

А. А. КОРНИЕНКО, М. Л. ЛАПКО

**ПРОБЛЕМЫ ВЗАМОСОГЛАСОВАННОГО ОПИСАНИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ИНТЕНСИВНОСТЯМ ПОЛОС
ПОГЛОЩЕНИЯ И ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ МУЛЬТИПЛЕТА $^4I_{13/2}$ ЭРБИЯ
В ОКСИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Для объяснения противоречия между измеренной силой осциллятора абсорбционного перехода иона эрбия в оксидном кристалле Lu_2O_3 на первый возбужденный уровень $^4I_{13/2}$ и временем его жизни предложено рассмотреть процессы резонансного двухфотонного поглощения в системе из трех уровней $^4I_{15/2}$, $^4I_{13/2}$, $^4I_{9/2}$ с эквидистантным расположением.

Процессы двухфотонного и двухступенчатого поглощения в системе из трех эквидистантно расположенных уровней под действием интенсивного лазерного излучения хорошо изучены экспериментально и теоретически в физике атома [1]. При экспериментальном изучении спектроскопических характеристик лазерных материалов, активированных редкоземельными ионами, применяется излучение малой интенсивности, при которой двухфотонные и двухступенчатые процессы мало существенны на фоне однофотонных процессов. Однако вклад двух фотонного поглощения может быть сравним с однофотонным поглощением при строгом выполнении резонансных условий. Обсуждению этих проблем посвящена данная работа.

В некоторых работах (см., например, [2]) по изучению спектроскопических свойств оксидных лазерных материалов, активированных ионами тулия и эрбия, было установлено, что время жизни мультиплета $^4I_{13/2}$, вычисленное на основе экспериментального значения силы осциллятора абсорбционного перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$, в два раза меньше экспериментально измеренного.

Так как между первым возбужденным уровнем и основным нет промежуточных уровней, то между временем жизни первого возбужденного уровня и силой осциллятора абсорбционного перехода на него существует взаимно однозначное соответствие. По этой причине более точный учет конфигурационного взаимодействия [3] по сравнению с теорией Джадда-Офелта [4,5] не в состоянии обеспечить улучшение взаимосогласованного описания интенсивностных характеристик поглощения и излучения.

Противоречие между интенсивностными характеристиками поглощения на переходе $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ иона эрбия и излучения с уровня $^4I_{13/2}$ можно устранить, если предположить, что в полосе перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ существует дополнительное поглощение. Такая ситуация может реализоваться в трехуровневой системе с эквидистантным расположением (рисунок 1).

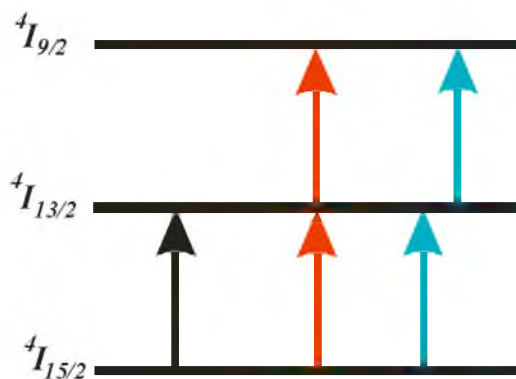


Рисунок 1 – Схемы поглощения:

однофотонного – черная стрелка; двухфотонного – красные стрелки; двухступенчатого – зеленые стрелки

Дополнительное поглощение на переходе $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ может обеспечить резонансное двухфотонное поглощение по схеме $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$ и двухступенчатое поглощение $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2} + ^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$ при условии выполнения эквидистантности и резонансных соотношений. В такой ситуации только часть интенсивности относится к силе осциллятора однофотонного поглощения, а только сила осциллятора однофотонного поглощения ответственна за время жизни мультиплета $^4I_{13/2}$. Уменьшение силы осциллятора соответствует увеличению вычисленного времени жизни, что должно способствовать устранению противоречия между измеренной силой осциллятора абсорбционного перехода на уровень $^4I_{13/2}$ и экспериментальным временем его жизни.

