περιγράψουμε την απόκριση των κυματοσυναρτήσεων στο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο του ανιχνευτή με χωρική έκταση συγκρίσιμη με την εξιτονική ακτίνα Bohr, θα πρέπει να διατηρήσουμε τον μη τοπικό χαρακτήρα της επιδεκτικότητας. Τότε όμως δεν είναι πλέον εφικτό να ορισθεί ένας τοπικός συντελεστής απορρόφησης που να συνδέει την απορροφούμενη ισχύ με την ένταση του φωτός.

Ωστόσο, θεωρώντας ένα πεδίο φωτός $E(\mathbf{r}, \omega) = E(\omega) \xi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ όπου $\xi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ το προφίλ του πεδίου γύρω από την θέση \mathbf{R} της δέσμης, μπορεί κανείς να ορίσει έναν τοπικό συντελεστή απορρόφησης ο οποίος είναι συνάρτηση της θέσης της δέσμης και συνδέει την ολική απορροφούμενη ισχύ με την ισχύ της τοπικής διέγερσης (illumination mode):

$$\alpha_{\xi}(\mathbf{R}, \omega) \propto \int \Im[\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \xi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \xi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'] \quad (4.75)$$

Η παραπάνω έκφραση δεν ισχύει μόνο σε περιπτώσεις ασθενούς οπτικής διέγερσης, αλλά περιγράφει τόσο την γραμμική όσο και την μη γραμμική απόκριση του συστήματος. Όπως έχει αναφερθεί, για την γραμμική περιοχή όπου το άθροισμα των συναρτήσεων κατανομής των ηλεκτρονίων και οπών είναι πολύ μικρότερο της μονάδας, η ποσότητα

$$\Psi^\lambda(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu}^\lambda \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}_h) \quad (4.76)$$

αποτελεί την εξιτονική κυματοσυνάρτηση, οι δε πραγματικές ιδιοτιμές ($\Sigma^\lambda = E^\lambda$) είναι οι εξιτονικές ενέργειες. Στην περίπτωση αυτή, ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης έχει την μορφή:

$$\alpha_\xi(\mathbf{R}, \omega) \propto \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \xi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \xi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) |M_{bulk}|^2 \Im \sum_{\lambda, \mu\nu, \mu'\nu'} \frac{C_{\mu\nu}^\lambda C_{\mu'\nu'}^{\lambda*} \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu' e*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu' h*}(\mathbf{r}')}{E^\lambda - \hbar\omega} \quad (4.77)$$

Τελικά προκύπτει:

$$\alpha_\xi(\mathbf{R}, \omega) = \Im \left[\sum_\lambda \frac{\alpha_\xi^\lambda(\mathbf{R})}{E^\lambda - \hbar\omega} \right] \quad (4.78)$$

όπου η ποσότητα:

$$\alpha_\xi^\lambda(\mathbf{R}) = \left| \int d\mathbf{r} \Psi^\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \xi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right|^2 \quad (4.79)$$

καλείται ισχύς ταλαντωτή (oscillator strength). Αν συμπεριλάβουμε τον όρο των συγκρούσεων (dephasing) οι παραπάνω σχέσεις γράφονται:

$$\alpha_\xi(\mathbf{R}, \omega) = \Im \left[\sum_\lambda \frac{\alpha_\xi^\lambda(\mathbf{R})}{E^\lambda - i\gamma - \hbar\omega} \right] \quad (4.80)$$

με

$$\alpha_\xi^\lambda(\mathbf{R}) = \left| \int d\mathbf{r} \Psi^\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \xi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right|^2 \quad (4.81)$$

Η παραπάνω εξίσωση εμπεριέχει το φαινόμενο της χωρικής συνεκτικότητας των κβαντικών καταστάσεων στην γραμμική περιοχή. Διακρίνουμε τρεις περιοχές:

- Στο όριο του μακρινού πεδίου far field (όπου το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο του ανιχνευτή θεωρείται ομοιογενές), το φάσμα απορρόφησης δίνει πληροφορίες για την μέση τιμή της εξιτονικής συνάρτησης σε όλο τον χώρο.

- Στο αντίθετο όριο, του εξαιρετικά λεπτού ανιχνευτή, όπου το προφίλ του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου είναι μια δέλτα συνάρτηση, είναι $\alpha_{\xi}^{\lambda}(\mathbf{R}, \omega) \propto |\Psi^{\lambda}(\mathbf{R}, \mathbf{R})|^2$, οπότε το τοπικό φάσμα απορρόφησης *χαρτογραφεί* την εξιτονική συνάρτηση στην θέση του ανιχνευτή. Στην περίπτωση αυτή ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης είναι μη μηδενικός σε κάθε σημείο που η εξιτονική συνάρτηση έχει πεπερασμένη συνεισφορά. Είναι λοιπόν φανερό ότι μεταβάσεις μη ορατές (“ απαγορευμένες”) στο μακρινό πεδίο μπορούν να γίνουν ορατές στο όριο αυτό.
- Στην ενδιάμεση περιοχή ενός πολύ στενού αλλά πεπερασμένου ανιχνευτή (near field), λαμβάνεται η χωρική μέση τιμή της εξιτονικής συνάρτησης αλλά στην περιοχή που καθορίζεται από την έκταση της φωτεινής δέσμης.

Έχει αποδειχθεί [2, 166] ότι εξιτονικές μεταβάσεις που είναι “ απαγορευμένες” στο μακρινό πεδίο (far field), μπορούν να είναι ορατές στο εγγύς πεδίο. Επιπλέον, στην περίπτωση του στενού αλλά πεπερασμένου ανιχνευτή, είναι δυνατόν να μηδενίζεται η συνεισφορά από την εξιτονική συνάρτηση σε διάφορα σημεία του χώρου κι αυτό οδηγεί σε έναν “ εντοπισμό” του φάσματος απορρόφησης. Έτσι η έκταση της φωτεινής δέσμης επηρεάζει σημαντικά το φάσμα απορρόφησης.

Κεφάλαιο 5

Μαγνητοαπορρόφηση εγγύς πεδίου στις κβαντικές τελείες

Η έννοια της τοπικότητας του συντελεστή απορρόφησης [154] μας δίνει την δυνατότητα να αναπτύξουμε μια θεωρητική μελέτη τέτοια ώστε να συμπεριλαμβάνει και την εφαρμογή ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου με αποτέλεσμα την έκφραση του συντελεστή μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου κβαντικών τελειών.

Αυτό είναι και το αντικείμενο του πρώτου μέρους της παρούσας διδακτορικής διατριβής. Υπολογίζουμε τον συντελεστή απορρόφησης εγγύς πεδίου απλών και διπλών κβαντικών τελειών που υπόκεινται σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο με ποικίλο προσανατολισμό και μέτρο μέχρι 20T.

Παράλληλα εξετάζουμε τον ρόλο που παίζουν τόσο ο χωρικός (που οφείλεται στα δομικά χαρακτηριστικά της κβαντικής τελείας) όσο και ο μαγνητικός (που οφείλεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο) εντοπισμός στο φάσμα απορρόφησης. Η εφαρμογή του μαγνητικού πεδίου προκαλεί μια αναδιάρθρωση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων των φορέων, η οποία σε συνδυασμό με την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών, εισάγει μια πληθώρα τροποποιήσεων στο φάσμα απορρόφησης εγγύς πεδίου. Οι τροποποιήσεις αυτές μπορούν να παρατηρηθούν με τους σημερινούς ανιχνευτές μεγάλης διακριτικής ικανότητας.

Στο τέλος του κεφαλαίου, για πληρότητα, γίνεται μια συνοπτική παρουσίαση της εξέλιξης της φασματοσκοπίας εγγύς πεδίου, των πλεονεκτημάτων και της βασικής θεωρίας της. Ένα από τα βασικά χαρακτηριστικά του SNOM είναι το ότι μεταβάσεις "άπαγορευμένες" στο μακρινό πεδίο μπορούν να είναι ορατές στο εγγύς πεδίο [166]. Ανάλογη συμπεριφορά παρατηρήθηκε και στα κβαντικά σύρματα [154].

Σύμφωνα με θεωρητικούς υπολογισμούς [2], τόσο η αλληλεπίδραση Coulomb

όσο και η χωρική επικάλυψη των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων με το προφίλ του διεγείροντος ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, καθορίζουν το φάσμα απορρόφησης εγγύς πεδίου. Συγκεκριμένα, αποδείχθηκε ότι εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων Coulomb, αυξάνοντας την περιοχή που φωτίζουμε, παρατηρούνται αυξομειώσεις της έντασης των μεταβάσεων (μη μονότονη συμπεριφορά), όταν η περιοχή που φωτίζουμε γίνει συγκρίσιμη με την εξιτονική ακτίνα Bohr.

Αν και στις αρχές του 1990 επιτεύχθηκε ανάλυση ≈ 12 nm [167] (κατά την μελέτη μικρών τελειών Al σε υπόστρωμα γυαλιού), στις ετεροδομές ημιαγωγών η χωρική ανάλυση που επιτεύχθηκε ως τα τέλη του '90 ήταν $\approx 100 - 200$ nm. Είναι λοιπόν φανερό ότι για τελείες GaAs με εξιτονική ακτίνα Bohr ≈ 12 nm, δεν μπορούσε να γίνει σύγκριση μεταξύ πειράματος και θεωρίας. Προκειμένου κάτι τέτοιο να είναι εφικτό, θα πρέπει να συγκλίνουν τρία πράγματα: (α) Να μειωθεί το πάχος του επιστρώματος της επιφάνειας, το οποίο δημιουργεί μια αναπόφευκτη και μη επιθυμητή απόσταση $\approx 50 - 100$ nm μεταξύ των προς ανίχνευση εξιτονικών καταστάσεων της τελείας και του ανιχνευτή, (β) να χρησιμοποιηθεί ημιαγωγός με μεγαλύτερη εξιτονική ακτίνα Bohr, όπως για παράδειγμα το InAs με $\rho \approx 38$ nm, και (γ) να βελτιωθεί η χωρική ανάλυση (φωτιζόμενη περιοχή) των ανιχνευτών εγγύς πεδίου. Οι Matsuda et al. [4, 168] πέτυχαν χωρική ανάλυση 30 nm ($\approx \lambda/30$, $\lambda = 930$ nm), κατά την απεικόνιση αυτοοργανούμενων InAs κβαντικών τελειών, καθώς και κατά την απεικόνιση στον πραγματικό χώρο της κυματοσυναρτήσης του κέντρου μάζας ενός εξιτονίου εντοπισμένου σε μια τελεία GaAs.

Η επιτυχία αυτή σε πειραματικό επίπεδο [4, 168] έδωσε νέα ώθηση σε θεωρητικές μελέτες. Χαρακτηριστικά αναφέρονται θεωρητικοί υπολογισμοί του φάσματος φωτοφωταύγειας και απορρόφησης εγγύς πεδίου λόγω εξιτονικών μεταβάσεων και δι-εξιτονίων (biexcitons) που είναι περιορισμένα σε ημιαγωγικές τελείες που σχηματίζονται λόγω διακυμάνσεων στην ενδοεπιφάνεια κβαντικών πηγαδιών GaAs [5, 6] καθώς και θεωρητική περιγραφή του SNOM σε μακρομόρια [7].

Από την άλλη, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη των εξιτονίων σε κβαντικές τελείες που υπόκεινται σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Χαρακτηριστικά αναφέρουμε: (α) την μελέτη εξιτονίων σε κβαντικές τελείες InGaAs/GaAs που αποτελούνται από N ηλεκτρόνια και οπές, και βρίσκονται υπό την επίδραση κάθετου μαγνητικού πεδίου [169], (β) την μελέτη της επίδρασης κατακόρυφου μαγνητικού πεδίου στα εξιτόνια κβαντικής τελείας με ασύμμετρο παραβολικό δυναμικό εντοπισμού στο xy επίπεδο και πολύ στενό πηγάδι στον άξονα τον παράλληλο με το πεδίο [170], ή (γ) την μελέτη της επίδρασης πολύ υψηλών μαγνητικών πεδίων στα εξιτόνια τελείας σε σχήμα δίσκου [171].

Όπως προαναφέρθηκε, στο πρώτο μέρος της παρούσας διδακ-

τορικής διατριβής υπολογίζουμε τον συντελεστή μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου απλών ή διπλών κβαντικών τελειών. Ο υπολογισμός αυτός περιλαμβάνει τέσσερα βασικά στάδια:

- Το πρώτο αφορά στον υπολογισμό των μονοσωματιδιακών καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών που υπόκεινται στο τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό της τελείας και στο εξωτερικά εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο.
- Στο δεύτερο στάδιο εισάγουμε την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ των καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών.
- Στο τρίτο στάδιο επιλύουμε το εξιτονικό πρόβλημα υπολογίζοντας τις εξιτονικές καταστάσεις και ενέργειες.
- Τέλος, με βάση τα παραπάνω αποτελέσματα υπολογίζουμε το φάσμα μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου.

Η μελέτη υποστηρίζεται από ένα υπολογιστικό πρόγραμμα που αποτελείται τέσσερα αντίστοιχα μέρη.

5.1 Μονοσωματιδιακές καταστάσεις

Στις ημιαγωγικές τελείες οι φορείς υπόκεινται σε τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό. Θεωρώντας ότι το περιοριστικό δυναμικό μεταβάλλεται πολύ λίγο κατά μήκος μιας πλεγματικής σταθεράς, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση περιβάλλουσας συνάρτησης (envelope-function approach). Επιπλέον, επειδή η ενεργειακή περιοχή που μας ενδιαφέρει βρίσκεται κοντά στο ενεργειακό χάσμα, για την εύρεση της δομής των ζωνών χρησιμοποιούμε την προσέγγιση ενεργού μάζας μιας ζώνης, τόσο για τα ηλεκτρόνια όσο και για τις οπές. Η Χαμιλτονιανή υπό μαγνητικό πεδίο είναι:

$$\hat{H} = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

όπου: $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2}$ το διανυσματικό δυναμικό, $V(\mathbf{r})$ το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό της τελείας.

Για παράδειγμα, για την απλή κβαντική τελεία με ισότροπο παραβολικό περιοριστικό δυναμικό στο xy επίπεδο και πηγάδι στον άξονα z το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό δίνεται ως:

$$V(x, y, z) = 1/2m^{e/h,*}\omega^2(x^2 + y^2) + V(z) \quad (5.2)$$

Στην παραπάνω Χαμιλτονιανή δεν λάβαμε υπόψη το spin.

Για την εύρεση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων $|\Phi^{e/h}\rangle$, τις αναπτύσσουμε σε ορθοκανονική βάση επιπέδων κυμάτων, σε κουτί περιοδικότητας $\Omega = L_x L_y L_z$, δηλαδή

$$|\Phi^\mu\rangle = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^\mu |\mathbf{k}\rangle \quad (5.3)$$

Από τις περιοδικές συνθήκες συνεπάγεται: $\mathbf{k}_a^{e,h} = \frac{2\pi n_a^{e,h}}{L_a}$, $n_a^{e,h}$ ακέραιος και $a = x, y, z$. Οι μονοσωματιδιακές ενέργειες E^μ καθώς και οι συντελεστές $C_{\mathbf{k}}^\mu$ προκύπτουν από την αριθμητική λύση του παρακάτω προβλήματος ιδιοτιμών:

$$\sum_{\mathbf{k}'} [(\mathbf{k}|\hat{H}|\mathbf{k}') - E^\mu \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}] \langle \mathbf{k}' | \Phi^\mu \rangle = 0 \quad (5.4)$$

Για την λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών (5.4), φτιάξαμε έναν αλγόριθμο διαγωνιοποίησης, τον οποίο ενσωματώσαμε στο πρώτο μέρος του υπολογιστικού προγράμματος που είχαμε.

Υπολογιστικά, έχουμε την δυνατότητα να μελετούμε πολύπλοκες δομές κβαντικών τελειών υπό μαγνητικά πεδία διαφόρων προσανατολισμών. Επιπλέον φτιάξαμε απεικονίσεις των παραπάνω μονοσωματιδιακών συναρτήσεων στον πραγματικό χώρο, ώστε να ανιχνεύουμε πιθανές συμμετρίες και να ελέγχουμε γραφικά τις λύσεις.

Στην περίπτωση της απλής κβαντικής τελείας η σύγκλιση στις ενέργειες επιτεύχθηκε χρησιμοποιώντας 1200 επίπεδα κύματα. Στα σχήματα 5.1, 5.2 και 5.3 παρουσιάζονται οι πρώτες 6 (Darwin-Fock) καταστάσεις των ηλεκτρονίων, όπως υπολογίζονται λύνοντας αριθμητικά το πρόβλημα των ιδιοτιμών (5.4) για απλή παραβολική τελεία με πλάτος πηγαδιού $z_0 = 10$ nm και για μαγνητικά πεδία $B = 0$ T, $Bz = 4$ T και $Bx = 4$ T αντίστοιχα.

Στο Παράρτημα Η' περιγράφουμε τον αλγόριθμο που κατασκευάσαμε για τον έλεγχο ορθογωνιότητας των μονοσωματιδιακών καταστάσεων που προκύπτουν από την λύση του προβλήματος ιδιοτιμών (5.4). Καταλήξαμε σε μια σχέση ορθογωνιότητας που συνδέει τους συντελεστές $C_{\mathbf{k}}^\mu$ του αναπτύγματος σε επίπεδα κύματα.

Επειδή σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο οι καταστάσεις που προκύπτουν από την λύση του προβλήματος ιδιοτιμών (5.4) είναι εκφυλισμένες, κατασκευάσαμε έναν αλγόριθμο ορθοκανονικοποίησης που βασίζεται στην μέθοδο Gram-Schmidt και που υπολογίζει τους νέους συντελεστές $G_{\mathbf{k}}^\mu$ του αναπτύγματος σε επίπεδα κύματα, ώστε το σύνολο των μονοσωματιδιακών καταστάσεων να είναι ορθοκανονικό. Αυτό απαιτείται για την ανάπτυξη της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης σε όρους μονοσωματιδιακών συναρτήσεων (παράγραφος 5.3). Ο αλγόριθμος ορθοκανονικοποίησης που φτιάξαμε περιγράφεται στο Παράρτημα Θ'.

5.2 Τα στοιχεία πίνακα Coulomb

Χρησιμοποιώντας τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις όπως αυτές υπολογίζονται από το πρώτο βήμα, βρίσκουμε τα στοιχεία πίνακα Coulomb μεταξύ των διαφόρων καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών, που έχουν ορισθεί στο Παράρτημα Α' ως:

$$V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} \equiv \int d^3\mathbf{r}_e \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e) \frac{e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h) \equiv V_{\ell\ell'}^{eh} \quad (5.5)$$

με $\ell = \mu\nu$. Από την Εξ.(5.5) είναι φανερό ότι ο πίνακας $V_{\ell\ell'}^{eh}$ είναι ερμιτιανός.

Στο Παράρτημα (ΙΑ') αποδεικνύουμε ότι τα στοιχεία πίνακα (5.5) συνδέονται με τους συντελεστές του αναπτύγματος σε επίπεδα κύματα με την σχέση:

$$V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} = \frac{e^2}{\kappa_0} \sum_{\mathbf{q}_e, \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_h} C_{\mathbf{k}'_e + \mathbf{q}_e}^{\mu*} C_{\mathbf{k}'_e}^{\mu'} C_{\mathbf{k}_h}^{\nu*} C_{\mathbf{k}_h + \mathbf{q}_e}^{\nu'} \frac{4\pi}{q_e^2} \quad (5.6)$$

5.3 Το εξιτονικό πρόβλημα

Το επόμενο βήμα είναι το εξιτονικό πρόβλημα. Περιοριζόμαστε στην γραμμική περιοχή ($1 - f^{\mu e} - f^{\nu h} \approx 1$), δηλαδή θεωρούμε ότι το σύστημά μας αποτελείται από ένα ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής. Στην περίπτωση αυτή οι εξισώσεις (4.44) παίρνουν την μορφή:

$$\begin{aligned} W_{\ell\ell'} &\equiv V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} \\ S_{\ell\ell'} &\equiv T_{\ell'} \delta_{\ell\ell'} - W_{\ell\ell'} \end{aligned} \quad (5.7)$$

όπου: $T_{\ell} = E^{\mu e} + E^{\nu h}$ το άθροισμα των μονοσωματιδιακών ενεργειών και $S_{\ell\ell'}$ ο εξιτονικός πίνακας. Η εξιτονική κυματοσυνάρτηση αναπτύσσεται σε όρους μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων:

$$\Psi^{\lambda}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu}^{\lambda} \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}_h) \quad (5.8)$$

Η ποσότητα $|\Psi^{\lambda}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)|^2$ αποτελεί την πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο στην θέση \mathbf{r}_e και μια οπή στην θέση \mathbf{r}_h . Στο Παράρτημα Α' είδαμε ότι το εξιτονικό πρόβλημα ιδιοτιμών γράφεται:

$$\sum_{\ell'} [S_{\ell\ell'} - E^{\lambda} \delta_{\ell\ell'}] C_{\ell'}^{\lambda} = 0. \quad (5.9)$$

Όπως έχει αναφερθεί, ο εξιτονικός πίνακας είναι ερμιτιανός στην γραμμική περιοχή. Η εξίσωση (5.9) λύνεται αριθμητικά με χρήση της ρουτίνας διαγωνιοποίησης. Για το ανάπτυγμα της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης χρησιμοποιούμε ως βάση 6 (12) ηλεκτρόνια και 6 (12) οπές για την απλή (διπλή) τελεία.

5.4 Ο τοπικός συντελεστής μαγνητοαπορρόφησης

Τέλος, υπολογίζουμε το φάσμα απορρόφησης εγγύς πεδίου από την Εξ. (4.80):

$$\alpha_{\xi}(\mathbf{R}, \omega) = \Im \left[\sum_{\lambda} \frac{\alpha_{\xi}^{\lambda}(\mathbf{R})}{E^{\lambda} - i\gamma - \hbar\omega} \right] \quad (5.10)$$

όπου:

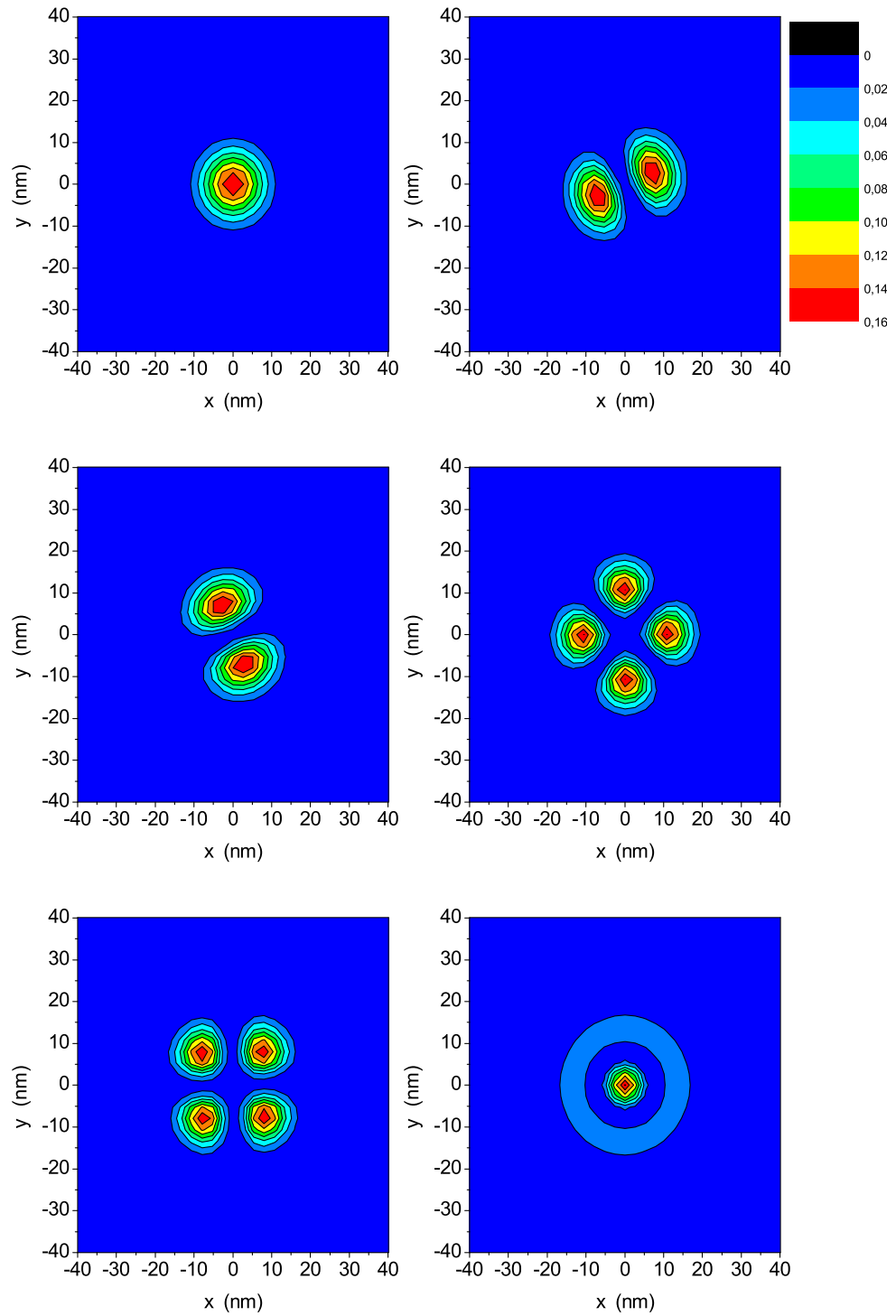
$$\alpha_{\xi}^{\lambda}(\mathbf{R}) = \left| \int d^3\mathbf{r} \Psi^{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \xi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right|^2 \quad (5.11)$$

είναι η ισχύς ταλαντωτή (oscillator strength). Θεωρούμε ότι το πεδίο που διεγείρει τοπικά το δείγμα, χαρακτηρίζεται από μια κατανομή ηλεκτρικού πεδίου $E_{\omega}(\mathbf{r})$ με δεδομένο προφίλ ξ γύρω από την θέση \mathbf{R} της δέσμης, δηλαδή $E_{\omega}(\mathbf{r}) = E_{\omega}\xi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$. Για έναν στενό αλλά πεπερασμένο ανιχνευτή, λαμβάνεται η χωρική μέση τιμή της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης σε μια περιοχή που καθορίζει η ένταση της φωτεινής δέσμης. Για το προφίλ του ηλεκτρικού πεδίου χρησιμοποιούμε μια Γκαουσιανή $\xi(x, y, z) \propto \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}\right)$ (θεωρώντας βέβαια ότι ο ανιχνευτής “σκανάρει” την επιφάνεια την παράλληλη στο xy επίπεδο). Τότε η χωρική ανάλυση που ορίζεται ως το μέγεθος της περιοχής που φωτίζεται από τον ανιχνευτή, δίνεται από το εύρος ημίσειας τιμής (Full Width at Half Maximum ή FWHM) της Gaussian, δηλαδή από $2\sqrt{2\ln 2}\sigma \approx 2.35\sigma$.

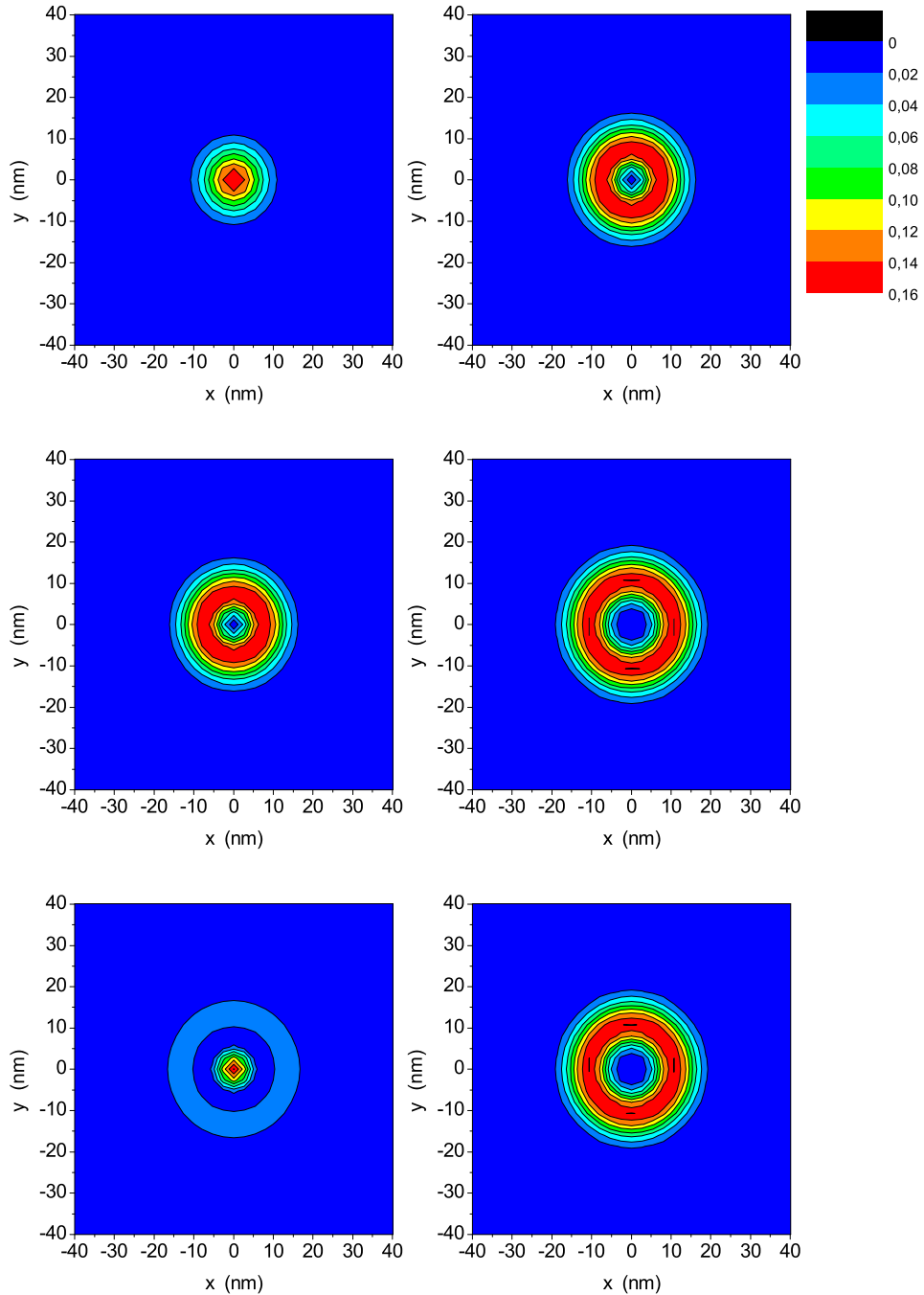
5.5 Μονοσωματιδιακές καταστάσεις σε απλές κβαντικές τελείες. Ο ρόλος του χωρικού και του μαγνητικού εντοπισμού

Προκειμένου να μελετήσουμε τον ρόλο του χωρικού εντοπισμού, μεταβάλλουμε το πλάτος του πηγαδιού και συγκεκριμένα χρησιμοποιούμε πλάτη πηγαδιού $z = 10$ nm, $z = 20$ nm, και $z = 30$ nm. Αντίστοιχα, προκειμένου να μελετήσουμε τον ρόλο του μαγνητικού εντοπισμού μεταβάλλουμε τόσο τον προσανατολισμό ($B//x$ ή $B//z$), όσο και το μέτρο (0-20T) του μαγνητικού πεδίου. Θεωρούμε αρχικά μια απλή κβαντική τελεία με ισότροπο παραβολικό περιοριστικό δυναμικό στο xy επίπεδο και πηγάδι στον άξονα z [2].

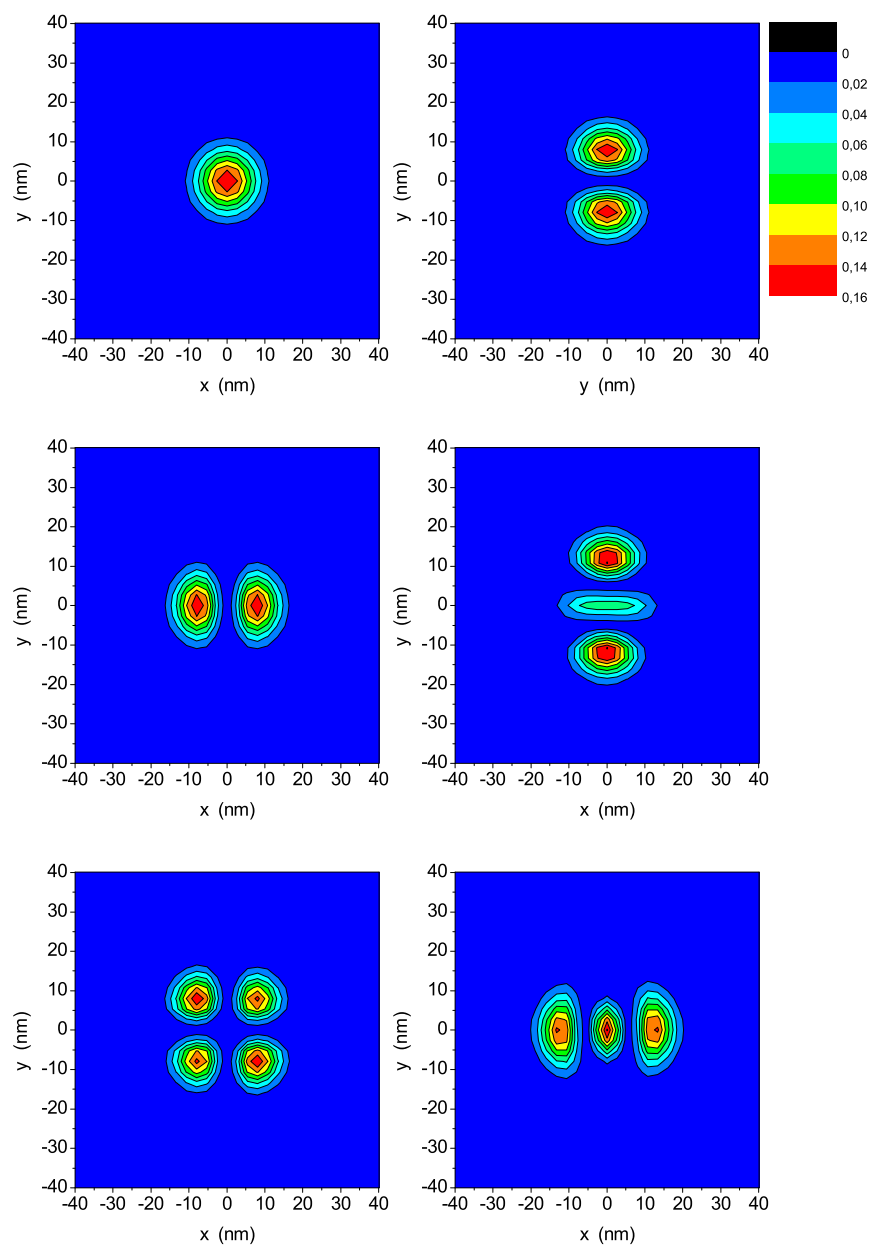
Για μηδενικό μαγνητικό πεδίο, η τελεία έχει κυλινδρική συμμετρία λόγω της δομής της. Οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις (σχήμα 5.1) είναι οι γνωστές Darwin-Fock [172,173] καταστάσεις που περιγράφονται στο Παράρτημα Γ'. Υπό την επίδραση



Σχήμα 5.1: Απλή κβαντική τελεία με τετραγωνικό πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Διδιάστατες απεικονίσεις των μονοσωματιδιακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων για $B = 0$ T. Darwin-Fock καταστάσεις.



Σχήμα 5.2: Απλή κβαντική τελεία με τετραγωνικό πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Διδιάστατες απεικονίσεις των μονοσωματιδιακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων για $Bz = 4$ T. Darwin-Fock καταστάσεις.



Σχήμα 5.3: Απλή κβαντική τελεία με τετραγωνικό πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Διδιάστατες απεικονίσεις των μονοσωματιδιακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων για $Bx = 4T$.

ενεργός μάζα ηλεκτρονίου:	0.067 m_0
ενεργός μάζα οπής:	0.38 m_0
διηλεκτρική σταθερά κ_0 :	12.9
ασυνέχεια της ζώνης αγωγιμότητας για τα ηλεκτρόνια ΔV_{CB} :	300 meV
ασυνέχεια της ζώνης σθένους για τις οπές ΔV_{VB} :	200 meV
δυναμική ενέργεια περιορισμού στο xy επίπεδο $\hbar\omega_{pc}^e$ για τα ηλεκτρόνια:	20 meV
δυναμική ενέργεια περιορισμού στο xy επίπεδο $\hbar\omega_{pc}^h$ για τις οπές:	3.5 meV

Πίνακας 5.1: Παράμετροι του υλικού και δομικές παράμετροι της τελείας, που χρησιμοποιήθηκαν στους υπολογισμούς μας.

κατακόρυφου ($B//z$) μαγνητικού πεδίου το σύστημα διατηρεί την κυλινδρική συμμετρία του (σχήμα 5.2), ενώ το εγκάρσιο μαγνητικό πεδίο ($B//x$ ή $B//y$) καταστρέφει την κυλινδρική συμμετρία (σχήμα 5.3). Η συνολική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου (ή μιας οπής) δίνεται από την σχέση $E = E_{xy} + E_z$ όπου οι E_z καθορίζονται από την λύση της εξίσωσης Schrödinger στο πηγάδι πλάτους z_0 , ενώ οι E_{xy} δίνονται από την σχέση:

$$E_{xy} = \hbar\Omega(2n_\rho + |m_\ell| + 1) \pm \frac{\hbar\omega_B m_\ell}{2} \quad (5.12)$$

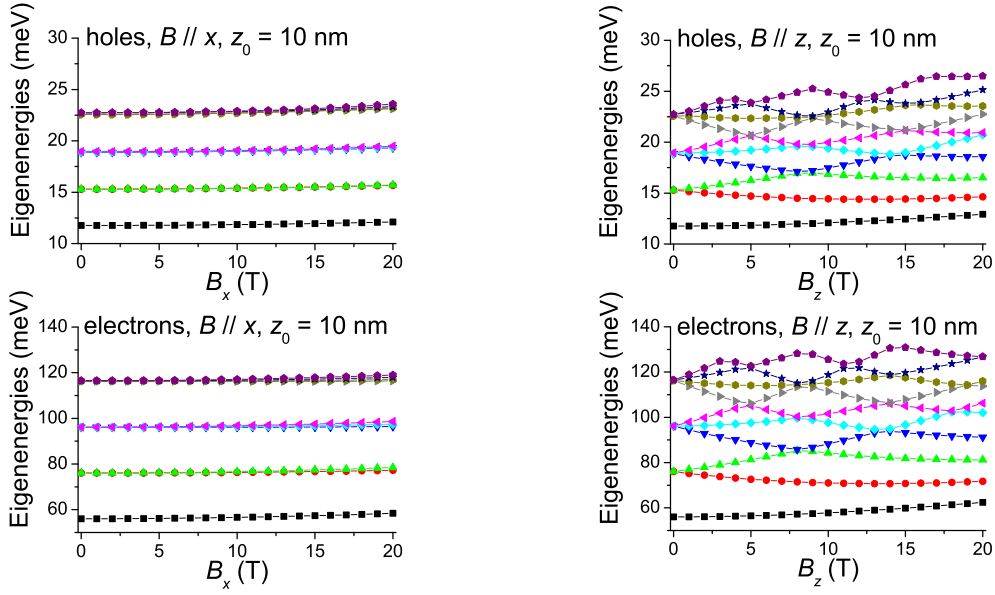
Το (+) στην παραπάνω σχέση αντιστοιχεί στα ηλεκτρόνια και το (−) στις οπές. n_ρ είναι φυσικός αριθμός και m_ℓ ακέραιος. Οι καταστάσεις με $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ συμβολίζονται ως 1,2,3,... Οι καταστάσεις με $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ χαρακτηρίζονται ως s, p, d, \dots . Η συχνότητα Ω προκύπτει από την σχέση:

$$\Omega^2 = \frac{\omega_B^2}{4} + \omega_{pc}^2 \quad (5.13)$$

Η ενέργεια $\hbar\omega_{pc}$ είναι μέτρο του χωρικού εντοπισμού ενώ η κυκλοτρονική ενέργεια $\hbar\omega_B = \hbar eB/m^*$ αποτελεί μέτρο του μαγνητικού εντοπισμού. Εξαιτίας της συμμετρίας περιστροφής γύρω από τον άξονα z , κατά την εφαρμογή κατακόρυφου μαγνητικού πεδίου, διατηρείται η z συνιστώσα της στροφορμής με ιδιοτιμές $\hbar m_\ell$.

Αντίθετα, με την εφαρμογή εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου ($B//x$ ή $B//y$), “σπάει” η συμμετρία του συστήματος, δεν είναι πλέον κυλινδρική. Στην περίπτωση αυτή οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις προκύπτουν λύνοντας αριθμητικά την εξίσωση (5.4). Καμία από τις συνιστώσες της στροφορμής δεν διατηρείται.

