

---

# ***ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΣΤΕΡΕΩΝ***

***(Πλέγμα + ηλεκτρόνια)***

---

# Τι θα μελετήσουμε

- Αλληλεπίδραση ακτινοβολίας με στερεό
  - **Μικροσκοπικά**
    - Απορρόφηση φωτονίου
    - Δημιουργία ζευγών ηλεκτρονίου-οπής
  - **Μακροσκοπικά**
    - Εξισώσεις Maxwell
    - Παράμετροι υλικού.
  - **Μεικτή**
    - Θα ξεκινήσουμε από τη **Μακροσκοπική** και επιλεκτικά θα επεκταθούμε στην **Μικροσκοπική**.
    - Απλά φαινόμενα
    - Γραμμικά φαινόμενα

# Διηλεκτρική Συνάρτηση

- Περιγράφει ποσοτικά την επίδραση ΗΜΑ στο στερεό.
  - Ε-πεδίο  $\Rightarrow$  "κίνηση"
    - Ρεύμα "ελεύθερους φορείς" ( Μέταλλα, ημιαγωγούς με προσμίξεις).
      - Αγωγιμότητα  $\mathbf{j}(r, t, \omega) = \vec{\sigma} \mathbf{E}(r, t, \omega)$
    - Δέσμια (εντοπισμένα) φορτία
      - Διπολικές ροπές
- Και οι δύο διαδικασίες ερμηνεύονται από τις εξισώσεις Maxwell.

# Διηλεκτρική Συνάρτηση

- Εξισώσεις Maxwell

$$\text{curl} \mathcal{E} = \nabla \times \mathcal{E}(t, \mathbf{r}) = \dot{\mathbf{B}}(t, \mathbf{r})$$

$$\text{curl} \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{H}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{j}(t, \mathbf{r}) + \dot{\mathbf{D}}(t, \mathbf{r})$$

- Χρονικά (χωρικά ?) εξαρτώμενες ποσότητες !!



- Συχνοτικά εξαρτώμενες ποσότητες
- Μετασχηματισμών Fourier:

$$\mathcal{E}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t} d\omega e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}$$

$$\mathbf{D}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{D}(\omega, \mathbf{k}) e^{-\omega t} d\omega e^{-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}$$

# Διηλεκτρική Συνάρτηση

- Εξισώσεις υλικού

$$\mathbf{j}(r, t) = \vec{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$$

$$\mathbf{D}(r, t) = \varepsilon_0 \vec{\epsilon}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$$

Θεωρούμε ότι:  $k \ll G$

$$\mathbf{D}(\omega) = \mathbf{D}^*(-\omega)$$

$$\mathbf{E}(\omega) = \mathbf{E}^*(-\omega)$$

$$\mathbf{E}(r, t, \omega)$$

πραγματική Συνάρτηση

$$\vec{\sigma}(\omega) = \vec{\sigma}(-\omega)$$

$$\vec{\epsilon}(\omega) = \vec{\epsilon}(-\omega)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\omega) = \mathbf{j}(\omega) + \dot{\mathbf{D}}(\omega) \xrightarrow{H(\omega) \sim H_0(\omega) e^{-i\omega t}, E(\omega) \sim E_0(\omega) e^{-i\omega t}} \Rightarrow$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\omega) = [\sigma(\omega) - i\omega \varepsilon_0 \epsilon(\omega)] \mathbf{E}(\omega) = \tilde{\sigma}(\omega) \mathbf{E}(\omega)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\omega) = -i\omega \varepsilon_0 \mathbf{E}(\omega) \left[ i \frac{\sigma(\omega)}{\omega \varepsilon_0} + \epsilon(\omega) \right] = -i\omega \varepsilon_0 \tilde{\epsilon}(\omega) \mathbf{E}(\omega) = -i\omega \mathbf{D}(\omega)$$

Αγωγιμότητα

Δέσμια ηλεκτρόνια

Αντίφαση ??

Επανεξέταση  
έννοιας "δεσμιού" ?

# Διηλεκτρική Συνάρτηση

$$\mathbf{D} = \mathbf{P} + \varepsilon_0 \mathbf{E} = \varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \mathbf{E} \Rightarrow \mathbf{P} = \varepsilon_0 (\varepsilon(\omega) - 1) \mathbf{E} = \varepsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}$$

$$\chi(\omega) = \varepsilon(\omega) - 1 \quad \tilde{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$$

- Αρχή αιτιότητας:
  - Η πόλωση  $\mathbf{P}$  σε χρόνο  $t$  οφείλεται σε πεδία  $\mathbf{E}(t')$ ,  $t' < t$
- Συνεπώς για να ισχύει
  - $\mathbf{P}(t) \equiv 0$   $t > t'$  ή διαφορετικά
- Θα πρέπει
  - $\chi(\omega) \rightarrow 0$  για  $\omega \rightarrow \infty$  και να απειρίζεται (πόλος) για  $\text{Im}(\omega) \leq 0$
- **Δημιουργεί** "σχέση" μεταξύ πραγματικού και φανταστικού μέρους!

$$\begin{aligned} P(t) &= \int_{-\infty}^t \chi(t, t') E(t') dt' = \int_{-\infty}^t \chi(t-t') E(t') dt' \\ &= \xrightarrow{\tau=t-t'} \int_0^{\infty} \chi(\tau) E(t-\tau) d\tau \end{aligned}$$

Εξαρτάται μόνο από τη διαφορά του χρόνου  
(Memory function)

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega' - \omega} d\omega'$$

Σχέσεις  
Kramers Kronig

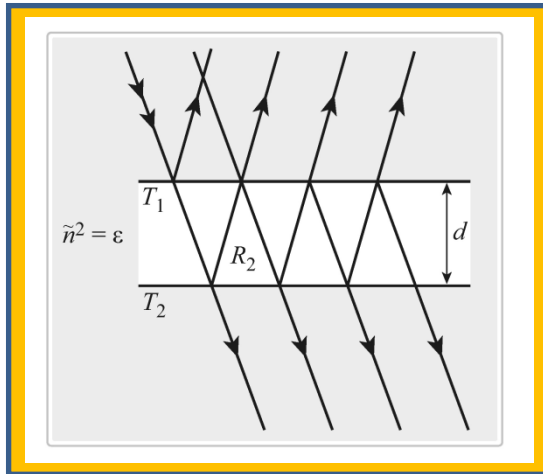
# Απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας

$$\tilde{n}(\omega) = n + i\kappa \equiv +\sqrt{\varepsilon(\omega)}$$

$$E = E_0 e^{-i(\omega t - kx)} = E_0 e^{-i\omega(t - \tilde{n}x/c)}$$

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - \kappa^2 \quad \varepsilon_2(\omega) = 2n\kappa$$

$$= E_0 e^{-i\omega[t - (n+i\kappa)x/c]} = E_0 e^{-\omega\kappa x/c} e^{-i\omega(t - nx/c)}$$



$$T_1 = \frac{2}{\tilde{n} + 1} \quad T_2 = \frac{2\tilde{n}}{\tilde{n} + 1} \quad R_2 = \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} = \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega)} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega)} + 1}$$

Διερχόμενη:

$$E_0^{\text{διερχ}} = E_0 T_1 T_2 e^{i(\tilde{n}\omega/c)d} (1 + R_2^2 e^{2i(\tilde{n}\omega/c)d} + \dots)$$

$$= E_0 T_1 T_2 \frac{e^{i(\tilde{n}\omega/c)d}}{1 - R_2^2 e^{2i(\tilde{n}\omega/c)d}}$$

Av:

$$\tilde{n} = 1 + \Delta \quad |\Delta| \ll 1$$

$$\Downarrow$$

$$T_1 T_2 \approx 1 \quad R_2^2 \approx 0$$

$$E_0^{\text{διερχ}} = E_0 e^{i(\tilde{n}\omega/c)d} \Rightarrow I \propto E_0^{\text{διερχ}} E_0^{*\text{διερχ}}$$

$$= E_0 e^{-2(\tilde{n}\omega/c)d} \xrightarrow{\frac{|\Delta| \ll 1}{2\kappa = \varepsilon_2}} I = I_0 e^{-2(\tilde{n}\omega/c)d}$$