Теоретическое изучение процессов поглощения в системе трех эквидистантных уровней наиболее просто можно выполнить в полуклассическом приближении, используя уравнение движения для матрицы плотности ρ :

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho],$$

где гамильтониан можно записать в виде:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha}^0 |\alpha\rangle\langle\alpha| - \sum_{\alpha \neq \beta} |\alpha\rangle\langle\alpha| (\vec{d} \cdot \vec{E}) |\beta\rangle\langle\beta|,$$

где E_{α}^0 – энергия невозмущенного состояния $|\alpha\rangle$, $\vec{d}$ – эффективный оператор электрического дипольного момента, $\vec{E}$ – напряженность электрического поля электромагнитной волны внешнего излучения.

Запишем матрицу гамильтониана для трех уровневой системы с учетом двухфотонных процессов:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{12} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{13} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{21} & E_2^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{23} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{31} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{32} & E_3^0 \end{pmatrix}$$

Здесь $\vec{d}_{13}$ – эффективный оператор электрического дипольного момента для двух фотонного поглощения. Если рассматривать резонансное поглощения в переходах между соседними уровнями или однофотонное и двухступенчатое поглощение, то матрица гамильтониана становится немного проще:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & -E \cdot d_{12} & 0 \\ -E \cdot d_{21} & E_2^0 & -E \cdot d_{23} \\ 0 & -E \cdot d_{32} & E_3^0 \end{pmatrix},$$

где $-\vec{E} \cdot \vec{d}_{ij}$ запишем как $-E \cdot d_{ij}$ т. е. d – это проекция дипольного момента на направление поля. После подстановки гамильтониана в уравнение движения для матрицы плотности получим систему дифференциальных уравнений:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} & \dot{\rho}_{12} & \dot{\rho}_{13} \\ \dot{\rho}_{21} & \dot{\rho}_{22} & \dot{\rho}_{23} \\ \dot{\rho}_{31} & \dot{\rho}_{32} & \dot{\rho}_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{12} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{13} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{21} & E_2^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{23} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{31} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{32} & E_3^0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_1^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{12} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{13} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{21} & E_2^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{23} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{31} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{32} & E_3^0 \end{pmatrix}$$

Проинтегрировать эти уравнения можно в системе компьютерной математики «MAPLE». Однако решение получается очень громоздким и малопригодным для сравнительного анализа однофотонного и двухступенчатого поглощения. Анализируя результаты численного решения системы дифференциальных уравнений, удалось установить, что двухступенчатое поглощение усиливает абсорбционную полосу $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ на 20%.

Таким образом, если исключить двухступенчатое поглощение из абсорбционной полосы $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ получится удовлетворительное согласие между вычисленным временем жизни мультиплета $^4I_{15/2}$ и измеренным. Это устраняет противоречие между интенсивностными характеристиками поглощения и излучения.

Список литературы

1. Perez-Arjona, I. Two-photon absorption / I. Perez-Arjona, G. J. de Valcarcel, E. Roldan // Revista mexicana de física. – 2003. – Vol. 49. – P. 91–100.
2. Spectroscopy and diode-pumped laser operation of transparent Tm:Lu₃Al₅O₁₂ ceramics produced by solid-state sintering / F. Yue [et al.] // Optics Express. – 2020. – Vol. 28. – P. 28400.
3. Dunina, E. B. Influence of Excited Configurations on the Intensities of Electric Dipole Transitions of Rare Earth Ions / E. B. Dunina, A. A. Kornienko // Optics and Spectroscopy. – 2014. – Vol. 116, No. 5. – P. 706–711.
4. Judd, B. R. Optical absorption intensities of rare-earth ions / B. R. Judd // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750–761.
5. Ofelt, G. S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G. S. Ofelt // J. Chem. Phys. – 1962. – Vol. 37, № 3. – P. 511–520.