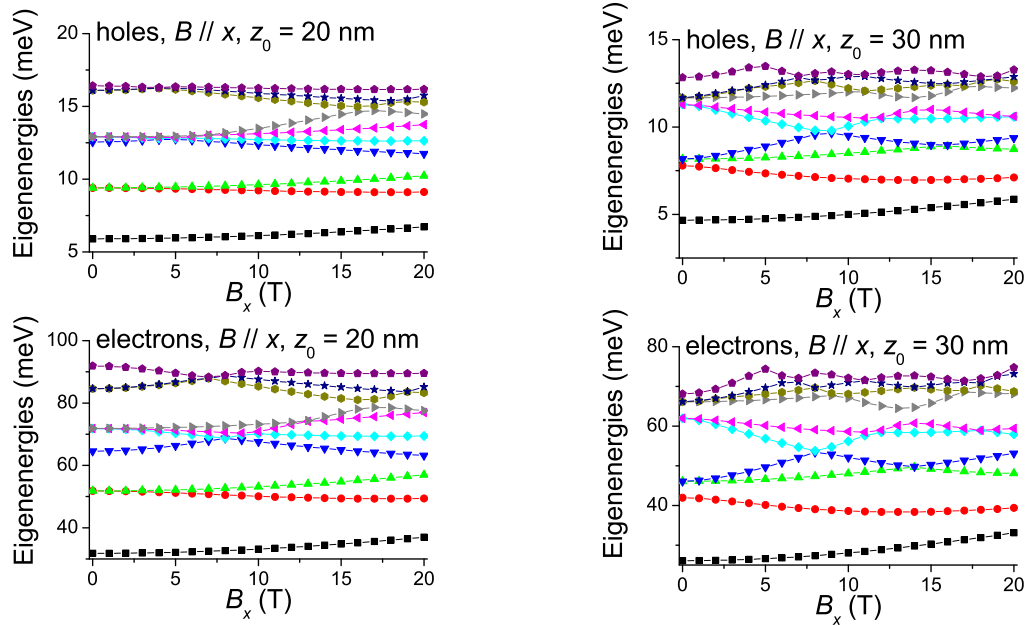
Στο σχήμα 5.4 παρουσιάζονται οι μονοσωματιδιακές ιδιοενέργειες ηλεκτρονίου και οπής υπό εγκάρσιο ή κατακόρυφο μαγνητικό πεδίο, για απλή κβαντική τελεία με τετραγωνικό πηγάδι στον άξονα z πλάτους $z_0 = 10$ nm και παραβολικό δυναμικό



Σχήμα 5.4: Απλή κβαντική τελεία με πλάτος πηγαδιού $z_0 = 10$ nm. Σχηματική παράσταση των ενεργειών ηλεκτρονίων και οπών για τις 10 πρώτες καταστάσεις, σαν συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου, εφαρμοζόμενου κατά την x ή κατά την z διεύθυνση.

περιορισμού στο xy επίπεδο. Έχουμε δει στο Παράρτημα Ι', ότι οι Darwin-Fock καταστάσεις είναι εκφυλισμένες για μηδενικό μαγνητικό πεδίο κατά ομάδες των 1-2-3-4... καταστάσεων. Λόγω του πολύ στενού πηγαδιού η διαφορά των ενεργειών στον άξονα z είναι τόσο μεγάλη, που μπορούμε να διακρίνουμε καθαρά τις τέσσερις ομάδες των εκφυλισμένων (για $B=0T$) που εξελίσσονται σε μη εκφυλισμένες σε μεγαλύτερα πεδία. Για $B=0T$ οι τέσσερις καλά διαχωρισμένες ενέργειες E_{xyz} που εμφανίζονται, αντιστοιχούν στην θεμελιώδη E_z του πηγαδιού και στις ενέργειες E_{xy} των 4 ομάδων των εκφυλισμένων Darwin-Fock καταστάσεων. Για τον λόγο αυτό, η κβαντική τελεία με το πηγάδι πλάτους $z_0 = 10$ nm αποτελεί την "ιδανική" τελεία στην οποία εφαρμόστηκαν οι πρώτες θεωρητικές μας παρατηρήσεις για την επίδραση του μαγνητικού πεδίου [174, 175]. Όπως είναι αναμενόμενο, λόγω του πολύ στενού πλάτους του πηγαδιού, το εγκάρσιο μαγνητικό πεδίο επηρεάζει ελάχιστα τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις. Για τον λόγο αυτόν, στην περίπτωση αυτής της τελείας εξετάζουμε αποκλειστικά τον ρόλο που έχει η επίδραση του κατακόρυφου πεδίου.

Στο σχήμα 5.5 παρουσιάζονται οι μονοσωματιδιακές ιδιοενέργειες σαν συνάρτηση



Σχήμα 5.5: Απλή κβαντική τελεία με πλάτη πηγαδιού $z_0 = 20$ nm και $z_0 = 30$ nm. Σχηματική παράσταση των ενεργειών ηλεκτρονίων και οπών για τις 10 πρώτες καταστάσεις, σαν συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου, εφαρμοζόμενου κατά την x διεύθυνση. Η κυλινδρική συμμετρία που έχει το σύστημα σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο λόγω της δομής της τελείας, καταστρέφεται με την εφαρμογή του εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου.

του εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου ($B//x$) για τελείες με $z_0 = 20$ nm και $z_0 = 30$ nm. Καθώς αυξάνεται το πλάτος του πηγαδιού στον z άξονα, ο ρόλος του χωρικού εντοπισμού μειώνεται και αντίστοιχα αυξάνει ο ρόλος του μαγνητικού εντοπισμού [95]: το εγκάρσιο μαγνητικό πεδίο επηρεάζει περισσότερο τις καταστάσεις.

Επιπλέον, όπως είναι αναμενόμενο, για μεγαλύτερο πλάτος πηγαδιού η διαφορά των ενεργειών E_z γίνεται πιο μικρή κι έτσι για $B=0$ T παρατηρούμε περισσότερες από τέσσερις ενέργειες (δηλ. περισσότερες ενέργειες από τις τέσσερις ομάδες των εκφυλισμένων καταστάσεων). Η ανάμιξη των καταστάσεων γίνεται μεγαλύτερη στην περίπτωση της κβαντικής τελείας με πλάτος πηγαδιού $z_0 = 30$ nm.

5.6 Ο ρόλος της αλληλεπίδρασης Coulomb στην ν “ιδανική” κβαντική τελεία.

Όπως προαναφέρθηκε, η κβαντική τελεία με το πηγάδι πλάτους $z_0 = 10$ nm αποτελεί την “ιδανική” τελεία. Στο σχήμα 5.6 παρουσιάζεται το φάσμα μαγνητοαπορρόφησης της “ιδανικής” κβαντικής τελείας, είτε λαμβάνοντας υπόψη είτε αμελώντας την αλληλεπίδραση Coulomb. Στην τελεία εφαρμόζεται μαγνητικό πεδίο μέτρου: $B = 0$ T, $B_x = 1$ T και $B_z = 4$ T. Κάθε ομάδα διαγραμμμάτων αντιστοιχεί σε διαφορετική τιμή της ακτίνας ($\approx 2.35\sigma$) της φωτιζόμενης περιοχής (χωρική ανάλυση), δηλ. (α) $\sigma = 0.1$ nm, (β) $\sigma = 10$ nm και (γ) $\sigma = 50$ nm. Όπως φαίνεται στο σχήμα 5.6, για $\sigma = 50$ nm, το φάσμα εξαρτάται πολύ λίγο από την θέση του ανιχνευτή κι επομένως η τιμή αυτή του σ αντιστοιχεί στο μακρινό πεδίο (Far Field ή FF). Σε κάθε ομάδα διαγραμμμάτων οι δύο διαφορετικές στήλες αντιστοιχούν σε αποτελέσματα με και χωρίς αλληλεπίδραση Coulomb, ενώ οι διαφορετικές γραμμές αντιστοιχούν στις διαφορετικές τιμές του μαγνητικού πεδίου. Ο συντελεστής απορρόφησης $\alpha_x(\mathbf{R}, \omega)$ παρουσιάζεται συναρτήσεως τόσο της θέσης (X) του ανιχνευτή κατά την x διεύθυνση όσο και της φωτονικής ενέργειας $\hbar\omega$. Στην y διεύθυνση ο ανιχνευτής έχει τεθεί στην αρχή των αξόνων ($Y=0$).

Για την εύρεση των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων και ενεργειών λάβαμε ως βάση 6 καταστάσεις ηλεκτρονίων και 6 καταστάσεις οπών (περιγραφή $6e - 6h$). Επαναλάβουμε τους υπολογισμούς μας χρησιμοποιώντας 10 καταστάσεις ηλεκτρονίων και 10 καταστάσεις οπών (περιγραφή $10e - 10h$). Για μεγάλες ενέργειες φωτονίων οι δύο εικόνες αποκλίνουν, ενώ για μικρές ταυτίζονται.

Στον πίνακα 5.2 παρουσιάζονται τα εξιτόνια και οι κύριες μεταβάσεις από τις οποίες αποτελούνται, στο ενεργειακό διάστημα που καλύπτει και τα 36 εξιτόνια στην περιγραφή $6e - 6h$. Στην περιγραφή $10e - 10h$ εμφανίζονται δύο νέα εξιτόνια που όμως έχουν “σκοτεινές” συνιστώσες στο μακρινό πεδίο: $1p(-1) - 2p(+1)$ και $1p(+1) - 2p(-1)$. Είναι λοιπόν φανερό ότι όσον αφορά στα εξιτόνια με φωτεινές συνιστώσες στο μακρινό πεδίο, οι δύο περιγραφές συμπίπτουν.

Η αλληλεπίδραση Coulomb έχει σαν αποτέλεσμα την μετατόπιση του φάσματος προς χαμηλότερες ενέργειες, εξαιτίας της ελκτικής αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίου και οπής που οδηγεί στις δέσμιες εξιτονικές καταστάσεις, καθώς και την μεταφορά της ισχύος του ταλαντωτή από τις υψηλές στις χαμηλές ενέργειες. Τα φαινόμενα αυτά παρατηρούνται και στα κβαντικά σύρματα [170] κι έτσι μπορούν να θεωρηθούν σαν μια γενική εκδήλωση της αλληλεπίδρασης Coulomb στις οπτικές ιδιότητες των νανοδομών.

Ωστόσο, η αλληλεπίδραση Coulomb είναι υπεύθυνη και για την εμφάνιση επιπρόσ-

Κύρια μετάβαση του εξιτονίου	E^λ $6e - 6h$	E^λ $10e - 10h$	$C_{\text{κύριας μεταβάσης}}^\lambda$ $6e - 6h$	$C_{\text{κύριας μεταβάσης}}^\lambda$ $10e - 10h$
$1s(0) - 1s(0)^*$:	51.9	51.7	(0.96,0.00)	(0.96,0.00)
$1s(0) - 2s(0)@$:	65.4	65.3	(0.96,0.00)	(0.96,0.00)
$1p(-1) - 1p(+1)^*$:	77.1	76.8	(0.94,0.00)	(0.93,0.00)
$1p(+1) - 1p(-1)^*$:	85.9	85.6	(0.96,0.00)	(0.95,0.00)
$1p(-1) - 2p(+1)@$:		87.3		(0.96,0.00)
$1p(+1) - 2p(-1)@$:		95.7		(0.95,0.00)
$2s(0) - 1s(0)@$:	98.4	98.1	(0.88,0.00)	(0.83,0.00)
$1d(-2) - 1d(+2)^*$:	99.7	99.5	(0.87,0.00)	(0.80,0.00)
$2s(0) - 2s(0)^*$:	107.7	107.5	(0.97,0.00)	(0.95,0.00)
$1d(+2) - 1d(-2)^*$:	115.9	115.9	(0.98,0.00)	(0.98,0.00)

Πίνακας 5.2: Όλα τα εξιτόνια για $B_z = 4T$ στο διάστημα ενεργειών που περιλαμβάνει και τα 36 ηλεκτρόνια στην περιγραφή $6e - 6h$. Η περιγραφή $10e - 10h$ αναδεικνύει δύο νέα εξιτόνια με κύρια συστατικά τις “σκοτεινές” στο μακρινό πεδίο μεταβάσεις: $1p(-1) - 2p(+1)$ και $1p(+1) - 2p(-1)$. Ο αστερίσκος δηλώνει “φωτεινές” μεταβάσεις στο μακρινό πεδίο, ενώ το σύμβολο @ δηλώνει “σκοτεινές” μεταβάσεις [95].

θετων κορυφών στο φάσμα απορρόφησης, τα οποία παρουσιάζουν μια ασυνήθιστη μη μονότονη συμπεριφορά.

Για παράδειγμα, για $\mathbf{B}=\mathbf{0T}$ εμφανίζεται μια νέα κορυφή στα ≈ 65 meV, η οποία είναι αρκετά έντονη για $\sigma = 0.1$ nm, σχεδόν εξαφανίζεται για $\sigma = 10$ nm και είναι και πάλι έντονη στο μακρινό πεδίο. Η κορυφή αυτή αποδίδεται σε μεταβάσεις μεταξύ της ηλεκτρονικής κατάστασης $1s$ και των καταστάσεων $1s$, $1p$ και $(2s, 1d)$ των οπών. Τα εξιτόνια με κύρια συστατικά τις μεταβάσεις αυτές έχουν αντίστοιχα $-s$, $-p$ ή $-d$ συμμετρία. Η κύρια συνεισφορά στην κορυφή των ≈ 65 meV προέρχεται από ένα s -τύπου και δύο p -τύπου εξιτόνια. Στο μακρινό πεδίο όπου $\alpha_\xi^{\lambda}(\mathbf{R}) = |\int d\mathbf{r} \Psi^\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$, η συνεισφορά από τα δύο p -εξιτόνια μηδενίζεται. Έτσι η συνεισφορά των δύο p -τύπου εξιτονίων είναι φθίνουσα συνάρτηση του σ . Δεν συμβαίνει ωστόσο το ίδιο με το s -τύπου εξιτόνιο. Η χωρική μέση τιμή της κυματοσυνάρτησής του είναι μη μηδενική και κατά συνέπεια είναι ορατό τόσο στο μακρινό όσο και στο εγγύς πεδίο.

Η μη μονότονη συμπεριφορά του χαρακτηριστικού στα 65 meV, οφείλεται σε

αντίστοιχη μη μονότονη συμπεριφορά της ποσότητας [2]:

$$I_{\xi}^{\lambda} \propto \int d\mathbf{R} \alpha_{\xi}^{\lambda}(\mathbf{R}) \quad (5.14)$$

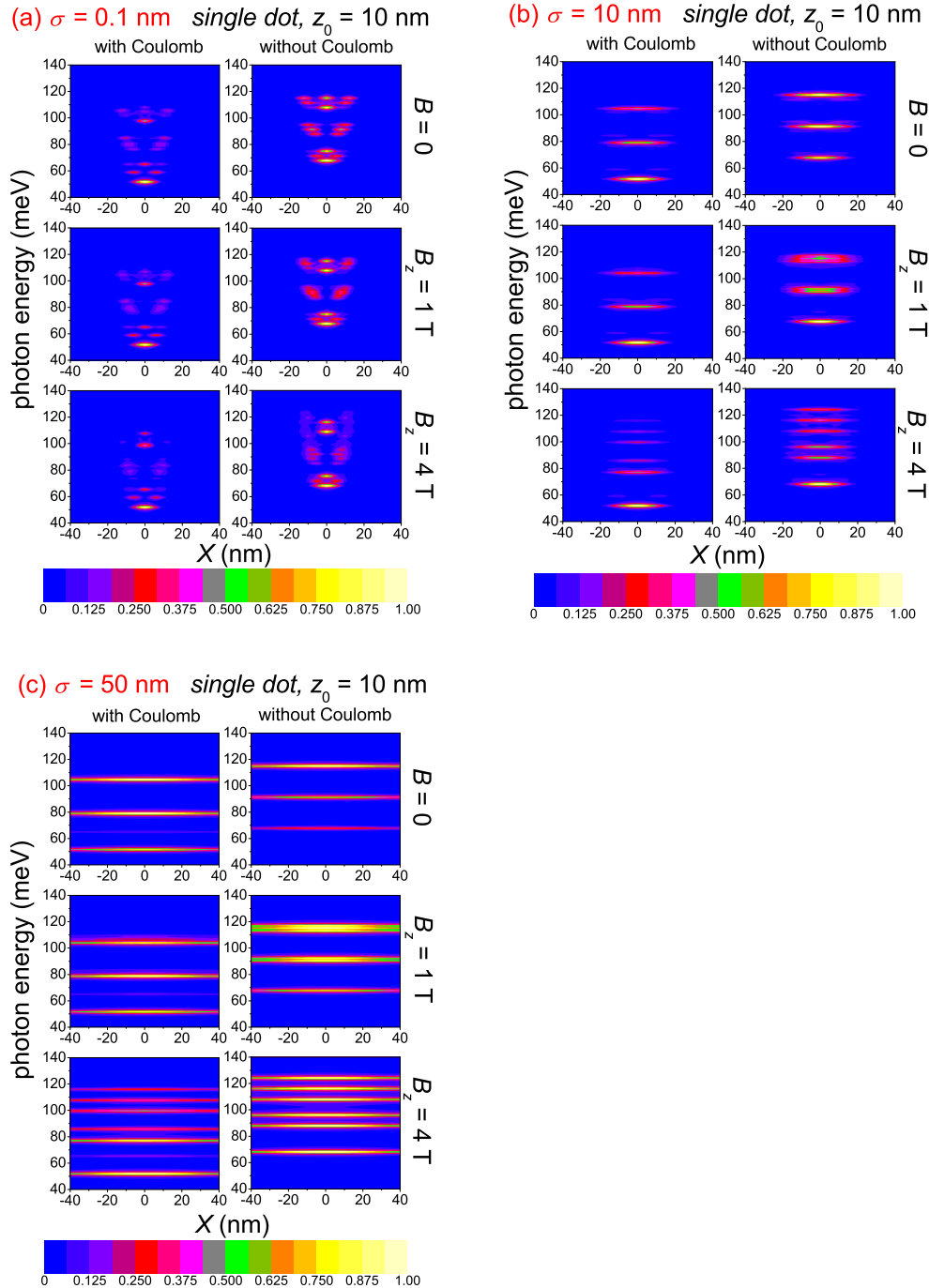
η οποία παρέχει ένα μέτρο της συνεισφοράς κάθε εξιτονίου στο φάσμα απορρόφησης, συναρτήσει του σ . Καθώς το σ αυξάνει, η συνεισφορά των δύο p -τύπου εξιτονίων φθίνει, μέχρι που τελικά μηδενίζεται για $\sigma \approx 20$ nm. Αντίθετα το s -τύπου εξιτόνιο παρουσιάζει μια μη μονότονη συμπεριφορά που αντανακλάται και στο φάσμα. Συγκεκριμένα, μειώνεται καθώς αυξάνει το σ , μέχρι που μηδενίζεται για $\sigma \approx 5.11$ nm ή ισοδύναμα όταν $2.35\sigma \approx \rho = 12$ nm όπου ρ η εξιτονική ακτίνα Bohr για το GaAs. Στην συνέχεια αυξάνεται καθώς το σ αυξάνει.

Στο σχήμα 5.6 παρουσιάζονται τα θεωρητικά μας αποτελέσματά μας για την μαγνητοαπορρόφηση της απλής κβαντικής τελείας για μικρά μαγνητικά πεδία. Παρατηρώντας το σχήμα συμπεραίνουμε ότι για $B_z = 1$ T και $B_z = 4$ T η μη μονότονη συμπεριφορά της κορυφής στα 65 meV όχι μόνο διατηρείται αλλά γίνεται και πιο έντονη. Επιπλέον, για πεδίο $B_z = 4$ T, υπάρχουν και άλλες νέες κορυφές (στα 98–100 meV) με ανάλογη συμπεριφορά.

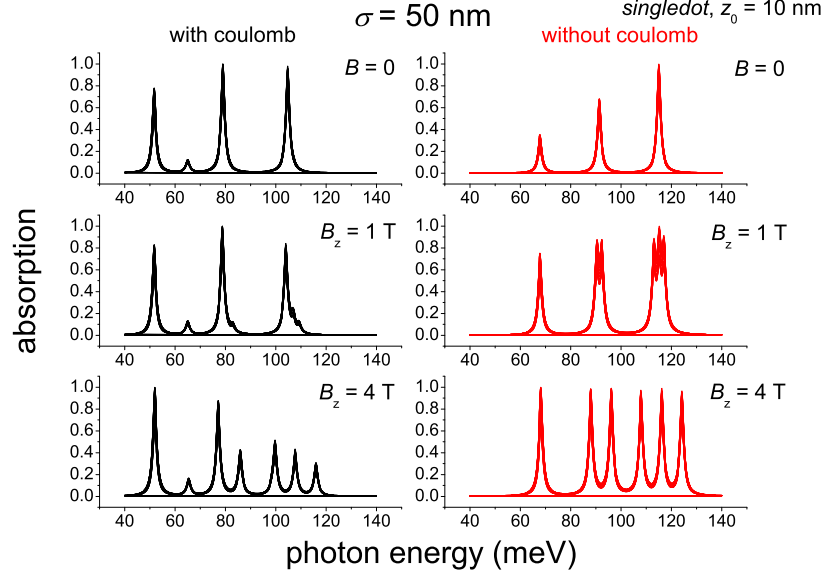
Προκειμένου να δώσουμε μια πιο σαφή εικόνα των μεταβάσεων, παρουσιάζουμε στο σχήμα 5.7, το φάσμα μακρινού πεδίου ($\sigma = 50$ nm) για την απλή παραβολική τελεία με $z_0 = 10$ nm συναρτήσει μόνο της ενέργειας των φωτονίων. Θεωρούμε αρχικά την περίπτωση όπου αμελείται η Coulomb αλληλεπίδραση.

Στο μακρινό πεδίο $\alpha_{\xi}^{\lambda}(\mathbf{R}) \propto |\int d^3\mathbf{r} \Psi^{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$ επιτρέπονται μόνο μεταβάσεις στις οποίες η z συνιστώσα της συνολικής στροφορμής είναι ίση με μηδέν. Η αναγκαία συνθήκη είναι δηλαδή: $m_{\ell}^e + m_{\ell}^h = 0$. Ωστόσο η συνθήκη αυτή δεν είναι και ικανή. Δηλαδή για να “επιβιώσει” μια μετάβαση στο μακρινό πεδίο θα πρέπει και το ολοκλήρωμα του ακτινικού μέρους να είναι επίσης μη μηδενικό. Η άρση του εκφυλισμού που επάγει το κατακόρυφο μαγνητικό πεδίο έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση του αριθμού των επιτρεπτών μεταβάσεων στο μακρινό πεδίο από 3 (για $B=0$ T) σε 6 (για $B_z = 4$ T).

Επιπλέον, για $B=0$ T, η χαμηλότερη ενεργειακά μετάβαση ($1s(m_{\ell}^e = 0)$ σε $1s(m_{\ell}^h = 0)$) δεν είναι εκφυλισμένη, η αμέσως επόμενη ενεργειακά μετάβαση ($1p(m_{\ell}^e = \pm 1)$ σε $1p(m_{\ell}^h = \mp 1)$) είναι διπλά εκφυλισμένη και η ανώτερη ενεργειακά ($1d(m_{\ell}^e = \pm 2)$ σε $1s(m_{\ell}^h = \mp 2)$ και $(2s(m_{\ell}^e = 0)$ σε $2s(m_{\ell}^h = 0)$) είναι τριπλά εκφυλισμένη. Για τον λόγο αυτό η ισχύς ταλαντωτή ακολουθεί την αναλογία 1:2:3, όπως παρατηρούμε και στο σχήμα 5.7. Από την άλλη πλευρά, για $B_z = 4$ T εξαιτίας της άρσης του εκφυλισμού όλες οι μεταβάσεις έχουν την ίδια περίπου ένταση. Οι κορυφές εμφανίζονται στις ενέργειες $E^{\mu e} + E^{\nu h}$. Για $B_z = 4$ T κατά αύξουσα ενέργεια οι 6 μεταβάσεις είναι: $1s(m_{\ell}^e = 0)$ σε $1s(m_{\ell}^h = 0)$, $1p(m_{\ell}^e = -1)$ σε $1p(m_{\ell}^h = +1)$, $1p(m_{\ell}^e = +1)$



Σχήμα 5.6: Απλή κβαντική τελεία με τετραγωνικό πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Διδιάστατη απεικόνιση του τοπικού συντελεστή απορρόφησης συναρτήσει της θέσης X του ανιχνευτή ($Y = 0$) και της ενέργειας $\hbar\omega$ των φωτονίων, για διαφορετικές τιμές της χωρικής ανάλυσης ($\approx 2.35 \ln \sigma$). Στην πρώτη στήλη κάθε ομάδας διαγραμμάτων έχει ληφθεί υπόψη η αλληλεπίδραση Coulomb ενώ στην δεύτερη στήλη αμελείται. Η φωτονική ενέργεια μετράται συναρτήσει του ενεργειακού χάσματος.



Σχήμα 5.7: Το φάσμα απορρόφησης μακρινού πεδίου του σχήματος 5.6 σαν συνάρτηση της φωτονικής ενέργειας.

σε $1p(m_\ell^h = -1)$, $1d(m_\ell^e = -2)$ σε $1s(m_\ell^h = +2)$, $2s(m_\ell^e = 0)$ σε $2s(m_\ell^h = 0)$, και $1d(m_\ell^e = +2)$ σε $1s(m_\ell^h = -2)$.

Η αλληλεπίδραση Coulomb αναμιγνύει τις μεταβάσεις μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών.

Η σχετική συνεισφορά κάθε μετάβασης $\mu(e) \rightarrow \nu(h)$, εκφράζεται από τον συντελεστή $C_{\mu\nu}^\lambda$ στην σχέση (5.8). Στον πίνακα 5.2 απεικονίζονται όλα τα εξιτόνια με μία τουλάχιστον φωτεινή στο μακρινό πεδίο μετάβαση (FF bright), στο ενεργειακό διάστημα των 36 εξιτονίων της περιγραφής $6e - 6h$. Ο πίνακας περιλαμβάνει επίσης σύγκριση της περιγραφής $6e - 6h$ με την $10e - 10h$. Παρατηρούμε ότι στην περιγραφή $10e - 10h$ εμφανίζονται δύο νέα εξιτόνια με κάποια τουλάχιστον FF φωτεινή συνιστώσα: αυτά με την FF κύρια συνιστώσα $1p(-1) - 2p(+1)$ και $1p(+1) - 2p(-1)$. Οι δύο περιγραφές παράγουν παρόμοια αποτελέσματα.

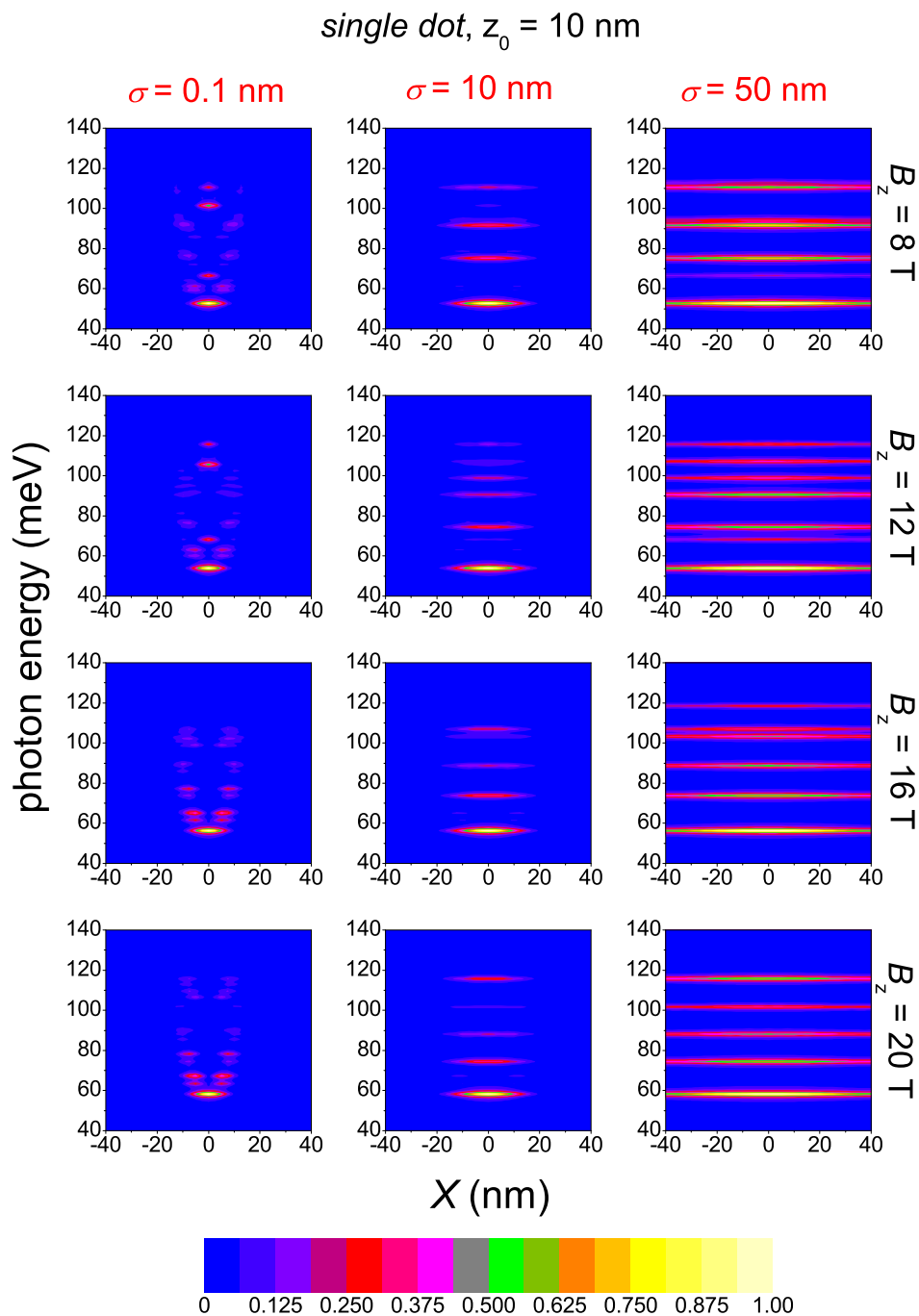
5.7 Απλή κβαντική τελεία υποκείμενη σε υψηλά πεδία

Η εφαρμογή μικρού μαγνητικού πεδίου αίρει τον εκφυλισμό των καταστάσεων και τροποποιεί το φάσμα απορρόφησης. Ωστόσο, κυριαρχεί ο χωρικός εντοπισμός. Προκειμένου να δούμε την σημασία του μαγνητικού εντοπισμού χρησιμοποιούμε στους υπολογισμούς μας υψηλά μαγνητικά πεδία (8-20T) [95]. Πολύ σημαντικό ρόλο παίζει και πάλι ο προσανατολισμός του πεδίου.

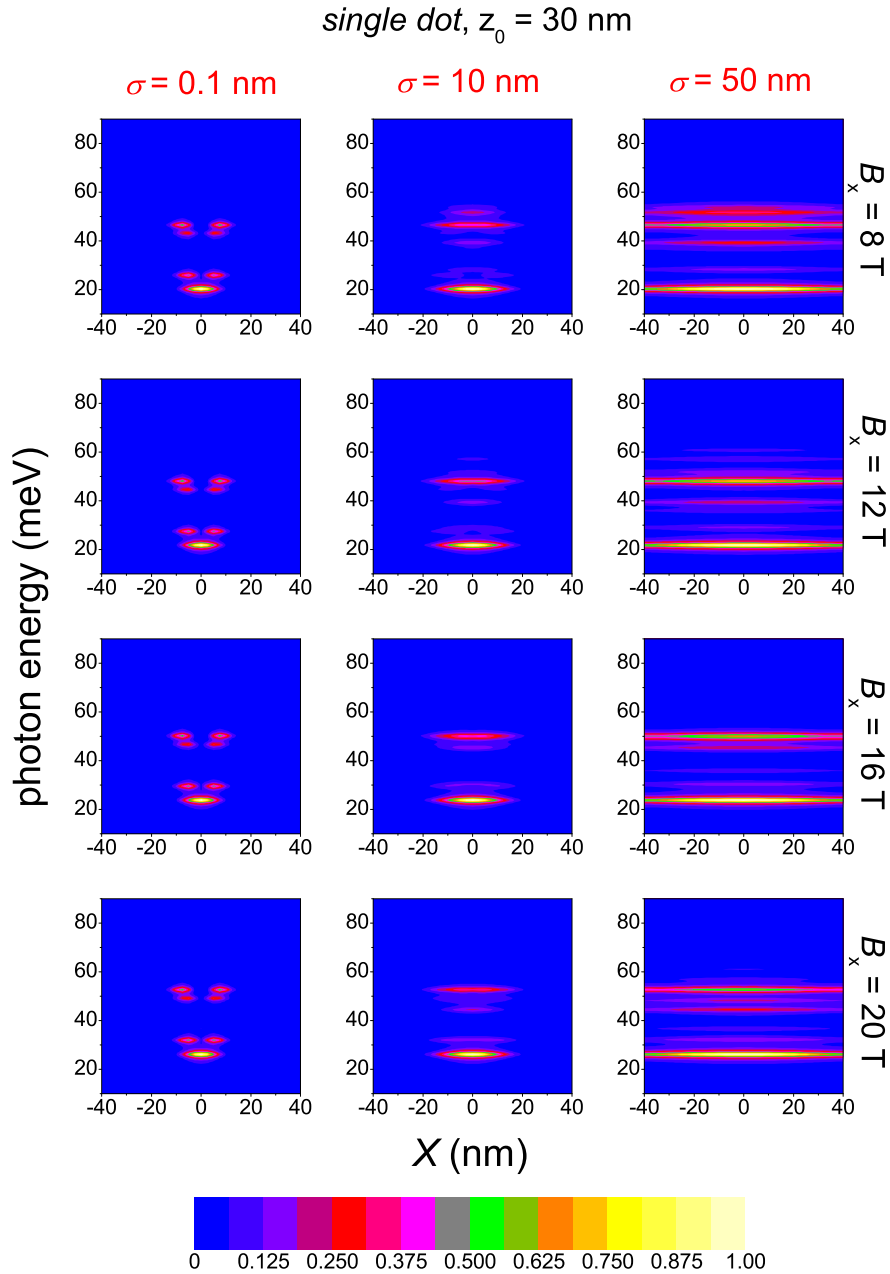
Στο σχήμα 5.8 παρουσιάζεται το φάσμα απορρόφησης κβαντικής τελείας με $z_0 = 10 \text{ nm}$ για μεγάλες τιμές κατακόρυφου μαγνητικού πεδίου, συμπεριλαμβάνοντας την αλληλεπίδραση Coulomb. Σε υψηλά μαγνητικά πεδία συμβαίνει μια “επαναδιάρθρωση” των καταστάσεων με την έννοια ότι στο ανάπτυγμα της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης συνεισφέρουν νέες καταστάσεις με μεγαλύτερους κβαντικούς αριθμούς n_ρ και m_ℓ , ενώ αντίθετα κάποιες από τις καταστάσεις με μικρότερους κβαντικούς αριθμούς που χρησιμοποιήθηκαν στα μικρότερα πεδία, παραλείπονται. Αυτή ακριβώς η “επαναδιάρθρωση” των καταστάσεων αντανακλάται στον αριθμό των επιτρεπών εξιτονικών μεταβάσεων στο μακρινό πεδίο. Έχουμε τονίσει ότι το κατακόρυφο πεδίο διατηρεί την κυλινδρική συμμετρία λόγω δομής (που υπάρχει δηλαδή για $B=0T$). Για τον λόγο αυτό σκανάροντας το δείγμα είτε κατά την x διεύθυνση (διατηρώντας $Y=0$), είτε κατά την y διεύθυνση (διατηρώντας $X=0$), το φάσμα απορρόφησης είναι ακριβώς το ίδιο.

Στα σχήματα 5.9 και 5.10 παρουσιάζεται το φάσμα απορρόφησης σε υψηλά εγκάρσια μαγνητικά πεδία για την κβαντική τελεία με $z_0 = 30 \text{ nm}$ “σκανάροντας” το δείγμα κατά την x και y διεύθυνση αντίστοιχα. Έχουμε ήδη αναφέρει ότι το εγκάρσιο πεδίο καταστρέφει την συμμετρία. Για το λόγο αυτό και τα δύο φάσματα είναι διαφορετικά [176, 177]. Αυτό το σπάσιμο της συμμετρίας αναδεικνύεται για $\sigma = 0.1\text{nm}$ και $\sigma = 10\text{nm}$ αλλά χάνεται στο μακρινό πεδίο [178].

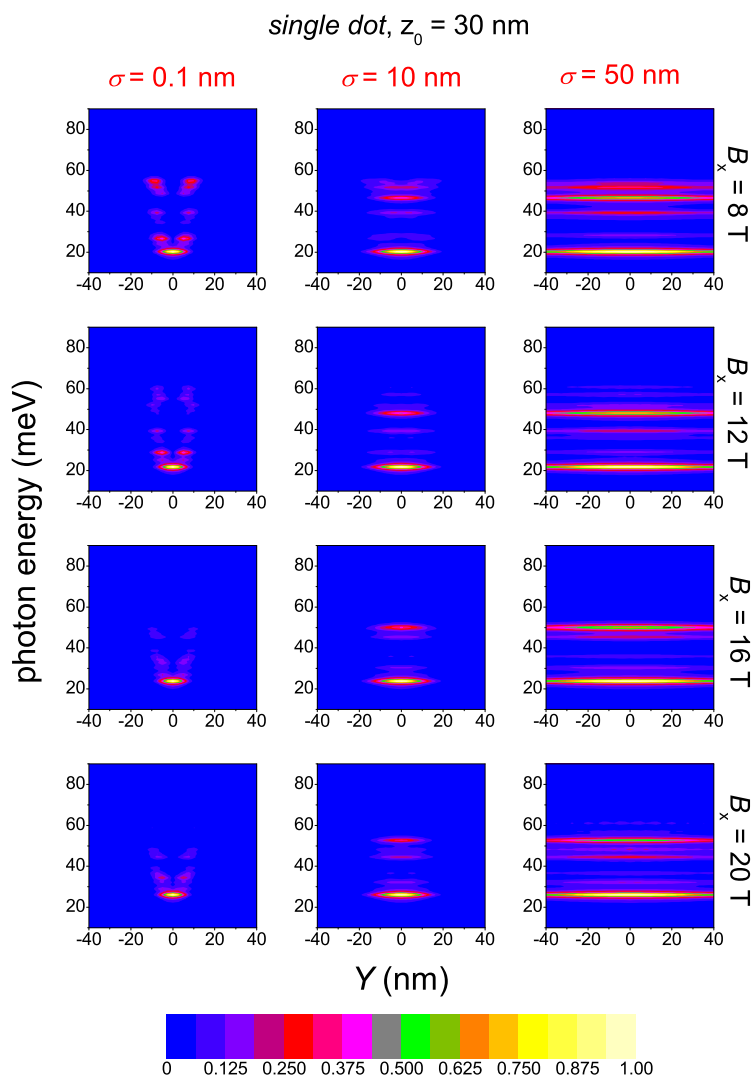
Διαπιστώνουμε τον σημαντικό ρόλο της μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου στην ανάδειξη του άξονα συμμετρίας μιας κβαντικής τελείας: Αν έχουμε για παράδειγμα μια κβαντική τελεία με κυλινδρική συμμετρία, η εφαρμογή μαγνητικού πεδίου παράλληλα στον άξονα συμμετρίας της, δεν θα επηρεάσει την συμμετρία της τελείας κι επομένως σκανάροντας την δομή υπό οποιαδήποτε διεύθυνση στο εγκάρσιο επίπεδο, το φάσμα θα είναι το ίδιο. Αντίθετα, η εφαρμογή μαγνητικού πεδίου σε διεύθυνση διαφορετική από τον άξονα συμμετρίας της τελείας, καταστρέφει την συμμετρία, με αποτέλεσμα τα φάσματα που προκύπτουν σκανάροντας την δομή υπό διαφορετικές διευθύνσεις στο εγκάρσιο επίπεδο να είναι διαφορετικά. Η σημαντική αυτή ιδιότητα χάνεται στο μακρινό πεδίο.



Σχήμα 5.8: Απλή κβαντική τελεία με πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης σαν συνάρτηση της θέσης X του ανιχνευτή και της φωτονικής ενέργειας. Η θέση του ανιχνευτή κατά την διεύθυνση y διατηρείται στην αρχή, δηλ. $Y = 0$. Κάθε στήλη αντιστοιχεί σε διαφορετικές τιμές της χωρικής ανάλυσης ($\approx 2.35 \ln \sigma$), ενώ κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε διαφορετική τιμή του κατακόρυφου μαγνητικού πεδίου. Η “δομική” κυλινδρική συμμετρία διατηρείται υπό το κατακόρυφο πεδίο.



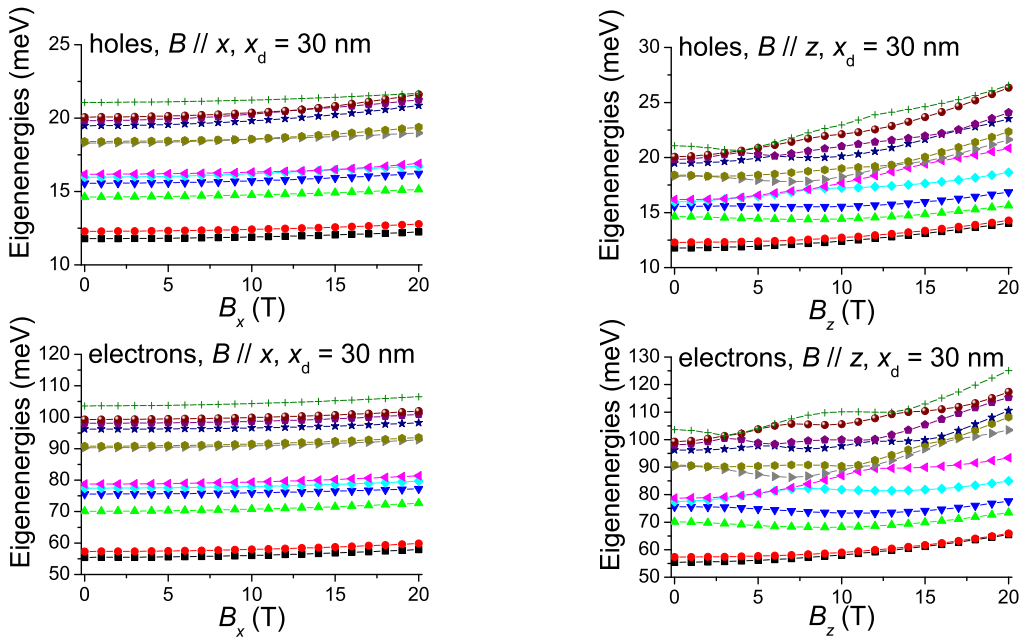
Σχήμα 5.9: Απλή κβαντική τελεία με πηγάδι (πλάτους $z_0 = 30$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης σαν συνάρτηση της θέσης X του ανιχνευτή και της φωτονικής ενέργειας ως προς το ενεργειακό χάσμα. Η θέση του ανιχνευτή κατά την διεύθυνση y διατηρείται στην αρχή, δηλ. $Y = 0$. Κάθε στήλη αντιστοιχεί σε διαφορετικές τιμές της χωρικής ανάλυσης ($\approx 2.35 \ln \sigma$), ενώ κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε διαφορετική τιμή του εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου. Η “δομική” κυλινδρική συμμετρία που έχει το σύστημα σε μηδενικό πεδίο, καταστρέφεται από το εγκάρσιο πεδίο.