Νόμος Beer

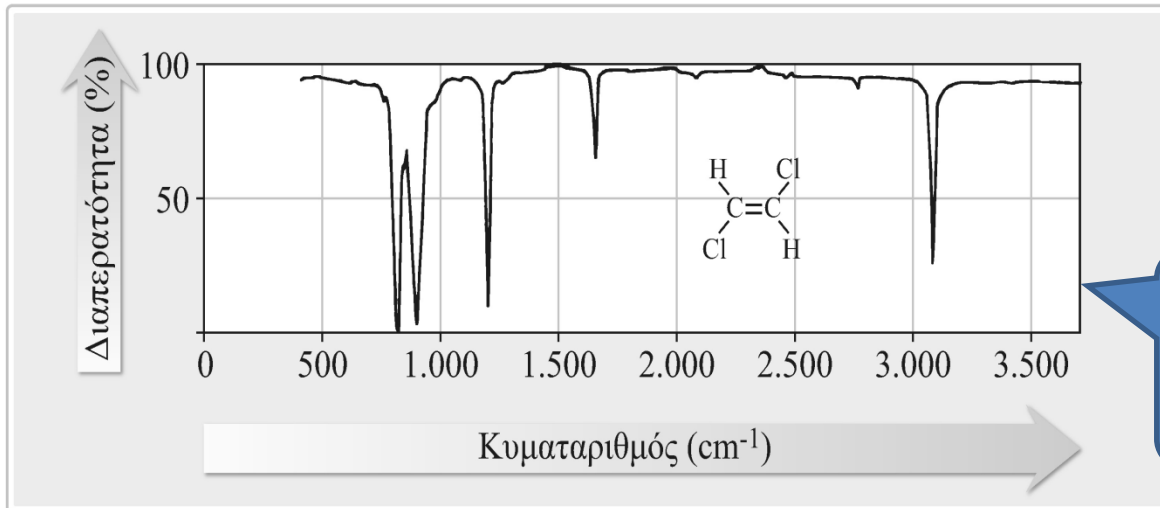
# Απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας

Λεπτό υμένιο:  
 $\left| \frac{\tilde{n}(\omega)\omega}{c} d \right| \ll 1$

$$I = I_0 e^{-2(\tilde{n}\omega/c)d} \rightarrow I = I_0 \left( 1 - \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)d}{c} + \dots \right)$$

$$K(\omega) = \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{c}$$

$K(\omega)$   
Συντελεστής  
απορρόφησης



- 815 C-Cl stretch
- 895 C-H bend out of plane
- 1200 C-H bend in plane
- 1650 C=C stretch
- 3100 C-H stretch

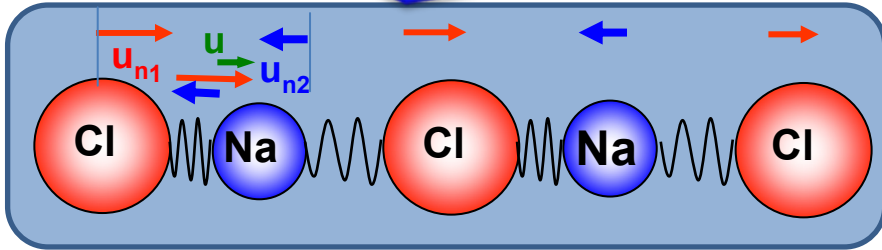
Σχ. 11.3. Φάσμα απορρόφησης υπερύθρου από 1,2-trans-διχλωροαιθένιο [11.1]. Για μη ισχυρή συνολική απορρόφηση, οι ισχυρές κορυφές αντιστοιχούν στη φασματική μορφή του όρου  $\omega \varepsilon_2(\omega)$  στις συχνότητες συντονισμού των κανονικών τρόπων ταλάντωσης του μορίου.

- Το μιγαδικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης ελέγχει την απορρόφηση (διαπερατότητα) και προκαλεί την εμφάνιση διασποράς  $n(\omega)$ .



# Διηλεκτρική συνάρτηση αρμονικού ταλαντωτή

Οπτικός τρόπος για  $q \cong 0$



$$M_1(\ddot{u}_{n_1} + \gamma \dot{u}_{n_1} + \omega_0^2 u_{n_1}) = -e^* E$$

$$M_2(\ddot{u}_{n_2} + \gamma \dot{u}_{n_2} + \omega_0^2 u_{n_2}) = +e^* E$$

$$(\ddot{u}_{n_1} - \ddot{u}_{n_2}) + \gamma(\dot{u}_{n_1} - \dot{u}_{n_2}) + \omega_0^2(u_{n_1} - u_{n_2}) = e^* E \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$$

$$u(\omega)(\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega) = \frac{e^*}{\mu} E(\omega)$$

$$P(\omega) = \frac{N}{V} e^* u(\omega) + \varepsilon_0 \frac{N}{V} \alpha E(\omega)$$

Μετασχηματισμός  
Fourier  $\{\alpha(\omega) = \alpha\}$

Η ισοδύναμη  
θεωρώντας  
 $E \sim e^{-i\omega t}$

$$p = e^* u$$

$$\ddot{u} + \gamma \dot{u} = -\omega_0^2 u + \frac{e^*}{\mu} E$$

$$P = \underbrace{\frac{N}{V} e^* u}_{\text{Πόλωση Ιόντων}} + \underbrace{\frac{N}{V} \varepsilon_0 \alpha E}_{\text{Πόλωση Ηλεκτρονίων}}$$

$$\varepsilon(\omega) = \frac{N}{V} \alpha + \frac{\frac{N}{V} e^{*2}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

$$\xrightarrow[\varepsilon_\infty = \varepsilon(\omega \rightarrow \infty)]{\varepsilon_{st} = \varepsilon(\omega \rightarrow 0)}$$

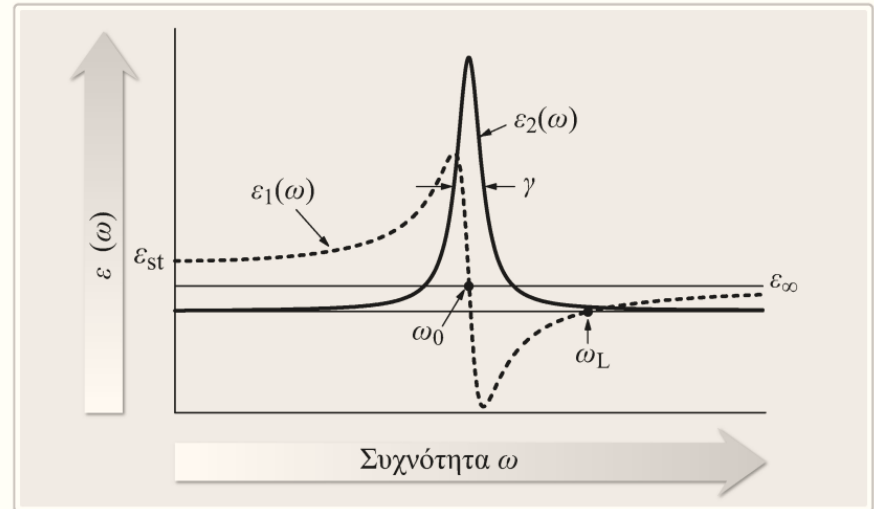
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_0^2 (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$$

# Διηλεκτρική συνάρτηση αρμονικού ταλαντωτή

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)\omega_0^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{(\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)\omega_0^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

Συχνότητα πλάσματος  $\omega_L$   
 $\varepsilon_1(\omega_L) = 0$



• Μπορούμε να υπολογίσουμε τον συντελεστή απορρόφησης:

• Συνολική απορρόφηση :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{z \pm i\gamma} = \wp \frac{1}{z} \mp i\pi\delta(z)$$

$$\delta(z^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} (\delta(z - a) - \delta(z + a))$$

$$K(\omega) = \frac{\omega\varepsilon_2(\omega)}{c} = \frac{(\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)\omega_0^2\gamma\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \cdot \frac{1}{c}$$

$$\begin{aligned} d \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega) d\omega &= \int_{-\infty}^{\infty} \ln \frac{I(\omega)}{I_0(\omega)} d\omega \\ &= \frac{d}{c} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)\omega_0^2\gamma\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} d\omega = \frac{d\pi\omega_0^2(\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)}{c} \end{aligned}$$

• Συνολική απορρόφηση :  
 – Εξαρτάται **μόνον** από τις παραμέτρους του συστήματος

# Διηλεκτρική συνάρτηση αρμονικού ταλαντωτή

$$\delta(z) = \frac{1}{\pi} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\gamma}{z^2 + \gamma^2} \Leftrightarrow \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{z - i\gamma} = \wp \frac{1}{z} + i\pi\delta(z)$$

$$\delta(g(z)) = \frac{\delta(z - z_0)}{|g'(z_0)|} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(z - a) f(z) dz = f(a)$$

$$\delta(\omega^2 - \omega_0^2) = \frac{1}{2\omega_0} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)]$$