To explain the contradiction between the measured oscillator strength of the absorption transition of the erbium ion in the Lu_2O_3 oxide crystal to the first excited level $^4I_{13/2}$ and its lifetime, it is proposed to consider the processes of resonant two-photon absorption in a system of three levels $^4I_{15/2}$, $^4I_{13/2}$, $^4I_{9/2}$ with equidistant location.

Корниенко Антон Алексеевич, студент Витебского государственного университета имени П. М. Машерова, Витебск, Беларусь, anton.kornienko2000@mail.ru.

Ланко Максим Леонидович, студент Витебского государственного технологического университета, Витебск, Беларусь, monstrmaks666@mail.ru.

Научный руководитель – **Дунина Елена Брониславовна**, доцент кафедры информационных систем и автоматизации производства Витебского государственного технологического университета, кандидат физико-математических наук, Витебск, Беларусь, L.Dun@mail.ru.

УДК 53.043:535.015

А. А. КУРАПЦОВА

ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКИ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПЛЁНКИ ОКСИДА ТИТАНА TiO_2 ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

Приводятся результаты моделирования влияния длины волны солнечного излучения, энергии залегания дефектов в оксиде титана и степени, типа легирования кремниевой подложки на концентрацию носителей заряда, плотность электрического заряда на поверхности пленки оксида титана и величины электрического напряжения в пленке оксида титана.

Оксид титана сейчас востребован для производства в процессах фотокатализа, при фотолизе воды, очистке воздуха и воды от загрязнений, в том числе от тяжелых металлов и органических соединений. Оксид титана существует в трех модификациях: рутил, брукит и анатаз [1]. Анатаз проявляет наибольшую каталитическую активность и был использован в данном моделировании. Электрофизические свойства гетероструктур кремний – оксид титана представляют интерес в связи с доступностью и дешевизной оксида титана и обработанностью кремниевой технологии. Фотокаталитические свойства покрытий из оксида титана связаны с процессами переноса электрического заряда и электрическими характеристиками данных гетероструктур [2].

В зависимости от технологии нанесения пленки диоксида титана и ее стехиометрического состава в оксиде могут возникать дефектные состояния: различные вакансии атомов кислорода или титана, пространственные дефекты и т. д. [3]. Энергия уровня дефектов варьируется в широком диапазоне и оказывает влияние на электрофизические свойства материала.

Целью данной работы является исследование концентраций носителей заряда, плотности электрического заряда и электрического напряжения в пленке оксида титана и на ее поверхности на кремниевой подложке от длины волны падающего излучения, энергии ионизации (глубины залегания) дефектов в оксиде титана и свойств кремниевой подложки.

Моделирование проводилось в программном пакете Comsol Multiphysics на основании модели Андерсона для полупроводниковых гетеропереходов, решения уравнения Пуассона, уравнений непрерывности для электронов и дырок и уравнений Максвелла для электромагнитных волн. Моделирование проводилось на основании двумерной модели. Толщина пленки оксида титана 0,1 мкм, толщина кремниевой подложки 0,5 мкм, глубина залегания дефектов E_c задавалась внутри запрещенной зоны, считая от дна зоны проводимости. Мощность излучения $1 \cdot 10^{-8}$ Вт, что соответствует плотности мощности солнечного излучения 1 кВт/м². Излучение было направленно перпендикулярно поверхности пленки. Основные параметры полупроводников представлены в таблице 1 [4; 5].

Таблица 1 – Параметры материалов

	Si	n-TiO ₂
Ширина запрещенной зоны, эВ	1,124	3,2
Сродство к электрону, эВ	4,05	4,3
Относительная диэлектрическая проницаемость	11,7	40
Время жизни электронов, мкс	10	0,024
Время жизни дырок, мкс	10	0,0023
Концентрация примеси, см ⁻³	N_t	10^{16}
Подвижность электронов, см ² /(В·с)	1450	4
Подвижность дырок, см ² /(В·с)	500	0,1