Σχήμα 5.10: Απλή κβαντική τελεία με πηγάδι (πλάτους $z_0 = 30$ nm) στον άξονα z και παραβολικό δυναμικό στο επίπεδο xy . Ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης σαν συνάρτηση της θέσης Y του ανιχνευτή και της φωτονικής ενέργειας ως προς το ενεργειακό χάσμα. Η θέση του ανιχνευτή κατά την διεύθυνση x διατηρείται στην αρχή, δηλ. $X = 0$. Κάθε στήλη αντιστοιχεί σε διαφορετικές τιμές της χωρικής ανάλυσης ($\approx 2.35 \ln \sigma$), ενώ κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε διαφορετική τιμή του εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου. Η “δομική” κυλινδρική συμμετρία που έχει το σύστημα σε μηδενικό πεδίο, καταστρέφεται από το εγκάρσιο πεδίο. Για τον λόγο αυτό το “σκανάρισμα” στον x άξονα ($Y = 0$) δίνει διαφορετική εικόνα από το σκανάρισμα στον y άξονα ($X = 0$).

5.8 Διπλή κβαντική τελεία

Θεωρούμε μια πρωτότυπη διπλή κβαντική τελεία [2] με διδιάστατο παραβολικό δυναμικό εντοπισμού στο επίπεδο xy και τετραγωνικό πηγάδι $z_0 = 10$ nm στον άξονα z . Το δυναμικό στον άξονα x παρουσιάζει δύο ελάχιστα στα σημεία $x = \pm \frac{x_d}{2}$, όπου $x_d = 30$ nm η απόσταση των δύο τελειών που είναι και η απόσταση των δύο ελαχίστων της δυναμικής ενέργειας. Η μορφή του δυναμικού της διπλής τελείας στον άξονα x προκύπτει από την συνθήκη το δυναμικό να είναι ομαλό και συνεχές στα σημεία $x = \pm \frac{x_d}{2}$. Με βάση την παραπάνω συνθήκη το δυναμικό περιγράφεται ως:



Σχήμα 5.11: Διπλή κβαντική τελεία με πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και απόσταση κατά τον άξονα x μεταξύ των τελειών $x_d = 30$ nm. Στον άξονα y το δυναμικό περιορισμού είναι παραβολικό. Παρουσιάζονται οι ιδιοενέργειες ηλεκτρονίων και οπών για τις πρώτες 12 καταστάσεις, συναρτήσεως του μαγνητικού πεδίου \mathbf{B} κατά την z ή την x διεύθυνση.

- αν $|x| > \frac{x_d}{2}$

$$V^{e,h}(x, y) = \frac{1}{2} m^* \omega^2 [(|x| - x_d)^2 + y^2] \quad (5.15)$$

- αν $|x| < \frac{x_d}{2}$

$$V^{e,h}(x, y) = \frac{1}{2} m^* \omega^2 \left[\left(\frac{x_d}{2} - x \right)^2 + y^2 \right] \quad (5.16)$$

Στο σχήμα 5.11 παρουσιάζονται οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις για την πρωτότυπη αυτή διπλή τελεία, σαν συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου B_x ή B_z . Για την λύση του εξιτονικού προβλήματος χρησιμοποιήσαμε ως βάση 12 ηλεκτρόνια και 12 οπές.

Στο σχήμα 5.12 παρουσιάζεται ο συντελεστής απορρόφησης για την διπλή τελεία, υπό την επίδραση πολύ ισχυρού πεδίου $B_z = 20\text{T}$. Το πολύ ισχυρό πεδίο οδηγεί σε ισχυρό εντοπισμό των εξιτονίων. Με άλλα λόγια, η χωρική έκταση των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων μειώθηκε κατά $\approx 1/3$ και εμφανίζεται μια μετατόπιση του φάσματος προς υψηλότερες ενέργειες. Εδώ θα πρέπει να επισημανθεί ως κίνητρο για τους πειραματικούς, ότι αυτές οι τροποποιήσεις που επιφέρει το μαγνητικό πεδίο θα μπορούσαν σε πειραματικό επίπεδο να ανιχνευτούν χρησιμοποιώντας ανιχνευτή εγγύς πεδίου με χωρική ανάλυση $2\sqrt{2}\ln 2 \times 10 \text{ nm} \approx 23.5 \text{ nm}$.

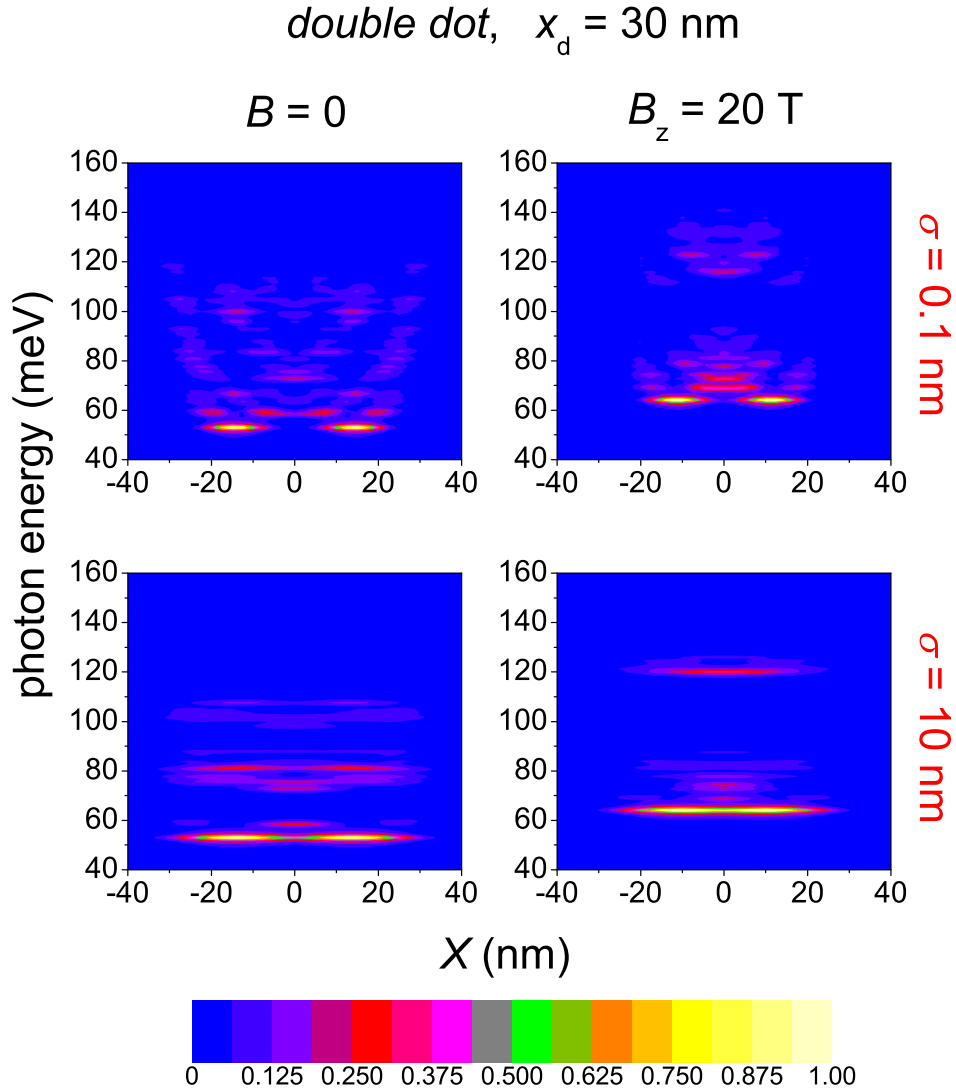
5.9 Η θεμελιώδης ενέργεια δέσμευσης του εξιτονίου

Τόσο τα δομικά χαρακτηριστικά της τελείας (που καθορίζουν την μορφή του περιοριστικού δυναμικού) όσο και το μαγνητικό πεδίο, επηρεάζουν σημαντικά τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις. Επιπλέον επηρεάζουν την αλληλεπίδραση Coulomb η οποία με την σειρά της μεταβάλλει τις εξιτονικές ιδιοενέργειες. Προφανώς, αυτό προσφέρει έναν τρόπο διαμόρφωσης (engineering) της θεμελιώδους ενέργειας δέσμευσης του εξιτονίου, η οποία ορίζεται ως:

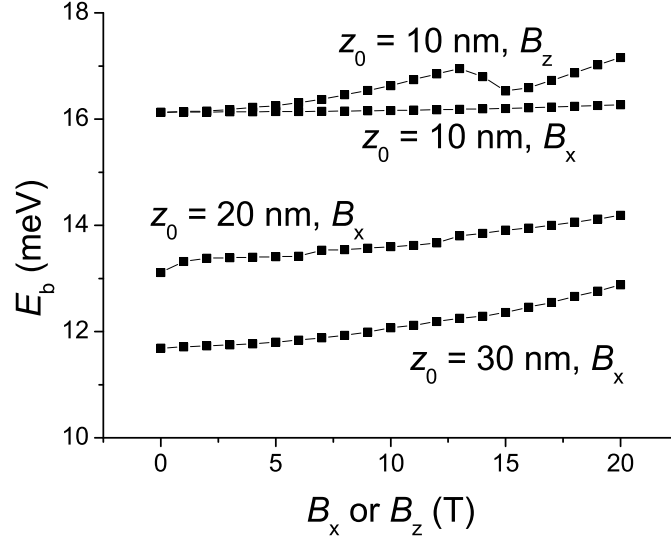
$$E_b = E_e + E_h - E_{xc} \quad (5.17)$$

όπου E_e (E_h) η θεμελιώδης ιδιοενέργεια του ηλεκτρονίου (της οπής) και E_{xc} είναι η θεμελιώδης εξιτονική ενέργεια. Στο σχήμα 5.13 παρουσιάζεται η θεμελιώδης εξιτονική ενέργεια δέσμευσης σαν συνάρτηση του κατακόρυφου ή εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου για τις τελείες με πλάτη πηγαδιού $z_0 = 10, 20, 30 \text{ nm}$. Παρατηρούμε ότι για μηδενικό πεδίο το μέγεθος της τελείας καθορίζει την ενέργεια δέσμευσης.

Στην μικρότερη τελεία υπάρχει πιο ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών, με αποτέλεσμα η εξιτονική ενέργεια δέσμευσης να είναι μεγαλύτερη. Καθώς αυξάνει το εγκάρσιο πεδίο, στις χβαντικές τελείες με τα μεγαλύτερα πλάτη πηγαδιού, παρατηρείται αύξηση της εξιτονικής ενέργειας δέσμευσης γιατί ο μαγνητικός



Σχήμα 5.12: Διπλή κβαντική τελεία με πηγάδι (πλάτους $z_0 = 10$ nm) στον άξονα z και απόσταση κατά τον άξονα x μεταξύ των τελειών $x_d = 30$ nm. Στον άξονα y το δυναμικό περιορισμού είναι παραβολικό. Ο τοπικός συντελεστής απορρόφησης σαν συνάρτηση της θέσης X του ανιχνευτή και της φωτονικής ενέργειας ως προς το ενεργειακό χάσμα. Η θέση του ανιχνευτή κατά την διεύθυνση y διατηρείται στην αρχή, δηλ. $Y = 0$. Κάθε στήλη αντιστοιχεί σε διαφορετικές τιμές της χωρικής ανάλυσης ($\approx 2.35 \ln \sigma$: $\sigma = 0.1$ nm και $\sigma = 10$ nm). Κάθε στήλη αντιστοιχεί διαφορετική τιμή του κατακόρυφου μαγνητικού πεδίου: $B = 0T$ και $B_z = 20T$.



Σχήμα 5.13: Η θεμελιώδης ενέργεια δέσμευσης E_b του εξιτονίου σαν συνάρτηση του κατακόρυφου ή του εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου για τις τέσσερις χαρακτηριστικές περιπτώσεις που παρουσιάστηκαν στα σχήματα 5.4 και 5.5.

εντοπισμός φέρνει πιο κοντά ηλεκτρόνια και οπές. Αντίθετα, για την μικρή τελεία η αύξηση του εγκάρσιου πεδίου δεν επηρεάζει την ενέργεια δέσμευσης, γιατί υπερσχύει ο χωρικός εντοπισμός.

Η σχετικά μεγάλη -συγκρινόμενη με την θερμική ενέργεια σε θερμοκρασία δωματίου ($k_B T \approx 26$ meV)- θεμελιώδης εξιτονική ενέργεια δέσμευσης είναι απαραίτητη για την ικανοποιητική λειτουργία των οπτικών διατάξεων σε θερμοκρασία δωματίου. Από το παραπάνω διάγραμμα φαίνεται ότι ένας τρόπος για να αυξήσουμε την E_b είναι να μειώσουμε το μέγεθος της τελείας ή/και να αυξήσουμε το μαγνητικό πεδίο, αναγκάζοντας έτσι τα ηλεκτρόνια και τις οπές να έρθουν πιο κοντά.

Ωστόσο αυτή η "συμπίση" των μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων εξαρτάται από την ασυνέχεια στις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας των δύο υλικών (GaAs/AlGaAs εδώ). Για παράδειγμα [113], σε σφαιρικές τελείες η σχέση που συνδέει την κατώτερη κρίσιμη διάμετρο με την ασυνέχεια στην ζώνη αγωγιμότητας των δύο υλικών είναι:

$$D_{min} = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2m^* \Delta E_c}} \quad (5.18)$$

όπου ΔE_c η ασυνέχεια στην ζώνη αγωγιμότητας των δύο υλικών και m^* η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου. Επιπλέον, μειώνοντας το πλάτος του πηγαδιού περαιτέρω, οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις εισχωρούν στον AlGaAs φραγμό.

Έχει δειχθεί ότι στα κβαντικά σύρματα, γενικά οι ενέργειες δέσμωσης είναι μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες στα κβαντικά πηγάδια, είναι ωστόσο μικρότερες από $k_B T_{room}$ [179]. Παρατηρούμε ότι ο συνδυασμός που κάναμε, δηλαδή μείωση του πλάτους του πηγαδιού με ταυτόχρονη αύξηση του πεδίου, έχει σαν αποτέλεσμα η E_b να πλησιάσει την θερμική ενέργεια σε θερμοκρασία δωματίου.

5.10 Περιγραφή του μικροσκοπίου σάρωσης κοντινού πεδίου

Η πειραματική μελέτη των συστημάτων ημιαγωγικών κβαντικών τελειών, με την παραδοσιακή μικροσκοπία μακρινού πεδίου, παρέχει πληροφορίες κατά μέσο όρο για το σύνολο των τελειών. Παρά τα πλεονεκτήματα και το εύρος των εφαρμογών της συμβατικής οπτικής μικροσκοπίας, το κυριότερο περιοριστικό γνώρισμα του οπτικού μικροσκοπίου είναι η χαμηλή διακριτική ικανότητα. Για τα συμβατικά οπτικά μικροσκόπια, επιβάλλεται από τον υλικό χαρακτήρα του φωτός, ένα θεμελιώδες κατώτερο όριο (φράγμα Abbe [180]) στη χωρική διακριτική ικανότητα που μπορεί να επιτευχθεί με αυτά τα όργανα.

Στην πράξη τα υπό μελέτη δείγματα αποτελούνται από έναν αριθμό τελειών με διαφορετικά μεγέθη, σχήματα και πολλές φορές και σύνθεση, η αναπόφευκτη ανομοιογενής διαπλάτυνση των κορυφών καλύπτει πολλές από τις ιδιότητες των απομονωμένων κβαντικών τελειών. Έτσι ένας τρόπος για να μελετήσουμε τις ιδιότητες των μεμονωμένων κβαντικών τελειών που ανήκουν σε μια συλλογή, είναι η χρήση οπτικών μεθόδων με χωρική ανάλυση υποπολλαπλάσια του μήκους κύματος.

Ο αισθητήρας ενός μικροσκοπίου κοντινού πεδίου χρησιμοποιεί έναν μικρό κωνικό ανιχνευτή (probe) με ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή αυτού, της τάξης των δεκάδων ή εκατοντάδων nm. Γενικά, ένας τέτοιος ανιχνευτής μπορεί να έχει μια αδιαφανή (συνήθως μεταλλική) επίστρωση στις πλευρές του, έχοντας στο άκρο του ένα υποπολλαπλάσιο του μήκους κύματος άνοιγμα. Η χωρική ανάλυση καθορίζεται από την διάμετρο του ανοίγματος και κυμαίνεται από 10-100 nm. Σε άλλες διατάξεις, μπορεί να είναι χωρίς επίστρωση. Και στις δύο περιπτώσεις, σχηματίζεται μια εικόνα μέσω σάρωσης του ανιχνευτή στο κοντινό πεδίο της επιφάνειας του δείγματος, ενώ ο ανιχνευτής μπορεί να λειτουργεί είτε ως πηγή (στη λειτουργία φωτισμού) είτε ως ανιχνευτής (στη λειτουργία συλλογής) ακτινοβολίας. Ένα τέτοιο όργανο αναφέρεται

ως οπτικό μικροσκόπιο σάρωσης κοντινού πεδίου ή NSOM (Near-field Scanning Optical Microscope). Το σήμα (I) που λαμβάνεται σε κάθε pixel, αναλύεται σε όρους αλληλεπίδρασης μεταξύ του ΗΜ πεδίου που φωτίζει το δείγμα ($\mathbf{E}_{\text{illum}}$), της απόκρισης του προς μελέτη αντικειμένου στο πεδίο αυτό και του διανυσματικού πεδίου συλλογής του δείγματος ($\mathbf{E}_{\text{collect}}$). Οι ενδογενείς ιδιότητες του αντικειμένου συμβολίζονται με τον πίνακα \mathbf{R} . Η απόκριση του αντικειμένου στο ΗΜ πεδίο που φωτίζει το δείγμα, περιλαμβάνει διεργασίες όπως ανάκλαση, απορρόφηση, επακόλουθη εκπομπή κλπ. Μπορεί βέβαια να περιλαμβάνει και δημιουργούμενα με μη οπτικό τρόπο οπτικά πεδία (ηλεκτροφωταύγεια...) Το πεδίο $\mathbf{E}_{\text{illum}}$ καθορίζεται από την φωτεινή πηγή, φίλτρα, και ό,τι άλλο παρεμβάλλεται μεταξύ πηγής και αντικειμένου. Κλείνει μέσα του τον χρόνο, το κυματόνισμα, την πόλωση και τις χωρικές ιδιότητες του φωτός που διεγείρει το δείγμα. Αντίθετα, το πεδίο $\mathbf{E}_{\text{collect}}$, καθορίζεται από τα φίλτρα, τους αναλυτές, τους ανιχνευτές και ό,τι άλλο παρεμβάλλεται μεταξύ αντικειμένου και ανιχνευτή. Το σήμα που λαμβάνεται σε ένα pixel δίνεται σχηματικά από:

$$I(\mathbf{r}, \lambda, t) = \int_{\mathbf{r}'} \int_{\lambda'} \int_{t'} \mathbf{E}_{\text{illum}} \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{E}_{\text{collect}} d^3\mathbf{r}' d\lambda' dt' \quad (5.19)$$

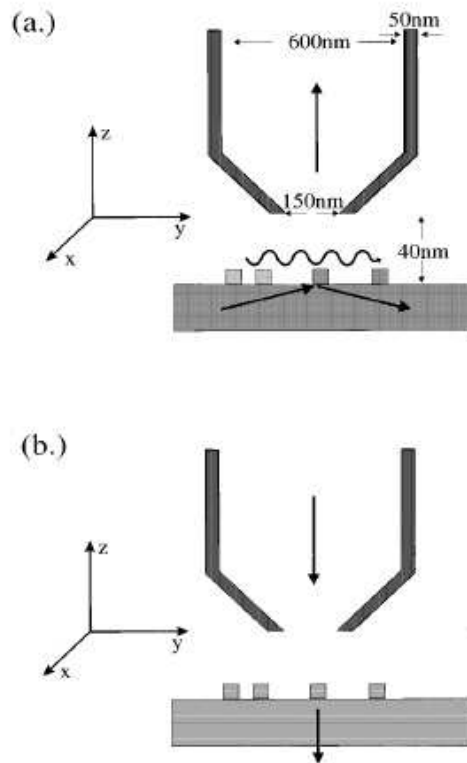
Μια απεικόνιση περιλαμβάνει μια συλλογή σημάτων καθώς σαρώνει κανείς την σχετική θέση της άκρης του ανιχνευτή και του δείγματος για ένα σύνολο τιμών (x, y) . Αυτό που χαρτογραφείται σε μια διαδικασία απεικόνισης είναι η διανυσματική ποσότητα $\mathbf{E}_{\text{illum}} \cdot \mathbf{R}$ (σε λειτουργία φωτισμού), είτε η διανυσματική $\mathbf{E}_{\text{collect}} \cdot \mathbf{R}$ (σε λειτουργία συλλογής). Παρακάτω περιγράφονται οι δύο κύριες λειτουργίες του μικροσκοπίου σάρωσης κοντινού πεδίου.

5.10.1 Λειτουργία φωτισμού

Το άκρο του ανιχνευτή λειτουργεί ως πηγή φωτός στο εγγύς πεδίο και η χωρική ανάλυση επιτυγχάνεται μέσω της σάρωσης του δείγματος από το άκρο του ανιχνευτή (σχήμα 5.14), ενώ οι αλλαγές που προκαλεί η αλληλεπίδραση με το δείγμα ανιχνεύονται στο μακρινό πεδίο. Η πειραματικά παρατηρούμενη ποσότητα, η οποία ανιχνεύεται μέσω ενός σημειακού φωτοανιχνευτή, είναι η ένταση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου \mathbf{E} σε κάποιο σημείο \mathbf{r}_0 στο μακρινό πεδίο. Για να αφαιρεθεί το υπόβαθρο, υπολογίζεται η σχετική μεταβολή της έντασης εξαιτίας της ύπαρξης του δείγματος [181]:

$$S(\mathbf{r}_0) = \frac{|\mathbf{E}|^2 - |\mathbf{E}_0|^2}{|\mathbf{E}_0|^2} \quad (5.20)$$

\mathbf{E}_0 είναι το ΗΜ πεδίο χωρίς το δείγμα και \mathbf{E} είναι το ΗΜ πεδίο που επάγει η αλληλεπίδραση με το δείγμα.



Σχήμα 5.14: Σχηματική παράσταση ενός NSOM στις δύο βασικές λειτουργίες του [181].

5.10.2 Λειτουργία συλλογής

Επίπεδο διεγείρον κύμα προσπίπτει υπό γωνία ολικής ανάκλασης από τον πυθμένα του υποστρώματος, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.14. Το προσπίπτον κύμα δημιουργεί παροδικά κύματα επιφανείας που διατρέχουν την επιφάνεια του υποστρώματος και αλληλεπιδρούν με την συλλογή από τελείες. Στην κορυφή αυτής της γεωμετρίας εφαρμόζεται ένα NSOM σε λειτουργία συλλογής. Το πεδίο που εκπέμπουν οι κβαντικές τελείες συλλέγεται από το άκρο του ανιχνευτή. Ένας φωτοανιχνευτής μετρά την πυκνότητα ροής ενέργειας, της ακτινοβολίας, σε όλη την επιφάνεια του άκρου του ανιχνευτή [181]:

$$w(L_0) = \frac{c}{4\pi} \int \int dx dy \text{Re}(E \times H^*)_z \quad (5.21)$$

Προκειμένου λοιπόν να ληφθούν οι παραπάνω πειραματικά παρατηρούμενες ποσότητες, θα πρέπει να υπολογιστούν τα αντίστοιχα ηλεκτρομαγνητικά πεδία. Αυτά προκύπτουν από την λύση των εξισώσεων Maxwell για το ολικό ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} :

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \nabla \nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P} \quad (5.22)$$

Στην γραμμική περιοχή, χρησιμοποιώντας μια γραμμική επιδεκτικότητα χ , η πόλωση γράφεται ως:

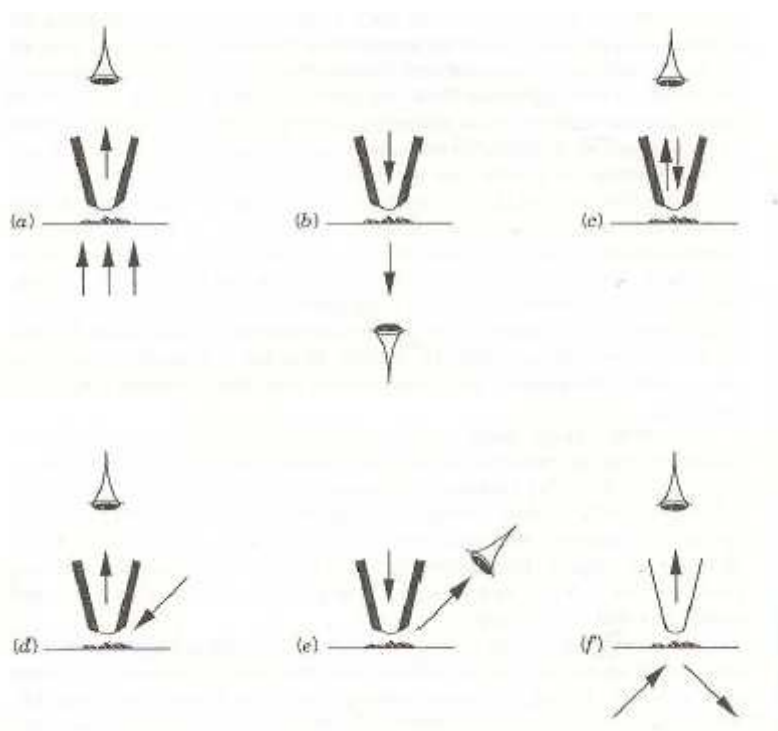
$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \chi(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (5.23)$$

όπου έχει θεωρηθεί ότι το μέσο είναι οπτικά ισότροπο και χαρακτηρίζεται από **τοπική** απόκριση. Για το μαγνητικό πεδίο έχουμε μια παρόμοια εξίσωση:

$$\nabla^2 \mathbf{B} + \frac{\omega^2}{c_0^2} \mathbf{B} = \frac{4\pi i \omega}{c_0} \nabla \times \mathbf{P} \quad (5.24)$$

Έτσι, λύνοντας την Εξ.(5.22), βρίσκουμε κατόπιν την πόλωση από την Εξ. (5.23), (γνωρίζοντας βέβαια την έκφραση της τοπικής επιδεκτικότητας) και στην συνέχεια υπολογίζουμε το μαγνητικό πεδίο από την Εξ. (5.24).

Εκτός από τις προαναφερθείσες, υπάρχει ένα πλήθος δυνατών διατάξεων ενός μικροσκοπίου σάρωσης εγγύς πεδίου. Στο σχήμα 5.15 απεικονίζονται έξι από τους συνηθέστερους τρόπους λειτουργίας, στο οποίο έχουμε υποθέσει για λόγους απλότητας ότι το στοιχείο μεταφοράς του σήματος είναι μια οπτική ίνα κωνικής διατομής. Χρησιμοποιούνται και άλλες κατασκευές, όχι όμως τόσο συχνά όσο η κωνική ίνα. Σε όλες τις περιπτώσεις που δείχνονται στο σχήμα 5.15, το δείγμα υποτίθεται ότι βρίσκεται επάνω σε ένα επίπεδο υπόστρωμα απευθείας κάτω από την κορυφή της ίνας. Στις εικόνες 5.15(a-e), οι πλευρές της ίνας ενδεχομένως επικαλύπτονται με μια μεταλλική μεμβράνη. Στην εικόνα 5.15(f) δεν υφίσταται τέτοια επίστρωση. Στη λειτουργία συλλογής NSOM (εικόνα 5.15a), συλλέγεται φως μέσω του διαφράγματος στο άκρο της ίνας ενώ παρέχεται φωτισμός από μια διάταξη μακρινού πεδίου. Στη λειτουργία φωτισμού NSOM (εικόνα 5.15b), το δείγμα φωτίζεται με φως από ένα διάφραγμα, αλλά συλλέγεται στο μακρινό πεδίο. Στη λειτουργία φωτισμού/ συλλογής NSOM (εικόνα 5.15c), το δείγμα φωτίζεται μέσω του ίδιου διαφράγματος. Στη λειτουργία πλάγιας συλλογής NSOM (εικόνα 5.15d), το δείγμα φωτίζεται πλάγια με μια διάταξη μακρινού πεδίου και το φως συλλέγεται στην ίνα αφού περάσει μέσα από το διάφραγμα. Στη λειτουργία πλάγιου φωτισμού NSOM (εικόνα 5.15e), το δείγμα φωτίζεται με φως από το διάφραγμα και το σήμα συλλέγεται πλάγια με μια διάταξη μακρινού πεδίου. Στη λειτουργία σκοτεινού πεδίου NSOM(εικόνα 5.15f), το προσπίπτον φως

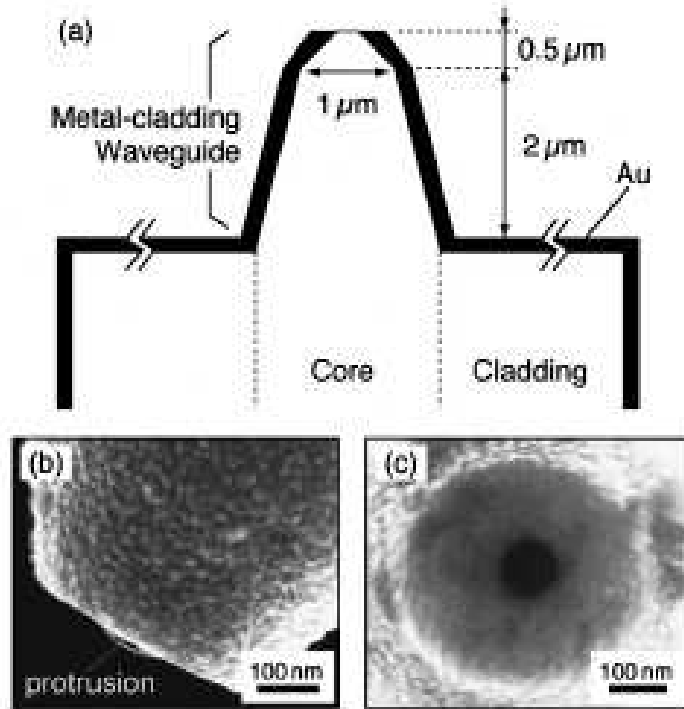


Σχήμα 5.15: Οι έξι δυνατοί τρόποι λειτουργίας ενός NSOM.(a) συλλογή, (b) φωτισμός, (c) φωτισμός/ συλλογή, (d) πλάγια συλλογή (e) πλάγιος φωτισμός, (f) σκοτεινό πεδίο [182].

εξαναγκάζεται σε ολική εσωτερική ανάκλαση από την επιφάνεια υποστρώματος. Το φως συλλέγεται μέσω μιας ανεπίστρωτης ίνας τοποθετημένης στο κοντινό πεδίο του δείγματος.

Πολύ σημαντικός παράγοντας στην βελτίωση της διακριτικής ικανότητας αποτελεί η κατασκευή του ανοίγματος του ανιχνευτή. Οι T. Saiki και K. Matsuda [168], πέτυχαν χωρική ανάλυση της τάξης των 30 nm, μειώνοντας το μήκος της μεταλλικά επιστρωμένης περιοχής του κυματοδηγού (που χαρακτηρίζεται από σημαντικές απώλειες του σήματος), κατασκευάζοντας μια διπλή κωνική δομή στην κορυφή του κυματοδηγού (σχήμα 5.16). Επιπλέον η διπλή κωνική δομή έχει το πλεονέκτημα ότι το άνοιγμα του ανιχνευτή έχει πολύ οξύ άκρο κι αυτό συνεισφέρει σημαντικά στην αποτελεσματική δημιουργία και ανίχνευση του παροδικού πεδίου στην γειτονιά του δείγματος. Τέλος, κατάφεραν επιπρόσθετη αύξηση της απόδοσης του ανιχνευτή μειώνοντας το πάχος του επιφανειακού στρώματος που καλύπτει την επιφάνεια των

τελειών για την αποφυγή της φθορά τους, το οποίο όμως δημιουργεί μια αναπόφευκτη και μη επιθυμητή απόσταση $\approx 50 - 100$ nm μεταξύ της προς ανίχνευση τελείας και του ανιχνευτή.



Σχήμα 5.16: (α) Σχηματική παράσταση της οπτικής ίνας του ανιχνευτή που κατασκευάστηκε από τους T. Saiki και K. Matsuda [168] με την διπλή κωνική δομή, (β) πλευρική τομή και (γ) κάτοψη από πάνω της σχισμής με διάμετρο 100 nm.

5.11 Σύνοψη

Παρουσιάστηκε μια θεωρητική μελέτη του φάσματος μαγνητοαπορρόφησης εγγύς πεδίου απλών και διπλών τελειών. Διερευνούμε την επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο φάσμα απορρόφησης καθώς και τον ανταγωνισμό μεταξύ χωρικού και μαγνητικού εντοπισμού. Αυτή η διερεύνηση μας παρέχει έναν τρόπο χειρισμού των εξιτονικών κυματοσυναρτήσεων και συγκεκριμένα της εξιτονικής ενέργειας δέσμευσης της θεμελιώδους κατάστασης.

Χρησιμοποιώντας μια απλή κβαντική τελεία με ισότροπο παραβολικό δυναμικό στο xy επίπεδο και πηγάδι στον άξονα z και μεταβάλλοντας το πλάτος του πηγαδιού καθώς και το μέτρο και τον προσανατολισμό του πεδίου συμπεραίνουμε:

A) Η κυλινδρική συμμετρία που έχει η κβαντική τελεία λόγω της δομής της για μη-δενικό μαγνητικό πεδίο, διατηρείται υπό κατακόρυφο και καταστρέφεται υπό εγκάρσιο μαγνητικό πεδίο.

B) Καθώς αυξάνει το πλάτος του πηγαδιού στον άξονα z , ο ρόλος του χωρικού εντοπισμού μειώνεται κι αντίστοιχα αυξάνει ο ρόλος του μαγνητικού εντοπισμού.

Γ) Η άρση του εκφυλισμού που επάγει το μαγνητικό πεδίο έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση του αριθμού των επιτρεπτών μεταβάσεων στο μακρινό πεδίο.

Δ) Η αλληλεπίδραση Coulomb επιφέρει σημαντικές τροποποιήσεις στο φάσμα απορρόφησης, όπως:

- μετατόπιση του φάσματος προς χαμηλότερες ενέργειες λόγω της ελκτικής αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίου και οπής
- μεταφορά της ισχύος ταλαντωτή από τις υψηλές στις χαμηλές ενέργειες
- εμφάνιση νέων κορυφών με μη μονότονη συμπεριφορά στην έντασή τους καθώς αυξάνεται η χωρική ανάλυση ($\approx 2.35 \ln \sigma$).

E) Εξετάζοντας το φάσμα απορρόφησης της απλής κβαντικής τελείας με πλάτος πηγαδιού $z_0 = 10 \text{ nm}$ υποκείμενη σε πολύ υψηλά μαγνητικά πεδία και λαμβάνοντας υπόψη την αλληλεπίδραση Coulomb, συμπεραίνουμε ότι αλλάζει ο αριθμός των επιτρεπτών μεταβάσεων στο μακρινό πεδίο. Αυτό οφείλεται στην επαναδιάρθρωση των καταστάσεων λόγω του πεδίου.

ΣΤ) Εφαρμόζοντας στην κβαντική τελεία με κυλινδρική συμμετρία υψηλό μαγνητικό πεδίο παράλληλα στον άξονα συμμετρίας της, δεν επηρεάζεται η συμμετρία της, κι έτσι σκανάροντας την δομή υπό οποιαδήποτε διεύθυνση στο εγκάρσιο επίπεδο το φάσμα εγγύς πεδίου είναι το ίδιο. Αντίθετα, εφαρμόζοντας μαγνητικό πεδίο σε διεύθυνση διαφορετική από τον άξονα συμμετρίας της, καταστρέφεται η συμμετρία της τελείας, κι έτσι σκανάροντας την δομή υπό διαφορετικές διευθύνσεις στο εγκάρσιο επίπεδο, προκύπτουν διαφορετικά φάσματα εγγύς πεδίου. Αυτή η δυνατότητα χάνεται στο μακρινό πεδίο. Αυτή η πολύ σημαντική ιδιότητα του φάσματος μαγνητοαπορρόφησης όσον αφορά στην ανάδειξη του άξονα συμμετρίας της κβαντικής τελείας αποτελεί χαρακτηριστική διαφορά ανάμεσα στο εγγύς και μακρινό πεδίο.

Z) Το μαγνητικό πεδίο και το μέγεθος της κβαντικής τελείας αποτελούν καθοριστικούς παράγοντες για την εξιτονική ενέργεια δέσμευσης της θεμελιώδους κατάστασης. Συγκεκριμένα, ο συνδυασμός που κάναμε δηλαδή μείωση του πλάτους του

πηγαδιού με ταυτόχρονη αύξηση του μαγνητικού πεδίου, έχει σαν αποτέλεσμα η E_b να πλησιάσει την θερμική ενέργεια σε θερμοκρασία δωματίου. Η συνθήκη αυτή είναι αναγκαία για την ικανοποιητική λειτουργία των οπτικών διατάξεων σε θερμοκρασία δωματίου.

Εξετάζοντας το φάσμα μαγνητοαπορρόφησης (σε υψηλά πεδία) διπλής κβαντικής τελείας, παρατηρείται μια μετατόπιση σε υψηλότερες ενέργειες και μείωση της έκτασης των κυματοσυναρτήσεων κατά περίπου $1/3$.

Κεφάλαιο 6

Οι εξισώσεις φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες και η αναλυτική επίλυσή τους

Το κεφάλαιο αυτό αποτελεί το δεύτερο μέρος της παρούσας διατριβής. Παρουσιάζεται η πρωτότυπη παραγωγή των εξισώσεων φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες όπως αυτές προκύπτουν από την κβαντομηχανική περιγραφή της αλληλεπίδρασης του συστήματος των φορέων που είναι εντοπισμένοι στην κβαντική τελεία, τόσο μεταξύ τους, όσο και με το πεδίο των φωτονίων. Λύνοντας αναλυτικά τις εξισώσεις φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή, καταλήγουμε στην έκφραση που δίνει την ένταση του εκπεμπόμενου φωτός δηλαδή το φάσμα φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες.

Στην παραγωγή της εξίσωσης που δίνει τον συντελεστή απορρόφησης, για την περιγραφή της δυναμικής του συστήματος, θεωρήσαμε την αλληλεπίδραση των φορέων μόνο με το συνεκτικό πεδίο του λέιζερ (όρος H_d). Κατά την διαδικασία αυτή υπάρχει όμως και ο πρόσθετος όρος $H_{c\gamma}$ της αλληλεπίδρασης των φορέων με το υπόβαθρο πεδίο των φωτονίων (background photon field [183]), ο οποίος οδηγεί στην αυθόρμητη εκπομπή. Ο όρος αυτός προκύπτει από την κβαντομηχανική περιγραφή του πεδίου φωτός. Οι διαδικασίες αυθόρμητης εκπομπής συμβαίνουν σε χρόνους πολύ μεγαλύτερους συγκριτικά με άλλες διαδικασίες σκέδασης. Έτσι, κατά την μελέτη της πολύ γρήγορης (ultrafast) δυναμικής των φορέων που διεγείρονται από το συνεκτικό πεδίο του λέιζερ, είναι ήσσονος σημασίας. Για τον λόγο αυτό στην παραγωγή του συντελεστή απορρόφησης δεν λάβαμε υπόψη τον όρο $H_{c\gamma}$, ο οποίος περικλείει την αλληλεπίδραση των φορέων με τα φωτόνια που προκύπτουν από την αποδιέγερση του συστήματος.

Αντίθετα, στα πειράματα φωτοφωταύγειας, αυτό που μετράται πειραματικά είναι το φάσμα των εκπεμπόμενων φωτονίων, και η διαδικασία επανασύνδεσης είναι ο συνδυαστικός κρίκος μεταξύ των θεωρητικών υπολογισμών και των πειραματικών παρατηρήσεων. Κατά συνέπεια για τον υπολογισμό του φάσματος φωτοφωταύγειας, θα πρέπει να συμπεριλάβουμε την Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης του συστήματος με το πεδίο των φωτονίων. Στην περίπτωση κατά την οποία συνεκτικές πηγές φωτός (λείζερ) διεγείρουν συγχρόνως σε συντονισμό την κβαντική τελεία [25] (συνεκτική φωτοφωταύγεια), στην θεωρητική μελέτη λαμβάνονται υπόψη τόσο η αλληλεπίδραση των φορέων με το υπόβαθρο του πεδίου φωτός (όρος $H_{c\gamma}$), όσο και αλληλεπίδραση με το λείζερ (όρος H_{cl}).