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega) &= \varepsilon_\infty + \frac{\omega_0^2 (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad \text{(για μικρό } \gamma) \\ &= \varepsilon_\infty + \frac{\omega_0^2 (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2} \\ &\quad + i \frac{\pi\omega_0}{2} (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega \varepsilon_2(\omega)}{c} d\omega = \frac{1}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \left[ \frac{\pi\omega_0}{2} (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \right] d\omega$$

$$= \frac{1}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \left[ \frac{\pi\omega_0}{2} (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \right] d\omega$$

$$= \frac{1}{c} \frac{\pi\omega_0}{2} (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) \int_{-\infty}^{\infty} \omega [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] d\omega = \frac{1}{c} \frac{\pi\omega_0}{2} (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) [\omega_0 + \omega_0] = \frac{\pi\omega_0^2 (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)}{c}$$

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-x^2/\varepsilon^2} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{x} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{1}{x^2 + \varepsilon^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(\omega) d\omega = \frac{\pi\omega_0^2 (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)}{c} = \frac{N \pi e^{*2}}{V c \varepsilon_0 \mu}$$

$$\int_0^{\infty} K(\omega) d\omega = \frac{1}{6} \frac{N \pi e^{*2}}{V \varepsilon_0 c \mu} \xrightarrow{f_e = e^*} \frac{1}{6} \frac{N \pi f^2 e^2}{V \varepsilon_0 c \mu}$$

# Διαμήκεις και εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι

$P_x = P_{x0} e^{-i(\omega t - qx)}$	<i>Διάμηκες</i>	$\xrightarrow{\nabla \times P = i q \times P}$	$\nabla \times P_L = 0$	$\nabla \cdot P_L \neq 0$
$P_y = P_{y0} e^{-i(\omega t - qx)}$	<i>Εγκάρσιο</i>	$\xrightarrow{\nabla \times P = i q \times P}$	$\nabla \times P_T \neq 0$	$\nabla \cdot P_T = 0$

**Διηλεκτρικό χωρίς ελεύθερα φορτία:  $\rho(x,y,z) = 0$  !!**

- Διαμήκη κύματα:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho = 0 = \nabla \cdot [\varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \mathbf{E}] \xrightarrow[\mathbf{P} = \varepsilon_0 [\varepsilon(\omega) - 1] \mathbf{E}]{\mathbf{D} = \mathbf{P} + \varepsilon_0 \mathbf{E}} \varepsilon(\omega) \frac{\nabla \cdot \mathbf{P}}{\varepsilon(\omega) - 1} = 0$$

$$\Rightarrow \varepsilon(\omega_L) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}_L = -\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{P}$$

– Τα ανύσματα των  $\mathbf{E}$  και  $\mathbf{P}$  είναι εκτός φάσεως κατά  $180^\circ$ .

# Διαμήκεις και εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι

- Εγκάρσια κύματα ( μόνο κατά τον  $y$  !!!)

$$\left. \begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= -\mu\mu_0 \dot{\mathbf{H}} \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \dot{\mathbf{D}} \end{aligned} \right\} P_y = P_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} \quad \text{και} \quad \frac{\mathbf{P}}{\varepsilon_0[\varepsilon(\omega) - 1]} = \mathbf{E} \Rightarrow$$

$$\nabla \times \mathbf{P} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & P_y & 0 \end{vmatrix} = iqP_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} \hat{z} \Rightarrow \text{το } \mathbf{H} \text{ θα έχει} \\ \underline{\text{μόνο } z \text{ συνιστώσα}}$$

$$H_z = H_{z0} e^{-i(\omega t - qx)} \Rightarrow \nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & H_z \end{vmatrix} = -iqH_{z0} e^{-i(\omega t - qx)} \hat{y}$$

- Το  $\mathbf{D}$  θα έχει μόνο  $y$ -συνιστώσα  $D_y = D_{y0} e^{-i(\omega t - qx)}$ , αλλά με πλάτος  $D_{y0} = \frac{\varepsilon P_{y0}}{\varepsilon - 1}$

# Διαμήκεις και εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι

$$\left. \begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= -\mu\mu_0 \dot{\mathbf{H}} \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \dot{\mathbf{D}} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} P_y &= P_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} \\ D_x &= \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) - 1} e^{-i(\omega t - qx)} \end{aligned} \quad \text{και} \quad \frac{\mathbf{P}}{\varepsilon_0[\varepsilon(\omega) - 1]} = \mathbf{E} = \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon_0 \varepsilon(\omega)} \Rightarrow$$

$$\nabla \times \mathbf{P} = iqP_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} \hat{\mathbf{z}} \quad H_z = H_{z0} e^{-i(\omega t - qx)} \quad \mu = 1$$

$$\frac{iqP_{y0} e^{-i(\omega t - qx)}}{\varepsilon_0[\varepsilon(\omega) - 1]} \hat{\mathbf{z}} = -(-i\omega)\mu_0 H_{z0} e^{-i(\omega t - qx)} \hat{\mathbf{z}} \quad \boxed{qP_{y0} - \mu_0 \omega \varepsilon_0 [\varepsilon(\omega) - 1] H_{z0} = 0}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -iqH_{z0} e^{-i(\omega t - qx)} \hat{\mathbf{y}} \quad D_y = D_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) - 1} P_{y0} e^{-i(\omega t - qx)}$$

$$-iqH_{z0} e^{-i(\omega t - qx)} = -\frac{i\omega \cdot \varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) - 1} P_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} \quad \boxed{qH_{z0} - \frac{\omega \cdot \varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) - 1} P_{y0} = 0}$$

Μη τετριμμένη λύση  $\Rightarrow$

Σχέση διασποράς

$$\begin{pmatrix} q & -\mu_0 \omega \varepsilon_0 [\varepsilon(\omega) - 1] \\ -\frac{\omega \cdot \varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) - 1} & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{y0} \\ H_{z0} \end{pmatrix} = 0 \quad \left\| \begin{pmatrix} q & -\mu_0 \omega \varepsilon_0 [\varepsilon(\omega) - 1] \\ -\frac{\omega \cdot \varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) - 1} & q \end{pmatrix} \right\| = 0 \Rightarrow \boxed{\omega^2 = \frac{q^2}{\varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon(\omega)} = \frac{c^2}{\varepsilon(\omega)} q^2}$$

# Εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι (πολαριτόνια)

$$\omega^2 = \frac{q^2}{\epsilon_0 \mu_0 \epsilon(\omega)} = \frac{c^2}{\epsilon(\omega)} q^2$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty) \omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega}$$

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty) \omega_0^2 (\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}$$

$$\epsilon_1(\omega, \gamma = 0) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty) \omega_0^2}{\omega_0^2 (\sim \omega_T^2) - \omega^2}$$

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty) \omega_T^2}{(\omega_T^2 - \omega^2)} \Rightarrow \epsilon_1(\omega_L) = 0$$

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = \frac{\epsilon_{st}}{\epsilon_\infty} \quad \text{Σχέση LST}$$

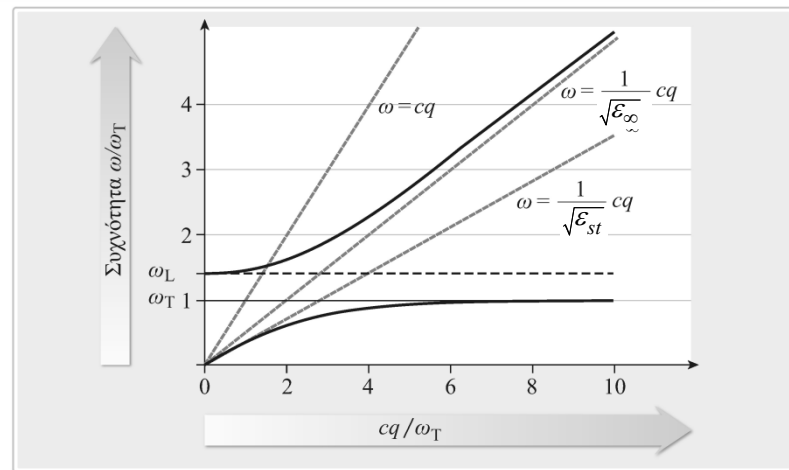
$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$$

$$\omega^2 = \frac{c^2 q^2}{\epsilon(\omega)} \quad \omega^2 \epsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} = c^2 q^2$$

$$\omega^4 - \omega^2 \left[ \omega_L^2 + \left( \frac{cq}{\epsilon_\infty} \right)^2 \right] + \omega_T^2 \left( \frac{cq}{\epsilon_\infty} \right)^2 = 0$$



$$\omega(q=0) = \begin{cases} 0 \\ \omega_L \end{cases} \quad \omega(q \rightarrow \infty) = \begin{cases} \omega_T \\ \omega = \frac{cq}{\sqrt{\epsilon_\infty}} \end{cases}$$



Σχ. 11.5. Καμπύλες διασποράς ενός φωνονικού - πολαριτονίου. Η περιοχή του q που απεικονίζεται είναι μικρή αναφορικά με ένα διάλυσμα του αντιστρόφου πλέγματος. Για τον λόγο αυτόν μπορεί να παραληφθεί η διασπορά του πλέγματος (φωνονίων).

# Εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι (πολαριτόνια)

- Λύση

$$\omega^2 = \frac{\omega_L^2 + c^2 q^2 / \varepsilon_\infty}{2} \pm \frac{1}{2} \left[ \left( \omega_L^2 + (c q / \varepsilon_\infty)^2 \right) - 4c^2 q^2 \omega_T^2 / \varepsilon_\infty \right]^{1/2}$$

- Για μικρά  $q$

$$\left[ \left( \omega_L^2 + c^2 q^2 / \varepsilon_\infty \right) - 4c^2 q^2 \omega_T^2 / \varepsilon_\infty \right]^{1/2} \cong \omega_L^2 \left[ 1 + \frac{2c^2}{\varepsilon_\infty} \left( \frac{1}{\omega_L^2} - \frac{2\omega_T^2}{\omega_L^4} \right) q^2 \right]^{1/2} \cong \omega_L^2 + \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_\infty} \left( 1 - \frac{2\omega_T^2}{\omega_L^2} \right)$$

οπότε

$$\omega^2 = \frac{\omega_L^2 + c^2 q^2 / \varepsilon_\infty}{2} \pm \frac{1}{2} \left[ \omega_L^2 + \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_\infty} \left( 1 - \frac{2\omega_T^2}{\omega_L^2} \right) \right] = \begin{cases} \omega_L^2 + c^2 q^2 (\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_{st}^{-1}) \\ \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_\infty} \frac{\omega_T^2}{\omega_L^2} = \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_{st}} \end{cases}$$

- Για μεγάλα  $q$

$$\left[ \left( \omega_L^2 + c^2 q^2 / \varepsilon_\infty \right)^2 - 4c^2 q^2 \omega_T^2 / \varepsilon_\infty \right]^{1/2} \cong \left[ \left( c^2 q^2 / \varepsilon_\infty \right)^2 - 4c^2 q^2 \omega_T^2 / \varepsilon_\infty \right]^{1/2} \cong \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_\infty} \left[ 1 - \frac{4\omega_T^2 \varepsilon_\infty}{c^2 q^2} \right]^{1/2} \cong \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_\infty} - 2\omega_T^2$$

οπότε

$$\omega^2 \cong \frac{c^2 q^2}{2\varepsilon_\infty} \pm \frac{1}{2} \left[ \frac{c^2 q^2}{\varepsilon_\infty} - 2\omega_T^2 \right] = \begin{cases} c^2 q^2 / \varepsilon_\infty \\ \omega_T^2 \end{cases}$$



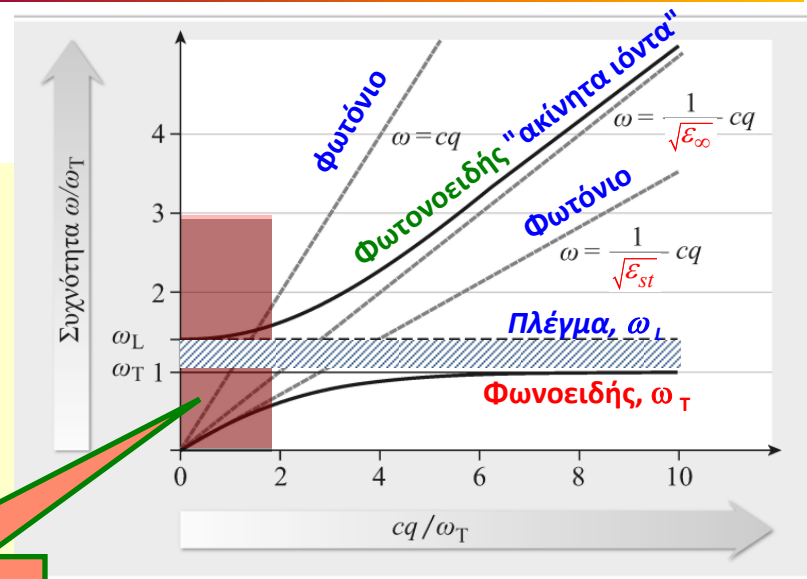
# Εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι (πολαριτόνια)

## • Πολαριτόνια

- Σύζευξη μηχανικών + ΗΜ κυμάτων.
- Εξαρτάται ισχυρά από τη μορφή  $\epsilon(\omega)$ .
- $cq/\omega_T \cong 1 \Rightarrow q \cong 1 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} / (3 \cdot 10^{16} \text{ \AA} \text{ s}^{-1}) \cong 3 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1} \ll G (=2\pi/a \cong 1 \text{ \AA}^{-1})$ .

- Δηλ. από πολύ μικρά  $q$  τα "μεικτά" κύματα κινούνται με τη συχνότητα συντονισμού  $\omega_T$ .

**Ισχυρή σύζευξη**



- Αν  $c \rightarrow \infty$  τότε η  $\omega = \omega_0 = \omega_T$ , η **ΜΟΝΗ ΛΥΣΗ** (Μη καθυστερημένη λύση. (Ηλεκτροστατική λύση). (Μόνο φωνόνια))
- **ΔΕΝ** υπάρχει λύση **οδευόντων** κυμάτων για  $\omega_T < \omega < \omega_L$ .

- Το  $q$  γίνεται φανταστικό!

- Για μεγάλα  $q$  το πάνω κλάδος τείνει ασυμπτωτικά στη  $\omega = cq / \sqrt{\epsilon_\infty}$

- Το φως "βλέπει" "στάσιμα" τα ιόντα.!

- Παρατηρούνται με τη φασματοσκοπία Raman ή εξασθενημένης ολικής ανάκλασης.

- Δυνατότητα μεταβολής του  $q$  της προσπίπτουσας ΗΜ-ακτινοβολίας.

# Επιφανειακά κύματα σε ένα διηλεκτρικό

- Μη άπειρες διαστάσεις.

– Οριακές συνθήκες

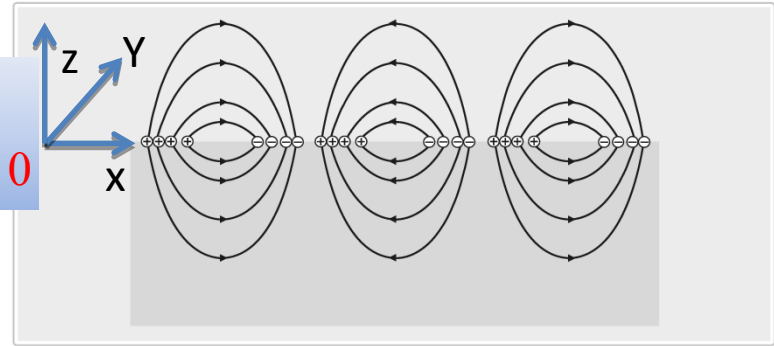
$$c \rightarrow \infty \Rightarrow \mu_0 \epsilon_0 \rightarrow 0$$

- Ημιεπίπεδο.

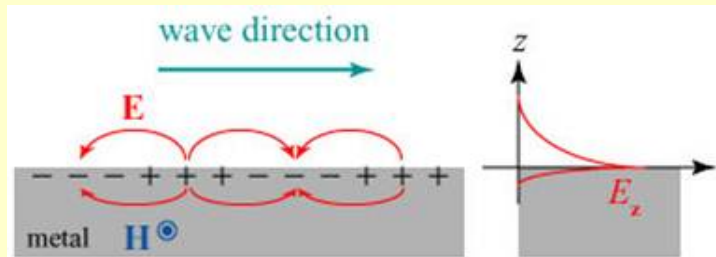
$$\nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}} = -\mu_0 \mathbf{H} \rightarrow 0$$

– Θεωρούμε

- Λύσεις χωρίς καθυστέρηση (στατικός ΗΜ, Coulomb).
- Εγκάρσια οδεύοντα κύματα** // επιφάνεια.
- Μειώνονται εκθετικά κατά τον z.