Στην παρούσα διατριβή μελετάται η μη-συνεκτική φωτοφωταύγεια, η οποία προκύπτει από την αποδιέγερση του πληθυσμού των διηγεμένων ηλεκτρονίων και οπών. Στην περίπτωση αυτή μηδενίζουμε τον όρο H_{cl} της αλληλεπίδρασης με το λείζερ και η συνολική Χαμιλτονιανή αποτελείται από τον όρο των μη αλληλεπιδρώντων φορέων H_{sp} , τον όρο της αλληλεπίδρασης μεταξύ των φορέων H_{cc} , τον όρο των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων H_γ και τέλος τον όρο $H_{c\gamma}$. Η εξίσωση που δίνει τον τελευταίο όρο για τις κβαντικές τελείες παράγεται στην ενότητα 6.3. Εφαρμόζοντας την εξίσωση κίνησης του Heisenberg στις αναμενόμενες τιμές του αριθμού των φωτονίων ($\langle a_q^\dagger a_{q'} \rangle$), των συναρτήσεων κατανομής των φορέων και των όρων συσχετισμού μεταξύ των τελεστών δημιουργίας (καταστροφής) φωτονίου και καταστροφής (δημιουργίας) ενός ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής, ($\langle a_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle \equiv \langle a_q^\dagger d_\nu c_\mu \rangle$), λαμβάνουμε ένα σύνολο εξισώσεων φωτοφωταύγειας σε κβαντικές τελείες.

6.1 Η έννοια της φωτοφωταύγειας

Η φωταύγεια (Luminescence) είναι διαδικασία αυθόρμητης εκπομπής κατά την οποία οι φορείς που έχουν μεταβεί σε διηγεμένες καταστάσεις μετά από κατάλληλη διέγερση, επανασυνδέονται εκπέμποντας ταυτόχρονα ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Για να συμβεί εκπομπή θα πρέπει οι φορείς να βρίσκονται σε κατάσταση μη-ισορροπίας. Έτσι απαιτείται ένα είδος διέγερσης. Αν η διέγερση γίνεται με ηλεκτρικό ρεύμα, τότε η διαδικασία καλείται ηλεκτροφωταύγεια (electroluminescence), αν η διέγερση γίνεται με δέσμη ηλεκτρονίων καλείται καθοδοφωταύγεια (cathodoluminescence), ή αν γίνεται με φως καλείται φωτοφωταύγεια (photoluminescence συντ PL). Με μια πρώτη ματιά η απορρόφηση και η φωτοφωταύγεια είναι συμμετρικές διαδικασίες. Στην πρώτη, λόγω της απορρόφησης ενός φωτονίου, ένα ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από μια κατάσταση της ζώνης σθένους σε μια κατάσταση της ζώνης αγωγιμότητας με ταυτόχρονη δημιουργία οπής, και ανιχνεύονται τα φωτόνια που δεν έχουν απορροφηθεί.

Στην περίπτωση της φωτοφωταύγειας, το ηλεκτρόνιο και η οπή που βρίσκονται σε διεγερμένες καταστάσεις μη ισορροπίας, επανασυνδέονται, κι ανιχνεύονται τα φωτόνια που εκπέμπονται.

Υπάρχει ωστόσο μια ουσιαστική διαφορά: η ακτινοβολούσα διαδικασία της εκπομπής συνυπάρχει με άλλες μη-ακτινοβολούσες διαδικασίες (φαινόμενο Auger, σύλληψη από βαθιά κέντρα, κ.α) που στέλνουν τους φορείς σε κατώτερες καταστάσεις από τις οποίες επανασυνδέονται είτε εκπέμποντας φωτόνια, είτε όχι. Έτσι ενώ στην απορρόφηση ένα φωτόνιο δημιουργεί ακριβώς ένα ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής, η φωτοφωταύγεια είναι ένας μόνο από τους πιθανούς μηχανισμούς που μπορούν να συμβούν. Επιπλέον, σε πολλές περιπτώσεις, κατά την διεγέρση φορέων από τον παλμό ενός λέιζερ, η διαδικασία εφησυχασμού στην θεμελιώδη κατάσταση είναι πολύ πιο γρήγορη από την διαδικασία επανασύνδεσης. Για παράδειγμα σε κβαντικά σύρματα σχήματος V [126] έχει αποδειχθεί ότι η διαδικασία επανασύνδεσης είναι της τάξης των 300 ps ενώ η διαδικασία εφησυχασμού είναι της τάξης των 50 ps. Κατά συνέπεια, σε πολλές περιπτώσεις με τα φάσματα PL δεν μπορούμε να αποκαλύψουμε την δομή των ζωνών αλλά να μελετήσουμε τις θεμελιώδεις καταστάσεις των δομών που δίνουν τα φάσματα.

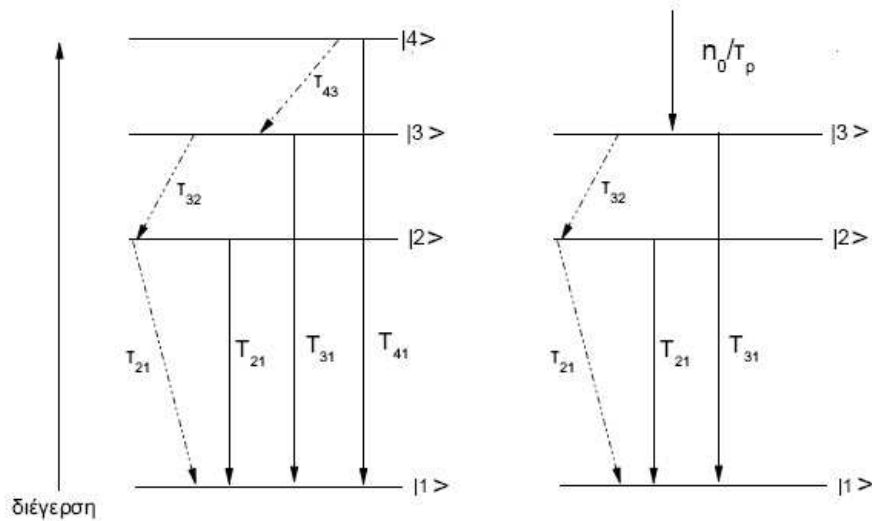
Για να φανεί καλύτερα η διάκριση μεταξύ απορρόφησης και φωτοφωταύγειας, παρουσιάζουμε στο σχήμα 6.1 ένα σύστημα τεσσάρων καταστάσεων. Οι φορείς διεγείρονται στην κατάσταση $|4\rangle$. Θα μελετήσουμε τα σήματα εκπομπής μόνο από τις στάθμες $|3\rangle$ και $|2\rangle$, δηλαδή στις ενέργειες $E_3 - E_1$ και $E_2 - E_1$, αντίστοιχα. Με T_{i1} σημειώνεται ο χρόνος της ακτινοβολούσας επανασύνδεσης $|i\rangle \rightarrow |1\rangle$, ενώ με τ_{ij} ο χρόνος της μη ακτινοβολούσας μετάβασης $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$. Θεωρώντας ότι η στάθμη $|3\rangle$ εφοικίζεται χωρίς ταυτόχρονη εκπομπή ακτινοβολίας από την $|4\rangle$, αρκεί να γράψουμε:

$$\begin{aligned} \frac{dn_3}{dt} &= \frac{n_0}{\tau_p} - \frac{n_3}{\tau_{32}} - \frac{n_3}{T_{31}} \\ \frac{dn_2}{dt} &= \frac{n_3}{\tau_{32}} - \frac{n_2}{\tau_{21}} - \frac{n_2}{T_{21}} \end{aligned} \quad (6.1)$$

Στην στάσιμη κατάσταση, $\frac{dn_i}{dt} = 0$ οι παραπάνω εξισώσεις γίνονται:

$$\begin{aligned} n_3 &= \frac{n_0}{\tau_p} \frac{T_{31}}{1 + T_{31}/\tau_{32}} \\ n_2 &= \frac{n_0}{\tau_p} \frac{T_{31}}{1 + T_{31}/\tau_{32}} \frac{T_{21}}{\tau_{32}} \frac{1}{1 + T_{21}/\tau_{21}} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Τα σήματα PL στις ενέργειες $E_3 - E_1 = \hbar\omega_{31}$ και $E_2 - E_1 = \hbar\omega_{21}$ είναι ανάλογα των πληθυσμών n_3 και n_2 αντίστοιχα. Αν ο χρόνος της μη ακτινοβολούσας μετάβασης



Σχήμα 6.1: Το σύστημα των τεσσάρων καταστάσεων. Οι φορείς διεγείρονται αρχικά στην κατάσταση $|4\rangle$ και μεταβαίνουν στις κατώτερες στάθμες είτε με ταυτόχρονη εκπομπή φωτονίων (σημειώνονται με τις ενιαίες γραμμές) είτε χωρίς ακτινοβολία (εστιασμένες). Με T_{i1} σημειώνεται ο χρόνος της ακτινοβολούσας μετάβασης $|i\rangle \rightarrow |1\rangle$, ενώ με τ_{ij} της μη ακτινοβολούσας μετάβασης $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$.

από την στάθμη $|3\rangle$ στην $|2\rangle$ είναι πολύ μικρότερος από τον χρόνο της ακτινοβολούσας επανασύνδεσης από την $|3\rangle$, δηλ. αν $\tau_{32} \ll T_{31}$, τότε είναι φανερό από τις σχέσεις (6.2) ότι $n_3 \ll 1$. Αυτό σημαίνει ότι όλος σχεδόν ο πληθυσμός του επιπέδου $|3\rangle$ χρησιμοποιείται για τον εποικισμό του επιπέδου $|2\rangle$ κι ελάχιστο ποσοστό συμμετέχει στην διαδικασία της εκπομπής.

Κατά συνέπεια, ακόμα κι αν η πυκνότητα καταστάσεων της στάθμης $|3\rangle$ είναι μεγαλύτερη από αυτήν της στάθμης $|2\rangle$ (ή έχει μεγαλύτερο βαθμό εκφυλισμού), το σήμα φωτοφωταύγειας στην ενέργεια $\hbar\omega_{31}$ θα είναι πολύ πιο ασθενές από το σήμα στην ενέργεια $\hbar\omega_{21}$. Το αντίθετο βέβαια θα συνέβαινε στην περίπτωση της απορρόφησης, όπου αν ο βαθμός εκφυλισμού της $|3\rangle$ ήταν μεγαλύτερος αυτού της κατάστασης $|2\rangle$, και η ισχύς ταλαντωτή ήταν η ίδια, τότε προφανώς το σήμα απορρόφησης στην ενέργεια $\hbar\omega_{31}$ θα ήταν πολύ πιο ισχυρό από το σήμα στην ενέργεια $\hbar\omega_{21}$.

Τα πειράματα PL αποτελούν βασικά εργαλεία για την μελέτη των διακριτών καταστάσεων στις κβαντικές τελείες. Η κεντρική ιδέα ενός πειράματος PL είναι η εξής: Δέσμη λέιζερ κατάλληλου μήκους κύματος διεγείρει ηλεκτρόνια από την ζώνη σθένους στην ζώνη αγωγιμότητας και δημιουργεί ζεύγη ηλεκτρονίων-οπών.

Ανάλογα με την ισχύ διέγερσης, αυτά τα ζεύγη καταλαμβάνουν τις διακριτές καταστάσεις της τελείας, ή τις καταστάσεις του 2D συνεχούς, ή τις καταστάσεις του bulk συνεχούς για πολύ μεγάλες ενέργειες διέγερσης. Ένα μέρος των σωματιδίων που δημιουργούνται εφησυχάζουν χωρίς εκπομπή ακτινοβολίας στην θεμελιώδη κατάσταση ή στις κατώτερες διηγευμένες καταστάσεις της τελείας. Στην συνέχεια τα ζεύγη ηλεκτρονίων-οπών που είναι παγιδευμένα στις διακριτές καταστάσεις της τελείας επανασυνδέονται εκπέμποντας φωτόνια τα οποία και ανιχνεύονται.

Υπάρχουν δύο είδη πειραμάτων φωτοφωταύγειας: τα πειράματα PL και τα πειράματα φωτοφωταύγειας διέγερσης (photoluminescence excitation συντ PLE). Στα πρώτα καταγράφεται η ένταση της ακτινοβολίας I_{em} των εκπεμπόμενων φωτονίων συναρτήσει της ενέργειάς τους, για συγκεκριμένη ένταση I_{exc} της προσπίπτουσας (διεγείρουσας) ακτινοβολίας. Δεδομένου ότι ο αριθμός των εξιτονίων που δημιουργούνται είναι ευθέως ανάλογος της ισχύος διέγερσης (δηλ. $I_{exc} \propto dn/dt$), διακρίνονται δύο πιθανές περιπτώσεις:

(α) Για πολύ ασθενή διέγερση ο αριθμός των εξιτονίων που δημιουργούνται είναι τόσο μικρός, ώστε κάθε φορά ένα το πολύ εξιτόνιο παγιδεύεται σε μια κατάσταση της τελείας (δηλαδή κάθε εξιτόνιο επανασυνδέεται πριν την παγίδευση του επόμενου εξιτονίου). Όταν ο χρόνος εφησυχασμού είναι πολύ μικρότερος από τον χρόνο επανασύνδεσης (αυτό ισχύει στα στερεά και στα κβαντικά πηγάδια), σχεδόν όλα τα εξιτόνια εφησυχάζουν στην θεμελιώδη κατάσταση και εμφανίζεται μία μόνο κορυφή στο φάσμα PL. Ωστόσο, η εμφάνιση κορυφών σε υψηλότερες ενέργειες οφείλεται στην ύπαρξη μετασταθών εξιτονικών καταστάσεων για τις οποίες ο χρόνος εφησυχασμού είναι συγκρίσιμος με τον χρόνο ακτινοβολούσας επανασύνδεσης.

(β) Για μεγάλες ενέργειες διέγερσης παγιδεύονται N ηλεκτρόνια στην τελεία. Στην περίπτωση αυτή η επανασύνδεση από την (αρχική) θεμελιώδη κατάσταση των N εξιτονίων γίνεται είτε στην (τελική) θεμελιώδη είτε στις τελικές διηγευμένες καταστάσεις των $N-1$ εξιτονίων. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την ύπαρξη κορυφών στο φάσμα εκπομπής, σε υψηλότερες ενέργειες, οι θέσεις των οποίων εξαρτώνται από τις ενέργειες διέγερσης του συστήματος των $N-1$ εξιτονίων.

Στα πειράματα PLE καταγράφεται η ένταση της εκπομπής I_{em} από συγκεκριμένη κορυφή της PL (δηλαδή από συγκεκριμένη ενέργεια E_i), συναρτήσει της ενέργειας των φωτονίων διέγερσης $\hbar\omega_{exc}$. Τα φάσματα PLE εμφανίζουν κορυφές σε ενέργειες, που δείχνουν ότι η εκπομπή είναι ισχυρή για συγκεκριμένη ενέργεια φωτονίων. Αυτό συμβαίνει όταν μια διηγευμένη κατάσταση έχει διεγερθεί σε συντονισμό (δηλ. $E_i = \hbar\omega_{exc}$), προκαλώντας έτσι ισχυρή αποδιέγερση. Κατά συνέπεια, η μελέτη του φάσματος PLE βοηθά στην ταυτοποίηση των διηγευμένων καταστάσεων.

6.2 Το φυσικό σύστημα

Όπως αναφέρθηκε στη εισαγωγή του κεφαλαίου, η συνολική Χαμιλτονιανή που περιγράφει το φυσικό μας σύστημα στην περίπτωση της αυθόρμητης εκπομπής έχει την μορφή:

$$H = H_{sp} + H_{cc} + H_{c\gamma} + H_{\gamma} \quad (6.3)$$

όπου ο όρος H_{sp} εκφράζει το σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και οπών που είναι εντοπισμένοι στην κβαντική τελεία παρουσία του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, ο όρος H_{cc} περιέχει την Coulomb αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών. Ο όρος $H_{c\gamma}$ εκφράζει την αλληλεπίδραση των φορέων με το πεδίο των εκπεμπομένων φωτονίων (background photon field [183]) και ο όρος H_{γ} εκφράζει το σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων και δίνεται από την σχέση:

$$H_{\gamma} = \sum_q \hbar\omega_q \alpha_q^\dagger(t) \alpha_q(t) \quad (6.4)$$

Ορίζουμε τους κάτωθι τελεστές:

$$\begin{aligned} \hat{n}_{\mu\mu'} &= c_{\mu}^\dagger c_{\mu'} \\ \hat{n}_{\nu\nu'} &= d_{\nu}^\dagger d_{\nu'} \end{aligned} \quad (6.5)$$

Οι μέσες τιμές των διαγωνίων όρων ($\mu = \mu'$ και $\nu = \nu'$) των τελεστών αυτών εκφράζουν τις συναρτήσεις κατανομής των ηλεκτρονίων και των οπών, ενώ οι μη διαγώνιοι όροι ($\mu \neq \mu'$ και $\nu \neq \nu'$) εκφράζουν τις intraband μεταβάσεις. Επίσης ορίζουμε τον τελεστή:

$$\rho_{\mu\nu}(t) = d_{\nu}(t) c_{\mu}(t) \quad (6.6)$$

Η μέση τιμή του παραπάνω τελεστή εκφράζει την οπτική πόλωση. Στο Παράρτημα IB' έχει υπολογιστεί η χρονική μεταβολή της οπτικής πόλωσης στο ημικλαστικό όριο:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_{\mu\nu}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'\nu'} (E_{\mu\mu'}^{e,renorm} \delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,renorm} \delta_{\mu\mu'}) p_{\mu'\nu'} \\ &- \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh} p_{\mu'\nu'} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\ &- C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} M_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \end{aligned} \quad (6.7)$$

Θεωρώντας το σύστημα αμέσως μετά την διέγερση ($t = t_0$), όπου υπάρχουν μόνο οι φορείς (λείπει ο όρος H_γ) καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_{\mu\nu}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'\nu'} (E_{\mu\mu'}^{e,renorm} \delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,renorm} \delta_{\mu\mu'}) p_{\mu'\nu'} \\ &- \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu'\mu'}^{eh} p_{\mu'\nu'} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \end{aligned} \quad (6.8)$$

Ορίζοντας, όπως και στο κεφάλαιο 4 την οπτική πόλωση στην εξιτονική εικόνα ως

$$p^\lambda(t) = \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} p_{\ell}(t) \quad (6.9)$$

προκύπτει η εξίσωση της μικροσκοπικής οπτικής πόλωσης στην εξιτονική εικόνα:

$$\frac{\partial p^\lambda}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \Sigma^\lambda p^\lambda(t) \quad (6.10)$$

Παίρνοντας τον μετασχηματισμό Fourier της εξίσωσης 6.10 προκύπτει:

$$(\Sigma^\lambda - \hbar\omega) p^\lambda(\omega) = 0 \quad (6.11)$$

Στην γειτονιά των εξιτονικών συντονισμών είναι φανερό ότι: $p^\lambda(\omega) = 0$ και κατά συνέπεια $p_{\ell}(t > t_0) = 0$.

6.3 Αλληλεπίδραση των φορέων με το πεδίο των φωτονίων

Η Hamiltonian που περιγράφει το σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φορέων παρουσία του εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου είναι:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q^* \mathbf{A}_{total})^2 + q^* \phi_{total} + V_c(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q^* \mathbf{A}_{total})(\mathbf{p} - q^* \mathbf{A}_{total}) + q^* \phi_{total} + V_c(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2m} [p^2 - q^* \mathbf{p} \mathbf{A}_{total} - q^* \mathbf{A}_{total} \mathbf{p} + q^2 A_{total}^2] + q^* \phi_{total} + V_c(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (6.12)$$

όπου

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{total} &= \mathbf{A} + \mathbf{A}_\gamma \\ \phi_{total} &= \phi + \phi_\gamma \end{aligned} \quad (6.13)$$

το ολικό βαθμωτό και διανυσματικό δυναμικό του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που συνίσταται από το εξωτερικό πεδίο \mathbf{A} που δρα στους φωτοδιηγεμένους φορείς και το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο \mathbf{A}_γ των φωτονίων που παράγονται από την αποδιέγερση του συστήματος. Όπως αναφέρθηκε στην μελέτη της μη-συνεκτικής φωτοφωταύγειας έχουμε μηδενίσει το συνεκτικό πεδίο του λείζερ. Αντικαθιστώντας το ολικό πεδίο στην έκφραση της Χαμιλτονιανής και αμελώντας δεύτερης τάξεως όρους ως προς το πεδίο των φωτονίων που δημιουργούνται από την αποδιέγερση του συστήματος προκύπτει:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} [(\mathbf{p} - q^* \mathbf{A})^2 + q^* \phi + V_c(\mathbf{r})] + \frac{1}{2m} (-q^* \mathbf{p} \mathbf{A}_\gamma - q^* \mathbf{A}_\gamma \mathbf{p} + q^* \phi_\gamma) \\ &= H_{sp} + H_{c\gamma} \end{aligned} \quad (6.14)$$

όπου

$$H_{sp} = \frac{1}{2m} [(\mathbf{p} - q^* \mathbf{A})^2 + q^* \phi + V_c(\mathbf{r})] \quad (6.15)$$

η Χαμιλτονιανή των μη αλληλεπιδρώντων φορέων παρουσία του εξωτερικού πεδίου \mathbf{A} . Όπως είδαμε στο Παράρτημα Β', η Χαμιλτονιανή αυτή για τις κβαντικές τελείες και έχοντας επιλέξει ορθοκανονικές μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις δίνεται από:

$$H_{sp} = \sum_{\mu} E^{\mu e} c_{\mu}^{\dagger}(t) c_{\mu}(t) + \sum_{\nu} E^{\nu h} d_{\nu}^{\dagger}(t) d_{\nu}(t) \quad (6.16)$$

όπου $E^{\mu e}$ και $E^{\nu h}$ οι μονοσωματιδιακές ενέργειες ηλεκτρονίων και οπών. Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης του διπόλου ηλεκτρονίου και οπής με το πεδίο των φωτονίων γράφεται:

$$H_{c\gamma} = -\frac{q^*}{2m} (\mathbf{p} \mathbf{A}_\gamma + \mathbf{A}_\gamma \mathbf{p}) + q^* \phi_\gamma(\mathbf{r}) \quad (6.17)$$

Επιλέγοντας βαθμίδα ακτινοβολίας ("radiation gauge") δηλαδή

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{A}_\gamma &= 0 \\ \phi_\gamma &= 0 \end{aligned} \quad (6.18)$$

λόγω της $[\mathbf{A}_\gamma, \mathbf{p}] = \mathbf{A}_\gamma \mathbf{p} - \mathbf{p} \mathbf{A}_\gamma = i\hbar \nabla \mathbf{A}_\gamma = 0$, η Χαμιλτονιανή που εκφράζει την αλληλεπίδραση με το πεδίο φωτός γράφεται τελικά:

$$H_{c\gamma} = -\frac{q^*}{m} (\mathbf{A}_\gamma \mathbf{p}) \quad (6.19)$$

Το διανυσματικό δυναμικό του πεδίου φωτός εκφράζεται συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής των φωτονίων στους διάφορους τρόπους [184]:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_\gamma(\mathbf{r}, t) &= \sum_{q,\lambda} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{v}\right)^{1/2} \omega_q^{-1/2} \xi_a(q, \lambda) \exp(iq\mathbf{r}) (\alpha_{q\lambda}^\dagger(t) + \alpha_{q\lambda}(t)) \\ &= \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q,\lambda} \omega_q^{-1/2} \xi_a(q, \lambda) \exp(iq\mathbf{r}) (\alpha_{q\lambda}^\dagger(t) + \alpha_{q\lambda}(t))\end{aligned}\quad (6.20)$$

Υπάρχουν δύο εγκάρσιοι τρόποι ταλάντωσης, ένας για κάθε εγκάρσια διεύθυνση, και ο δείκτης λ αθροίζεται σε αυτούς τους δύο τρόπους. Το μοναδιαίο διάνυσμα πόλωσης $\xi_a(q, \lambda)$ δίνει την διεύθυνση του κάθε τρόπου. Θεωρώντας έναν τρόπο ("one mode photon field") και διπολική προσέγγιση, το διανυσματικό δυναμικό γράφεται:

$$\mathbf{A}_\gamma(\mathbf{r}, t) = \sum_q \mathbf{A}_{\gamma 0} \omega_q^{-1/2} \xi_a(q) (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \quad (6.21)$$

Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο των φωτονίων γράφεται:

$$H_{c\gamma} = -\frac{q^*}{m} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \mathbf{A}_\gamma \mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (6.22)$$

Οι τελεστές πεδίου εκφράζονται συναρτήσει των περιβαλλουσών συναρτήσεων ηλεκτρονίων και σπών που είναι εντοπισμένοι στην κβαντική τελεία ως:

$$\begin{aligned}\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_\mu c_\mu^\dagger(t) \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) + \sum_\nu d_\nu(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \\ \Psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_\mu c_\mu(t) \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) + \sum_\nu d_\nu^\dagger(t) \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (6.23)$$

Εισάγοντας την Εξ. (6.23) στην Εξ.(6.22) και αμελώντας τα στοιχεία που αντιστοιχούν σε μεταβάσεις στην ίδια ζώνη, η Χαμιλτονιανή $H_{c\gamma}$ γράφεται:

$$\begin{aligned}H_{c\gamma} &= -\frac{q^*}{m} \int \sum_{\mu\nu} \Phi^{\mu e*} c_\mu^\dagger(t) \mathbf{A} \mathbf{p} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) d_\nu^\dagger(t) \\ &\quad - \frac{q^*}{m} \int \sum_{\mu\nu} \Phi^{\nu h} d_\nu(t) \mathbf{A} \mathbf{p} \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) c_\mu(t)\end{aligned}\quad (6.24)$$

Στην παραπάνω σχέση αντικαθιστούμε το διανυσματικό δυναμικό του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου του φωτός όπως δίνεται από την σχέση (6.21) και προκύπτει:

$$H_{c\gamma} = -\frac{q^* \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2}}{m} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \int \Phi^{\mu e*} c_\mu^\dagger(t) \mathbf{p} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) d_\nu^\dagger(t)$$

$$- \frac{q^* \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2}}{m} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \int \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) d_\nu(t) \mathbf{p} \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) c_\mu(t) \quad (6.25)$$

Αλλά ισχύει η σχέση:

$$\frac{1}{m} \langle \Phi_1 | \mathbf{p} | \Phi_2 \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Phi_1 | \mathbf{r} | \Phi_2 \rangle \quad (6.26)$$

η οποία συνδέει τα στοιχεία πίνακα της ορμής με τα διπολικά στοιχεία πίνακα [128]. Εφαρμόζοντας την παραπάνω σχέση στα στοιχεία πίνακα της ορμής που εμφανίζονται στην σχέση (6.25), προκύπτει:

$$\begin{aligned} H_{c\gamma} = & - q^* \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \int \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi^{\nu h^*}(\mathbf{r}) \frac{d}{dt} (c_\mu^\dagger(t) d_\nu^\dagger(t)) \\ & - q^* \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \int \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}) \frac{d}{dt} (d_\nu(t) c_\mu(t)) \quad (6.27) \end{aligned}$$

Λαμβάνοντας υπόψη τον ορισμό των διπολικών στοιχείων πίνακα στις κβαντικές τελείες:

$$\mathbf{M}_{\mu\nu}^0(\mathbf{r}) = q^* \int \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi^{\nu h^*}(\mathbf{r}) \quad (6.28)$$

η παραπάνω σχέση γράφεται:

$$\begin{aligned} H_{c\gamma} = & - \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \frac{d}{dt} (c_\mu^\dagger(t) d_\nu^\dagger(t)) \\ & - \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \frac{d}{dt} (d_\nu(t) c_\mu(t)) \quad (6.29) \end{aligned}$$

Για τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής του ηλεκτρονίου και της σπής ισχύουν οι σχέσεις [185]:

$$\begin{aligned} c_\mu^\dagger(t) &= \tilde{c}_\mu \exp(iE^{\mu e} t / \hbar) \\ c_\mu(t) &= \tilde{c}_\mu \exp(-iE^{\mu e} t / \hbar) \\ d_\nu^\dagger(t) &= \tilde{d}_\nu \exp(iE^{\nu h} t / \hbar) \\ d_\nu(t) &= \tilde{d}_\nu \exp(-iE^{\nu h} t / \hbar) \quad (6.30) \end{aligned}$$

Εισάγοντας τις χρονικές μεταβολές των παραπάνω τελεστών στην σχέση (6.29) προκύπτει :

$$H_{c\gamma} = - \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t))$$

$$\begin{aligned}
 & [\mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \frac{d}{dt} (\tilde{c}_\mu \tilde{d}_\nu \exp i(E^{\mu e} + E^{\nu e})t/\hbar) + \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \frac{d}{dt} (\tilde{c}_\mu \tilde{d}_\nu \exp -i(E^{\mu e} + E^{\nu h})t/\hbar)] \\
 = & -\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \\
 & [\mathbf{M}_{\mu\nu}^0 (c_\mu^\dagger(t) d_\nu^\dagger(t)) i(E^{\mu e} + E^{\nu h})/\hbar - \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} (c_\mu(t) d_\nu(t)) i(E^{\mu e} + E^{\nu h})/\hbar]
 \end{aligned} \tag{6.31}$$

Στον συντονισμό $\hbar\omega_q = E^{\mu e} + E^{\nu h}$ και η παραπάνω σχέση γράφεται :

$$\begin{aligned}
 H_{c\gamma} &= -\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{-1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \\
 & [\mathbf{M}_{\mu\nu}^0 (c_\mu^\dagger(t) d_\nu^\dagger(t)) i\omega_q - \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} (c_\mu(t) d_\nu(t)) i\omega_q] \\
 = & -\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} (\alpha_q^\dagger(t) + \alpha_q(t)) \\
 & (\mathbf{M}_{\mu\nu}^0 c_\mu^\dagger(t) d_\nu^\dagger(t) - \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} c_\mu(t) d_\nu(t))
 \end{aligned} \tag{6.32}$$

Έχοντας ορίσει $\wp_{\mu\nu}^\dagger = d_\nu^\dagger(t) c_\mu^\dagger(t)$ η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης με το πεδίο του φωτός γράφεται τελικά:

$$\begin{aligned}
 H_{c\gamma} &= \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} [\mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t) \wp_{\mu\nu} \\
 & - \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t) \wp_{\mu\nu}^\dagger - \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger(t) \wp_{\mu\nu}^\dagger + \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q(t) \wp_{\mu\nu}]
 \end{aligned} \tag{6.33}$$

Η παραπάνω Χαμιλτονιανή έχει την συνήθη μορφή αλληλεπίδρασης δίπολου- ηλεκτρομαγνητικού πεδίου [186–188]. Οι όροι $\alpha_q^\dagger(t) \wp_{eh}^\dagger$ και $\alpha_q(t) \wp_{eh}$ που εκφράζουν την δημιουργία ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής με ταυτόχρονη εκπομπή φωτονίου και την καταστροφή ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής με ταυτόχρονη απορρόφηση φωτονίου αντίστοιχα, οδηγούν σε πολύ ασθενείς μεταβάσεις [183], και δεν τους λαμβάνουμε υπόψη.

6.4 Η μη συνεκτική φωτοφωταύγεια

Το φάσμα φωτοφωταύγειας δίνεται από την ροή των εκπεμπόμενων φωτονίων [25, 189]:

$$I_{em}(\mathbf{q}) \propto \frac{\partial}{\partial t} \langle a_q^\dagger a_q \rangle \tag{6.34}$$

Στην παρούσα διατριβή μελετάμε την μη συνεκτική φωτοφωταύγεια (incoherent photoluminescence) κατά την οποία, οι φορείς διεγείρονται όχι σε συντονισμό με

τις δέσμιες εξιτονικές καταστάσεις, και πολύ πάνω από το χάσμα. Στην περίπτωση αυτή θεωρούμε ότι παύοντας την επίδραση του διεγείροντος φωτός (λείζερ), μόνο οι φορείς είναι παρόντες στο σύστημα και η οπτική πόλωση αμέσως μετά την διέγερση με τον παλμό μηδενίζεται λόγω σκέδασης των φορέων είτε μεταξύ τους, είτε με τα φωνόνια, στην διάρκεια του χαρακτηριστικού χρόνου (dephasing time [25, 190]). Οι αρχικές συνθήκες γράφονται:

$$\begin{aligned} p_{\nu\mu} \equiv \langle \wp_{\mu\nu}(t = t_0) \rangle &= 0 \\ \langle a_q(t = t_0) \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (6.35)$$

Υπό αυτές τις συνθήκες, όπως είδαμε και στην Ενότητα 6.2, αποδεικνύεται για $t > t_0$,

$$p_{\nu\mu} \equiv \langle \wp_{\mu\nu}(t) \rangle = 0 \quad (6.36)$$

Ομοίως, ισχύουν οι σχέσεις [25]:

$$\begin{aligned} \langle a_q(t) \rangle &= 0 \\ \langle c_\mu^\dagger c_\mu a_q(t) \rangle &= 0 \\ \langle d_\nu^\dagger d_\nu a_q(t) \rangle &= 0 \\ \langle \wp_{\mu\nu} a_q(t) \rangle &= 0 \\ \langle a_{q'}(t) a_q(t) \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (6.37)$$

Οι μόνες μη μηδενικές ποσότητες είναι οι: $f^{\mu e}$, $f^{\nu h}$, $\langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle$ και $\langle \alpha_q^\dagger(t) \wp_{\mu\nu}(t) \rangle$.

6.5 Οι εξισώσεις φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες

Στο Παράρτημα ΙΓ', έχει υπολογιστεί αναλυτικά η χρονική μεταβολή που σχετίζεται με τον όρο $\langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle$, ο οποίος εκφράζει τους συσχετισμούς του πεδίου, συναρτήσει όλων των όρων της Χαμιλτονιανής (6.3). Μαζεύοντας όλους τους όρους καταλήξαμε στην πρώτη εξίσωση φωτοφωταύγειας:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle &= \hbar(\omega_{q'} - \omega_q) \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu\nu} \rangle \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \wp_{\mu\nu}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (6.38)$$

Στο Παράρτημα ΙΔ', έχει υπολογιστεί η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle$ ο οποίος εκφράζει την αλληλεπίδραση πεδίου φωτός-φορέων, συναρτήσει όλων των όρων της Χαμιλτονιανής (6.3). Μαζεύοντας όλους τους όρους καταλήξαμε στην **δεύτερη** εξίσωση φωτοφωταύγειας:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle &= (E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle \\
 &- \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu'\nu'} \rangle \\
 &- \sum_{\mu_1\mu'} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu'}^{ee} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu'\nu}(t) \rangle f^{\mu_1 e} \\
 &- \sum_{\nu_1\nu'} V_{\nu_1\nu\nu_1\nu'}^{hh} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu}(t) \rangle f^{\nu_1 h} \\
 &- \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\
 &+ \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} \tag{6.39}
 \end{aligned}$$

Έχοντας όμως ορίσει στην σχέση (4.36) τις 'έπακανονικοποιημένες' μονοσωματιδιακές ενέργειες προκύπτει για τα ηλεκτρόνια (ομοίως για τις οπές):

$$\begin{aligned}
 E_{\mu\mu'}^{e,renorm} &= E_\mu \delta_{\mu\mu'} - \sum_{\mu_1} V_{\mu\mu_1\mu'\mu_1}^{ee} f^{\mu_1 e} \Rightarrow \\
 \sum_{\mu'\nu'} E_{\mu\mu'}^{e,renorm} \delta_{\nu\nu'} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu'\nu'} \rangle &= E^{\mu e} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle \\
 &- \sum_{\mu_1\mu'} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu'}^{ee} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu'\nu}(t) \rangle f^{\mu_1 e} \tag{6.40}
 \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ.(6.39) τον όρο (6.40) για τα ηλεκτρόνια, καθώς και τον αντίστοιχο όρο για τις οπές, η σχέση (6.39) γράφεται:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle &= \sum_{\mu'\nu'} (E_{\mu\mu'}^{e,renorm} \delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,renorm} \delta_{\mu\mu'}) \\
 &- V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu'\nu'} \rangle \\
 &- \hbar\omega_q \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle \\
 &- \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\
 &+ \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} \tag{6.41}
 \end{aligned}$$

Ορίζουμε ως ισχύ της αυθόρμητης εκπομπής [25] την ποσότητα:

$$\Omega_{SE}(\mathbf{q}) = i\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2}\omega_q^{1/2}\mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \quad (6.42)$$

και ως εξαναγκασμένη εκπομπή (ή απορρόφηση, ανάλογα με τις συνθήκες διέγερσης) την ποσότητα:

$$\begin{aligned} \Omega_{ST}(\mathbf{q}) &= \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2}i\sum_{q'}\omega_{q'}^{1/2}\mathbf{M}_{\mu\nu}^0\langle\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}\rangle \\ &+ V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh}\langle\alpha_q^\dagger\varrho_{\mu'\nu'}\rangle \end{aligned} \quad (6.43)$$

Με βάση τους παραπάνω ορισμούς η δεύτερη εξίσωση φωτοφωταύγειας γράφεται τελικά:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t)\rangle &= \sum_{\mu'\nu'}(E_{\mu\mu'}^{e,renorm}\delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,renorm}\delta_{\mu\mu'} \\ &- \hbar\omega_q\delta_{\nu\nu'}\delta_{\mu\mu'})\langle\alpha_q^\dagger\varrho_{\mu'\nu'}\rangle \\ &- (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h})\Omega_{ST}(\mathbf{q}) + f^{\mu e}f^{\nu h}\Omega_{SE}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (6.44)$$

Ο πρώτος όρος στην Εξ.(6.43), εκφράζει την συνεισφορά εξαιτίας των συσχετισμών του πεδίου ($\langle\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}\rangle$), ενώ ο δεύτερος όρος αποτελεί την συνεισφορά της Coulomb αλληλεπίδρασης. Η ποσότητα $\langle\alpha_q^\dagger\varrho_{\mu'\nu'}\rangle$ δίνει το μέτρο της διεργασίας κατά την οποία επανασυνδέεται ένα ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής με ταυτόχρονη εκπομπή ενός φωτονίου ίσης ορμής. Από την στιγμή που δημιουργηθούν διηγευμένοι φορείς στην τελεία, όπως φαίνεται από την δεύτερη εξίσωση φωτοφωταύγειας, ο όρος αυτός αρχίζει και αυξάνει διότι ακόμα και αν η συνεισφορά του πεδίου τεθεί αρχικά ίση με μηδέν, ο όρος Ω_{SE} είναι μη μηδενικός. Από την πρώτη εξίσωση φωτοφωταύγειας προκύπτει ότι τότε αρχίζουν και αυξάνονται οι συσχετισμοί του πεδίου ($\langle\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}\rangle$) και κατά συνέπεια και ο όρος της εξαναγκασμένης συνεισφοράς (Ω_{ST}), ο οποίος μεταβάλλει με την σειρά του το φάσμα. Τελικώς η φωτοφωταύγεια που παρατηρείται είναι αποτέλεσμα της δυναμικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των όρων $\langle\alpha_q^\dagger\varrho_{\mu'\nu'}\rangle$ και ($\langle\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}\rangle$) που με την σειρά τους επηρεάζονται από τους όρους της αυθόρμητης εκπομπής και εξαναγκασμένης συνεισφοράς.

Στα Παραρτήματα Ε' και ΙΕ' έχουν υπολογιστεί οι χρονικές μεταβολές της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων συναρτήσει του όρου των μη αλληλεπιδρώντων φορέων, των όρων της $e - e$, $e - h$, $h - h$ Coulomb αλληλεπίδρασης. Εξαιτίας των αρχικών συνθηκών, δηλ. μηδενική αρχική οπτική πόλωση και μηδενικό συνεκτικό πεδίο (πεδίο του laser), οι παραπάνω χρονικές μεταβολές ισούνται με μηδέν.

Έτσι η **τρίτη** εξίσωση φωτοφωταύγειας γράφεται:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{df^{\mu e}}{dt} &= i\hbar \frac{df^{\mu e}}{dt} \Big|_{c\gamma} \\ &= 2i\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\nu} \omega_q^{1/2} \Im[-i\mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle] \end{aligned} \quad (6.45)$$

Η φύση της φωτοφωταύγειας φαίνεται καθαρά από την σύγκριση της μεταβολής του συνολικού αριθμού των ηλεκτρονίων (ή των οπών) με την μεταβολή του συνολικού αριθμού των φωτονίων. Από τις εξισώσεις ΙΕ'.4 και 6.50 προκύπτει:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_q \langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_q(t) \rangle = - \frac{\partial}{\partial t} \sum_\mu f^{\mu e} \quad (6.46)$$

Η παραπάνω εξίσωση μας λέει ότι κάθε φορά που επανασυνδέεται ένα ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής, δημιουργείται ένα φωτόνιο.

Προκειμένου να υπολογιστεί το φάσμα εκπομπής, θα πρέπει να λύσουμε και τις τρεις εξισώσεις φωτοφωταύγειας:

- Η πρώτη εξίσωση γράφεται:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_{q'}^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle &= \hbar(\omega_{q'} - \omega_q) \langle \alpha_{q'}^\dagger \alpha_{q'} \rangle \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \varrho_{\mu\nu}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (6.47)$$

- Η δεύτερη εξίσωση γράφεται:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle &= (E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q) \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle \\ &- \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu'\mu'}^{eh} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu'\nu'} \rangle \\ &- \sum_{\mu_1\mu'} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu'}^{ee} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu'\nu} \rangle f^{\mu_1 e} \\ &- \sum_{\nu_1\nu'} V_{\nu_1\nu\nu_1\nu'}^{hh} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu'} \rangle f^{\nu_1 h} \\ &- \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'}^\dagger \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} \end{aligned} \quad (6.48)$$

- Η τρίτη εξίσωση γράφεται:

$$i\hbar \frac{df^{\mu e}}{dt} = 2i\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\nu} \omega_q^{1/2} \mathfrak{S}[-i\mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle] \quad (6.49)$$

Ωστόσο, στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, οι συναρτήσεις κατανομής μπορούν να θεωρηθούν σταθερές. Αυτή η προσέγγιση ισχύει στην περίπτωση όπου ο χρόνος σκέδασης των φορέων εντός της ίδιας ζώνης είναι πολύ μικρότερος από τον χρόνο δημιουργίας και επανασύνδεσης των φορέων. Τότε υπάρχει ένα “παράθυρο” όπου οι φορείς λόγω σκέδασης φορέα-φορέα ή φορέα-φωνονίου αποκτούν θερμοδυναμική ισορροπία με σταθερές συναρτήσεις κατανομής. Μια τέτοια κατάσταση παρατηρείται πειραματικά όταν μετράμε την φωτοφωταύγεια στη γειτονιά του χάσματος, μετά από διέγερση του συστήματος στην περιοχή της απορρόφησης [25].