Σχ. 11.6. Σχηματική παράσταση του ηλεκτρικού πεδίου επιφανειακών κυμάτων που αναπτύσσονται σε μια επίπεδη επιφάνεια ενός διηλεκτρικού.



- Δεν μας ενδιαφέρει η θεώρηση διαμήκων κυμάτων όγκου.

– Συνέχεια του D στον z, δίδει

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad z \neq 0 \Rightarrow$$

$$\nabla^2 \phi = \Delta \phi = 0 \quad \text{Εξίσωση Laplace}$$

Μία λύση

$$\nabla \cdot \nabla \times \phi(x, z) = 0$$

$$\phi(x, z) = \phi_0 e^{-|q|z} e^{-i(qx - \omega t)} \Rightarrow \mathbf{E}(x, z) = -\nabla \phi(x, z)$$

$$D_z = -\epsilon_0 \epsilon(\omega) \left. \frac{\partial \phi(x, z)}{\partial z} \right|_{z=0} = -\epsilon_0 \left. \frac{\partial \phi(x, z)}{\partial z} \right|_{z \geq 0}$$

$$-\epsilon(\omega_s) = 1 \quad \omega_s < \omega_L \quad (\epsilon(\omega_L) = 0)$$

Ιοντικό πλέγμα

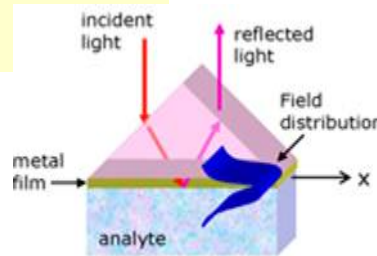
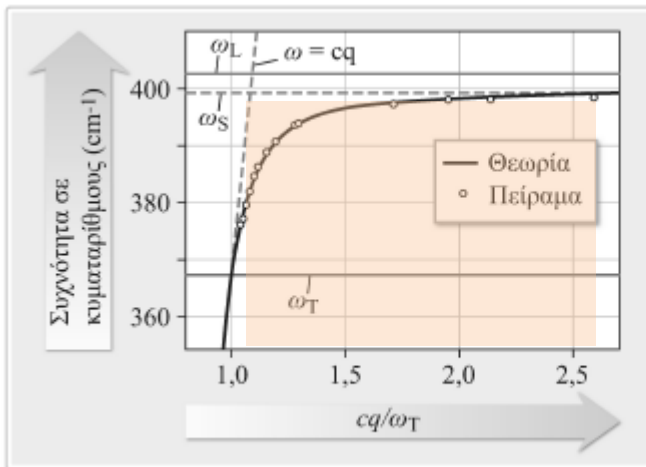
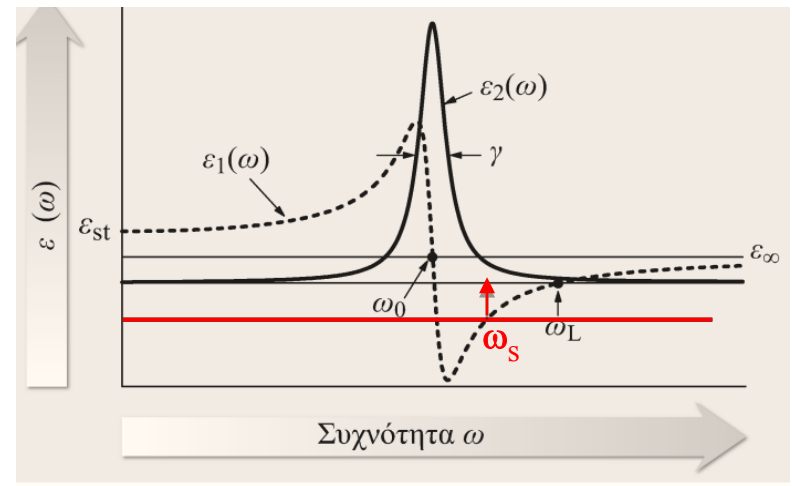
$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty) \omega_T^2}{(\omega_T^2 - \omega_s^2)} = -1 \Rightarrow \omega_s = \omega_T \left( \frac{\epsilon_{st} + 1}{\epsilon_\infty + 1} \right)^{1/2} \Rightarrow \omega_T < \omega_s < \omega_L = \left( \frac{\epsilon_{st}}{\epsilon_\infty} \right)^{1/2}$$

# Επιφανειακά κύματα σε ένα διηλεκτρικό

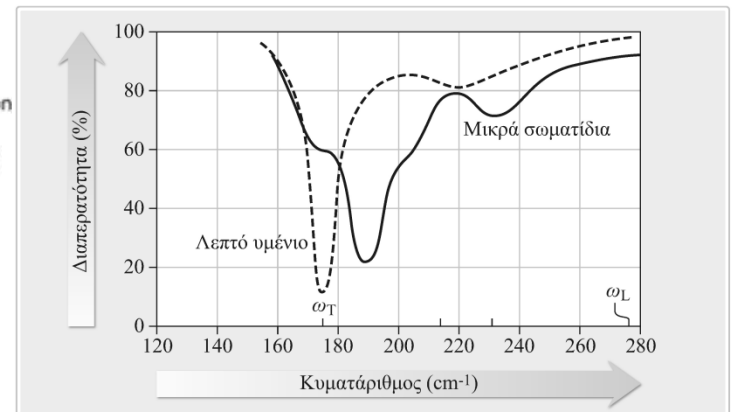
- **Εδώ ειδική περίπτωση:**
  - Εντοπισμένα στην επιφάνεια.
- Οι συχνότητες των επιφανειακών κυμάτων κείται  $\omega_T < \omega_s < \omega_L$ 
  - Σε αντίθεση με τα πολαριτόνια όγκου !!
- Τα επιφανειακά κύματα υφίστανται για  $q \geq q_x^{\text{φωτός}} = (\omega / c) \sin \theta$

**Τα επιφανειακά κύματα δεν συζευγνύονται με το φως !**

- **Μόνο σε ειδικές γεωμετρίες**
  - τραχύτητα, νανοσφαίρες, φράγματα,
- Συζευγνύονται με φορτισμένα σωματίδια, (e, He<sup>+</sup>, H<sup>+</sup>, e<sup>+</sup> κλπ).
- **Διαμήκη κύματα.**



Σχ. XIII.3. Διασπορά των επιφανειακών πολαριτονίων του GaP. Τα  $\omega_L$  και  $\omega_T$  είναι οι συχνότητες αντίστοιχα των διαμήκων και εγκάρσιων φωνονίων.  $\omega_s$  είναι η συχνότητα του επιφανειακού φωνονίου.



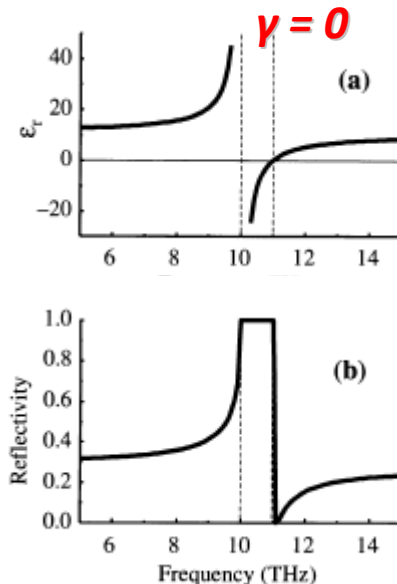
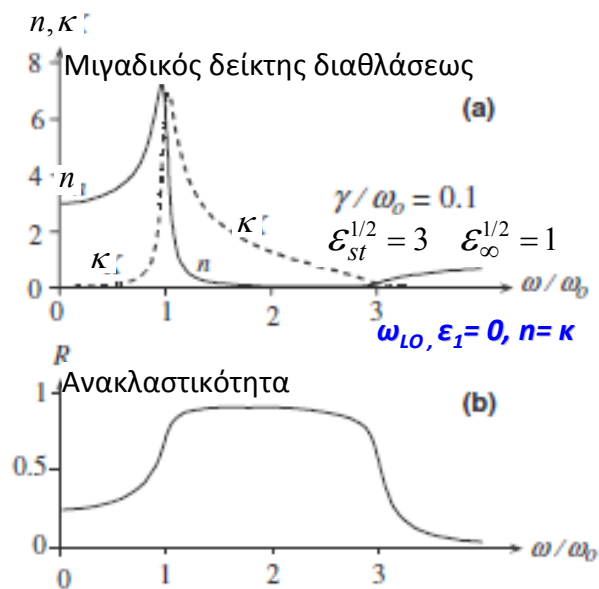
Σχ. 11.7. Φάσμα απορρόφησης στο υπέρυθρο λεπτού υμένιου NaCl και μικρών κυβικών NaCl ακμής 10 μm, κατά Martin [11.3]. Το λεπτό υμένιο απορροφεί στην  $\omega_T = 175 \text{ cm}^{-1}$  [βλ. (11.30, 11.410)]. Η επιπρόσθετη απορρόφηση στα  $220 \text{ cm}^{-1}$  οφείλεται σε διαδικασίες απορρόφησης δύο φωνονίων. Η μέγιστη απορρόφηση για μικρά σωματίδια είναι σαφώς μετατοπισμένη προς υψηλότερες συχνότητες.

# Ανακλαστικότητα διηλεκτρικού επιπέδου

- Ενώ η διαπερατότητα  $T(\omega)$  για **λεπτά** υμένα καθορίζεται **βασικά** από το  $\epsilon_2(\omega)$
- Η ανακλαστικότητα εμπεριέχει και τα δύο μέρη της  $\epsilon(\omega)$ .
  - Ειδικά για την κάθετη πρόσπτωση δίδεται

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty)\omega_0^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

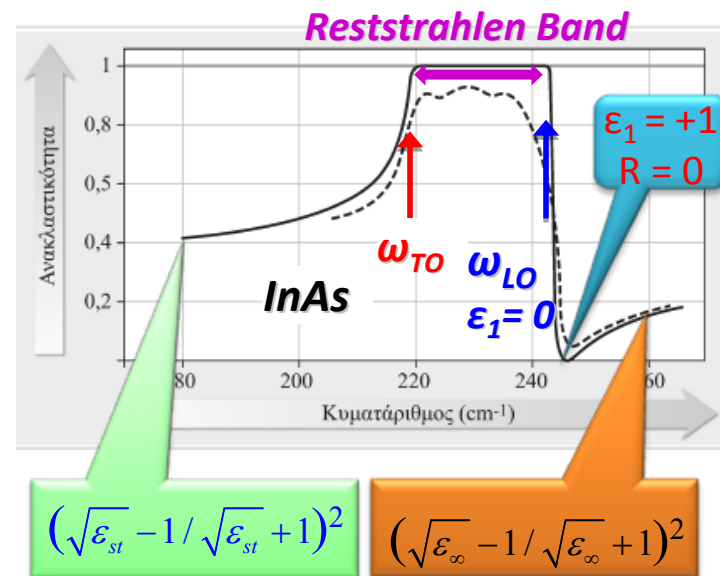
$$\epsilon_2(\omega) = \frac{(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty)\omega_0^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$



$$I_2(\omega) = E_0 \overbrace{T_1}^{-1} T_2 \frac{e^{i(\tilde{n}\omega/c)d}}{1 - \underbrace{R_2^2}_{\rightarrow 0} e^{2i(\tilde{n}\omega/c)d}}$$

$$I_R = \|R\|^2 = \tilde{R}^* \cdot \tilde{R} = \frac{\tilde{n}^* - 1}{\tilde{n}^* + 1} \cdot \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1}$$

$$= \left\| \frac{\sqrt{\tilde{\epsilon}(\omega)} - 1}{\sqrt{\tilde{\epsilon}(\omega)} + 1} \right\|^2 = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2}$$



# ΤΟΠΙΚΟ ΠΕΔΙΟ

- Το εξωτερικό πεδίο  $\mathbf{E} \neq \mathbf{E}_{loc}$  σε πυκνά μέσα.
  - Έστω ότι  $E \parallel z$ .  $\mathbf{i}$  κυψελίδες.

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \mathbf{p}_i \frac{3z_i - r_i^2}{r_i^5}$$

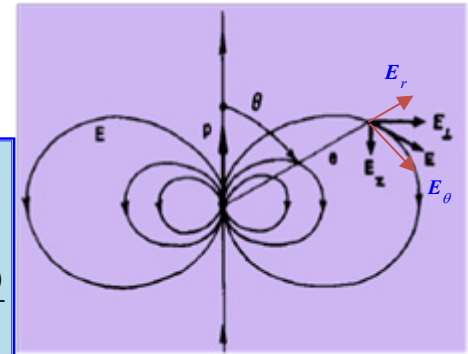
- Σφαιρική συμμετρία.

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \mathbf{p}_i \frac{3z_i - r_i^2}{r_i^5}$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{r^2} = \frac{p \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}}$$

$$E_x = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{2p \sin \theta \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad E_y = -\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{p(3 \cos^2 \theta - 1)}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} - r^2 \mathbf{p}}{r^5} \right) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^5} \mathbf{p}(3z^2 - r^2)$$



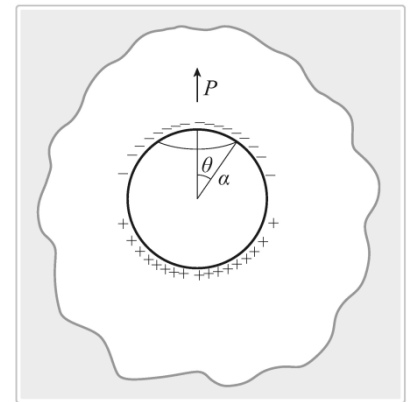
- Σφαιρική συμμετρία. Χρήσιμη για  $a \rightarrow 0$ , ή  $\lambda \gg a$

- Μένει όμως η συνεισφορά από υλικό εκτός σφαίρας !!!

- Εδώ: Συνεχής, μακροσκοπική πόλωση  $\mathbf{P}$ .
- Κατανομή φορτίου  $\Rightarrow$  κατανομή  $\mathbf{E}$ .
- Πεδίο στο κέντρο:

$$\rho_P = -P_n = -\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}} = -P \cos \theta$$

$$dq = -P \cos \theta 2\pi a \sin \theta a d\theta$$



$$dE = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{dq}{a^2} \cos \theta = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{-P \cos \theta 2\pi a \sin \theta a d\theta}{a^2} \cos \theta = \frac{P \cos^2 \theta \sin \theta d\theta}{2\pi\epsilon_0}$$

$$\mathbf{E}_P = \frac{\mathbf{P}}{2\pi\epsilon_0} \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{\mathbf{P}}{2\pi\epsilon_0} \frac{2\pi}{3} \Rightarrow \mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0}$$

# ΤΟΠΙΚΟ ΠΕΔΙΟ

- Η διαφοροποίηση λόγω τοπικού πεδίου επιβάλλει διαφοροποίηση των εξισώσεων ταλάντωσης (πλάτος, επαγόμενη πόλωση).

$$u(\omega)(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega) = \frac{e^*}{\mu} E_{loc}(\omega)$$

$$P(\omega) = \frac{N}{V} e^* u(\omega) + \varepsilon_0 \frac{N}{V} \alpha E_{loc}(\omega)$$



$$E_{loc} = E + \frac{P}{3\varepsilon_0}$$

$$u(\omega)(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega) = \frac{e^*}{\mu} \left( E(\omega) + \frac{P(\omega)}{3\varepsilon_0} \right)$$

$$P(\omega) = \frac{N}{V} e^* u(\omega) + \varepsilon_0 \frac{N}{V} \alpha \left( E(\omega) + \frac{P(\omega)}{3\varepsilon_0} \right)$$

$$u(\omega) \left( \omega_0^2 - \frac{N}{3\varepsilon_0\mu V} \cdot \frac{e^{*2}}{1 - N\alpha/3V} - \omega^2 - i\gamma\omega \right) = \frac{e^*}{\mu} \cdot \frac{E(\omega)}{1 - N\alpha/3V}$$

$$P(\omega) = \frac{N}{V} \cdot \frac{e^*}{1 - N\alpha/3V} u(\omega) + \varepsilon_0 \frac{N}{V} \cdot \frac{\alpha}{1 - N\alpha/3V} E(\omega)$$

$$\omega \rightarrow \infty, u(\omega) \rightarrow 0$$



$$\varepsilon_\infty = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{P(\omega_\infty)}{E(\omega_\infty)} + 1 = 1 + \frac{N\alpha/V}{1 - N\alpha/3V} \Rightarrow \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty + 2} = \frac{N}{3V} \alpha$$

$$u(\omega) = \frac{e^*}{3\mu} \frac{(\varepsilon_\infty + 2)}{(\omega_0'^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} E(\omega)$$

$$P(\omega) = \frac{N}{V} e^* u(\omega) + \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - 1) E(\omega)$$

$$\varepsilon_0 (\varepsilon - 1) = \frac{P(\omega)}{E(\omega)} = \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - 1) + \frac{N}{V} \cdot \frac{e^{*2}}{3\mu} \cdot \frac{(\varepsilon_\infty + 2)}{(\omega_0'^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}$$