6.6 Αναλυτική λύση των εξισώσεων φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή

Για πολύ ασθενή διέγερση, η επανακανονικοποίηση στις μονοσωματιδιακές ενέργειες είναι αμελητέα. Οι εξισώσεις φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή ($1 - f^{\mu e} - f^{\nu h} \approx 1$) παίρνουν την μορφή [191]:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle &= \hbar(\omega_{q'} - \omega_q) \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \varrho_{\mu\nu}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (6.50)$$

και

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle &= \sum_{\mu'\nu'} (E^{\mu e} \delta_{\nu\nu'} + E^{\nu h} \delta_{\mu\mu'} - \hbar\omega_q \delta_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu'}) \\ &\times \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu'\nu'} \rangle \\ &- \Omega_{ST}(\mathbf{q}) + f^{\mu e} f^{\nu h} \Omega_{SE}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (6.51)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις λύνονται αριθμητικά. Οι Kira et al. [25] έλυσαν αριθμητικά τις εξισώσεις φωτοφωταύγειας για κβαντικό πηγάδι, μηδενίζοντας τον όρο των συσχετισμών

του πεδίου από την δεύτερη εξίσωση φωτοφωταύγειας, και διαπίστωσαν ότι η προσέγγιση επιφέρει ελάχιστη αλλαγή από την λύση λαμβάνοντας υπόψη τον πλήρη όρο. Ομοίως, αναζητούμε μια προσεγγιστική λύση των εξισώσεων φωτοφωταύγειας στην στάσιμη κατάσταση, μηδενίζοντας τον όρο $\langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle$ από την σχέση (6.43). Τότε, η δεύτερη εξίσωση PL γράφεται:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle = \sum_{\mu'\nu'} [(E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q) \delta_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu'} - V_{\mu\nu'\mu'}^{eh}] \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu'\nu'} \rangle + f^{\mu e} f^{\nu h} i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \quad (6.52)$$

Χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό $\ell \equiv \mu\nu$ η Εξ. (6.52) γράφεται:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_\ell(t) \rangle = \sum_{\ell'} (S_{\ell\ell'} - \hbar\omega_q \delta_{\ell\ell'}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\ell'} \rangle + f^{\mu e} f^{\nu h} i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_\ell^0 \quad (6.53)$$

όπου, όπως έχουμε δει στο κεφάλαιο 5 ο εξιτονικός πίνακας στην γραμμική περιοχή δίνεται από την Εξ.(5.7):

$$S_{\ell\ell'} \equiv T_{\ell'} \delta_{\ell\ell'} - V_{\ell\ell'}^{eh} \quad (6.54)$$

με

$$T_\ell \equiv E^{\mu e} + E^{\nu h} \quad (6.55)$$

το άθροισμα των μονοσωματιδιακών ενεργειών.

Θέτουμε:

$$R_{\ell\ell'} \equiv S_{\ell\ell'} - \hbar\omega \delta_{\ell\ell'} \quad (6.56)$$

και

$$Q_\ell = \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_\ell(t) \rangle \quad (6.57)$$

για τον όρο των συσχετισμών φορέων-φωτός στην **εικόνα των μη αλληλεπιδρώντων φορέων**. Λαμβάνοντας υπόψη την εξίσωση ιδιοτιμών του εξιτονικού πίνακα (Παράρτημα ε'), εύκολα προκύπτει ότι και η εξίσωση ιδιοτιμών τού πίνακα \hat{R} είναι:

$$\sum_{\ell} C_\ell^{\lambda*} R_{\ell\ell'} = (E^\lambda - \hbar\omega) C_{\ell'}^{\lambda*} \quad (6.58)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (6.53) τις σχέσεις (6.56), και (6.57), προκύπτει η παρακάτω εξίσωση για την στάσιμη κατάσταση:

$$\sum_{\ell'} R_{\ell\ell'} Q_{\ell'} = -i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} f^{\mu e} f^{\nu h} \mathbf{M}_\ell^0 \Leftrightarrow$$

$$\begin{aligned}
\sum_{\ell} \sum_{\ell'} R_{\ell\ell'} Q_{\ell'} C_{\ell}^{\lambda*} &= -i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} C_{\ell}^{\lambda*} \Leftrightarrow \\
\sum_{\ell'} [\sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} R_{\ell\ell'}] Q_{\ell'} &= -i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} C_{\ell}^{\lambda*} \Leftrightarrow \\
(E^{\lambda} - \hbar\omega) [\sum_{\ell'} C_{\ell'}^{\lambda*} Q_{\ell'}] &= -i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} C_{\ell}^{\lambda*} \quad (6.59)
\end{aligned}$$

Ορίζοντας τον όρο των συσχετισμών φορέων-φωτός στην **εξιτονική εικόνα** ως

$$Q^{\lambda} \equiv \sum_{\ell'} C_{\ell'}^{\lambda*} Q_{\ell'} \quad (6.60)$$

η Εξ. (6.59) γράφεται:

$$Q^{\lambda} = \frac{-i \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} C_{\ell}^{\lambda*}}{E^{\lambda} - \hbar\omega} \quad (6.61)$$

Η πρώτη εξίσωση φωτοφωταύγειας για $q = q'$ γράφεται:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^{\dagger} \alpha_q \rangle &= \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i\omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^{0*} Q_{\ell} + \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i\omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 Q_{\ell}^* \Leftrightarrow \\
\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^{\dagger} \alpha_q \rangle &= \frac{\mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2}}{\hbar} [\sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^{0*} Q_{\ell} + \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 Q_{\ell}^*] \Leftrightarrow \\
\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^{\dagger} \alpha_q \rangle &= \frac{\mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2}}{\hbar} [\sum_{\ell'} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^{0*} Q_{\ell'} \delta_{\ell\ell'} + \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell'}^0 Q_{\ell}^* \delta_{\ell\ell'}] \quad (6.62)
\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την σχέση ορθογωνιότητας της εξιτονικής: $\sum_{\lambda} C_{\ell}^{\lambda} C_{\ell'}^{\lambda*} = \delta_{\ell\ell'}$, η παραπάνω σχέση γράφεται:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^{\dagger} \alpha_q \rangle &= \frac{\mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} \omega_q^{1/2}}{\hbar} \sum_{\lambda} [\sum_{\ell'} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^{0*} C_{\ell}^{\lambda} Q_{\ell'} C_{\ell'}^{\lambda*} \\
&\quad + \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell'}^0 C_{\ell'}^{\lambda*} Q_{\ell}^* C_{\ell}^{\lambda}] \quad (6.63)
\end{aligned}$$

Λόγω των ορισμών των διπολικών στοιχείων πίνακα στην εξιτονική εικόνα $\mathbf{M}^{\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r})$ και του όρου των συσχετισμών φορέων-φωτός (Εξ. 6.60) στην εξιτονική εικόνα, η χρονική μεταβολή της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων

που προκύπτουν από την αποδιέγερση του συστήματος γράφεται:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger \alpha_q \rangle &= \frac{\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \omega_q^{1/2}}{\hbar} \sum_{\lambda} (Q^{\lambda} \mathbf{M}^{\lambda*} + Q^{\lambda*} \mathbf{M}^{\lambda}) \\
&= \frac{\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \omega_q^{1/2}}{\hbar} \sum_{\lambda} \left(\frac{\mathbf{M}^{\lambda*} (-i) \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \sum_{\ell} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} C_{\ell}^{\lambda*}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mathbf{M}^{\lambda} i \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell}^{0*} f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \right) \\
&= \frac{-i \mathbf{A}_{\gamma 0} \omega_q}{\hbar} \sum_{\lambda} \left[\frac{\mathbf{M}^{\lambda*} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\mathbf{M}^{\lambda} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell}^{0*} f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \right] \\
&= \frac{-i \mathbf{A}_{\gamma 0} \omega_q}{\hbar} \sum_{\lambda} 2i \Im \frac{\mathbf{M}^{\lambda*} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \\
&= \frac{2 \mathbf{A}_{\gamma 0} \omega_q}{\hbar} \Im \sum_{\lambda} \frac{\sum_{\ell'} C_{\ell'}^{\lambda} \mathbf{M}_{\ell'}^{0*} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}^0 f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \tag{6.64}
\end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τα ολικά διπολικά στοιχεία πίνακα από την Εξ. (6.28), καθώς και την εξιτονική κυματοσυνάρτηση από την Εξ.(5.8), το φάσμα εκπομπής δίνεται τελικά από την σχέση:

$$I_{em} \propto \Im \sum_{\lambda} \frac{\int d^3 \mathbf{r} \Psi^{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \sum_{\ell} \int d^3 \mathbf{r}' C_{\ell}^{\lambda*} \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}') f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega} \tag{6.65}$$

Αν συμπεριλάβουμε φαινομενολογικά (Παράρτημα Ιγ') τους μηχανισμούς που καταστρέφουν την συνεκτικότητα του συστήματος όπως είναι η σκέδαση από φωνόνια, η παραπάνω εξίσωση γράφεται:

$$I_{em} \propto \Im \sum_{\lambda} \frac{\int d^3 \mathbf{r} \Psi^{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \sum_{\ell} \int d^3 \mathbf{r}' C_{\ell}^{\lambda*} \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}') f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar \omega - i \gamma} \tag{6.66}$$

όπου η σταθερά γ είναι μια φαινομενολογική σταθερά που σχετίζεται με τον χρόνο ζωής της συνεκτικότητας του συστήματος (dephasing time) με την σχέση $\tau = \frac{\hbar}{\gamma}$. Η εξίσωση (6.66) αποτελεί τον συνδυαστικό κρίκο μεταξύ της δυναμικής των φορέων με το φάσμα των εκπεμπόμενων φωτονίων, όπως αυτό παρατηρείται στα πειράματα φωτοφωταύγειας.

Αν θεωρήσουμε ένα ελεύθερο αέριο ηλεκτρονίων και οπών, η δεύτερη εξίσωση φωτοφωταύγειας (Εξ. 6.39) γράφεται:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle &= (E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle \\ &- \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\ &+ \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} \end{aligned} \quad (6.67)$$

Στην στάσιμη κατάσταση, και μηδενίζοντας τον όρο των συσχετισμών του πεδίου προκύπτει:

$$\langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle = \frac{-\mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h}}{(E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q)} \quad (6.68)$$

Αντικαθιστώντας στην πρώτη εξίσωση φωτοφωταύγειας (Εξ.6.50), και συμπεριλαμβάνοντας και τον όρο των συγχρούσεων (dephasing), προκύπτει το φάσμα εκπομπής για το ελεύθερο αέριο ηλεκτρονίων-οπών:

$$I_{em}^{free} = \frac{2\mathbf{A}_{\gamma 0}\omega_q}{\hbar} \Im \sum_{\mu\nu} \frac{|\mathbf{M}_{\mu\nu}^0|^2 f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q - i\gamma} \quad (6.69)$$

Λαμβάνοντας υπόψη [192] ότι στο όριο $\epsilon \rightarrow 0$

$$\lim_{\epsilon} \Im \left(\frac{1}{k - i\epsilon} \right) = \pi \delta(k) \quad (6.70)$$

η Εξ.(6.69) για πολύ μικρή σταθερά dephasing γράφεται:

$$I_{em}^{free} = \frac{2\pi\mathbf{A}_{\gamma 0}\omega_q}{\hbar} \sum_{\mu\nu} |\mathbf{M}_{\mu\nu}^0|^2 f^{\mu e} f^{\nu h} \delta(E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar\omega_q) \quad (6.71)$$

που δεν είναι τίποτα άλλο παρά ο χρυσός κανόνας Fermi.

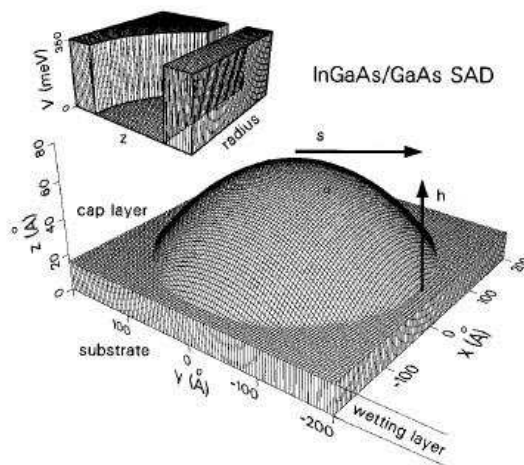
6.7 Σύνοψη

Στο παρόν κεφάλαιο έγινε μια πλήρης κβαντομηχανική ανάλυση που οδηγεί στην παραγωγή των εξισώσεων φωτοφωταύγειας για την περίπτωση κβαντικών τελειών, η αναλυτική επίλυση των οποίων μας δίνει την ένταση της φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή.

Κεφάλαιο 7

Σύγκριση με το πείραμα

Στο κεφάλαιο αυτό χρησιμοποιούμε τα θεωρητικά αποτελέσματά μας του προηγούμενου κεφαλαίου για την αναπαραγωγή του φάσματος φωτοφωταύγειας σε θερμοκρασία δωματίου, απλής κβαντικής τελείας $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ σχήματος φακού και σύγκριση με το πειραματικά παρατηρούμενο φάσμα [26].



Σχήμα 7.1: Σχηματική αναπαράσταση μιας $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ αυτοοργανούμενης κβαντικής τελείας ως τμήμα σφαίρας πάνω σε ένα στενό στρώμα διαβροχής. Inset: εγκάρσιο περιοριστικό δυναμικό [193].

Οι αυτοοργανούμενες κβαντικές τελείες σχήματος φακού (lens-shaped) αποτελούνται από ένα στενό κβαντικό πηγάδι που καλείται στρώμα διαβροχής (wetting layer ή

WL) πάχους t_W και μπορεί να θεωρηθεί ως τμήμα σφαίρας συνολικού ύψους l_0 και ακτίνα βάσης ρ_0 . Μια τέτοια τελεία απεικονίζεται στο σχήμα 7.1

Ο πυθμένας της ζώνης αγωγιμότητας του υλικού του WL και της τελείας (δηλ. του $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$) είναι κάτω από τον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας του περιβάλλοντος υλικού (GaAs). Έτσι οι φορείς που αρχικά είναι εντοπισμένοι στο στενό κβαντικό πηγάδι, εντοπίζονται και εγκάρσια στην περιοχή της τελείας εξαιτίας της αύξησης του πάχους του στρώματος σε αυτά τα σημεία. Οι τελείες έχουν ακτίνα βάσης της τάξης των nm με αποτέλεσμα το εγκάρσιο περιοριστικό δυναμικό να είναι σημαντικό.

Ο υπολογισμός του φάσματος εκπομπής περιλαμβάνει τέσσερα βασικά στάδια: Το πρώτο αφορά στον υπολογισμό των μονοσωματιδιακών καταστάσεων ηλεκτρονίων και οπών που υπόκεινται στο τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό της τελείας. Στο δεύτερο και τρίτο στάδιο ακολουθούμε διαδικασία ανάλογη με αυτήν που εφαρμόσαμε στον υπολογισμό του συντελεστή απορρόφησης στο κεφάλαιο 5, δηλαδή εισάγουμε την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ αυτών των καταστάσεων, κι επιλύουμε το εξιτονικό πρόβλημα υπολογίζοντας τις εξιτονικές καταστάσεις και ενέργειες.

Τέλος, υπολογίζουμε το φάσμα εκπομπής, όπως αυτό δίνεται στην Εξ. (6.66). Η εύρεση του φάσματος εκπομπής υποστηρίζεται από ένα υπολογιστικό αλγόριθμο που κατασκευάσαμε.

7.1 Αριθμητική εύρεση των μονοσωματιδιακών καταστάσεων

Η υπό μελέτη κβαντική τελεία έχει σχήμα φακού με ακτίνα στην βάση s και ύψος h . Όπως φαίνεται στο σχήμα 7.2 ένα κβαντικό πηγάδι πλάτους $l_0 = h + t_W$ μπορεί να γίνει lens-shaped κβαντική τελεία με ίδιο συνολικό ύψος $l_0 = h + t_W$ και ακτίνα ρ_0 (αν συμπεριλάβουμε και το στρώμα διαβροχής). Εφαρμόζοντας απλή γεωμετρία βρίσκουμε:

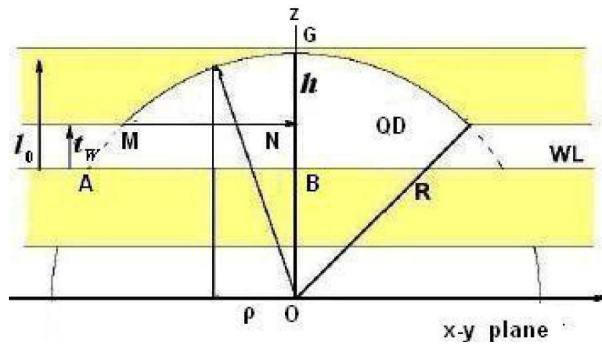
$$\begin{aligned}\rho_0 &= l_0 \sqrt{1 + \frac{s^2 - h^2 - 2t_w h}{hl_0}} \\ z_B &= \frac{s(1 - A^2)}{2A} - t_W \\ z_N &= \frac{s(1 - A^2)}{2A}\end{aligned}$$

$$z_G = \frac{s(1 + A^2)}{2A} \quad (7.1)$$

όπου $A = h/s$.

7.1.1 Το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό κβαντικής τελείας σε σχήμα φακού

Στην ενότητα αυτή περιγράφουμε τον αλγόριθμο που χρησιμοποιήσαμε για την περιγραφή του τρισδιάστατου περιοριστικού δυναμικού μιας κβαντικής τελείας σε σχήμα φακού. Το περιοριστικό δυναμικό $V(\mathbf{r})$ καθορίζεται με βάση το σχήμα της τελείας. Είναι μηδέν στο εσωτερικό της τελείας και του στρώματος διαβροχής και ισούται με την ασυνέχεια των ζωνών αγωγιμότητας (ή σθένους) ($V = \Delta V_{CB}$ ή $V = \Delta V_{VB}$) στο εσωτερικό του φραγμού. Έστω n_{pos} το σύνολο των σημείων που χρησιμοποιούμε



Σχήμα 7.2: Διατομή μιας ιδεατής τελείας σε σχήμα φακού. Με κίτρινο διαφαίνεται το υλικό του φραγμού που είναι εκατέρωθεν της τελείας και του στρώματος διαβροχής.

στην διεύθυνση z για την περιγραφή του δυναμικού. Τότε

$$n_1 = \frac{n_{pos} - 6}{2} + 1 \quad (7.2)$$

$$n_2 = n_{pos} - 6 - n_1 \quad (7.3)$$

είναι τα σημεία διαμέρισης στο εσωτερικό της κβαντικής τελείας και του στρώματος διαβροχής αντίστοιχα. Το στρώμα διαβροχής χωρίζεται κατά την διεύθυνση z σε n_2 ευθύγραμμα τμήματα μήκους $dpos_2 = t_w/n_2$, ενώ η κβαντική τελεία (σφαιρικό τμήμα) σε n_1 ευθύγραμμα τμήματα μήκους $dpos_1 = h/n_1$. Έτσι, η διαμέριση στον

άξονα z έχει ως εξής:

$$\begin{aligned}
 z(1) &= -\frac{L_z}{2} \\
 z(2) &= z_B - 10^{-6} \\
 z(3) &= z_B + dpos_2 \\
 z(4) &= z_B + 2dpos_2 \\
 &\dots \\
 z(n_2 + 3) &= z_N - 10^{-6} \\
 z(n_2 + 4) &= z_N + dpos_1 \\
 z(n_2 + 5) &= z_N + 2dpos_1 \\
 &\dots \\
 z(n_{pos} - 1) &= z_G + 10^{-6} \\
 z(n_{pos}) &= \frac{L_z}{2}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

L_z είναι η πλευρά του “κουτιού” περιοδικότητας κατά την z διεύθυνση. Είδαμε ότι το περιοριστικό δυναμικό $V(\mathbf{r})$ είναι μηδέν στο εσωτερικό της τελείας και του στρώματος διαβροχής και ίσο με την ασυνέχεια των ζωνών αγωγιμότητας (ή σθένους) ($V = \Delta V_{CB}$ ή $V = \Delta V_{VB}$) στο εσωτερικό του φραγμού. Έτσι, με βάση την παραπάνω διαμέριση, το τρισδιάστατο περιοριστικό της τελείας ορίζεται ως εξής:

- αν $z < z_B$: τότε $V(x, y, z) = \Delta V_{CB}$ (ή ΔV_{VB}).
- αν $z_B < z < z_N$, δηλαδή εντός του στρώματος διαβροχής: $V(x, y, z) = 0$.
- αν $z_N < z$, τότε ορίζουμε την ακτίνα $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ στο εγκάρσιο επίπεδο. Διακρίνουμε δύο υποπεριπτώσεις:
 - αν $r > s$, δηλαδή στην περιοχή εκτός του σφαιρικού τμήματος της τελείας, $V(x, y, z) = 0$.
 - αν $r < s$, ορίζουμε $z_\ell = \sqrt{z_G^2 - r^2}$ για να περιγράψουμε το σφαιρικό τμήμα της τελείας. Έτσι, αν $z < z_\ell$ (εσωτερικό του σφαιρικού τμήματος), $V(x, y, z) = 0$, ενώ αν $z > z_\ell$, $V(x, y, z) = \Delta V_{CB}$ (ή ΔV_{VB}).

7.2 Το φάσμα εκπομπής

Εφαρμόζουμε [194] τα θεωρητικά μας αποτελέσματα για την ερμηνεία των πειραματικών δεδομένων του Matsuda et al. [26] που αφορούν στο φάσμα εκπομπής εγγύς πεδίου σε θερμοκρασία δωματίου, κβαντικής τελείας $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ σχήματος φακού. s η ακτίνα βάσης της τελείας και h το ύψος της. Το πάχος του στρώματος διαβροχής είναι $t_W = 4\text{ML}$ [26]. Στον πίνακα 7.2 δίνονται οι παράμετροι του υλικού και

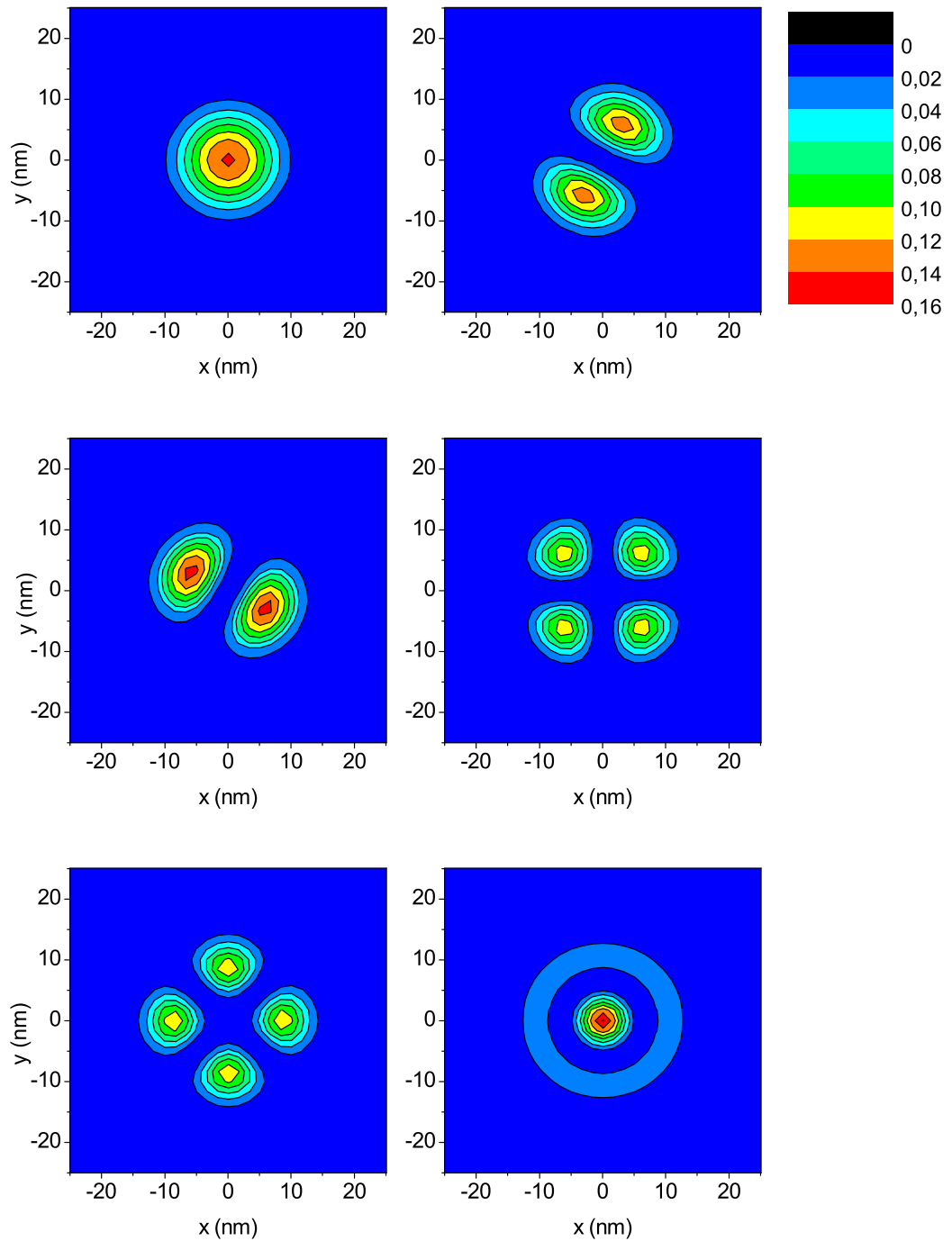
ενεργός μάζα ηλεκτρονίου:	$0.0632 m_0$
ενεργός μάζα οπής:	$0.11 m_0$
διηλεκτρική σταθερά κ_0 :	12.9
ασυνέχεια της ζώνης αγωγιμότητας για τα ηλεκτρόνια ΔV_{CB} :	224 meV
ασυνέχεια της ζώνης σθένους για τις οπές ΔV_{VB} :	180 meV
ακτίνα βάσης s της κβαντικής τελείας:	16.8 nm
ύψος h της κβαντικής τελείας:	9.5 nm
πάχος του στρώματος διαβροχής $t_W = 4\text{ML}$:	1.1 nm

Πίνακας 7.1: Παράμετροι του υλικού και δομικές παράμετροι της τελείας, που χρησιμοποιήθηκαν στους υπολογισμούς μας [195, 196].

οι δομικές παράμετροι της τελείας, που χρησιμοποιήθηκαν στους υπολογισμούς μας. Στα συστήματα ημιαγωγών III-V η διαδικασία Stranski-Krastanow [70] οδηγεί στον σχηματισμό νησιδίων InAs πάνω σε GaAs , όπου τόσο οι κβαντικές τελείες όσο και η περιβάλλουσα μήτρα είναι χωρίς εξαρθρώσεις και τάση (strain). Έτσι μπορούμε να πάρουμε την ενεργό μάζα ηλεκτρονίου και οπής στην τελεία $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ ίση με την ενεργό μάζα του bulk GaAs . Επιπρόσθετα, για το strained υλικό δεχόμαστε τις ζώνες των οπών αποσυζευγμένες, και κατά συνέπεια θεωρούμε μια ζώνη για τις οπές (βαριές οπές), όπως ακριβώς και για τα ηλεκτρόνια, αλλά με διαφορετική ενεργό μάζα και περιοριστικό δυναμικό. Υπολογίζουμε τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις, ηλεκτρονίων και οπών, στα πλαίσια της προσέγγισης ενεργού μάζας και περιβάλλουσας συνάρτησης.

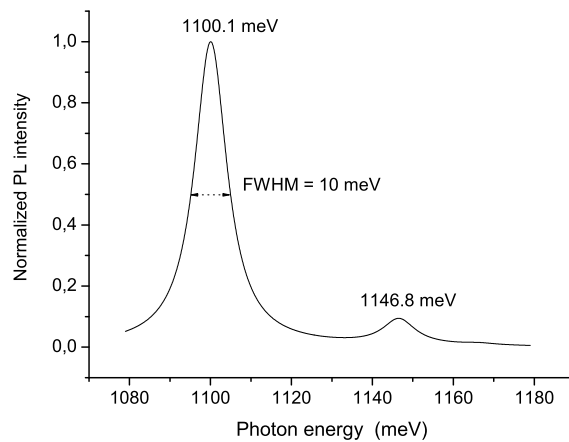
Αναπτύσσουμε τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις σε ορθοκανονική βάση επίπεδων κυμάτων, δηλ. $|\Phi^\mu\rangle = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^\mu |\mathbf{k}\rangle$, σε κουτί περιοδικότητας $\Omega = L_x L_y L_z$. Οι διαστάσεις του κουτιού που χρησιμοποιήσαμε ώστε οι μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις να είναι καλά εντοπισμένες είναι: 60-60-40 nm. Κατόπιν λύνουμε αριθμητικά το πρόβλημα ιδιοτιμών (Εξ. (5.4) και υπολογίζουμε τις ιδιοενέργειες E^μ και τους συντελεστές $C_{\mathbf{k}}^\mu$ του αναπτύγματος.

Η σύγκλιση στις ενέργειες επιτεύχθηκε χρησιμοποιώντας 1600 επίπεδα κύματα.



Σχήμα 7.3: Απλή χβαντική τελεία σχήματος φακού ακτίνας $s = 16.8$ nm και ύψους $h = 9.5$ nm. Διδιάστατες απεικονίσεις των 6 πρώτων καταστάσεων των ηλεκτρονίων.

Στο σχήμα 7.3 απεικονίζονται οι 6 πρώτες καταστάσεις των ηλεκτρονίων της κβαντικής τελείας σε σχήμα φακού. Είναι φανερό πως οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις έχουν κυλινδρική συμμετρία και μοιάζουν με τις Darwin-Fock καταστάσεις [172,173]. Κατόπιν, γνωρίζοντας τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις υπολογίζουμε τα στοιχεία πίνακα Coulomb (Εξ. 5.6). Αναπτύσσουμε την εξιτονική κυματοσυνάρτηση σε βάση που κατασκευάζεται από 6 καταστάσεις ηλεκτρονίων και 6 καταστάσεις οπών. Στην συνέχεια, υπολογίζουμε τις εξιτονικές ενέργειες και κυματοσυναρτήσεις λύνοντας το εξιτονικό πρόβλημα ιδιοτιμών (Εξ. 5.9). Τέλος, υπολογίζουμε το φάσμα φωτοφωταύγειας για την απλή τελεία σε θερμοκρασία δωματίου από την Εξ.(6.66). Στις



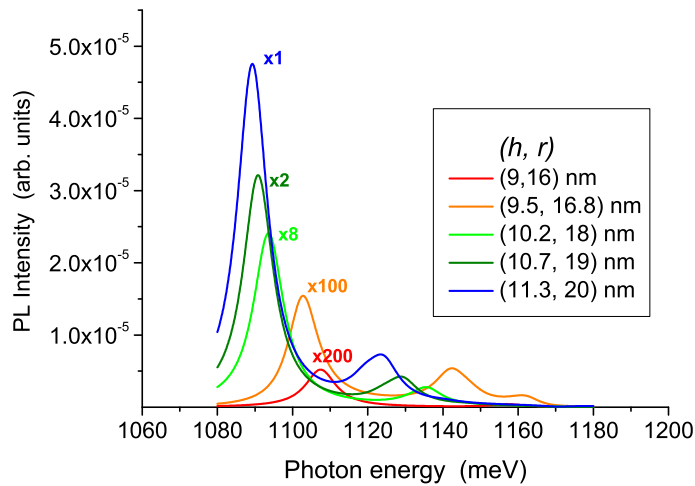
Σχήμα 7.4: Το φάσμα εκπομπής σε θερμοκρασία δωματίου μιας απλής $In_{0.5}Ga_{0.5}As$ κβαντικής τελείας σε σχήμα φακού, με διάμετρο βάσης 33.6 nm και ύψος 9.5 nm. Για τον υπολογισμό του φάσματος χρησιμοποιήσαμε 6 καταστάσεις ηλεκτρονίων και 6 καταστάσεις οπών.

υψηλές θερμοκρασίες οι πληθυσμοί ηλεκτρονίων (οπών), $f^{\mu e}$ ($f^{\nu h}$), δίνονται από τις συναρτήσεις κατανομής Fermi-Dirac [113,118]. Επιπλέον, όπως είδαμε στο Κεφάλαιο 3, όταν οι φορείς σε όλες τις τελείες της συλλογής βρίσκονται στην ίδια κατάσταση θερμοικής ισορροπίας, έχουν κοινή στάθμη Fermi, η οποία για ασθενή ισχύ διέγερσης βρίσκεται κοντά στο μέσο του χάσματος [117]. Τα αποτελέσματά μας για την ένταση της φωτοφωταύγειας κβαντικής τελείας ακτίνας βάσης s απεικονίζονται στο σχήμα 7.4.

Παρατηρούνται δύο κορυφές: Η πρώτη στα 1100.1 meV, συνίσταται κυρίως από την μετάβαση $1s(e) \rightarrow 1s(h)$, δηλ. την μετάβαση θεμελιώδους στάθμης. Η δεύτερη

κορυφή στα 1146.8 meV, συνίσταται από τις παρακάτω μεταβάσεις: $1s(e) \rightarrow 2s(h)$ και $1p(e) \rightarrow 1p(h)$.

Κατόπιν επαναλάβαμε την διαδικασία αναπαραγωγής του φάσματος φωτοφωταύγειας χρησιμοποιώντας 10 καταστάσεις ηλεκτρονίων και 10 καταστάσεις οπών και καταλήξαμε στο ίδιο φάσμα. Προκειμένου να έχουμε την πειραματικά παρατηρούμενη διαπλάτυνση κορυφής (FWHM=10meV), χρησιμοποιούμε για την σταθερά γ την τιμή 4.9meV. Η τιμή αυτή μέσω της σχέσης $\tau = \frac{\hbar}{\gamma}$ οδηγεί σε dephasing time $\tau = 130$ fs, τιμή η οποία συμφωνεί με τις τιμές που αναφέρονται στην βιβλιογραφία για τον χρόνο καταστροφής της συνοχής του συστήματος λόγω σκέδασης από οπτικά φωνόνια [197–199].



Σχήμα 7.5: Το φάσμα εκπομπής σε θερμοκρασία δωματίου μιας απλής $In_{0.5}Ga_{0.5}As$ χβαντικής τελείας σε σχήμα φακού, για πέντε διαφορετικές τιμές ύψους και ακτίνας της βάσης της. Ο χαρακτηριστικός λόγος ύψος/ακτίνα είναι σταθερός.

Τέλος, υπολογίσαμε το φάσμα φωτοφωταύγειας για πέντε διαφορετικές τιμές της ακτίνας και του ύψους της χβαντικής τελείας $In_{0.5}Ga_{0.5}As$ σχήματος φακού, διατηρώντας ωστόσο σταθερό τον χαρακτηριστικό λόγο ύψους/ακτίνα. Τα αποτελέσματα μας απεικονίζονται στο σχήμα 7.5. Καθώς μειώνεται το μέγεθος της χβαντικής τελείας παρατηρείται μετατόπιση των κορυφών της φωτοφωταύγειας προς υψηλότερες ενέργειες. Το φαινόμενο αυτό έχει παρατηρηθεί και πειραματικά (για παράδειγμα σε χβαντικές τελείες GaN [200]) και οφείλεται στην μετατόπιση των ηλεκτρονικών σταθμών προς υψηλότερες ενέργειες λόγω του τρισδιάστατου περιοριστικού δυναμικού,

σε συνδυασμό με την αύξηση της Coulomb αλληλεπίδρασης λόγω της αντίστοιχης συμπίεσης της εξιτονικής ακτίνας Bohr. Επιπλέον, παρατηρείται ότι καθώς αυξάνει το μέγεθος της κβαντικής τελείας αυξάνει σημαντικά η ένταση της φωτοφωταύγειας. Πράγματι, η αύξηση του μεγέθους της κβαντικής τελείας συνεπάγεται μείωση της απόστασης των μονοσωματιδιακών ενεργειακών επιπέδων από την στάθμη Fermi. Αυτό οδηγεί σε εκθετική αύξηση των συναρτήσεων κατανομής Fermi-Dirac καθώς αυξάνει το μέγεθος της κβαντικής τελείας.

7.3 Σύνοψη

Η παραχθείσα έκφραση για την ένταση της φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή, δίνει επιτυχή αποτελέσματα στην αναπαραγωγή του πειραματικά παρατηρούμενου φάσματος εκπομπής κβαντικών τελειών στις υψηλές θερμοκρασίες.

Κεφάλαιο 8

Επίλογος-Ερευνητικές προοπτικές

A) Αναφορικά με το μέρος της παρούσας διατριβής που διερευνά την απορρόφηση, είδαμε ότι η επίδραση του μαγνητικού πεδίου ανέδειξε νέα χαρακτηριστικά στο φάσμα, καθώς και νέες σημαντικές δυνατότητες.

Κατά την μελέτη του φάσματος απορρόφησης εγγύς πεδίου, για την περιγραφή της ζώνης των οπών χρησιμοποιήσαμε την προσέγγιση της εξίσωσης ενεργού μάζας μιας ζώνης. Επιπλέον δεν λάβαμε υπόψη μας την αλληλεπίδραση του μαγνητικού πεδίου με το σπίν. Είναι λοιπόν φανερό ότι η ακριβής επίλυση της εξίσωσης ενεργής μάζας για τις ζώνες των βαριών οπών, τις ζώνες των ελαφριών οπών (και των οπών διαχωρισμού), καθώς και ο συνυπολογισμός της αλληλεπίδρασης με το σπίν, θα δώσει μια πιο ολοκληρωμένη περιγραφή του φάσματος απορρόφησης καθώς θα εισάγει μια πληθώρα τροποποιήσεων.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη του φάσματος εγγύς πεδίου των δι-εξιτονίων (biexcitons) κβαντικών τελειών που υπόκεινται σε μαγνητικό πεδίο με ποικίλο μέτρο και προσανατολισμό (κατά αναλογία με [5,6] για μηδενικό πεδίο).

B) Αναφορικά με το μέρος της παρούσας διατριβής που διερευνά την εκπομπή, η λύση των εξισώσεων φωτοφωταύγειας σε πολύ ασθενείς διεγέρσεις και σε υψηλές T και κατά συνέπεια σε πολύ μικρές τιμές συναρτήσεων κατανομής των φορέων, οδήγησε στην παραγωγή του φάσματος φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή.

Στις χαμηλές θερμοκρασίες, οι συναρτήσεις κατανομής δεν μπορούν πλέον να προσεγγιστούν από την συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac αλλά από την μεγαλοκανονική κατανομή Gibbs [118]. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα οι συναρτήσεις κατανομής ηλεκτρονίων και οπών να μην είναι πολύ μικρές συγκρινόμενες με την μονάδα. Τότε

όμως θα πρέπει να επιλύσουμε αναλυτικά τις εξισώσεις φωτοφωταύγειας (6.47) και (6.48) (μη γραμμική περιοχή), αντί των (6.50) και (6.51) που αντιστοιχούν στην γραμμική περιοχή. Η επέκταση της σχέσης που δίνει το φάσμα φωτοφωταύγειας στην μη γραμμική περιοχή θα μας δώσει την δυνατότητα να μελετήσουμε και τις χαμηλές θερμοκρασίες. Παράλληλα στις χαμηλές θερμοκρασίες ή/και σε ενδιάμεσες συγκεντρώσεις φορέων, τα φαινόμενα εποικισμού των εξιτονικών καταστάσεων γίνονται σημαντικά και θα πρέπει να ληφθούν υπόψη διορθωτικοί όροι της μορφής $\Delta\langle Q_\nu^\dagger Q_\nu \rangle$, όπου Q_ν^\dagger (Q_ν) οι τελεστές δημιουργίας (καταστροφής) ενός εξιτονίου στην κατάσταση n [190, 201]. Αποτελούν συνεπώς ανοικτά θέματα προς διερεύνηση, ο υπολογισμός των στατιστικών ιδιοτήτων των εξιτονίων αυτών στις χαμηλές θερμοκρασίες, της συνάρτησης κατανομής τους και πώς είναι δυνατή η ανίχνευσή τους πειραματικά.

Επιπλέον, πειράματα που μελετούν μαγνητο-φωτοφωταύγεια αναφέρονται σε χαμηλές θερμοκρασίες [202–206].

Μπορούμε επίσης να μελετήσουμε αναλυτικά την επίδραση των μηχανισμών σκέδασης από οπτικά ή ακουστικά φωνόνια, εισάγοντας στην Χαμιλτονιανή (6.3) τις αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η ανάπτυξη αντίστοιχης θεωρητικής περιγραφής τόσο της συνεκτικής (coherent) φωτοφωταύγειας μεμεονωμένων κβαντικών τελειών για την ερμηνεία αντίστοιχων πειραματικών δεδομένων [207], όσο και της φωτοφωταύγειας εγγύς πεδίου.