**Εξίσωση  
Clausius Mossoti**

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_T'^2 (\varepsilon_{st}' - \varepsilon_\infty)}{(\omega_T'^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}$$

$$\varepsilon_{st}' = \varepsilon_\infty + \frac{N}{V} \cdot \frac{e^{*2}}{3\varepsilon_0\mu} \cdot \frac{1}{\omega_0'^2 (= \omega_T'^2)}$$

**Μείωση  $\omega_0$**

**Γενικά**

$$u(\omega) \left( \underbrace{\omega_0^2 - \frac{N}{3\varepsilon_0\mu V} \frac{e^{*2}}{1 - N\alpha/3V}}_{\omega_0'^2 < \omega_0^2} - \omega^2 - i\gamma\omega \right) = \frac{e^*}{\mu} \frac{E(\omega)}{1 - N\alpha/3V}$$

$$P(\omega) = \frac{N}{V} e^* u(\omega) + \varepsilon_0 (\varepsilon_\infty - 1) E(\omega)$$

$$1 - N\alpha/3V = 3/(\varepsilon_\infty + 2)$$

# Καταστροφή λόγω πόλωσης

• Τοπικό πεδίο  $\Rightarrow$  Μείωση συχνότητας συντονισμού.

– Πόσο?  $\omega_T = 0$  ? ή  $< 0$  ?

•  $\omega_T = 0$

– Απωστικές άμεσων γειτόνων (ελαστικές)  $<$  δυνάμεις λόγω πεδίου.

– Συνισταμένη δύναμη  $\Rightarrow$  νέα θέση ισορροπίας.

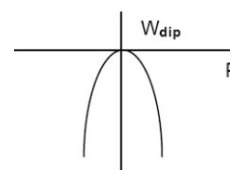
• Δυνάμεις στην νέα θέση μη αρμονικές !!

– Διαχωρισμός του στερεού σε περιοχές με διαφορετική πόλωση.

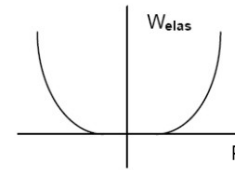
– Καταστροφή λόγω πόλωσης.!!

– **Σιδηροηλεκτρική φάση**  $\Leftarrow$  (Σιδηρομαγνητική φάση)

$$\omega_T^2 = \omega_0^2 - \frac{N}{3\epsilon_0\mu V} \frac{e^{*2}}{1 - N\alpha/3V}$$



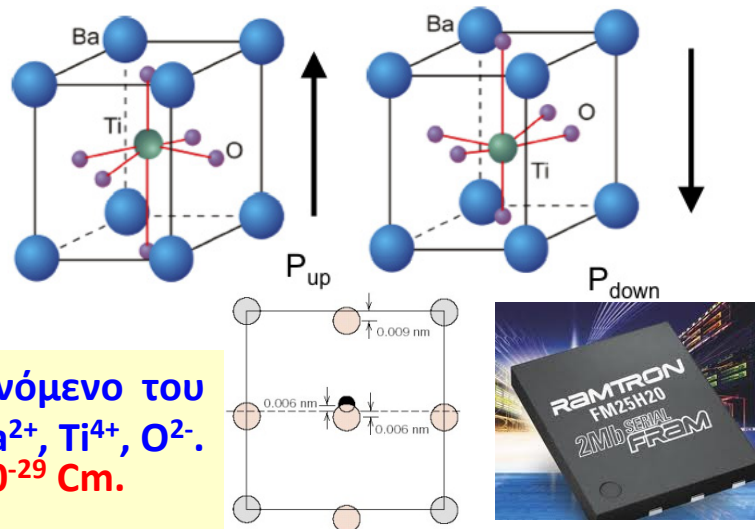
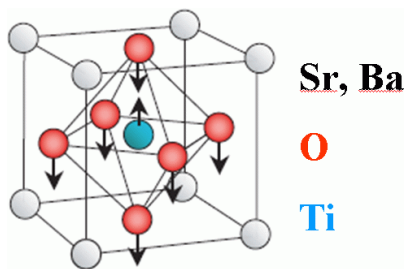
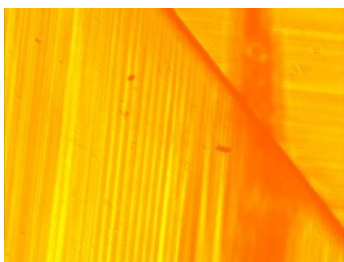
(a) Dipole interaction  
 $W_{dip} = - (N\alpha/2/9\epsilon_0^2)P^2$



(b) Elastic energy  
 $W_{elas} = (k/2Nq^2)P^2 + (k'/4N^3q^4)P^4$



(c) Total energy  
 $W_{tot} = W_{dip} + W_{elas}$



– Η πόλωση υπολογίζεται αθροιστικά από το γινόμενο του φορτίου επί την μετατόπιση για όλα τα ιόντα  $Ba^{2+}$ ,  $Ti^{4+}$ ,  $O^{2-}$ .  
 $p = 0,25 \text{ C m/κυψελίδα} \Rightarrow P = p^* \text{ κυψελίδα} = 2 \cdot 10^{-29} \text{ Cm.}$

# Καταστροφή λόγω πόλωσης

$$\frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + 2} = \frac{1}{3} \frac{Na}{V} \Rightarrow \varepsilon[a(\omega)] = \frac{1 + \frac{2}{3} \frac{Na(\omega)}{V}}{1 - \frac{1}{3} \frac{Na(\omega)}{V}} \Rightarrow \begin{cases} \varepsilon(a) \rightarrow \infty \\ a(\omega) = \frac{3V}{N} \end{cases}$$

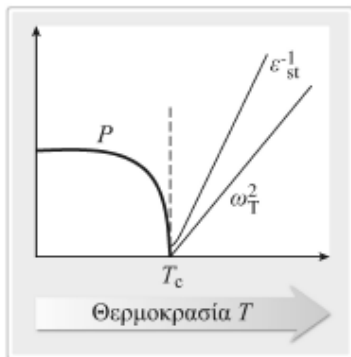
- Κοντά στην κρίσιμη πολωσιμότητα

$$\frac{Na(\omega)}{3V} \rightarrow 1 - s (s \ll 1) \quad \varepsilon(a) \approx 1/s \approx 1/\xi(T - T_c)$$

$$\varepsilon \approx 1/\xi(T - T_c) \quad \varepsilon^{-1} \propto T - T_c$$

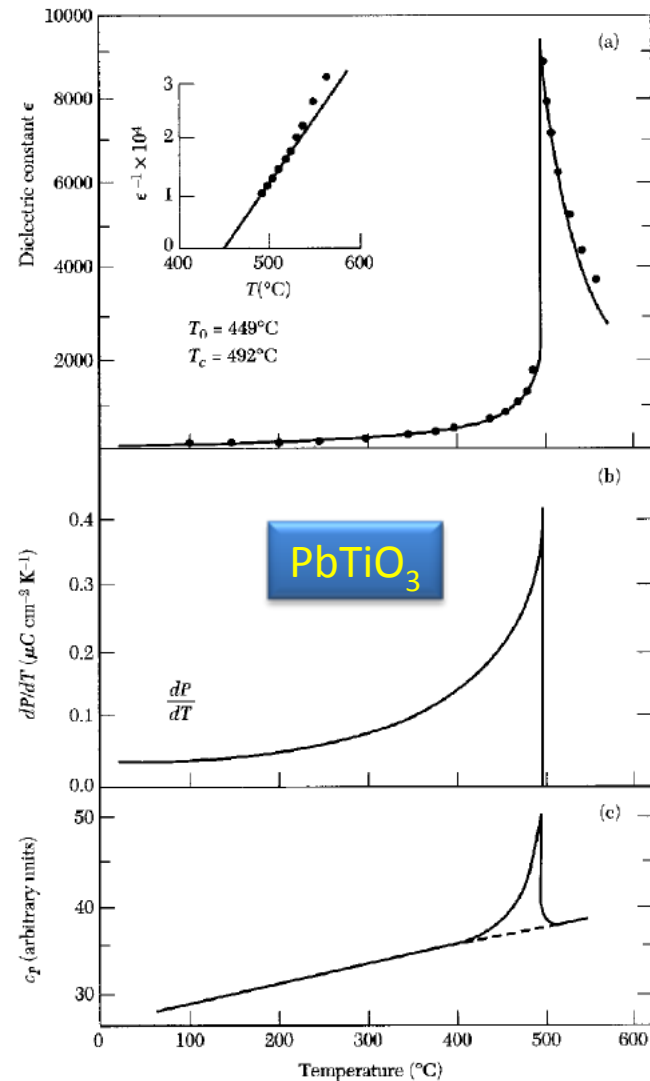
- Από την LST σχέση για να έχουμε  $\omega_T \rightarrow 0$ , πρέπει  $\varepsilon_{st} \rightarrow \infty$ ,

$$\omega_T^2 = \omega_L^2 \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_{st}} \Rightarrow \begin{cases} \omega_T^2 \rightarrow 0 \\ \varepsilon_{st} \rightarrow \infty \end{cases} \xrightarrow{T=T_c} \omega_T^2 \propto \varepsilon_{st}^{-1} \propto T - T_c$$