Παράρτημα Α΄

Η εξίσωση ιδιοτιμών της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης

Είδαμε στο κεφάλαιο 3 ότι η εξιτονική κυματοσυνάρτηση γράφεται σαν ανάπτυγμα με όρους μονοσωματιδιακές καταστάσεις ηλεκτρονίων και οπών:

$$\Psi^\lambda(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu}^\lambda \Phi^{\mu e}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}_h) \quad (\text{A}'1)$$

Η εξιτονική κυματοσυνάρτηση ικανοποιεί την εξίσωση ιδιοτιμών:

$$H\Phi^\lambda(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E^\lambda\Phi^\lambda(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (\text{A}'2)$$

όπου

$$H = H_{se} + H_{sh} + H_{eh} \quad (\text{A}'3)$$

Οι H_{se} και H_{sh} είναι οι Χαμιλτονιανές των μη αλληλεπιδρώντων φορέων και H_{eh} η Χαμιλτονιανή που εκφράζει την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-οπής. Εισάγοντας το ανάπτυγμα (A'.1) στην εξίσωση (A'.2) προκύπτει:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda (H_{se} \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e)) \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h) + \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda (H_{sh} \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h)) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e) \\ & + \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h) \frac{-e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e) = \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda E^\lambda \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e) \end{aligned} \quad (\text{A}'4)$$

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη της Εξ.(A'.4) με $\int d^3\mathbf{r}_e \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h)$ προκύπτει:

$$\sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda E^{\mu' e} \int d^3\mathbf{r}_e \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e) \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda E^{\nu'h} \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu'h}(\mathbf{r}_h) \int d^3\mathbf{r}_e \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu'e}(\mathbf{r}_e) \\
& + \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda \int d^3\mathbf{r}_e \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu'e}(\mathbf{r}_e) \frac{-e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu'h}(\mathbf{r}_h) \\
& = \sum_{\mu'\nu'} C_{\mu'\nu'}^\lambda E^\lambda \int d^3\mathbf{r}_e \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu'e}(\mathbf{r}_e) \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu'h}(\mathbf{r}_h) \quad (A'.5)
\end{aligned}$$

Ορίζοντας τα στοιχεία πίνακα Coulomb ως:

$$V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} \equiv \int d^3\mathbf{r}_e \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu'e}(\mathbf{r}_e) \frac{e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu'h}(\mathbf{r}_h) \equiv V_{\ell\ell'}^{eh} \quad (A'.6)$$

με $\ell = \mu\nu$, και λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις ορθογωνιότητας των μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων $\int d^3\mathbf{r}_i \Phi^{\mu i*}(\mathbf{r}_i) \Phi^{\mu'i}(\mathbf{r}_i) = \delta_{\mu\mu'}$ ($i = e, h$), η Εξ.(A'.5) καταλήγει στην παρακάτω εξίσωση ιδιοτιμών της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης:

$$\sum_{\ell'} [T_{\ell'} \delta_{\ell\ell'} - V_{\ell\ell'}^{eh} - E^\lambda \delta_{\ell\ell'}] C_{\ell'}^\lambda = 0. \quad (A'.7)$$

Ο όρος $T_\ell = E^{\mu e} + E^{\nu h}$ συμβολίζει το άθροισμα των μονοσωματιδιακών ενεργειών. Από την παραπάνω εξίσωση με διαγωνιοποίηση υπολογίζονται αριθμητικά οι συντελεστές C_ℓ^λ του αναπτύγματος της εξιτονικής κυματοσυνάρτησης. Η εξίσωση (A'.7) είναι η εξίσωση (3.48) του κειμένου.

Παράρτημα Β΄

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και οπών που είναι εντοπισμένοι σε μια κβαντική τελεία, παρουσία του εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που δρα σε μεγαλύτερη κλίμακα χρόνου δίνεται από την σχέση:

$$H_{sp} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left[\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{B'.1})$$

όπου $V(\mathbf{r})$ το τρισδιάστατο περιοριστικό δυναμικό της τελείας. Εισάγοντας στην παραπάνω σχέση τα αναπτύγματα (4.17) για τους τελεστές πεδίου, προκύπτει:

$$\begin{aligned} H_{sp} = & \int d^3\mathbf{r} \left\{ \sum_{\mu\mu'} c_\mu^\dagger(t) \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \left[\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right] c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \right. \\ & + \sum_{\nu\nu'} d_\nu(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \left(\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right) d_{\nu'}^\dagger(t) \Phi^{\nu' h^*}(\mathbf{r}) \\ & + \sum_{\mu\nu'} c_\mu^\dagger(t) \Phi^{\mu e^*}(\mathbf{r}) \left(\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right) d_{\nu'}^\dagger(t) \Phi^{\nu' h^*}(\mathbf{r}) \\ & \left. + \sum_{\mu'\nu} c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \left(\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right) d_\nu(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \right\} (\text{B'.2}) \end{aligned}$$

Στην παραπάνω Χαμιλτονιανή αμελούμε τους δύο τελευταίους όρους που αντιστοιχούν σε σύζευξη των ζωνών σθένους και αγωγιμότητας λόγω του εξωτερικού

ΗΜ πεδίου. Έτσι, γράφουμε τελικά :

$$H_{sp} = \sum_{\mu\mu'} E_{\mu\mu'}^e c_{\mu}^{\dagger}(t) c_{\mu'}(t) + \sum_{\nu\nu'} E_{\nu\nu'}^h d_{\nu}^{\dagger}(t) d_{\nu'}(t) = H_{se} + H_{sh} \quad (\text{B'.3})$$

όπου ορίζονται [140]:

$$\begin{aligned} E_{\mu\mu'}^e &= \int d\mathbf{r} \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) \left(\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \\ E_{\nu\nu'}^h &= - \int d\mathbf{r} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) \left(\frac{(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - \frac{q^*}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q^* \phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \right) \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{B'.4})$$

τα στοιχεία πίνακα της Χαμιλτονιανής των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και οπών παρουσία του εξωτερικού πεδίου. Τα διαγώνια στοιχεία αποτελούν τις μονοσωματιδιακές ενέργειες $E^{\mu e}$ και $E^{\nu h}$. Επειδή επιλέγουμε ορθοκανονικές μονοσωματιδιακές κυματοσυναρτήσεις, η Χαμιλτονιανή των μη αλληλεπιδρώντων φορέων γράφεται τελικά:

$$H_{sp} = \sum_{\mu} E^{\mu e} c_{\mu}^{\dagger}(t) c_{\mu}(t) + \sum_{\nu} E^{\nu h} d_{\nu}^{\dagger}(t) d_{\nu}(t) = H_{se} + H_{sh} \quad (\text{B'.5})$$

Παράρτημα Γ'

Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης του συστήματος με το πεδίο του laser

Η Χαμιλτονιανή η οποία περιγράφει την αλληλεπίδραση του συστήματος με το υψηλής συχνότητας πεδίο του laser γράφεται:

$$H_{cl} = q^* \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \phi_l(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (\Gamma'.1)$$

Εισάγοντας τους τελεστές πεδίου (σχέση 4.17), καθώς και το βαθμωτό δυναμικό (σχέση 4.20) η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$\begin{aligned} H_{cl} &= -q^* \int d^3\mathbf{r} [\sum_{\mu} c_{\mu}^{\dagger}(t) \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu} d_{\nu}(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r})] \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} \\ &\quad [\sum_{\mu'} c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu'} d_{\nu'}^{\dagger}(t) \Phi^{\nu' h*}(\mathbf{r})] \\ &= -q^* \int d^3\mathbf{r} [\sum_{\mu\mu'} c_{\mu}^{\dagger}(t) \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \sum_{\nu\nu'} d_{\nu}(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} d_{\nu'}^{\dagger}(t) \Phi^{\nu' h*}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \sum_{\mu\nu'} c_{\mu}^{\dagger}(t) \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} d_{\nu'}^{\dagger}(t) \Phi^{\nu' h*}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \sum_{\mu'\nu} c_{\mu'}(t) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} d_{\nu}(t) \Phi^{\nu h}(\mathbf{r})] \quad (\Gamma'.2) \end{aligned}$$

Εφόσον ενδιαφερόμαστε για τις οπτικές μεταβάσεις που επάγει το πεδίο του laser, αμελούμε τους δύο πρώτους όρους που αντιστοιχούν σε μεταβάσεις μέσα στην ίδια ζώνη. Έτσι η παραπάνω σχέση παίρνει την τελική μορφή:

$$H_{cl} = \sum_{\mu\nu} c_{\mu}^{\dagger}(t)d_{\nu}^{\dagger}(t)U_{\mu\nu}(t) + \sum_{\mu\nu} c_{\mu}(t)d_{\nu}(t)U_{\mu\nu}^{*}(t) \quad (\Gamma'.3)$$

όπου

$$U_{\mu\nu}(t) = - \int d^3\mathbf{r} \mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \quad (\Gamma'.4)$$

και $\mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = q\Phi^{\mu e*}(\mathbf{r})\mathbf{r}\Phi^{\nu h*}(\mathbf{r})$ τα τοπικά διπολικά στοιχεία πίνακα που έχουν ορισθεί στην σχέση (4.42). Η ποσότητα $U_{\mu\nu}(t)$ θεωρώντας ηλεκτρικό πεδίο $\mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) = E_l(\mathbf{r})(E_0(t)e^{i\omega_L t})$ γράφεται:

$$U_{\mu\nu}(t) = - \int d^3\mathbf{r} \mathbf{M}_{\mu\nu}(\mathbf{r}) E_l(\mathbf{r}) E_0(t) e^{i\omega_L t} = U_0 e^{i\omega_L t} \quad (\Gamma'.5)$$

Έχει κατά συνέπεια την μορφή (4.11) και για τον λόγο αυτό καλείται ενέργεια Rabi.

Παράρτημα Δ'

Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης μεταξύ των φορέων

Η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης των φορέων μεταξύ τους δίνεται στην δεύτερη κβάντωση από:

$$H_{cc} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (\Delta'.1)$$

Αντικαθιστώντας στην παραπάνω τους τελεστές πεδίου από την σχέση (4.17) προκύπτει:

$$\begin{aligned} H_{cc} &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' [\sum_{\mu_1} c_{\mu_1}^\dagger \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu_1} d_{\nu_1} \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r})] \cdot [\sum_{\mu_2} c_{\mu_2}^\dagger \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') + \sum_{\nu_2} d_{\nu_2} \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}')] \\ &V^{cc} [\sum_{\mu_3} c_{\mu_3} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') + \sum_{\nu_3} d_{\nu_3}^\dagger \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}')] \cdot [\sum_{\mu_4} c_{\mu_4} \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu_4} d_{\nu_4}^\dagger \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \nu_4} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_3 \mu_4} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger d_{\nu_3}^\dagger c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_3 \nu_4} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger d_{\nu_3}^\dagger d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \nu_2 \mu_3 \mu_4} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \nu_2 \mu_3 \nu_4} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_3} d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \nu_2 \nu_3 \mu_4} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} d_{\nu_3}^\dagger c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} d_{\nu_3}^\dagger d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} d_{\nu_1} c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \mu_2 \mu_3 \nu_4} d_{\nu_1} c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \mu_2 \nu_3 \mu_4} d_{\nu_1} c_{\mu_2}^\dagger d_{\nu_3}^\dagger c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \mu_2 \nu_3 \nu_4} d_{\nu_1} c_{\mu_2}^\dagger d_{\nu_3}^\dagger d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \nu_2 \mu_3 \mu_4} d_{\nu_1} d_{\nu_2} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \nu_2 \mu_3 \nu_4} d_{\nu_1} d_{\nu_2} c_{\mu_3} d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \mu_4} d_{\nu_1} d_{\nu_2} d_{\nu_3}^\dagger c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} d_{\nu_1} d_{\nu_2} d_{\nu_3}^\dagger d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r}) \quad (\Delta'.2)
\end{aligned}$$

Οι όροι που περιέχουν γινόμενα των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής ηλεκτρονίων και οπών της μορφής: $c_{e1}^\dagger c_{e2}^\dagger d_{h3}^\dagger c_{e4}$, $c_{e1}^\dagger d_{h2} c_{e3} c_{e4}$, $d_{h1}^\dagger d_{h2}^\dagger c_{e3}^\dagger d_{h4}$ και $d_{h1}^\dagger c_{e2} d_{h3} d_{h4}$ εκφράζουν διαδικασίες κατά τις οποίες δεν διατηρείται ο αριθμός των σωματιδίων όπως επανασύνδεση Auger και (impact ionization) [208] και δεν τις λαμβάνουμε υπόψη εδώ [140]. Επιπλέον, αμελούμε τους όρους που περιέχουν τα γινόμενα $c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_3} d_{\nu_4}^\dagger \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1 e^*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2 h}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\mu_3 e}(\mathbf{r}') \Phi^{\nu_4 h^*}(\mathbf{r})$ και $d_{\nu_1} c_{\mu_2}^\dagger d_{\nu_3}^\dagger c_{\mu_4} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\nu_1 h}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2 e^*}(\mathbf{r}') V^{cc} \Phi^{\nu_3 h^*}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4 e}(\mathbf{r})$ που εκφράζουν αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ των ζωνών (interband exchange interaction) ή αλλιώς αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου. Η προσέγγιση αυτή ισχύει όσο η εξιτονική ενέργεια δέσμευσης είναι μικρή συγκρινόμενη με το χάσμα.

Ορίζοντας τα στοιχεία πίνακα Coulomb ως:

$$V_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{cc} \equiv \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\ell_1*}(\mathbf{r}) \Phi^{\ell_2*}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\ell_3}(\mathbf{r}') \Phi^{\ell_4}(\mathbf{r}) \quad (\Delta'.3)$$

η Χαμιλτονιανή που περιέχει την αλληλεπίδραση φορέα-φορέα γράφεται τελικά:

$$\begin{aligned} H_{cc} &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} V_{\nu_4 \nu_3 \nu_2 \nu_1}^{hh} d_{\nu_1} d_{\nu_2} d_{\nu_3}^\dagger d_{\nu_4}^\dagger \\ &- \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &= H_{ee} + H_{hh} + H_{eh} \end{aligned} \quad (\Delta'.4)$$

Παράρτημα Ε΄

Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων

Ε΄.1 Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στο σύστημα των ελευθέρων φορέων

Με βάση την εξίσωση του Heisenberg:

$$i\hbar \frac{df^{\mu e}}{dt} |_{sp} = \langle [c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{sp}] \rangle \quad (\text{Ε΄.1})$$

όπου sp δηλώνει το σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φορέων (single-particle). Εισάγοντας την Χαμιλτονιανή των μη αλληλεπιδρώντων φορέων (σχέση Β΄.5) στον μεταθέτη $[c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{sp}]$ προκύπτει:

$$\begin{aligned} [c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{sp}] &= \sum_{\mu'} E^{\mu' e} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} + \sum_{\nu'} E^{\nu' h} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} d_{\nu'}^{\dagger} d_{\nu'} \\ &- \sum_{\mu'} E^{\mu' e} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} - \sum_{\nu'} E^{\nu' h} d_{\nu'}^{\dagger} d_{\nu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\ &= \sum_{\mu'} E^{\mu' e} c_{\mu}^{\dagger} (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu}) c_{\mu'} - \sum_{\mu'} E^{\mu' e} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\ &= E^{\mu e} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} - \sum_{\mu'} E^{\mu' e} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} - \sum_{\mu'} E^{\mu' e} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} = 0 \quad (\text{Ε΄.2}) \end{aligned}$$

Ε'.2 Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση των φορέων με το συνεχτικό πεδίο του laser

Από την εξίσωση Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{cl} = \langle [c_\mu^\dagger c_\mu, H_{cl}] \rangle \quad (E'.3)$$

Εισάγοντας στον μεταθέτη $[c_\mu^\dagger c_\mu, H_{cl}]$ την Χαμιλτονιανή H_{cl} από την σχέση Γ'.3 προκύπτει:

$$\begin{aligned}
[c_\mu^\dagger c_\mu, H_{cl}] &= \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_\mu^\dagger c_\mu c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger + \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1}^* c_\mu^\dagger c_\mu d_{\nu_1} c_{\mu_1} \\
&- \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger c_\mu^\dagger c_\mu - \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1}^* d_{\nu_1} c_{\mu_1} c_\mu^\dagger c_\mu \\
&= \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_\mu^\dagger (\delta_{\mu \mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_\mu) d_{\nu_1}^\dagger - \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1}^* d_{\nu_1} c_\mu^\dagger c_{\mu_1} c_\mu \\
&- \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger c_\mu^\dagger c_\mu - \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1}^* d_{\nu_1} c_{\mu_1} c_\mu^\dagger c_\mu \\
&= \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_\mu^\dagger \delta_{\mu \mu_1} d_{\nu_1}^\dagger - \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_\mu^\dagger c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_1}^\dagger \\
&- \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1}^* d_{\nu_1} (\delta_{\mu \mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_\mu) c_\mu - \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger c_\mu^\dagger c_\mu \\
&- \sum_{\mu_1 \nu_1} U_{\mu_1 \nu_1}^* d_{\nu_1} c_{\mu_1} c_\mu^\dagger c_\mu \\
&= \sum_{\nu_1} U_{\mu \nu_1} c_\mu^\dagger d_{\nu_1}^\dagger - \sum_{\nu_1} U_{\mu \nu_1}^* d_{\nu_1} c_\mu
\end{aligned} \quad (E'.4)$$

Τελικά προκύπτει:

$$i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{cl} = \sum_{\nu_1} (U_{\mu \nu_1} p_{\nu_1}^* - U_{\mu \nu_1}^* p_{\mu \nu_1}) \quad (E'.5)$$

Ε'.3 Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση φορέα-φορέα

Είδαμε στο Δ' ότι η Χαμιλτονιανή που περιέχει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των φορέων γράφεται ως άθροισμα τριών όρων $H_{cc} = H_{ee} + H_{hh} + H_{eh}$. Εισάγοντας τους παραπάνω όρους στην εξίσωση Heisenberg προκύπτει:

$$i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{cc} = \langle [c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{ee} + H_{hh} + H_{eh}] \rangle \quad (\text{Ε'.6})$$

Προς χάριν ευκολίας, υπολογίζουμε ξεχωριστά τους μεταθέτες του γινομένου $c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}$ με καθέναν από τους όρους της παραπάνω Χαμιλτονιανής. Ο πρώτος όρος γράφεται:

$$\begin{aligned} [c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{ee}] &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} (\delta_{\mu \mu_1} - c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu}) c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_1}^{\dagger} (\delta_{\mu \mu_2} - c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu}) c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} (\delta_{\mu\mu_3} - c_{\mu_3} c_{\mu}^{\dagger}) c_{\mu_4} c_{\mu} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_4} c_{\mu} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} (\delta_{\mu\mu_4} - c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger}) c_{\mu} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_4 \mu_3} V_{\mu_2\mu\mu_4\mu_3}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_4} c_{\mu_3} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_4} c_{\mu} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_1 \mu_4} V_{\mu_2\mu_1\mu_4\mu}^{ee} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_1}^{\dagger} c_{\mu_4} c_{\mu} \tag{E'.7}
\end{aligned}$$

Από τον ορισμό των στοιχείων πίνακα Coulomb ως:

$$V_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{cc} \equiv \int d^3 \mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\ell_1*}(\mathbf{r}) \Phi^{\ell_2*}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\ell_3}(\mathbf{r}') \Phi^{\ell_4}(\mathbf{r}) \tag{E'.8}$$

προκύπτει ότι $V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} = V_{\mu_2\mu\mu_4\mu_3}^{ee}$ και $V_{\mu_1\mu_2\mu\mu_4}^{ee} = V_{\mu_2\mu_1\mu_4\mu}^{ee}$, οπότε η σχέση (E'.7) γράφεται:

$$[c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{ee}] = \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu_2}^{\dagger} c_{\mu_3} c_{\mu_4}$$

$$+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_4} c_{\mu_1} \quad (\text{E'.9})$$

Αντικαθιστώντας τον μεταθέτη στην εξίσωση Heisenberg, προκύπτει:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{ee} &= \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} \langle c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3}^\dagger c_{\mu_4} c_{\mu_2} \rangle \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_4}^{ee} \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_4} c_{\mu_1} \rangle \end{aligned} \quad (\text{E'.10})$$

Η παραπάνω εξίσωση περιέχει γινόμενα τεσσάρων τελεστών εντός της μέσης τιμής. Η κατώτερης τάξης συνεισφορά λαμβάνεται αποζευγνύοντας τους πίνακες πυκνότητας δύο σωματιδίων σε γινόμενα πινάκων πυκνότητας ενός σωματιδίου. Το προσεγγιστικό αυτό σχήμα αποσύζευξης (decoupling) καλείται Hartree-Fock προσέγγιση

$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle |_{HF} = \langle a_1^\dagger a_4 \rangle \langle a_2^\dagger a_3 \rangle - \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle. \quad (\text{E'.11})$$

Εφαρμόζοντας την προσέγγιση Hartree-Fock στην εξίσωση Heisenberg καταλήγουμε στην παρακάτω έκφραση για την χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων λόγω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{ee} &= \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} \delta_{\mu_4} f^\mu \delta_{\mu_2 \mu_3} f^{\mu_2} \\ &- \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} \delta_{\mu_3} f^\mu \delta_{\mu_2 \mu_4} f^{\mu_4} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_4}^{ee} \delta_{\mu_1} f^\mu \delta_{\mu_2 \mu_4} f^{\mu_4} \\ &- \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_4}^{ee} \delta_{\mu_2} f^\mu \delta_{\mu_1 \mu_4} f^{\mu_1} \\ &= \sum_{\mu_2} V_{\mu_2 \mu_2 \mu_2}^{ee} f^\mu f^{\mu_2} - \sum_{\mu_4} V_{\mu_4 \mu_4 \mu_4}^{ee} f^\mu f^{\mu_4} \\ &+ \sum_{\mu_4} V_{\mu_4 \mu_4 \mu_4}^{ee} f^\mu f^{\mu_4} - \sum_{\mu_1} V_{\mu_1 \mu_1 \mu_1}^{ee} f^\mu f^{\mu_1} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E'.12})$$

Όμοια υπολογίζεται η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων (ή των οπών) που οφείλεται στην αλληλεπίδραση hole-hole. Ο μεταθέτης του γινομένου $c_\mu^\dagger c_\mu$ με τον τρίτο όρο της αλληλεπίδρασης φορέα-φορέα H_{eh} , γράφεται:

$$[c_\mu^\dagger c_\mu, H_{eh}] = - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2}^{eh} c_\mu^\dagger c_\mu c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} c_{\mu}^\dagger c_{\mu} \\
& = - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu}^\dagger (\delta_{\mu \mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu}) d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} c_{\mu}^\dagger c_{\mu} \\
& = - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu}^\dagger c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} c_{\mu} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} c_{\mu}^\dagger c_{\mu} \\
& = - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu}^\dagger c_{\mu_2} c_{\mu} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} c_{\mu}^\dagger c_{\mu} \\
& = - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} (\delta_{\mu \mu_2} - c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu}) c_{\mu} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} c_{\mu}^\dagger c_{\mu} \\
& = - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu} \\
& = - \sum_{\mu_1 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_1}^{eh} c_{\mu}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_1} \\
& + \sum_{\mu_1 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu} \tag{E'.13}
\end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τον μεταθέτη στην εξίσωση Heisenberg, και λαμβάνοντας υπόψη τον ορισμό της οπτικής πόλωσης, προκύπτει τελικά:

$$i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{eh} = \sum_{\nu_1} (\Delta U_{\mu \nu_1} p_{\mu \nu_1}^* - \Delta U_{\mu \nu_1}^* p_{\mu \nu_1}) \tag{E'.14}$$

όπου:

$$\Delta U_{\mu\nu_1} = - \sum_{\mu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_1}^{eh} p_{\mu_1\nu_2} \quad (E'.15)$$

αποτελεί την "έπανακανονικοποίηση" στην ενέργεια Rabi [140]. Αθροίζοντας τις σχέσεις (E'.5) και (E'.14) προκύπτει τελικά για την χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f^{\mu e} = \sum_{\nu'} (U_{\mu\nu'}^{renorm} p_{\mu\nu'}^* - U_{\mu\nu'}^{renorm*} p_{\mu\nu'}) \quad (E'.16)$$

όπου

$$U_{\mu\nu}^{renorm} = U_{\mu\nu} - \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh} p_{\mu'\nu'} \quad (E'.17)$$

Οι Εξ.(E'.16) και (E'.17) αποτελούν την πρώτη από τις Εξ.(4.34) και την Εξ.(4.35) του κειμένου αντίστοιχα.

Παράρτημα φ'

Η εξίσωση ιδιοτιμών του εξιτονικού πίνακα

Αν θεωρήσουμε ότι Σ^λ είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα \hat{S} , τότε γράφουμε:

$$\begin{aligned}\hat{S}|\lambda\rangle &= \Sigma^\lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \\ \langle \ell|\hat{S}|\lambda\rangle &= \Sigma^\lambda\langle \ell|\lambda\rangle\end{aligned}\quad (\varphi'.1)$$

Εισάγοντας στην παραπάνω σχέση την $\sum_{\ell'} |\ell'\rangle\langle \ell'| = 1$, η οποία εκφράζει την ορθοκανονικότητα των συναρτήσεων των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και οπών, προκύπτει:

$$\sum_{\ell'} \langle \ell|\hat{S}|\ell'\rangle\langle \ell'|\lambda\rangle = \Sigma^\lambda C_\ell^\lambda \quad (\varphi'.2)$$

Λαμβάνοντας υπόψη την σχέση $\langle \ell|\lambda\rangle = C_\ell^\lambda$ προκύπτει η εξίσωση ιδιοτιμών του εξιτονικού πίνακα:

$$\sum_{\ell'} S_{\ell\ell'} C_{\ell'}^\lambda = \Sigma^\lambda C_\ell^\lambda \quad (\varphi'.3)$$

Όμοια, αποδεικνύεται η συζυγής της παραπάνω σχέσης, δηλαδή

$$\langle \lambda|\hat{S}^\dagger = \langle \lambda|\Sigma^{\lambda*} \quad (\varphi'.4)$$

Αν \hat{S} ερμιτιανός η $\varphi'.4$ γράφεται:

$$\begin{aligned}\langle \lambda|\hat{S} &= \Sigma^\lambda\langle \lambda| \\ \langle \lambda|\hat{S}|\ell'\rangle &= \Sigma^\lambda\langle \lambda|\ell'\rangle\end{aligned}\quad (\varphi'.5)$$

Λόγω της $\langle \lambda | \ell \rangle = C_\ell^{\lambda*}$ η παραπάνω γράφεται τελικά:

$$\sum_{\ell} C_\ell^{\lambda*} S_{\ell\ell'} = \Sigma^\lambda C_{\ell'}^{\lambda*} \quad (\varphi'.6)$$

Το Παράρτημα αυτό αναφέρεται στην Ενότητα 4.7.2.

Παράρτημα Ζ'

Μετασχηματισμοί Fourier

Ζ'.1 Της ενέργειας Rabi στην εξιτονική εικόνα

Ο μετασχηματισμός Fourier της ενέργειας Rabi στην εξιτονική εικόνα γράφεται:

$$\bar{U}^\lambda(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{U}^\lambda(t) \exp(i\omega t) dt \quad (Z'.1)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ.(Ζ'.1) την έκφραση για την ενέργεια Rabi στην εξιτονική εικόνα προκύπτει:

$$\begin{aligned} \bar{U}^\lambda(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \bar{U}_{\ell}(t) \exp(i\omega t) dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} U_{\ell}(t) (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \exp(i\omega t) dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \left[- \int d(\mathbf{r}) \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \right] (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \exp(i\omega t) dt \\ &= - \sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \int d(\mathbf{r}) \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r}) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \exp(i\omega t) dt \right] (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\ &= - \int d(\mathbf{r}) \left(\sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} \mathbf{M}_{\ell}(\mathbf{r}) \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \end{aligned} \quad (Z'.2)$$

Z'.2 Της οπτικής πόλωσης στην εξιτονική εικόνα

Ο μετασχηματισμός Fourier της οπτικής πόλωσης γράφεται:

$$p^\lambda(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt p^\lambda(t) \exp(i\omega t) \quad (Z'.3)$$

Από την σχέση Z'.3 προκύπτουν οι αντίστροφοι μετασχηματισμοί:

$$\begin{aligned} p^{\lambda*}(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega p^{\lambda*}(-\omega) \exp(-i\omega t) \\ p^\lambda(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega p^\lambda(\omega) \exp(-i\omega t) \end{aligned} \quad (Z'.4)$$

Το Παράρτημα αυτό αναφέρεται στην Ενότητα 4.8.

Παράρτημα Η'

Έλεγχος ορθογωνιότητας των μονοσωματιδιακών καταστάσεων

Είδαμε στο κεφάλαιο 5 πως οι μονοσωματιδιακές περιβάλλουσες συναρτήσεις αναπτύσσονται σε ορθοκανονική βάση επιπέδων κυμάτων:

$$\Phi^\mu(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^\mu e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{H'.1})$$

Η συνθήκη ορθογωνιότητας των μονοσωματιδιακών καταστάσεων στον πραγματικό χώρο είναι:

$$\int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \Phi^{\mu*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mu\mu'} \quad (\text{H'.2})$$

Αντικαθιστώντας στο πρώτο μέλος της σχέσης ορθογωνιότητας (H'.2) το ανάπτυγμα (H'.2), προκύπτει:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'}^{\mu*} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{\mu'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= \\ \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}'}^{\mu*} C_{\mathbf{k}}^{\mu'} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} &= \\ \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}'}^{\mu*} C_{\mathbf{k}}^{\mu'} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') &= \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{\mu*} C_{\mathbf{k}}^{\mu'} \end{aligned} \quad (\text{H'.3})$$

όπου κάναμε χρήση της ιδιότητας:

$$\int_{\Omega} d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \Omega \delta(\mathbf{q}) \quad (\text{H'.4})$$

Έτσι, αντί της συνθήκης ορθογωνιότητας στον πραγματικό χώρο, χρησιμοποιούμε την συνθήκη ορθογωνιότητας στον χώρο των \mathbf{k} :

$$\sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{\mu*} C_{\mathbf{k}}^{\mu'} = \delta_{\mu\mu'} \quad (\text{H'.5})$$

Η σχέση αυτή είναι χρήσιμη γιατί συσχετίζει τους συντελεστές του αναπτύγματος των μονοσωματιδιακών συναρτήσεων, όπως αυτοί προκύπτουν από την λύση του προβλήματος ιδιοτιμών (5.4).

Παράρτημα Θ΄

Εφαρμογή της ορθογωνιοποίησης Gram-Schmidt στις μονοσωματιδιακές καταστάσεις

Θ΄.1 Περιγραφή της μεθόδου

Η ορθογωνιοποίηση Gram-Schmidt είναι μια μέθοδος που παίρνει ένα μη ορθογώνιο σύνολο γραμμικά ανεξάρτητων συναρτήσεων και κατασκευάζει ένα σύνολο ορθογώνιων συναρτήσεων σε ένα αυθαίρετο διάστημα χρησιμοποιώντας ένα αυθαίρετο παράγοντα βάρους w . Στην γλώσσα της Γραμμικής άλγεβρας η διαδικασία αυτή είναι ανάλογη με ένα μετασχηματισμό ομοιότητας μεταξύ ενός σετ ορθογώνιων κι ενός σετ μη ορθογώνιων συναρτήσεων. Οι συναρτήσεις μπορεί να είναι πραγματικές ή μιγαδικές. Θεωρούμε τρία σύνολα συναρτήσεων:

- το αρχικό σύνολο που περιέχει τις συναρτήσεις $u_n(x)$, $n = 1, 2, 3, \dots$, που είναι γραμμικά ανεξάρτητες, μη-ορθογώνιες και μη κανονικοποιημένες,
- ένα καινούριο σύνολο $\psi_n(x)$, $n = 1, 2, 3, \dots$ συναρτήσεων που είναι γραμμικά ανεξάρτητες, ορθογώνιες αλλά μη κανονικοποιημένες και
- το τελικό σύνολο ϕ_n που είναι οι κανονικοποιημένες $\psi_n(x)$

Η n -οστή συνάρτηση ψ_n κατασκευάζεται από την αρχική u_n συν ένα άγνωστο γραμμικό συνδυασμό των προηγούμενων ϕ_n . Η απαίτηση κάθε $\psi_n(x)$ να είναι ορθογώνια με καθεμία από τις προηγούμενες ϕ_n παρέχει τις απαραίτητες εξισώσεις για τον ορισμό των άγνωστων συντελεστών που χρησιμοποιούμε για την ανάπτυξη των

$\psi_n(x)$. Κατόπιν κανονικοποιώντας την $\psi_n(x)$ λαμβάνουμε την ϕ_n . Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για την $\psi_{n+1}(x)$. Για $n = 1$, ορίζουμε:

$$\psi_1(x) = u_1(x) \quad (\Theta'.1)$$

Κανονικοποιώντας την $\psi_1(x)$, λαμβάνουμε την ϕ_1 :

$$\phi_1(x) = \frac{\psi_1(x)}{\sqrt{\int |\psi_1|^2 w(x) dx}} \quad (\Theta'.2)$$

όπου: $w(x)$ είναι παράγοντας βάρους ο οποίος καθορίζεται από την συνθήκη κανονικοποίησης των ϕ_n ,

$$\int_a^b \phi_i^*(x) \phi_j(x) w(x) dx = \delta_{i,j} \quad (\Theta'.3)$$

Για $n = 2$ προχωρούμε στην κατασκευή της επόμενης συνάρτησης:

$$\psi_2(x) = u_2(x) + a_{21}^* \phi_1(x) \quad (\Theta'.4)$$

Απαιτούμε η $\psi_2(x)$ να είναι ορθογώνια με την $\phi_1(x)$. Αυτή η συνθήκη ορθογωνιότητας οδηγεί στην εξίσωση προσδιορισμού του άγνωστου συντελεστή a_{21} :

$$\int \psi_2^*(x) \phi_1(x) w(x) dx = \int u_2^*(x) \phi_1(x) w(x) dx + a_{21} \int |\phi_1(x)|^2 w(x) dx = 0 \quad (\Theta'.5)$$

Από την σχέση (Θ'.2) φαίνεται ότι η συνάρτηση ϕ_1 είναι κανονικοποιημένη, οπότε προκύπτει:

$$a_{21} = - \int u_2^*(x) \phi_1(x) w(x) dx \quad (\Theta'.6)$$

Έτσι στην σχέση (Θ'.4) είναι όλα γνωστά για τον υπολογισμό της $\psi_2(x)$. Κανονικοποιώντας την $\psi_2(x)$ προκύπτει η $\phi_2(x)$:

$$\phi_2(x) = \frac{\psi_2(x)}{\sqrt{\int |\psi_2|^2(x) w(x) dx}} \quad (\Theta'.7)$$

Γενικεύοντας, έχουμε:

$$\phi_i(x) = \frac{\psi_i(x)}{\sqrt{\int |\psi_i|^2(x) w(x) dx}} \quad (\Theta'.8)$$

όπου

$$\psi_i(x) = u_i + a_{i,1}^* \phi_1(x) + a_{i,2}^* \phi_2(x) + \dots + a_{i,i-1}^* \phi_{i-1}(x) \quad (\Theta'.9)$$

Οι συντελεστές a_{ij} δίνονται από την σχέση:

$$a_{ij} = - \int u_i^*(x) \phi_j(x) w(x) dx \quad (\Theta'.10)$$

Σημειώνεται ότι η σχέση (Θ'.10) είναι για κανονικοποίηση στην μονάδα. Θα δούμε τώρα πώς εφαρμόζεται η ορθογωνιοποίηση Gram-Schmidt στην κατασκευή ενός συνόλου ορθοκανονικών ιδιοδιανυσμάτων της Hamiltonian σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο.

Θ'.2 Εφαρμογή της μεθόδου στις μονοσωματιδιακές καταστάσεις που αντιστοιχούν σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο

Οι ιδιοσυναρτήσεις μας έχουν την μορφή:

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^n \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\Theta'.11)$$

Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, ορίζουμε τρία σύνολα συναρτήσεων:

- το σύνολο που αποτελείται από τις αρχικές ιδιοσυναρτήσεις μας που δίνονται από την σχέση (Θ'.11),
- το σύνολο που αποτελείται από τις συναρτήσεις

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} R_{\mathbf{k}}^n \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\Theta'.12)$$

και τέλος

- το σύνολο που αποτελείται από τις κανονικοποιημένες ψ_n :

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^n \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\Theta'.13)$$

Με βάση τους ορισμούς των συντελεστών του αναπτύγματος των συναρτήσεων σε επίπεδα κύματα $C_{\mathbf{k}}^n$, $R_{\mathbf{k}}^n$ και $G_{\mathbf{k}}^n$, θα ανάγουμε τις σχέσεις μεταξύ των συναρτήσεων στην προηγούμενη ενότητα, σε σχέσεις μεταξύ των συντελεστών τους. Η συνθήκη ορθογωνιότητας γράφεται:

$$\int_{\Omega} d^3(r) u_m^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) = \delta_{mn} \quad (\Theta'.14)$$

η οποία ανάγεται στην σχέση ορθογωνιότητας μεταξύ των συντελεστών:

$$\sum_k C_{\mathbf{k}}^{m*} C_{\mathbf{k}}^n = \delta_{mn} \quad (\Theta'.15)$$

Η παραπάνω σχέση μας υποδεικνύει να χρησιμοποιήσουμε ως παράγοντα βάρους $w(x) = 1$. Για $\mathbf{n} = \mathbf{1}$ έχουμε:

$$\psi_1(\mathbf{r}) = u_1(\mathbf{r}) \quad (\Theta'.16)$$

ή ισοδύναμα,

$$R_{\mathbf{k}}^1 = C_{\mathbf{k}}^1 \quad k = 1, nsort \quad (\Theta'.17)$$

$$\begin{aligned} [normfactor(1)]^2 &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d^3r \\ &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} R_{\mathbf{k}'}^{1*} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}} R_{\mathbf{k}}^{1*} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} R_{\mathbf{k}'}^{1*} R_{\mathbf{k}}^1 \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} |R_{\mathbf{k}}^1|^2 \end{aligned} \quad (\Theta'.18)$$

όπου κάναμε χρήση της ιδιότητας:

$$\int_{\Omega} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \Omega \delta(\mathbf{q}) \quad (\Theta'.19)$$

Αντικαθιστώντας στην (Θ'.10) τα αναπτύγματα (Θ'.11) και (Θ'.13) προκύπτει:

$$\begin{aligned} a_{\ell j} &= - \int d^3r \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{\ell*} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}'}^j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \\ &= - \frac{1}{\Omega} \sum_{kk'} C_{\mathbf{k}}^{\ell*} G_{\mathbf{k}'}^j \int d^3r \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}) \\ &= - \sum_k C_{\mathbf{k}}^{\ell*} G_{\mathbf{k}}^j \end{aligned} \quad (\Theta'.20)$$

Αντικαθιστώντας στην (Θ'.9) τα αναπτύγματα (Θ'.11), (Θ'.12) και (Θ'.13) προκύπτει:

$$\sum_{\mathbf{k}_1} R_{\mathbf{k}_1}^\ell \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_2}^\ell \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}) + \sum_j a_{\ell j} \sum_{\mathbf{k}_3} G_{\mathbf{k}_3}^\ell \exp(i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}) \quad (\Theta'.21)$$

Πολλαπλασιάζοντας την (Θ'.21) με $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ και ολοκληρώνοντας στον όγκο Ω , προκύπτει τελικά η αναδρομική σχέση που συνδέει τους συντελεστές:

$$R_{\mathbf{k}}^\ell = C_{\mathbf{k}}^\ell + \sum_j a_{\ell j}^* G_{\mathbf{k}}^\ell \quad (\Theta'.22)$$

με $j = \ell - 1$. Τέλος,

$$G_{\mathbf{k}}^\ell = \frac{R_{\mathbf{k}}^\ell}{\text{normfactor}(\ell)} \quad (\Theta'.23)$$

όπου $\text{normfactor}(\ell) = \sqrt{\sum_{\mathbf{k}} |R_{\mathbf{k}}^\ell|^2}$.

Παράρτημα Γ'

Καταστάσεις Darwin-Fock

Γ'.1 Για μηδενικό μαγνητικό πεδίο

Η κίνηση ενός ηλεκτρονίου της ζώνης αγωγιμότητας περιορισμένου σε διδιάστατο παραβολικό πηγάδι, περιγράφεται στην προσέγγιση ενεργού μάζας από την ακόλουθη Χαμιλτονιανή σε κυλινδρικές συντεταγμένες:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{m^* \omega^2}{2} \rho^2 \quad (\text{I'.1})$$

όπου m^* η ενεργός μάζα. Οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής αυτής της μορφής και οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες ορίστηκαν αναλυτικά από τους Fock και Darwin [172,173] πολύ πριν την εμφάνιση των νανοδομών. Αναζητούμε λύσεις της μορφής:

$$\psi(\rho, \phi) = R(\rho) e^{im_\ell \phi} \quad (\text{I'.2})$$

Αντικαθιστώντας την Εξ.(I'.2) στην Εξ.(I'.1) προκύπτει η εξίσωση που ικανοποιεί το ακτινικό μέρος:

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} - \frac{m^* \omega^2 \rho^2}{\hbar^2} - \frac{m_\ell^2}{\rho^2} \right) R(\rho) = 0 \quad (\text{I'.3})$$

Αντικαθιστούμε τα μεγέθη ρ και E με τις αδιάστατες μεταβλητές: $r = \rho/a_0$ και $W = E/(\hbar\omega)$. Η μεταβλητή

$$a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega}} \quad (\text{I'.4})$$

έχει διαστάσεις μήκους και παρέχει ένα μέτρο της έκτασης των καταστάσεων Darwin-Fock. Συναρτήσεϊ των νέων αδιάστατων μεταβλητών η εξίσωση που ικανοποιεί η ακτινική κυματοσυνάρτηση γίνεται:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + (2W - \frac{m_\ell^2}{r^2} - r^2)R(r) = 0 \quad (I.5)$$

Θέτουμε $\sigma = r^2$ και η I.5 γράφεται:

$$\sigma \frac{d^2 R(\sigma)}{d\sigma^2} + \frac{dR(\sigma)}{d\sigma} + (\frac{W}{2} - \frac{m_\ell^2}{4\sigma} - \frac{\sigma}{4})R(\sigma) = 0 \quad (I.6)$$

Αναζητούμε λύσεις της μορφής:

$$R(\sigma) = e^{-\sigma/2} \sigma^{|m_\ell|/2} F(\sigma) \quad (I.7)$$

Τότε, η συνάρτηση $F(\sigma)$ ικανοποιεί την εξίσωση Kummer:

$$\sigma F''(\sigma) + F'(\sigma)(|m_\ell| + 1 - \sigma) - [\frac{1}{2}(|m_\ell| + 1) - \frac{W}{2}]F(\sigma) = 0 \quad (I.8)$$

με λύσεις τα ενεργειακά επίπεδα Darwin-Fock:

$$E_{n_\rho, m_\ell} = \hbar\omega(2n_\rho + |m_\ell| + 1) \quad (I.9)$$

και τις καταστάσεις:

$$\psi_{n_\rho, m_\ell}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_0}} \sqrt{\frac{2n_\rho}{(|m_\ell| + n_\rho)!}} \left(\frac{\rho}{a_0}\right)^{|m_\ell|} e^{-\frac{\rho^2}{2a_0^2}} L_{n_\rho}^{|m_\ell|}\left(\frac{\rho^2}{a_0^2}\right) e^{im_\ell\phi} \quad (I.10)$$

όπου $L_{n_\rho}^{|m_\ell|}\left(\frac{\rho^2}{a_0^2}\right)$ τα πολυώνυμα Laguerre.

Για τις Darwin-Fock καταστάσεις χρησιμοποιούμε τον ατομικό συμβολισμό. Οι καταστάσεις με $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ συμβολίζονται ως $1, 2, 3, \dots$, ενώ οι καταστάσεις με $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ συμβολίζονται ως s, p, d, \dots . Ο εκφυλισμός των Darwin-Fock καταστάσεων είναι $D = 2n_\rho + |m_\ell| + 1$ με $n_\rho \geq 0$.

I.2 Για μαγνητικό πεδίο διαφορετικό του μηδενός

Η Χαμιλτονιανή υπό μαγνητικό πεδίο είναι:

$$\hat{H} = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m^*} + U(\mathbf{r}) \quad (I.11)$$

όπου $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2}$ είναι το διανυσματικό δυναμικό του μαγνητικού πεδίου και $U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m^*\omega^2\rho^2$ το παραβολικό περιοριστικό δυναμικό. Η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{p^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*(\omega^2 + \frac{\omega_B^2}{4})\rho^2 \pm \frac{1}{2}\omega_B\ell_z \\ &= \hat{H}_{|B=0}(\Omega) \pm \frac{1}{2}\omega_B\ell_z\end{aligned}\quad (\text{I}.12)$$

Στην παραπάνω σχέση το πρόσημο (+) αντιστοιχεί στα ηλεκτρόνια και το (-) στις οπές. Επίσης, $\omega_B = \frac{eB}{m^*}$ είναι η κυκλοτρονική συχνότητα και

$$\Omega^2 = \omega^2 + \omega_B^2/4 \quad (\text{I}.13)$$

Εισάγοντας τις καταστάσεις Darwin-Fock (σχέση Γ.10) στην Χαμιλτονιανή (I.13) προκύπτει:

$$\hat{H}\psi_{n_\rho, m_\ell}(\rho, \phi) = \hbar\Omega(2n_\rho + |m_\ell| + 1)\psi_{n_\rho, m_\ell}(\rho, \phi) \pm \frac{\hbar\omega_B}{2}m_\ell\psi_{n_\rho, m_\ell}(\rho, \phi) \quad (\text{I}.14)$$

Από την παραπάνω σχέση είναι φανερό ότι οι ιδιοκαταστάσεις έχουν ίδια μορφή, αλλά οι ιδιοενέργειες γράφονται:

$$E_{n_\rho, m_\ell} = \hbar\Omega(2n_\rho + |m_\ell| + 1) \pm \frac{\hbar\omega_B}{2}m_\ell \quad (\text{I}.15)$$

Κατά συνέπεια, το κατακόρυφο μαγνητικό πεδίο ($B//z$) αίρει τον εκφυλισμό και αλλάζει την διαφορά ενεργειών μεταξύ δύο διαδοχικών καταστάσεων.

Παράρτημα ΙΑ΄

Υπολογισμός των στοιχείων πίνακα Coulomb

Τα στοιχεία πίνακα Coulomb ορίζονται ως:

$$V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} \equiv \int d^3\mathbf{r}_e \int d^3\mathbf{r}_h \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}_e) \Phi^{\mu' e}(\mathbf{r}_e) \frac{e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}_h) \Phi^{\nu' h}(\mathbf{r}_h) \quad (\text{IA}' .1)$$

Αντικαθιστώντας τις μονοσωματιδιακές περιβάλλουσες κυματοσυναρτήσεις

$$\Phi^\mu(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^\mu e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{IA}' .2)$$

στην σχέση (IA'.1) προκύπτει:

$$V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} = \frac{e^2}{\kappa_0 \Omega^2} \sum_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_h, \mathbf{k}'_h} C_{\mathbf{k}_e}^{\mu*} C_{\mathbf{k}'_e}^{\mu'} C_{\mathbf{k}_h}^{\nu*} C_{\mathbf{k}'_h}^{\nu'} \int d^3\mathbf{r}_e \int d^3\mathbf{r}_h e^{-i\mathbf{q}_e \mathbf{r}_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} e^{-i\mathbf{q}_h \mathbf{r}_h} \quad (\text{IA}' .3)$$

όπου $\mathbf{q}_{e/h} = \mathbf{k}_{e/h} - \mathbf{k}'_{e/h}$.

Καλούμε $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$. Εκ των \mathbf{r} , \mathbf{r}_e , \mathbf{r}_h τα δύο είναι ανεξάρτητα. Έτσι αντί για δύο ολοκληρώματα στα \mathbf{r}_e , \mathbf{r}_h μπορούμε να έχουμε δύο ολοκληρώματα στα \mathbf{r} , \mathbf{r}_h . Έτσι προκύπτει:

$$V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} = \frac{e^2}{\kappa_0 \Omega^2} \sum_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_h, \mathbf{k}'_h} C_{\mathbf{k}_e}^{\mu*} C_{\mathbf{k}'_e}^{\mu'} C_{\mathbf{k}_h}^{\nu*} C_{\mathbf{k}'_h}^{\nu'} \int d^3\mathbf{r}_h e^{-i(\mathbf{q}_e + \mathbf{q}_h) \mathbf{r}_h} \int d^3\mathbf{r} \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}_e \mathbf{r}} \quad (\text{IA}' .4)$$

Ορίζοντας τον μετασχηματισμό Fourier ως:

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{IA'.5})$$

και την δέλτα συνάρτηση ως:

$$\delta(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (\text{IA'.6})$$

η σχέση (IA'.4) γράφεται:

$$\begin{aligned} V_{\mu\mu',\nu\nu'}^{eh} &= \frac{e^2}{\kappa_0\Omega^2} \sum_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_h, \mathbf{k}'_h} C_{\mathbf{k}_e}^{\mu*} C_{\mathbf{k}'_e}^{\mu'} C_{\mathbf{k}_h}^{\nu*} C_{\mathbf{k}'_h}^{\nu'} \times \\ &\quad \Omega \delta(-\mathbf{q}_h - \mathbf{q}_e) \frac{4\pi}{q_e^2} \Omega \\ &= \frac{e^2}{\kappa_0} \sum_{\mathbf{q}_e, \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_h} C_{(\mathbf{k}'_e + \mathbf{q}_e)}^{\mu*} C_{\mathbf{k}'_e}^{\mu'} C_{\mathbf{k}_h}^{\nu*} C_{(\mathbf{k}_h + \mathbf{q}_e)}^{\nu'} \frac{4\pi}{q_e^2} \end{aligned} \quad (\text{IA'.7})$$

Η Εξ.(IA'.7) είναι η Εξ.(5.6) του κειμένου.

Παράρτημα IB'

Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\varrho_{\mu\nu}(t)$

IB'.1 Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\varrho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στο σύστημα των ελεύθερων φορέων

Με βάση την εξίσωση του Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varrho_{\mu\nu}(t)|_{sp} = [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{sp}] \quad (\text{IB'.1})$$

Αντικαθιστώντας στον μεταθέτη την Hamiltonian του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων από την σχέση B'.5 προκύπτει:

$$\begin{aligned} [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{sp}] &= \sum_{\mu'} E^{\mu'e} d_{\nu} c_{\mu} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} + \sum_{\nu'} E^{\nu'h} d_{\nu} c_{\mu} d_{\nu'}^{\dagger} d_{\nu'} \\ &- \sum_{\mu'} E^{\mu'e} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} d_{\nu} c_{\mu} - \sum_{\nu'} E^{\nu'h} d_{\nu'}^{\dagger} d_{\nu'} d_{\nu} c_{\mu} \\ &= \sum_{\mu'} E^{\mu'e} d_{\nu} (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu}) c_{\mu'} + \sum_{\nu'} E^{\nu'h} (\delta_{\nu\nu'} - d_{\nu'}^{\dagger} d_{\nu}) d_{\nu'} c_{\mu} \\ &- \sum_{\mu'} E^{\mu'e} c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu'} d_{\nu} c_{\mu} - \sum_{\nu'} E^{\nu'h} d_{\nu'}^{\dagger} d_{\nu'} d_{\nu} c_{\mu} \\ &= E^{\mu e} \varrho_{\mu\nu} + E^{\nu h} \varrho_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (\text{IB'.2})$$

IB'.2 Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\varrho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών

Όπως και στα προηγούμενα η χρονική μεταβολή δίνεται από:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varrho_{\mu\nu}(t)|_{eh} = [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{eh}] \quad (\text{IB'.3})$$

όπου:

$$H_{eh} = - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \quad (\text{IB'.4})$$

Αντικαθιστώντας την Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης, ο μεταθέτης $[\varrho_{\mu\nu}(t), H_{eh}]$ γράφεται:

$$\begin{aligned} [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{eh}] &= - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} d_{\nu} c_{\mu} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{ceh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} d_{\nu} c_{\mu} \\ &= - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} d_{\nu} (\delta_{\mu\mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu}) d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} d_{\nu} c_{\mu} \\ &= - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} d_{\nu} \delta_{\mu\mu_1} d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} d_{\nu} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu} d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} d_{\nu} c_{\mu} \\ &= - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu\nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} d_{\nu} d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} d_{\nu} c_{\mu} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} (\delta_{\nu\nu_1} - d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu}) c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu} d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &= - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu\nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} (\delta_{\nu\nu_1} - d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu}) d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_2} V_{\mu_1 \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu} d_{\nu_2} c_{\mu_2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\mu_1\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu_1\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_{\nu_1}^\dagger d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu_1\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_{\nu_1}^\dagger d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2\nu_2} V_{\mu\nu\nu_2\mu_2}^{eh} d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_{\nu_1}^\dagger d_\nu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1\mu_2\nu_2} V_{\mu_1\nu\nu_2\mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \tag{IB'.5}
\end{aligned}$$

Με βάση την παραπάνω εξίσωση, η χρονική μεταβολή γράφεται:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{\mu\nu}(t)|_{eh} & = - \sum_{\mu_2\nu_2} V_{\mu\nu\nu_2\mu_2}^{eh} \varphi_{\mu_2\nu_2} + \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_{\nu_1}^\dagger d_\nu \varphi_{\nu_2\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1\mu_2\nu_2} V_{\mu_1\nu\nu_2\mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger c_\mu \varphi_{\nu_2\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2\nu_2} V_{\mu\nu\nu_2\mu_2}^{eh} \varphi_{\mu_2\nu_2} \\
& + \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} (\delta_{\nu\nu_1} - d_\nu d_{\nu_1}^\dagger) d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& - \sum_{\mu_1\mu_2\nu_2} V_{\mu_1\nu\nu_2\mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_\mu c_{\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_\nu d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& - \sum_{\mu_1\mu_2\nu_2} V_{\mu_1\nu\nu_2\mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_\mu c_{\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_\nu (\delta_{\nu_2\nu_1} - d_{\nu_2} d_{\nu_1}^\dagger) c_{\mu_2} \\
& - \sum_{\mu_1\mu_2\nu_2} V_{\mu_1\nu\nu_2\mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_\mu c_{\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_1\mu_2}^{eh} d_\nu c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_\nu d_{\nu_2} d_{\nu_1}^\dagger c_{\mu_2} \\
& - \sum_{\mu_1\mu_2\nu_2} V_{\mu_1\nu\nu_2\mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_\mu c_{\mu_2} \\
& = \sum_{\mu_2\nu_1\nu_2} V_{\mu\nu_1\nu_2\mu_2}^{eh} d_\nu d_{\nu_2} d_{\nu_1}^\dagger c_{\mu_2}
\end{aligned}$$

$$- \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_\mu c_{\mu_2}. \quad (\text{IB'.6})$$

Όμως με βάση το Hartree-Fock (E'.11) σχήμα αποσύζευξης

$$\begin{aligned} \langle d_\nu d_{\nu_2} d_{\nu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle &= \langle d_\nu c_{\mu_2} \rangle \langle d_{\nu_2} d_{\nu_1}^\dagger \rangle - \langle d_\nu d_{\nu_1}^\dagger \rangle \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle \\ &= \langle d_\nu c_{\mu_2} \rangle \delta_{\nu_1 \nu_2} (1 - f^{\nu_1 h}) - \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle (1 - f^{\nu h}) \delta_{\nu \nu_1} \end{aligned} \quad (\text{IB'.7})$$

και

$$\begin{aligned} \langle c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_\mu c_{\mu_2} \rangle &= \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle \langle d_{\nu_2} c_\mu \rangle - \langle c_{\mu_1}^\dagger c_\mu \rangle \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle \\ &= \delta_{\mu_1 \mu_2} f^{\mu_2 e} \langle d_{\nu_2} c_\mu \rangle - \delta_{\mu_1 \mu} f^{\mu e} \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{IB'.8})$$

Η χρονική μεταβολή της οπτικής πόλωσης γράφεται:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_{\mu\nu}(t) \rangle|_{eh} &= \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu\nu_2 \nu_2 \mu_2}^{eh} \langle d_\nu c_{\mu_2} \rangle (1 - f^{\nu_2 h}) \\ &\quad - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu\nu_2 \mu_2}^{eh} \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle (1 - f^{\nu h}) \\ &\quad - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu_2 \nu_2 \mu_2}^{eh} f^{\mu_2 e} \langle d_{\nu_2} c_\mu \rangle \\ &\quad + \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu\nu_2 \mu_2}^{eh} f^{\mu e} \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle \\ &= - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu\nu_2 \mu_2}^{eh} \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}), \end{aligned} \quad (\text{IB'.9})$$

όπου λάβαμε μηδενικά τα στοιχεία πίνακα Coulomb $V_{\mu\nu_1 \nu_1 \mu_2}^{eh}$, $V_{\mu\nu_2 \nu_2 \mu_2}^{eh}$ και $V_{\mu_2 \nu_2 \mu_2}^{eh}$, γιατί το ηλεκτρόνιο και η οπή κατά την σκέδασή τους δεν αλλάζουν θέση ή κατάσταση.

IB'.3 Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\rho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων

Με βάση την εξίσωση του Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mu\nu}(t)|_{ee} = [\rho_{\mu\nu}(t), H_{ee}] \quad (\text{IB'.10})$$

όπου:

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \quad (\text{IB'.11})$$

Αντικαθιστώντας την παραπάνω Χαμιλτονιανή, ο μεταθέτης $[\varphi_{\mu\nu}(t), H_{ee}]$ γράφεται:

$$\begin{aligned} [\varphi_{\mu\nu}(t), H_{ee}] &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} d_\nu c_\mu V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} d_\nu c_\mu \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} d_\nu (\delta_{\mu\mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_\mu) V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} d_\nu c_\mu \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_\mu c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} d_\nu c_\mu \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger (\delta_{\mu\mu_2} - c_{\mu_2}^\dagger c_\mu) c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} d_\nu c_\mu \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu\mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} d_\nu c_\mu \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} d_\nu c_\mu \end{aligned} \quad (\text{IB'.12})$$

Κάνοντας την εναλλαγή $\mu_3 \leftrightarrow \mu_4$ στον πρώτο όρο του δεξιού μέλους και θέτοντας $\mu_1 = \mu_2$, η παραπάνω σχέση παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} [\wp_{\mu\nu}(t), H_{ee}] &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu\mu_1\mu_4\mu_3}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_4} c_{\mu_3} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &= - \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4}. \end{aligned} \quad (\text{IB'}.13)$$

Η χρονική μεταβολή της οπτικής πόλωσης γίνεται:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \wp_{\mu\nu}(t) \rangle |_{ee} = - \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} \langle d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \rangle. \quad (\text{IB'}.14)$$

Εφαρμόζοντας το Hartree-Fock σχήμα αποσύζευξης (E'.11) και θεωρώντας μηδενικά τα μη διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας που αντιστοιχούν στις ενδοζωνικές (intraband) πολώσεις

$$\begin{aligned} \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle &= \delta_{\mu_1\mu_2} f^{\mu_1 e} \\ \langle d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} \rangle &= \delta_{\nu_1\nu_2} f^{\nu_1 h}, \end{aligned} \quad (\text{IB'}.15)$$

προκύπτει:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \wp_{\mu\nu}(t) \rangle |_{ee} &= - \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} (\langle d_\nu c_{\mu_4} \rangle \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_3} \rangle - \langle d_\nu c_{\mu_3} \rangle \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_4} \rangle) \\ &= - \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} (\delta_{\mu_1\mu_3} f^{\mu_1 e} \langle d_\nu c_{\mu_4} \rangle - \delta_{\mu_1\mu_4} f^{\mu_1 e} \langle d_\nu c_{\mu_3} \rangle) \\ &= - \sum_{\mu_1\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu_4}^{ee} \langle d_\nu c_{\mu_4} \rangle f^{\mu_1 e} \\ &+ \sum_{\mu_1\mu_3} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_1}^{ee} \langle d_\nu c_{\mu_3} \rangle f^{\mu_1 e}. \end{aligned} \quad (\text{IB'}.16)$$

Όμως από τον ορισμό των στοιχείων πίνακα Coulomb ο όρος

$$V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_1}^{ee} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_3}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\mu_3}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_1}(\mathbf{r}) \quad (\text{IB'}.17)$$

όπου το ηλεκτρόνιο κατά την σκέδασή του δεν αλλάζει ούτε θέση ούτε κατάσταση είναι μηδενικός. Έτσι, η χρονική μεταβολή της οπτικής πόλωσης γράφεται:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \wp_{\mu\nu}(t) \rangle |_{ee} = - \sum_{\mu_1\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu_4}^{ee} \langle d_\nu c_{\mu_4} \rangle f^{\mu_1 e} \quad (\text{IB'}.18)$$

Όμοια υπολογίζεται η χρονική μεταβολή του τελεστή $\varrho_{\mu\nu}(t)$ εξαιτίας της αλληλεπίδρασης $h - h$.

IB'.4 Η χρονική μεταβολή του τελεστή $\varrho_{\mu\nu}(t)$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varrho_{\mu\nu}(t)|_{c\gamma} = [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{c\gamma}] \quad (\text{IB'.19})$$

όπου:

$$H_{c\gamma} = \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} [\mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu} - \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t) \varrho_{\mu\nu}^\dagger] \quad (\text{IB'.20})$$

Θέτουμε:

$$\begin{aligned} H_{c\gamma 1} &= C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu} \\ H_{c\gamma 2} &= -C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t) \varrho_{\mu\nu}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{IB'.21})$$

όπου $C = \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i$. Για λόγους ευκολίας, θα υπολογίσουμε τον μεταθέτη του $\varrho_{\mu\nu}(t)$ με κάθε όρο της παραπάνω Χαμιλτονιανής χωριστά:

$$\begin{aligned} [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{c\gamma 1}] &= C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \varrho_{\mu\nu} \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu'\nu'} \\ &\quad - C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger(t) \varrho_{\mu'\nu'} \varrho_{\mu\nu} \\ &= C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger d_\nu d_{\nu'} c_\mu c_{\mu'} \\ &\quad - C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger d_{\nu'} d_\nu c_{\mu'} c_\mu = 0 \end{aligned} \quad (\text{IB'.22})$$

και

$$\begin{aligned} [\varrho_{\mu\nu}(t), H_{c\gamma 2}] &= -C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \varrho_{\mu\nu} \alpha_{q'} \varrho_{\mu'\nu'}^\dagger \\ &\quad + C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_{q'} \varrho_{\mu'\nu'}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 d_\nu c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger \\
&+ C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
&= -C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 (\delta_{\nu\nu'} - d_{\nu'}^\dagger d_\nu) c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger \\
&+ C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
&= -C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger \\
&+ C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 d_{\nu'}^\dagger d_\nu (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^\dagger c_\mu) \alpha_{q'} \\
&+ C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
&= -C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger \\
&+ C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu'}^0 d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
&= -C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^\dagger c_\mu) \alpha_{q'} \\
&+ C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu'}^0 d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
&= -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_{q'} + C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 c_{\mu'}^\dagger c_\mu \alpha_{q'} \\
&+ C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu'}^0 d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'}. \tag{IB'.23}
\end{aligned}$$

Η χρονική μεταβολή της οπτικής πόλωσης γράφεται:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_{\mu\nu}(t) \rangle_{c\gamma} &= -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \rangle \\
&+ C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \delta_{\mu\mu'} f^{\mu e} \langle \alpha_{q'} \rangle \\
&+ C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu'}^0 \delta_{\mu\nu'} f^{\nu h} \langle \alpha_{q'} \rangle \\
&= -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}). \tag{IB'.24}
\end{aligned}$$

IB'.5 Η εξίσωση της οπτικής πόλωσης στο η-μικλασσικό όριο

Συγκεντρώνοντας όλους τους παραπάνω όρους και η εξίσωση της οπτικής πόλωσης γίνεται τελικά:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial p_{\mu\nu}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'\nu'} (E_{\mu\mu'}^{e,renorm} \delta_{\nu\nu'} + E_{\nu\nu'}^{h,renorm} \delta_{\mu\mu'}) p_{\mu'\nu'} \\
 &- \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mu'\nu'} V_{\mu\nu\nu'\mu'}^{eh} p_{\mu'\nu'} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\
 &- C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h})
 \end{aligned} \tag{IB'.25}$$

Η Εξ.(IB'.25) είναι η Εξ.(6.7) του κειμένου.

Παράρτημα ΙΓ'

Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle$

ΙΓ'.1 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle$ που οφείλεται στο σύστημα των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων

Με βάση την εξίσωση του Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t) \rangle |_\gamma = \langle [\alpha_q^\dagger(t) \alpha_{q'}(t), H_\gamma] \rangle \quad (\text{ΙΓ'.1})$$

Αντικαθιστώντας στον μεταθέτη την Hamiltonian του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων από την σχέση (6.4) προκύπτει:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger \alpha_{q'}, H_\gamma] &= \sum_{q''} \hbar \omega_{q''} \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \alpha_{q''}^\dagger \alpha_{q''} - \sum_{q''} \hbar \omega_{q''} \alpha_{q''}^\dagger \alpha_{q''} \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\ &= \sum_{q''} \hbar \omega_{q''} \alpha_q^\dagger (\delta_{q'q''} + \alpha_{q''}^\dagger \alpha_{q'}) \alpha_{q''} - \sum_{q''} \hbar \omega_{q''} \alpha_{q''}^\dagger (\delta_{qq''} + \alpha_q^\dagger \alpha_{q''}) \alpha_{q'} \\ &= \hbar (\omega_{q'} - \omega_q) \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \end{aligned} \quad (\text{ΙΓ'.2})$$

182 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle$

II'.2 Η χρονική μεταβολή $\langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων

Έχουμε δει ότι:

$$[\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}, H_{c\gamma}] = [\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}, H_{c\gamma_1}] + [\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}, H_{c\gamma_2}] \quad (\text{II'.3})$$

με

$$\begin{aligned} H_{c\gamma_1} &= C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu} \\ H_{c\gamma_2} &= -C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t) \varrho_{\mu\nu}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{II'.4})$$

και $C = \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i$.

Ο πρώτος όρος γράφεται:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}, H_{c\gamma_1}] &= C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \alpha_{q''}^\dagger \varrho_{\mu\nu} - C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_{q''}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\ &= C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger (\delta_{q'q''} + \alpha_{q''}^\dagger \alpha_{q'}) \varrho_{\mu\nu} - C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_{q''}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\ &= C \sum_{\mu\nu} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (\text{II'.5})$$

Ο δεύτερος όρος γράφεται:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger\alpha_{q'}, H_{c\gamma_2}] &= -C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \alpha_{q''} \varrho_{\mu\nu}^\dagger + C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_{q''} \varrho_{\mu\nu}^\dagger \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\ &= C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger + \alpha_{q''} \alpha_{q'} \varrho_{\mu\nu}^\dagger + C \sum_{q''\mu\nu} \omega_{q''}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 (\delta_{q''q} + \alpha_q^\dagger \alpha_{q''}) \alpha_{q''} \varrho_{\mu\nu}^\dagger \\ &= C \sum_{\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_{q'} \varrho_{\mu\nu}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{II'.6})$$

Είναι προφανές ότι οι χρονικές μεταβολές $\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle|_{sp}$ και $\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle|_{cc}$ ισούνται με μηδέν εφόσον οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των φωτονίων αντιμετατίθεται με τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των φορέων. Αθροίζοντας τις παραπάνω συνεισφορές προκύπτει η εξίσωση:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t)\alpha_{q'}(t) \rangle = \hbar(\omega_{q'} - \omega_q) \langle \alpha_q^\dagger\alpha_{q'} \rangle$$

$$\begin{aligned}
& + \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle \\
& + \mathbf{A}_{\gamma_0}^{1/2} i \sum_{\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_{q'} \varrho_{\mu\nu}^\dagger \rangle
\end{aligned} \tag{ΙΓ'.7}$$

Η Εξ. (ΙΓ'.7) είναι η Εξ. (6.50) του κειμένου.

Παράρτημα ΙΔ΄

Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$

ΙΔ΄.1 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στο σύστημα των ελεύθερων φορέων

Με βάση την εξίσωση του Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{sp} = \langle [\alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t), H_{sp}] \rangle \quad (\text{ΙΔ΄.1})$$

Αντικαθιστώντας στον μεταθέτη την Hamiltonian του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων από την σχέση (Β΄.5) προκύπτει:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t), H_{sp}] &= \sum_{\mu'} E^{\mu'e} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu c_{\mu'}^\dagger c_{\mu'} + \sum_{\nu'} E^{\nu'h} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu d_{\nu'}^\dagger d_{\nu'} \\ &- \sum_{\mu'} E^{\mu'e} \alpha_q^\dagger c_{\mu'}^\dagger c_{\mu'} d_\nu c_\mu - \sum_{\nu'} E^{\nu'h} \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_{\nu'} d_\nu c_\mu \\ &= \sum_{\mu'} E^{\mu'e} \alpha_q^\dagger d_\nu (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^\dagger c_{\mu'}) c_{\mu'} + \sum_{\nu'} E^{\nu'h} \alpha_q^\dagger (\delta_{\nu\nu'} - d_{\nu'}^\dagger d_{\nu'}) c_\mu d_{\nu'} \\ &- \sum_{\mu'} E^{\mu'e} \alpha_q^\dagger c_{\mu'}^\dagger c_{\mu'} d_\nu c_\mu - \sum_{\nu'} E^{\nu'h} \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_{\nu'} d_\nu c_\mu \\ &= E^{\mu'e} \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} + E^{\nu'h} \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (\text{ΙΔ΄.2})$$

Γράφουμε τελικά

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{sp} = (E^{\mu e} + E^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \rangle \quad (\text{IΔ'.3})$$

IΔ'.2 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών

Όπως και στα προηγούμενα η χρονική μεταβολή δίνεται από:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{eh} = \langle [\alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t), H_{eh}] \rangle \quad (\text{IΔ'.4})$$

όπου:

$$H_{eh} = - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \quad (\text{IΔ'.5})$$

Αντικαθιστώντας την Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης, ο μεταθέτης $[\alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t), H_{eh}]$ γράφεται:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t), H_{eh}] &= - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} c_{\mu_1} \\ &= - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} (\delta_{\mu\mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_1}) d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} c_{\mu_1} \\ &= - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} \delta_{\mu\mu_1} d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_1} d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} d_{\nu_1} c_{\mu_1} \\ &= - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu\nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1} d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\ &+ \sum_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} d_{\nu_1} c_{\mu_1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger (\delta_{\nu \nu_1} - d_{\nu_1}^\dagger d_\nu) c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger (\delta_{\nu \nu_1} - d_{\nu_1}^\dagger d_\nu) d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_2} V_{\mu_1 \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& - \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu_1 \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& = - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger d_\nu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& + \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_2} V_{\mu_1 \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} \alpha_q^\dagger c_{\mu_1}^\dagger c_\mu d_{\nu_2} c_{\mu_2} \\
& = \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_2} V_{\mu_1 \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} c_\mu \\
& + \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} d_\nu d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger c_{\mu_2} \tag{IΔ'.6}
\end{aligned}$$

Με βάση την παραπάνω εξίσωση, η χρονική μεταβολή γράφεται:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{eh} & = \sum_{\mu_1 \mu_2 \nu_2} V_{\mu_1 \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} \langle c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} c_\mu \rangle \\
& + \sum_{\mu_2 \nu_1 \nu_2} V_{\mu \nu_1 \nu_2 \mu_2}^{eh} \langle d_\nu d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle. \tag{IΔ'.7}
\end{aligned}$$

Η εξίσωση IΔ'.7 περιέχει μέσες τιμές της μορφής $\langle \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \widehat{O}_F \alpha_3 \alpha_4 \rangle$, δηλαδή γινόμενα τεσσάρων τελεστών σωματιδίων κι ενός τελεστή μποζονίου (\widehat{O}_F). Η αποσύζευξη αυτών στα πλαίσια του γενικευμένου σχήματος Hartree-Fock γίνεται βάσει της σχέσης [25]:

$$\begin{aligned}
\langle \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \widehat{O}_F \alpha_3 \alpha_4 \rangle & = \langle \widehat{O}_F \rangle \langle \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_3 \alpha_4 \rangle_{HF} \\
& + \langle \alpha_1^\dagger \widehat{O}_F \alpha_4 \rangle \langle \alpha_2^\dagger \alpha_3 \rangle \\
& - \langle \alpha_1^\dagger \widehat{O}_F \alpha_3 \rangle \langle \alpha_2^\dagger \alpha_4 \rangle \\
& - \langle \widehat{O}_F \rangle \langle \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_3 \alpha_4 \rangle_{HF} \\
& + \langle \alpha_2^\dagger \widehat{O}_F \alpha_3 \rangle \langle \alpha_1^\dagger \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \langle \alpha_2^\dagger \widehat{O}_F \alpha_4 \rangle \langle \alpha_1^\dagger \alpha_3 \rangle \\
& - \langle \widehat{O}_F \rangle \langle \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_3 \alpha_4 \rangle_{HF}
\end{aligned} \tag{ΙΔ'.8}$$

Επιπλέον θεωρούμε μηδενικά τα μη διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας που αντιστοιχούν στις ενδοζωνικές πολώσεις::

$$\begin{aligned}
\langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle &= \delta_{\mu_1 \mu_2} f^{\mu_1 e} \\
\langle d_{\nu_1}^\dagger d_{\nu_2} \rangle &= \delta_{\nu_1 \nu_2} f^{\nu_1 h}
\end{aligned} \tag{ΙΔ'.9}$$

Εφαρμόζοντας τα παραπάνω προσεγγιστικά σχήματα ΙΔ'.8 και ΙΔ'.9 οι μέσες τιμές γράφονται:

$$\begin{aligned}
\langle c_{\mu_1}^\dagger d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} c_\mu \rangle &= \langle c_{\mu_1}^\dagger \alpha_q^\dagger c_\mu \rangle \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle \\
& - \langle c_{\mu_1}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} \rangle \langle d_{\nu_2} c_\mu \rangle + \langle c_{\mu_1}^\dagger c_\mu \rangle \langle d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} \rangle \\
& - \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle \langle d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger c_\mu \rangle \\
& = \delta_{\mu_1 \mu} f^{\mu_1 e} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu_2 \nu_2} \rangle - \delta_{\mu_1 \mu_2} f^{\mu_2 e} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu \nu_2} \rangle
\end{aligned} \tag{ΙΔ'.10}$$

και

$$\begin{aligned}
\langle d_\nu d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger c_{\mu_2} \rangle &= \langle d_\nu \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} \rangle \langle d_{\nu_2} d_{\nu_1}^\dagger \rangle - \langle d_\nu \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger \rangle \langle d_{\nu_2} c_{\mu_2} \rangle \\
& + \langle d_\nu c_{\mu_2} \rangle \langle d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger d_{\nu_1}^\dagger \rangle - \langle d_\nu d_{\nu_1}^\dagger \rangle \langle d_{\nu_2} \alpha_q^\dagger c_{\mu_2} \rangle \\
& = -\delta_{\nu_1 \nu_2} f^{\nu_2 h} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu_2 \nu} \rangle - \delta_{\nu_1 \nu} (1 - f^{\nu_1 h}) \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu_2 \nu_2} \rangle
\end{aligned} \tag{ΙΔ'.11}$$

Στην μη συνεκτική φωτοφωταύγεια, οι όροι της μορφής $\langle d_{\nu_i} c_{\mu_j} \rangle$ που εκφράζουν οπτική πόλωση είναι μηδενικοί. Έτσι, η χρονική μεταβολή της ποσότητας $\langle \alpha_q^\dagger(t) \wp_{\mu\nu}(t) \rangle$ λόγω της Χαμιλτονιανής της Coulomb αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών γράφεται τελικά:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \wp_{\mu\nu}(t) \rangle |_{eh} &= \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu\nu\nu_2\mu_2}^{eh} f^{\mu e} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu_2 \nu_2} \rangle \\
& - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu_2 \nu \nu_2 \mu_2}^{eh} f^{\mu_2 e} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu \nu_2} \rangle \\
& - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu \nu_2 \nu_2 \mu_2}^{eh} f^{\nu_2 h} \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu_2 \nu} \rangle \\
& - \sum_{\mu_2 \nu_2} V_{\mu\nu\nu_2\mu_2}^{eh} (1 - f^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \wp_{\mu_2 \nu_2} \rangle.
\end{aligned} \tag{ΙΔ'.12}$$

188 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle$

Όμως από τον ορισμό των στοιχείων πίνακα Coulomb οι όροι

$$V_{\mu_2\nu_2\mu_2}^{eh} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_2*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\nu_2}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_2}(\mathbf{r}) \quad (\text{I}\Delta'.13)$$

και

$$V_{\mu\nu_2\nu_2\mu_2}^{eh} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu_2*}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\nu_2}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_2}(\mathbf{r}), \quad (\text{I}\Delta'.14)$$

όπου το ηλεκτρόνιο και η οπή κατά την σκέδασή τους δεν αλλάζουν ούτε θέση ούτε κατάσταση είναι μηδενικοί. Έτσι η χρονική μεταβολή παίρνει τελικά την μορφή:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{eh} = - \sum_{\mu_2\nu_2} V_{\mu\nu_2\mu_2}^{eh} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu_2\nu_2} \rangle. \quad (\text{I}\Delta'.15)$$

IΔ'.3 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{ee} = \langle [\alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t), H_{ee}] \rangle \quad (\text{I}\Delta'.16)$$

όπου:

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \quad (\text{I}\Delta'.17)$$

Αντικαθιστώντας την παραπάνω Χαμιλτονιανή, ο μεταθέτης $[\alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t), H_{ee}]$ γράφεται:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t), H_{ee}] &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu (\delta_{\mu\mu_1} - c_{\mu_1}^\dagger c_\mu) V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} \alpha_q^\dagger d_\nu c_{\mu_1}^\dagger c_\mu c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_2}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} \alpha_q^\dagger d_\nu c_{\mu_1}^\dagger (\delta_{\mu\mu_2} - c_{\mu_2}^\dagger c_\mu) c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4}^{ee} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_2}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_3 \mu_4}^{ee} d_\nu c_{\mu_1}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \tag{ΙΔ'.18}
\end{aligned}$$

Η χρονική μεταβολή γράφεται:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |ee\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} \langle d_\nu c_{\mu_2}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \rangle \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_3 \mu_4}^{ee} \langle d_\nu c_{\mu_1}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} c_{\mu_4} \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu_2 \mu_3 \mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} I_1 \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_3 \mu_4} V_{\mu_1 \mu_3 \mu_4}^{ee} I_2 \tag{ΙΔ'.19}
\end{aligned}$$

Οι όροι I_1 και I_2 περιέχουν μέσες τιμές της μορφής $\langle \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \widehat{O}_F \alpha_3 \alpha_4 \rangle$, δηλαδή γινόμενα τεσσάρων τελεστών σωματιδίων κι ενός τελεστή μπόζονιού (\widehat{O}_F). Με βάση την ΙΔ'.8 ο όρος I_2 γράφεται:

$$\begin{aligned}
I_2 &= \langle d_\nu c_{\mu_4} \rangle \langle c_{\mu_1}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} \rangle - \langle d_\nu c_{\mu_3} \rangle \langle c_{\mu_1}^\dagger \alpha_q^\dagger c_{\mu_4} \rangle \\
&- \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_4} \rangle \langle d_\nu \alpha_q^\dagger c_{\mu_3} \rangle + \langle c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_3} \rangle \langle d_\nu \alpha_q^\dagger c_{\mu_4} \rangle \tag{ΙΔ'.20}
\end{aligned}$$

Στην μη συνεκτική φωτοφωταύγεια, οι όροι της μορφής $\langle d_{\nu_i} c_{\mu_j} \rangle$ που εκφράζουν οπτική πόλωση είναι μηδενικοί. Έτσι, $I_2 = -\delta_{\mu_1 \mu_4} f^{\mu_1 e} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu_3 \nu} \rangle + \delta_{\mu_1 \mu_3} f^{\mu_1 e} \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\mu_4 \nu} \rangle$.

190 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$

Όμοια, βρίσκουμε τον όρο $I_1 = -\delta_{\mu_2\mu_4} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_3\nu} \rangle + \delta_{\mu_2\mu_3} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle$. Η σχέση ΙΔ'.19 γράφεται:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{ee} &= -\frac{1}{2} \sum_{\mu_2\mu_3\mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} \delta_{\mu_2\mu_4} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_3\nu} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_2\mu_3\mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} \delta_{\mu_2\mu_3} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} \delta_{\mu_1\mu_4} f^{\mu_1e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_3\nu} \rangle \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_3\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_4}^{ee} \delta_{\mu_1\mu_3} f^{\mu_1e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mu_2\mu_3} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_2}^{ee} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_3\nu} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_2\mu_4} V_{\mu\mu_2\mu_2\mu_4}^{ee} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_3} V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_1}^{ee} f^{\mu_1e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_3\nu} \rangle \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu_4}^{ee} f^{\mu_1e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle. \tag{ΙΔ'.21}
\end{aligned}$$

Όμως από τον ορισμό των στοιχείων πίνακα Coulomb οι όροι

$$V_{\mu_1\mu\mu_3\mu_1}^{ee} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu_1*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_1}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\mu_3}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_1}(\mathbf{r}) \tag{ΙΔ'.22}$$

και

$$V_{\mu\mu_2\mu_2\mu_4}^{ee} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Phi^{\mu*}(\mathbf{r}) \Phi^{\mu_2*}(\mathbf{r}') V^{cc}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi^{\mu_2}(\mathbf{r}') \Phi^{\mu_4}(\mathbf{r}), \tag{ΙΔ'.23}$$

όπου το ηλεκτρόνιο κατά την σκέδασή του δεν αλλάζει ούτε θέση ούτε κατάσταση είναι μηδενικοί. Η χρονική μεταβολή $\langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ γράφεται τελικά:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{ee} &= -\frac{1}{2} \sum_{\mu_1\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_1\mu_4}^{ee} f^{\mu_1e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mu_2\mu_3} V_{\mu\mu_2\mu_3\mu_2}^{ee} f^{\mu_2e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_3\nu} \rangle \\
&= -\sum_{\mu_1\mu_4} V_{\mu_1\mu\mu_4\mu_1}^{ee} f^{\mu_1e} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu_4\nu} \rangle \tag{ΙΔ'.24}
\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την σχέση: $V_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}^{ee} = V_{\mu\mu_1\mu_4\mu_1}^{ee}$, που προκύπτει από τον ορισμό των στοιχείων πίνακα Coulomb (E'.8). Όμοια υπολογίζεται η χρονική μεταβολή της ποσότητας $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ λόγω της αλληλεπίδρασης $h - h$.

ΙΔ'.4 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{c\gamma} = \langle [\alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t), H_{c\gamma}] \rangle \quad (\text{ΙΔ'.25})$$

όπου:

$$H_{c\gamma} = \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} [\mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu} - \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t)\varrho_{\mu\nu}^\dagger] \quad (\text{ΙΔ'.26})$$

Θέτουμε:

$$\begin{aligned} H_{c\gamma 1} &= C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu} \\ H_{c\gamma 2} &= -C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t)\varrho_{\mu\nu}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{ΙΔ'.27})$$

όπου $C = \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} i$. Για λόγους ευκολίας, θα υπολογίσουμε τον μεταθέτη του $\alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t)$ με κάθε όρο της παραπάνω Χαμιλτονιανής χωριστά:

$$\begin{aligned} [\alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t), H_{c\gamma 1}] &= C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu'\nu'} \\ &- C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger(t) \varrho_{\mu'\nu'} \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \\ &= C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger \alpha_q^\dagger d_\nu d_{\nu'} c_\mu c_{\mu'} \\ &- C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^{0*} \alpha_{q'}^\dagger \alpha_q^\dagger d_{\nu'} d_\nu c_{\mu'} c_\mu = 0 \end{aligned} \quad (\text{ΙΔ'.28})$$

και

$$[\alpha_q^\dagger(t)\varrho_{\mu\nu}(t), H_{c\gamma 2}] = -C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \varrho_{\mu\nu} \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu'\nu'}^\dagger$$

$$\begin{aligned}
& + C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_{q'} \delta_{\mu'\nu'}^\dagger \alpha_q^\dagger \rho_{\mu\nu} \\
& = -C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger \\
& + C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger \alpha_q^\dagger d_\nu c_\mu \\
& = -C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_q^\dagger (\delta_{\nu\nu'} - d_{\nu'}^\dagger d_\nu) c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger \\
& + C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 (\delta_{qq'} + \alpha_q^\dagger \alpha_{q'}) c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
& = -C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \alpha_q^\dagger c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger \\
& + C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^\dagger c_\mu) \alpha_{q'} \\
& + C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
& + C \sum_{q'\mu'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
& = -C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \alpha_q^\dagger c_\mu \alpha_{q'} c_{\mu'}^\dagger \\
& + C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu'}^0 \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
& + C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
& = -C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \alpha_q^\dagger (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^\dagger c_\mu) \alpha_{q'} \\
& + C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu'}^0 \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
& + C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
& = -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\
& + C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \alpha_q^\dagger c_{\mu'}^\dagger c_\mu \alpha_{q'}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
 & + C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu c_\mu \\
 & = -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \alpha_q^\dagger c_{\mu'}^\dagger c_\mu \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger (\delta_{\nu\nu'} - d_\nu d_{\nu'}^\dagger) c_\mu \\
 & = -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{q'\mu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 \alpha_q^\dagger c_{\mu'}^\dagger c_\mu \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{q'\nu'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \\
 & + C \sum_{\mu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu}^0 c_{\mu'}^\dagger c_\mu \\
 & - C \sum_{\mu'\nu'} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu'\nu'}^0 c_{\mu'}^\dagger d_\nu d_{\nu'}^\dagger c_\mu \tag{ΙΔ'.29}
 \end{aligned}$$

Εφαρμόζοντας το Hartree-Fock σχήμα αποσύζευξης προκύπτουν οι κάτωθι σχέσεις:

$$\langle \alpha_q^\dagger c_{\mu'}^\dagger c_\mu \alpha_{q'} \rangle = \delta_{\mu\mu'} f^{\mu e} \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle \tag{ΙΔ'.30}$$

$$\langle \alpha_q^\dagger d_{\nu'}^\dagger d_\nu \alpha_{q'} \rangle = \delta_{\nu\nu'} f^{\nu h} \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle \tag{ΙΔ'.31}$$

$$\langle c_{\mu'}^\dagger d_\nu d_{\nu'}^\dagger c_\mu \rangle = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} f^{\mu e} (1 - f^{\nu h}) \tag{ΙΔ'.32}$$

Οι σχέσεις (ΙΔ'.28) και (ΙΔ'.29) λόγω των Εξ. (ΙΔ'.30) γράφονται τελικά:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_{\mu\nu}(t) \rangle |_{c\gamma} & = -C \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\
 & + C \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h} \tag{ΙΔ'.33}
 \end{aligned}$$

ΙΔ'.5 Η χρονική μεταβολή του όρου $\langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle$ που οφείλεται στο σύστημα των ελευθέρων φωτονίων

Η Χαμιλτονιανή των μη αλληλεπιδρώντων φωτονίων δίνεται από την σχέση (6.4). Ο μεταθέτης της ποσότητας $\alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t)$ με την Χαμιλτονιανή αυτή, είναι:

$$\begin{aligned}
 [\alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t), H_\gamma] &= \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \alpha_{q'}^\dagger \alpha_{q'} - \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} \alpha_{q'}^\dagger \alpha_{q'} \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \\
 &= \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} \alpha_{q'}^\dagger \varrho_{\mu\nu} \alpha_{q'}^\dagger \alpha_{q'} - \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} \alpha_{q'}^\dagger (\delta_{qq'} + \alpha_q^\dagger \alpha_{q'}) \varrho_{\mu\nu} \\
 &= - \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} \alpha_{q'}^\dagger \delta_{qq'} \varrho_{\mu\nu} \\
 &= - \hbar \omega_q \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu}
 \end{aligned} \tag{ΙΔ'.34}$$

Έτσι τελικά:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle |_\gamma = - \hbar \omega_q \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle \tag{ΙΔ'.35}$$

Αθροίζοντας τις παραπάνω συνεισφορές προκύπτει τελικά:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu}(t) \rangle &= (E^{\mu e} + E^{\nu h} - \hbar \omega_q) \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu} \rangle \\
 &- \sum_{\mu' \nu'} V_{\mu\nu' \mu'}^{eh} (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu' \nu'} \rangle \\
 &- \sum_{\mu_1 \mu'} V_{\mu_1 \mu \mu_1 \mu'}^{ee} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu' \nu} \rangle f^{\mu_1 e} \\
 &- \sum_{\nu_1 \nu'} V_{\nu_1 \nu \nu_1 \nu'}^{hh} \langle \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu\nu'} \rangle f^{\nu_1 h} \\
 &- A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q'} \omega_{q'}^{1/2} M_{\mu\nu}^0 \langle \alpha_q^\dagger \alpha_{q'} \rangle (1 - f^{\mu e} - f^{\nu h}) \\
 &+ A_{\gamma 0}^{1/2} i \omega_q^{1/2} M_{\mu\nu}^0 f^{\mu e} f^{\nu h}
 \end{aligned} \tag{ΙΔ'.36}$$

Η Εξ.(ΙΔ'.36) είναι η Εξ.(6.39) του κειμένου.

Παράρτημα ΙΕ΄

Η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση με το πεδίο των φωτονίων

Έχουμε δει ότι:

$$\begin{aligned} H_{c\gamma 1} &= C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger(t) \varrho_{\mu\nu} \\ H_{c\gamma 2} &= -C \sum_{q\mu\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu\nu}^0 \alpha_q(t) \varrho_{\mu\nu}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{IE}' .1)$$

και $C = A_{\gamma 0}^{1/2} i$.

Ο μεταθέτης της ποσότητας $c_\mu^\dagger c_\mu$ με τον πρώτο όρο γράφεται:

$$\begin{aligned} [c_\mu^\dagger c_\mu, H_{c\gamma 1}] &= A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^{0*} c_\mu^\dagger c_\mu \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu'\nu} \\ &\quad - A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger \varrho_{\mu'\nu} c_\mu^\dagger c_\mu \\ &= A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^{0*} c_\mu^\dagger c_\mu \alpha_q^\dagger d_\nu c_{\mu'} \\ &\quad - A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^{0*} \alpha_q^\dagger d_\nu c_{\mu'} c_\mu^\dagger c_\mu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^{0*} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \alpha_q^{\dagger} d_{\nu} c_{\mu'} \\
&- A_{\gamma 0}^{1/2} i \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^{0*} (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'}) c_{\mu} \\
&= -i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu\nu}^{0*} \alpha_q^{\dagger} \varrho_{\mu\nu} \quad (\text{IE}' .2)
\end{aligned}$$

Ο δεύτερος όρος γράφεται:

$$\begin{aligned}
[c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu}, H_{c\gamma 2}] &= -i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^0 c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \alpha_q w p_{\mu'\nu}^{\dagger} \\
&+ i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^0 \alpha_q w p_{\mu'\nu}^{\dagger} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} \\
&= -i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu'\nu} M_{\mu'\nu}^0 \alpha_q c_{\mu}^{\dagger} (\delta_{\mu\mu'} - c_{\mu'}^{\dagger} c_{\mu}) d_{\nu}^{\dagger} \\
&+ i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\mu'\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu'\nu}^0 \alpha_q d_{\nu}^{\dagger} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} c_{\mu} \\
&= -i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\nu} \omega_q^{1/2} M_{\mu\nu}^0 \alpha_q w p_{\mu\nu}^{\dagger} \quad (\text{IE}' .3)
\end{aligned}$$

Αθροίζοντας τους όρους (IE'.2) και (IE'.3), η χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των ηλεκτρονίων γράφεται τελικά:

$$i\hbar \frac{\partial f^{\mu e}}{\partial t} |_{c\gamma} = 2i A_{\gamma 0}^{1/2} \sum_{q\nu} \omega_q^{1/2} \Im[-i \mathbf{M}_{\mu\nu}^{0*} \langle \alpha_q^{\dagger} \varrho_{\mu\nu} \rangle] \quad (\text{IE}' .4)$$

Η Εξ.(IE'.4) είναι η Εξ. (6.45) του κειμένου.

Παράρτημα Ιε'

Ο όρος των μη συνεκτικών διεργασιών στην φωτοφωταύγεια

Όπως είδαμε στο κεφάλαιο 6, η εξίσωση φωτοφωταύγειας στην γραμμική περιοχή είναι:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_\ell(t) \rangle = \sum_{\ell'} (S_{\ell\ell'} - \hbar\omega_q \delta_{\ell\ell'}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\ell'} \rangle + f^{\mu e} f^{\nu h} i \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_\ell^0 \quad (\text{Iε'.1})$$

Όπως είδαμε, για τον παραγωγή των εξισώσεων φωτοφωταύγειας στις κβαντικές τελείες, χρησιμοποιήσαμε την προσέγγιση Hartree-Fock. Στην προσέγγιση αυτή δεν περιλαμβάνονται όροι dephasing και screening, οι οποίοι εισάγονται μέσω του τελευταίου όρου του δεύτερου μέλους της Εξ. (Iε'.1). Ο επιπρόσθετος αυτός όρος, αποτελεί τον όρο των συγκρούσεων και περιλαμβάνει τις μη συνεκτικές διεργασίες (πχ. σκέδαση από φωνόνια), οι οποίες καταστρέφουν την συμφωνία φάσης που επάγει η διέγερση με το laser. Έτσι, η πλήρης εξίσωση για τον όρο συσχετισμού πεδίου φωτός και οπτικών διεγέρσεων γράφεται:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_\ell(t) \rangle = \sum_{\ell'} (S_{\ell\ell'} - \hbar\omega_q \delta_{\ell\ell'}) \langle \alpha_q^\dagger \rho_{\ell'} \rangle + f^{\mu e} f^{\nu h} i \mathbf{A}_{\gamma 0}^{1/2} \omega_q^{1/2} \mathbf{M}_\ell^0 + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha_q^\dagger(t) \rho_\ell(t) \rangle \right)_{coll} \quad (\text{Iε'.2})$$

Για τον όρο των συγκρούσεων χρησιμοποιούμε-φαινομενολογικά- την προσέγγιση του χρόνου εφησυχασμού [209] με βάση την οποία

$$\left(\frac{\partial \langle \alpha_q^\dagger(t) \varphi_\ell(t) \rangle}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{(\langle \alpha_q^\dagger \varphi_\ell \rangle)(t) - (\langle \alpha_q^\dagger \varphi_\ell \rangle^0)(t)}{\tau} \quad (I\tau'.3)$$

όπου ο όρος $\langle \alpha_q^\dagger \varphi_\ell \rangle^0(t)$ αποτελεί τον όρο συσχετισμού πεδίου φωτός και οπτικών διεγέρσεων σε θερμική ισορροπία, απουσία εξωτερικών πεδίων, δηλαδή όταν το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο του laser είναι μηδέν. Όταν η εξωτερική οπτική διέγερση η οποία επάγει συνοχή στο σύστημα, πάψει να υφίσταται, η μικροσκοπική οπτική πόλωση μειώνεται εξαιτίας των συγκρούσεων, μέχρι που μετά από χρόνο τ (dephasing time) μηδενίζεται. Άρα $\langle \alpha_q^\dagger \varphi_\ell \rangle^0(t) = 0$.

Μερική λύση της I\tau'.3 είναι: $\langle \alpha_q^\dagger \varphi_\ell \rangle(t) = \exp(-t/\tau)$. Ορίζουμε την ποσότητα

$$\gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (I\tau'.4)$$

με διαστάσεις ενέργειας, που αντιστοιχεί στον χρόνο dephasing. Η (I\tau'.2) λόγω των (I\tau'.3) και (I\tau'.4) γράφεται

$$\frac{\partial \langle \alpha_q^\dagger \varphi_\ell \rangle}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\ell'} (S_{\ell\ell'} - i\gamma\delta_{\ell\ell'} - \hbar\omega_q\delta_{\ell\ell'}) \langle \alpha_q^\dagger \varphi_{\ell'} \rangle \quad (I\tau'.5)$$

που διαφέρει από την (6.53) στο ότι έχουμε συμπεριλάβει τον όρο των συγκρούσεων. Ομοίως, ο πίνακας \hat{R} γίνεται:

$$R_{\ell\ell'} \equiv S_{\ell\ell'} - \hbar\omega\delta_{\ell\ell'} - i\gamma\delta_{\ell\ell'} \quad (I\tau'.6)$$

με εξίσωση ιδιοτιμών:

$$\sum_{\ell} C_{\ell}^{\lambda*} R_{\ell\ell'} = (E^{\lambda} - \hbar\omega - i\gamma) C_{\ell'}^{\lambda*} \quad (I\tau'.7)$$

Χρησιμοποιώντας διαδικασία ανάλογη με αυτήν των εξισώσεων (6.59) έως (6.64) προκύπτει η σχέση που δίνει την ένταση της φωτοφωταύγειας συμπεριλαμβανομένου του dephasing.

$$I_{em} = \frac{2\mathbf{A}_{\gamma 0}\omega_q}{\hbar} \Im \sum_{\lambda} \frac{\int d^3\mathbf{r} \Psi^{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \sum_{\ell} \int d^3\mathbf{r} C_{\ell}^{\lambda*} \Phi^{\mu e*}(\mathbf{r}) \Phi^{\nu h*}(\mathbf{r}) f^{\mu e} f^{\nu h}}{E^{\lambda} - \hbar\omega - i\gamma} \quad (I\tau'.8)$$

Η σχέση (I\tau'.8) είναι η σχέση (6.66) του κειμένου αντίστοιχα.

Βιβλιογραφία

- [1] N. F. Johnson, *J. Phys: Condens. Matter* **7**, 965 (1995).
- [2] C. D. Simserides, U. Hohenester, G. Goldoni, and E. Molinari, *Phys. Rev. B* **62**, 13657 (2000).
- [3] T. Saiki and K. Matsuda, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2773 (1999).
- [4] K. Matsuda, T. Saiki, S. Nomura, M. Mihara, Y. Aoyagi, S. Nair, and T. Takagahara, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 177401 (2003).
- [5] U. Hohenester, G. Goldoni, and E. Molinari, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3963 (2004).
- [6] E. Runge and C. Lienau, *Phys. Rev. B* **71**, 035347 (2005).
- [7] U. Hohenester, G. Goldoni, and E. Molinari, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 216802 (2005).
- [8] K. Von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45** 494 (1980).
- [9] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48** 1559 (1982).
- [10] S. K. Lyo, *Phys. Rev. B* **50**, 4965 (1994).
- [11] C. D. Simserides, *J. Phys: Condens. Matter* **11**, 5131 (1999).
- [12] O. N. Makarovskii, L. Smrčka, P. Vasek, T. Jungwirth, M. Cukr, L. Jansen, *Phys. Rev. B* **62**, 10908 (2000).
- [13] C. Simserides, *Phys. Rev. B* **69**, 113302 (2004).
- [14] D. Huang and S. K. Lyo, *Phys. Rev. B* **59**, 7600 (1999).

- [15] M. Orlita, R. Grill, P. Hlídek, M. Zvára, G. H. Döhler, S. Malzer, and M. Byszewski, *Phys. Rev. B* **72**, 165314 (2005).
- [16] A. S. Shkolnik, E. B. Dogonkin, V. P. Evtikhiev, E. Yu Kotelnikov, V. G. Talalaev, B. V. Novikov, J. W. Tomm and G. Gobsch, *Nanotechnology* **12**, 512 (2001).
- [17] A. Rastelli, S. Stuffer, A. Schliwa, R. Songmuang, C. Manzano, G. Costantini, K. Kern, A. Zrenner, D. Bimberg and O.G. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 166104 (2004).
- [18] R. Arians, T. Kümmell, G. Bacher, A. Gust, C. Kruse and D. Hommel, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 101114 (2007).
- [19] D. Kim, J. Lefebvre, J. Mckee, S. Studenikin, R. L. Williams, A. Sachrajda, P. Zawadzki, P. Hawrylak, W. Sheng, G. C. Aers, and P. J. Poole, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 212105 (2005).
- [20] J. T. Devreese, V. M. Fomin, V. N. Gladilin, E. P. Pokatilov and S. N. Klimin, *Nanotechnology* **13**, 163 (2002).
- [21] G. Pistone, S. Savasta, O. Di Stefano and R. Girlanda, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, S327 (2004).
- [22] C. Cornet, A. Schliwa, J. Even, F. Doré, C. Celebi, A. Letoublon, E. Macé, C. Paranthoën, A. Simon, P. M. Koenraad, N. Bertru, D. Bimberg and S. Loualiche, *Phys. Rev. B* **74**, 035312 (2006).
- [23] H. B. Wu, S. J. Xu and J. Wang, *Phys. Rev. B* **74**, 205329 (2006).
- [24] Y. H. Zhang, A. S. Plaut, J. P. Harbison and L.T. Florez, *Semicond. Sci. Technol.* **21**, 1139 (2006).
- [25] M. Kira, F. Jahnke, W. Hoyer, and S. W. Koch, *Progress in Quantum Electronics* **23**, 189 (1999).
- [26] K. Matsuda, T. Saiki, H. Saito and K. Nishi, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 73 (2000).
- [27] V. N. Lutskii, *Phys. Stat. Sol. (a)* **1**, 199 (1970).
- [28] L. V. Keldysh, *Fizika Tverdozo Tela (Sov. Phys. Solid State)* **4**, 2265 (1962).

- [29] R. Davies, and H. Hosack, *J. Appl. Phys.* **33**, 864 (1963).
- [30] L. V Iogansen, *Zh. Exp. i Teor. Fiziki (Sov. Phys. JETP)* **45**, 207 (1963).
- [31] L. V Iogansen, *Zh. Exp. i Teor. Fiziki (Sov. Phys. JETP)* **47**, 270 (1964).
- [32] A. Y Cho, *J. Vac. Sci. Technol.* **1**, 398 (1983).
- [33] R. D. Dupius, *Science* **226**, 623 (1984); R. D. Dupius, R. C. Miller and P. M. Petroff, *J. Crystal Growth* **68**, 398 (1984).
- [34] L. Esaki, and R. Tsu, *IBM Journal of Research and Development* **14**, 61 (1970).
- [35] R. F. Kazarinov, and R. A. Suris, *Fiz. I Tekh. Poluprovodn. (Sov. Phys.Semicond.)* **5**, 797 (1971); R. F. Kazarinov, and R. A. Suris, *Fiz. I Tekh. Poluprovodn. (Sov. Phys.Semicond.)* **6**, 148 (1972).
- [36] Zh. I. Alferov, Yu. V. Zhiljaev, and Yu. V. Shmartsev, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **5**, 196 (1971); Zh. I. Alferov, Yu. V. Zhiljaev, and Yu. V. Shmartsev, *Sov. Phys. Semicond.* **5**, 174 (1971).
- [37] L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- [38] R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827 (1974).
- [39] J. Christen, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B.* **42**, 7213 (1990).
- [40] E. Kapon, M. Hwang, and R. Bhat, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 430 (1989).
- [41] M. Reed, R. T. Bate, K. Bradshaw, W. M. Duncan, W. M. Frensley, J. W. Lee, and H. D. Smith, *J. Vac. Sci. Technol. B* **4**, 358 (1986).
- [42] J. Cibert, P. M. Petroff, G. J. Dolan, S. J. Pearton, A. C. Gossard and J. H. English, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1275 (1986).
- [43] H. Temkin, G. J. Dolan, M. B. Panish, and S. N. G. Chu, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 413 (1987).
- [44] K. Kash, A. Scherer, J. M. Worlock, H. G. Craighead, and M. C. Tamargo, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1043 (1986).
- [45] H. P. Rocksby, *J. Soc. Technol.* **16**, 171 (1932).

- [46] A. I. Ekimov, and A. A. Onushenko, *JETP. Lett.* **40**, 1137 (1984).
- [47] C. F. Klingshim, *Semiconductor Optics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1997).
- [48] A. P. Alivisatos, and V. L. Colvin *The Regents of the University of California, Patent Cooperation Treaty Application* May (1993) ; A. P. Alivisatos, and A. N. Goldstein, *The Regents of the University of California, United States Patent and Trademark office granted Patent* November (1993).
- [49] N. Kirstaedter, N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, S. S. Ruvimov, M. V. Maximov, P. S. Kop'ev, Zh. I. Alferon, U. Richter, P. Werner, U. Gösele, and J. Heydenreich, *Electronics. Lett.* **30**, 1416 (1994).
- [50] H. Shoji, K. Mukai, N. Ohtsuka, M. Sugawara, T. Uchida, and H. Ishikawa, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **7**, 1385 (1995).
- [51] S. Fafard, *Photonics Spectra* **31**, 160 (1997).
- [52] K. Hinzer, S. Fafard, A. J. SpringThorpe, J. Arlett, E. M. Griswold, and Y. Feng, *Physica E* **2**, 729 (1998).
- [53] R. Mirin, A. Gossard, and J. Bowers, *Electron. Lett.* **32**, 1732 (1996).
- [54] J. M. Costa-Fernandez, R. Pereiro, A. Sanz-Medel *Trends in Analytical Chemistry* **25**, 207 (2006).
- [55] R. E. Bailey, A. M. Smith and S. Nie *Physica E* **25** 1 (2004).
- [56] T. Demel, D. Heitmann, P. Grambow, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 788 (1990).
- [57] T. P. Smith, K. Y. Lee, C. M. Knoedler, J. M. Hong, and D. P. Kern, *Phys. Rev. B* **38**, 2172 (1988).
- [58] L. Jacak, *Eur. J. Phys.* **21**, 487 (2000).
- [59] C. Sikorski, and U. Merkt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2164 (1989).
- [60] J. Alsmeier, E. Batke, and J. P. Kotthaus, *Phys. Rev. B* **41**, 1699 (1990).
- [61] R. C. Ashoori, H. L. Störmer, J. S. Weiner, L. N. Pfeifer, S. J. Pearton, K. W. Baldwin, and K. West, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3088 (1992).

- [62] R. C. Ashoori, H. L. Störmer, J. S. Weiner, L. N. Pfeifer, K. W. Baldwin, and K. West, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 613 (1993).
- [63] W. Hansen, T. P. Smith, K. Y. Lee, J. A. Brum, C. M. Knoedler, J. M. Hong, D. P. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2168 (1989).
- [64] A. Lorke, J. P. Kotthaus, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2559 (1990).
- [65] B. Meurer, D. Heitmann, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1371 (1992).
- [66] O. Klein, C. de Chamon, D. Tang, D. M. Abush-Magder, U. Meirav, X. -G. Wen, M. A. Kastner and S. J. Wind, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 785 (1995).
- [67] K. Brunner, U. Bockelmann, G. Abstreiter, M. Walther, G. Böhm, G. Tränkle, and G. Weimann, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3216 (1992).
- [68] T. Fukui, S. Ando and Y. Tokura, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2018 (1991).
- [69] F. C. Frank and J. H. van der Merve, *Proc. R. Soc. London A* **198**, 205 (1949).
- [70] I. N. Stranski, and L. Krastanow, *Akad. Wiss. Let Mainz Math. Natur. Kl.IIb* **146**, 797 (1939).
- [71] M. Volmer, and A. Weber, *Z. Phys. Chem.* **119**, 277 (1926).
- [72] I. V. Markov, *Crystal Growth for Beginners, Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy*, World Scientific, Singapore (1995).
- [73] P. M. Petroff, and S. P. Denbaars, *Superlattices and Microstructures* **15**, 15 (1994).
- [74] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **52**, 11969 (1995).
- [75] J. -Y. Marzin, J. M. Gérard, A. Izraël D. Barrier, and G. Bastard, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 716 (1994).
- [76] S. Fafard, R. Leon, D. Leonard, J. L. Merz, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. B* **50**, 8086 (1994).
- [77] S. Fafard, R. Leon, D. Leonard, J. L. Merz, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. B* **52**, 5752 (1995).

- [78] S. Raymond, S. Fafard, P. J. Poole, A. Wojs, P. Hawrylak, S. Charbonneau, D. Leonard, R. Leon, P. M. Petroff, and J. L. Merz, *Phys. Rev. B* **54**, 11548 (1996).
- [79] S. Raymond, P. Hawrylak, C. Gould, S. Fafard, A. Sachrajda, M. Potemski, A. Wojs, S. Charbonneau, D. Leonard, P. M. Petroff, and J. L. Merz, *Solid State Commun.* **101**, 883 (1997).
- [80] A. I. Ekimov, A. L. Efros, and A. A. Onushchenko, *Solid State Commun.* **56**, 921 (1985).
- [81] T. Itoh, Y. Iwabuchi, and M. Kataoka, *Physica Status Solidi B* **145**, 567 (1988).
- [82] Y. Arakawa and H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 939 (1982).
- [83] M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley and Sons, Chichester (1999).
- [84] K. Nishi, *Device Applications of Quantum Dots in Semiconductor Quantum Dots*, eds. Y. Masumoto and T. Takagahara, Springer-Verlag, Berlin, (2002).
- [85] O. B. Shchekin and D. G. Deppe, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3277 (2002).
- [86] F. Klopff, S. Deubert, J. P. Reithmaier, and A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 217 (2002).
- [87] Z. Mi, P. Bhattacharya, and S. Fathpour, *Appl. Phys. Lett.* Seite 153109 (2005).
- [88] M. G. Thompson, A. Rae, R. L. Sellin, C. Marinelli, R. V. Penty, I. H. White, A. R. Kovsh, S. S. Mikhlin, D. A. Livshits, and I. L. Krestnikov, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 133119 (2006).
- [89] E. Klarreich, *Nature*, **413**, 450 (2001).
- [90] W. C. W. Chan, D. J. Maxwell, X. Gao, R. E. Bailey, M. Han, and S. Nie, *Curr. Opin. Biotechnol.* **13**, 40 (2002).
- [91] B. Dubertret, P. Skourides, D. J. Norris, V. Noireaux, A. H. Brivanlou, and A. Libchaber *Science* **298**, 1759 (2002).

- [92] X. Michalet, F. F. Pinaud, L. A. Bentolila, et al. *Science* **307** 538 (2005).
- [93] A. Fu, W. Gu, B. Boussert, et al. *Nano Letters* **7** 179 (2007).
- [94] L. Bentolila, and S. Weiss, *Physics World*, (March 2003).
- [95] C. Simserides, A. Zora, and G. Triberis, *Phys. Rev. B* **73**, 155313 (2006)
; selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology:
<http://www.vjnano.org>, April 24, 2006 issue ; selected for the Virtual Journal
of Biological Physics Research: <http://www.vjbio.org>, April 15, 2006 issue
- [96] P. Michler, *Single Quantum Dots- Fundamentals, Applications and New Concepts* Springer-Verlag (2004).
- [97] M. Kroutvar, Y. Ducommun, J. J. Finley, M. Bichler, G. Abstreiter, and A. Zrenner, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 443 (2003).
- [98] J. L. Jimenez, L. R. C. Fonseca, D. J. Brady, J. P. Leburton, D. E. Wohlert, and K. Y. Cheng, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 3558 (1997).
- [99] D. Loss and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [100] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger *Science* **294**, 1488 (2001).
- [101] J. M. Kikkawa, and D. D. Awschalom . *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
- [102] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag and L. W. Molenkamp, *Nature* **402**, 787 (1999).
- [103] Y. Ohno, D. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno and D. D. Awschalom, *Nature* **402**, 790 (1999).
- [104] S. Lüscher, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider and M. Bichler, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2118 (2001).
- [105] V. N. Golovach, and D. Loss *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 355 (2002).
- [106] C. Becher, A. Kiraz, P. Michler, W. V. Schoenfeld, P. M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, and A. Imamoglu, *Physica E* **13**, 412 (2002).

- [107] G. L. Snider, A. O. Orlov, I. Amlani, X. Zuo, G. H. Bernstein, C. S. Lent, J. L. Merz, and W. Porod, *J. Vac. Sci. Technol. A* **17**, 1394 (1999).
- [108] M. Ohtsu, K. Kobayashi, T. Kawazoe, S. Sangu, and T. Yatsui, *IEEE J. Select. Topics Quantum Electron.* **8**, 839 (2002).
- [109] A. Rogalski, *Prog. Quant. Electr.* **27**, 59 (2003).
- [110] H. C. Liu, M. Gao, J. McCaffrey, Z. R. Wasilewski, and S. Fafard, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 79 (2001).
- [111] P. Borri, W. Langbein, J. M. Hvam, F. Heinrichsdorff, M. -H. Mao, and D. Bimberg *IEEE J. Select. Topics Quantum Electron.* **6**, 544 (2000).
- [112] M. J. Kelly, *Low-Dimensional Semiconductors Materials, Physics, Technology, Devices* Clarendon Press, Oxford (1995).
- [113] D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley and Sons (1999).
- [114] L.V Asryan, and R. A Suris, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1 (1996).
- [115] M. A. Lampert, and P. Mark, *Current injection in Solids*, Academic Press, New York (1970).
- [116] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices* (2nd edn) John Wiley and Sons, New York (1981).
- [117] Y. Fu, F. Ferdos, M. Sadeghi, S. M. Wang, and A. Larsson, *J. Appl. Phys.* **92**, 3089 (2002).
- [118] C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **44**, 1646 (1991).
- [119] W. Kohn, *Phys. Rev.* **123**, 1242 (1961).
- [120] A. Kumar, S. E. Laux, and F. Stern, *Phys. Rev. B* **42**, 5166 (1990).
- [121] P. E. Lippens and M. Lannoo, *Phys. Rev. B* **41**, 6079 (1990).
- [122] L. -W. Wang, and A. Zunger *J. Phys. Chem* **98**, 2158 (1994).
- [123] L. -W. Wang, and A. Zunger *Phys. Rev. B* **53**, 9579 (1996).

- [124] L. -W. Wang, and A. Zunger *Phys. Rev. B* **54**, 11417 (1996).
- [125] P. C. Sercel, and K. J. Vahala *Phys. Rev. B* **42**, 3690 (1990) ; P. C. Sercel, and K. J. Vahala *Appl. Phys. Lett.* **57** 1569 (1990).
- [126] Μ. Τσέτσερη, *Οπτικές ιδιότητες και ιδιότητες μεταφοράς χαμηλοδιάστατων ημιαγωγικών δομών- Κβαντικά σύρματα σχήματος V*, Διδακτορική Διατριβή, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών (2004).
- [127] Γ. Χιώνης, *Δομή Ζωνών και ευκινησία οπών σε ετεροδομές Si/Si_{1-x}Ge_x*, Διδακτορική Διατριβή, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών (1999).
- [128] J. Singh, *Semiconductor Optoelectronics*, Mc-Graw-Hill, New York (1995) ; *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, McGraw-Hill International Editions(1993).
- [129] B. Ohnsesorge, M. Albrecht, J. Oshinowo, A. Forchel, and Y. Arakawa, *Phys. Rev. B* **54**, 11532 (1996).
- [130] R. Heitz, M. Veit, N. N. Ledentsov, A. Hoffmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, P. S. Kop'ev, and Zh. I. Alferov, *Phys. Rev. B* **56**, 10435 (1997).
- [131] R. Heitz, H. Born, F. Guffarth, O. Stier, A. Schliwa, A. Hoffmann, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **64**, 241305(R)(2001).
- [132] F. Adler, M. Geiger, A. Bauknecht, F. Scholz, H. Schweizer, M. H. Pilkuhn, B. Ohnsesorge, and A. Forchel, *J. Appl. Phys.* **80**, 4019 (1996).
- [133] X. -Q. Li, and Y. Arakawa, *Phys. Rev. B* **56**, 10423 (1997).
- [134] U. Bockelmann and T. Egeler, *Phys. Rev. B* **46**, 15574 (1992).
- [135] S. Marcinkevičius, A. Gaarder, and R. Leon *Phys. Rev. B* **64**, 115307 (2001).
- [136] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1998).
- [137] U. Bockelmann, *Semicond. Sci. Technol.* **9**, 865 (1994).
- [138] T. Inoshita and H. Sakaki, *Phys. Rev. B* **46**, 7260 (1992).
- [139] D. M. Grundmann, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley and Sons, Chichester (1999).

- [140] F. Rossi, *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 147 (1998).
- [141] A. Mysyrowicz, D. Hulin, A. Antonetti, A. Migus, W. T. Masselink, and H. Morkoç, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2748 (1986).
- [142] K. Leo, J. Shah, E. O. Göbel, T. C. Damen, S. Schmitt-Rink, W. Schäfer, K. Köhler, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 201 (1991).
- [143] C. Waschke, H. G. Roskos, R. Schwedler, K. Leo, H. Kurz, and K. Köhler, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3319 (1993).
- [144] K. Leo, M. Wegener, J. Shah, D. S. Chemla, E. O. Göbel, T. C. Damen, S. Schmitt-Rink, and W. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1340 (1990).
- [145] S. Weiss, M-A Mycek, J-Y Bigot, S. Schmitt-Rink, and D. S. Chemla, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2685 (1992).
- [146] D-S Kim, J. Shah, J. E. Cunningham, T. C. Damen, W. Schäfer, M. Hartmann, and S. Schmitt-Rink, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1006 (1992).
- [147] D-S Kim, J. Shah, C. Damen, W. Schäfer, F. Jahnkle, S. Schmitt-Rink, and K. Köhler, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2725 (1992).
- [148] H. G. Roskos, M. C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D.A.B Miller, A. M. Fox, S. Schmitt-Rink, and K. Köhler, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2216 (1992).
- [149] C. Comte, and G. Mahler, *Phys. Rev. B* **34**, 7164 (1986).
- [150] S. Schmitt-Rink, C. Ell, and H. Haug, *Phys. Rev. B* **33**, 1183 (1986).
- [151] S. Schmitt-Rink, D. S. Chemla, and H. Haug, *Phys. Rev. B* **37**, 941 (1988).
- [152] I. Balslev, R. Zimmermann, and A. Stahl, *Phys. Rev. B* **40**, 4095 (1989).
- [153] T. Kuhn, *Theory of Transport Properties of Semiconductor Nanostructures*, edited by E. Schöll, Chapman and Hall, London (1998).
- [154] O. Mauritz, G. Goldoni, E. Molinari, and F. Rossi, *Phys. Rev. B* **62**, 8204 (2000).
- [155] P. Borri, W. Langbein, S. Schneider, U. Woggon, R. L. Sellin, D. Ouyang, and D. Bimberg, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 157401 (2001).

- [156] P. Borri, W. Langbein, J. Mórck, J. M. Hvam, F. Heinrichsdorff, M -H Mao and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **60**, 7784 (1999).
- [157] L. Allen, and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms* New York : Interscience (1975).
- [158] H. Haug, and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific, 3rd edition, Singapore (1994).
- [159] F. Rossi and E. Molinari *Phys. Rev. B* **53**, 16462 (1996).
- [160] R. W. Schoonover, J. M. Rutherford, O. Keller, P. S. Carney, *Physics Letters A* , **342**, 363 (2005).
- [161] D. F. Walls, and G. J. Milburn, *Quantum Optics* Springer, Berlin (1994).
- [162] L. Mandel, and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics* Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- [163] A. Kundu, *Theoretical and Mathematical Physics* **144** 975 (2005).
- [164] A. Pegarkov , *J. Chem. Phys.* **123** 104313 (2005).
- [165] G. Goldoni, F. Rossi, E. Molinari, and A. Fasolino, *Phys. Rev. B* **55**, 7110 (1997).
- [166] O. Mauritz, G. Goldoni, F. Rossi, and E. Molinari, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 847 (1999).
- [167] E. Betzig, J. K. Trautman, T. D. Harris, J. S. Weiner, and R. L. Kostelak, *Science* **251**, 1468 (1991).
- [168] K. Matsuda, T. Saiki, S. Nomura, M. Mihara, and Y. Aoyagi, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2291 (2002).
- [169] S.-J. Cheng, W. Sheng, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **68**, 235330 (2003).
- [170] P. Pereyra and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **61**, 2128 (2000).
- [171] K. L. Janssens, F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **63**, 205311 (2001).
- [172] V. Fock, *Z. Phys.* **47**, 446 (1928).

- [173] C. G. Darwin, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **27**, 86 (1930).
- [174] A. Zora, C. Simserides, and G. Triberis, *phys. stat. sol. (a)* **202**, 619 (2005) ; Proceedings of EXMATEC04 (7th Expert Evaluation and Control of Compound Semiconductor Materials and Technologies).
- [175] A. Zora, C. Simserides and G. Triberis, *International Journal of Modern Physics B* **18**, 3717 (2004) ; *Proceedings of SEMIMAG16*(16th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics).
- [176] A. Zora, C. Simserides, G. Triberis *Proceedings of the ICPS 2006*, AIP Conf. Proc. **893** 893-894 (2007)
- [177] C. Simserides, A. Zora, and G. Triberis, *International Journal of Modern Physics B* **21**, 1649 (2007); Proceedings of the 17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics
- [178] Παρατηρώντας προσεκτικά τα σχήματα 5.9 και 5.10 προκύπτει ότι για αυτήν την μεγάλη τελεία για $\sigma = 50\text{nm}$ κάποια χαρακτηριστικά του φάσματος εξαρτώνται από την θέση του ανιχνευτή, κι επομένως η τιμή αυτή του σ δεν αποτελεί το όριο του μακρινού πεδίου.
- [179] F. Rossi, G. Goldoni, and E. Molinari, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3527 (1997).
- [180] E. Abbe, *Archiv. f. Mikroskop.* **9**, 413 (1873).
- [181] B. Hanewinkel, A. Knorr, P. Thomas, and S. W. Koch *Phys. Rev. B* **55**, 13715 (1997).
- [182] M. Paesler, and P. J. Moyer, *Near Field Optics, Theory Instrumentation and Applications*, John Wiley and Sons, inc., New York (1996).
- [183] T. Kuhn, and F. Rossi, *Phys. Rev. B* **46**, 7496 (1992)
- [184] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York (1990, 1981).
- [185] Οι σχέσεις που δίνουν την χρονική μεταβολή των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής των ηλεκτρονίων και των οπών προκύπτουν εφαρμόζοντας την εξίσωση του Heisenberg για τους τελεστές αυτούς, δηλαδή για παράδειγμα $i\hbar \frac{d}{dt}(c_e^\dagger(t)) = [c_e^\dagger(t), H]$ όπου H η Χαμιλτονιανή του συστήματος των μη αλληλεπιδρώντων φορέων.

- [186] M. Nakano, and K. Yamaguchi, *Chemical Physics Letters* **295** 328 (1998).
- [187] V. S. Filinov, M. Hoyer, M. Bonitz, M. Kira, V. E. Fortov, and S. W. Koch *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **5** S299 (2003).
- [188] H.-Y. Fan, and H.-I. Lu *Physics Letters A* **332** 1 (2004).
- [189] M. Lindberg, S. An , S. W. Koch, and M. Sargent III, *Physical Review A* **40**, 4415 (1989).
- [190] S. W. Koch, T. Meier, W. Hoyer, and M. Kira *Physica E* **14**, 45 (2002).
- [191] A. Zora, C. Simserides, G. Triberis, *Theory of spontaneous emission of quantum dots in the linear regime*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** 406201 (2007).
- [192] P. Young, *Singular Fourier Transform and the Integral Representation of the Dirac Delta Function* *Physics* 116C (2006).
- [193] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard, and L. Jacak, *Phys. Rev. B.* **54**, 5604 (1996).
- [194] A. Zora, C. Simserides, G. Triberis, *Room temperature photoluminescence of individual self-assembled $In_{0.5}Ga_{0.5}As$ quantum dots*, *Physica E*, In Press, Available on line 13/10/2007.
- [195] M. Wimmer, S. V. Nair, and J. Shumway, *Phys. Rev. B.* **73**, 165305 (2006).
- [196] E. H. Li, *Physica E* **5**, 215 (2000).
- [197] K. Leosson, D. Birkedal, I. Magnusdottir, W. Langbein, and J. M. Hvam, *Physica E* **17**, 1 (2003).
- [198] K. Matsuda, K. Ikeda, T. Saiki, H. Tsuchiya, H. Saito, and K. Nishi, *Phys. Rev. B* **63**, 121304(R) (2001).
- [199] A. V. Uskov, A -P Jauho, B. Tromborg, J. Mórck, and R. Lang, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1516 (2000).
- [200] P. Ramvall, S. Tanaka, S. Nomura, P. Riblet, and Y. Aoyagi, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1104 (1998).

- [201] M. Kira, W. Hoyer, T. Stroucken, and S. W. Koch, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 176401 (2001).
- [202] Y. G. Kim, Y. S. Joh, J. H. Song, K. S. Baek, S. K. Chang, and E. D. Sim, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2656 (2003).
- [203] G. Kim, J. Lefebvre, J. Mckee, S. Studenikin, R. L. Williams, A. Sachrajda, P. Zawadzki, P. Hawrylak, W. Sheng, G. C. Aers, and P. J. Poole, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 212105 (2005).
- [204] J. Oswald, K. Kuldová, J. Zeman, E. Hulcius, S. Jullian, and M. Potemski, *Materials Science and Engineering B* **69-70**, 318 (2000).
- [205] S. -J. Cheng, W. Sheng, P. Hawrylak, S. Raymond, S. Studenikin, A. Sachrajda, Z. Wasilewski, A. Babinski, M. Potemski, G. Ortner, and M. Bayer, *Physica E* **21**, 211 (2004).
- [206] A. Babinski, S. Awirothanamon, J. Lapointe, Z. Wasilewski, S. Raymond, and M. Potemski, *Physica E* **26**, 190 (2005); A. Babinski, S. Awirothanamon, S. Raymond, S. Studenikin, P. Hawrylak, S. -J. Cheng, W. Sheng, Z. Wasilewski, M. Potemski, and A. Sachrajda, *Physica E* **22**, 603 (2004).
- [207] Y. Toda, T. Sugimoto, M. Nishioka, and Y. Arakawa, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3887 (2000).
- [208] W. Quade, E. Schöll, F. Rossi and C. Jacoboni, *Phys. Rev. B* **50**, 7398 (1994).
- [209] Γ. Π. Τριμπέρης, *Σημειώσεις Φυσικής Στερεάς Κατάστασης Πανεπιστήμιο Αθηνών* (2005).