## Τεχνολογικό ενδιαφέρον

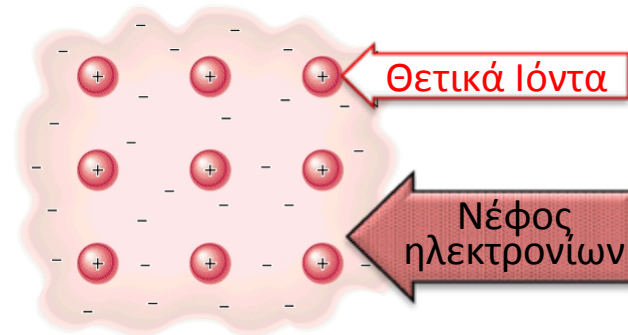
- Υλικά υψηλής  $\varepsilon$
- Πυκνωτές, Μετασχηματιστές
- Μη πτητικές μνήμες
- Πιεζοηλεκτρικά





# Αέριο Ελευθέρων Ηλεκτρονίων

- Χαρακτηρίζει τη διηλεκτρική συμπεριφορά υλικών με μεγάλη συγκέντρωση φορέων.
  - Μέταλλα, Ημιαγωγοί με μεγάλο αριθμό φορέων.
- Πάλι από την εξίσωση του εξαναγκασμένου ταλαντωτή.



$$M_1(\ddot{\mathbf{u}}_{n_1} + \gamma * \dot{\mathbf{u}}_{n_1} + \omega_0^2 \mathbf{u}_{n_1}) = -e^* \mathbf{E} \quad \begin{cases} M_1 \rightarrow nm \\ e^* \rightarrow -ne \\ \omega_0 \rightarrow 0 \\ M_1 \gamma^* \rightarrow \gamma \end{cases}$$

$$nm\ddot{\mathbf{u}} + \gamma\dot{\mathbf{u}} = -ne\mathbf{E}$$

- Συνδέουμε τις απώλειες  $\gamma$  με την αγωγιμότητα  $\sigma$ , θεωρώντας σταθερή ταχύτητα ( $\ddot{\mathbf{u}} = 0$ )
  - Δεν είναι ο μοναδικός τρόπος. Εξαρτάται από τον μηχανισμό απωλειών.
- Θεωρώντας αρμονικές λύσεις  $\mathbf{u} \sim \mathbf{u}_0 e^{-i\omega t}$  (ή  $\rightarrow$  M Fourier)

$$\mathbf{j} = -en\dot{\mathbf{u}} = en \frac{ne\mathbf{E}}{\gamma} = \sigma \mathbf{E} \quad \gamma = \frac{n^2 e^2}{\sigma}$$

$$nm\ddot{\mathbf{u}} + \frac{n^2 e^2}{\sigma} \dot{\mathbf{u}} = -ne\mathbf{E}$$

$$\left( -nm\omega^2 - i\omega \frac{n^2 e^2}{\sigma(\omega)} \right) \mathbf{u}(\omega) = -ne\mathbf{E}(\omega)$$

$$\mathbf{P} = -ne\mathbf{u}(\omega) = \varepsilon_0 (\varepsilon(\omega) - 1) \mathbf{E}(\omega)$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2}{\sigma(\omega)}} \quad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\varepsilon_0}$$

$\omega_p \equiv$  Συχνότητα πλάσματος

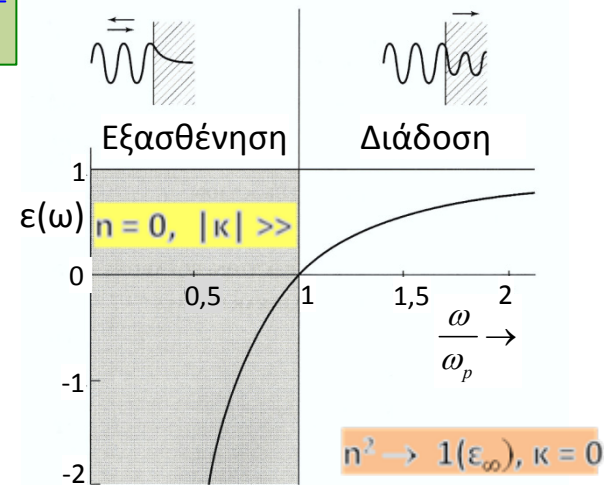
Συχνότητα διαμήκους ταλάντωσης "ελευθέρων" ηλεκτρονίων

# Αέριο Ελευθέρων Ηλεκτρονίων

- Ιδιαίτερα χρήσιμη η περίπτωση μικρών απωλειών ( $\gamma \rightarrow 0, \sigma \rightarrow \infty$ ).

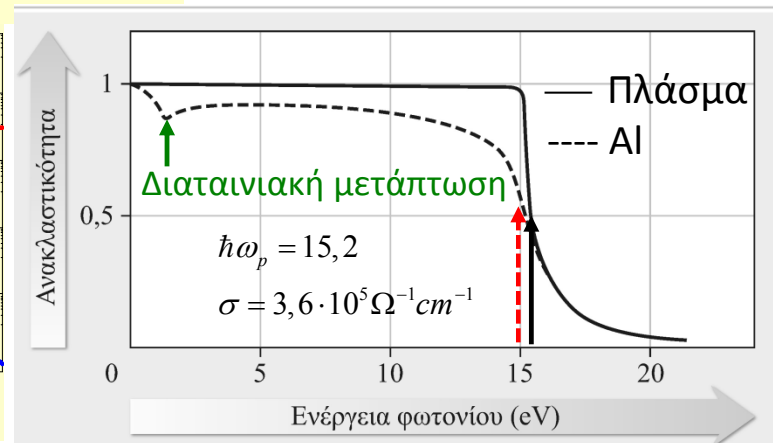
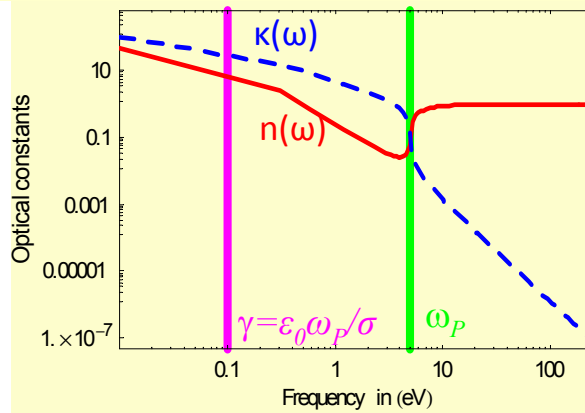
$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \varepsilon(\omega) = (n + i\kappa)^2 \xrightarrow{\text{Μέσον}} \varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \quad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_\infty m \varepsilon_0}$$

- Εδώ  $\varepsilon(\omega_p) = 0$ . Υπάρχουν μόνο διαμήκη κύματα.
- $\omega_T = 0$ . **ΔΕΝ** υπάρχει δύναμη επαναφοράς.!!
- Οι τιμές του  $\omega_p$  εξαρτώνται από τη συγκέντρωση ( $n$ ) και της ενεργού μάζας ( $m^*$ ). **Περίπου 3 – 20 eV**.
- Τα πλασμόνια είναι καλά ορισμένα μόνο απουσία άλλων διεγέρσεων.
  - Μέταλλα, ημιαγωγοί με προσμίξεις.
- Ερμηνεύει όμως "καλά" την υψηλή ανακλαστικότητα των μετάλλων. (Al, Zn κλπ).
- Η παρουσία της διατανιακής μετάπτωσης "προκαλεί" συνολική μείωση της ανακλαστικότητας στο 90%.



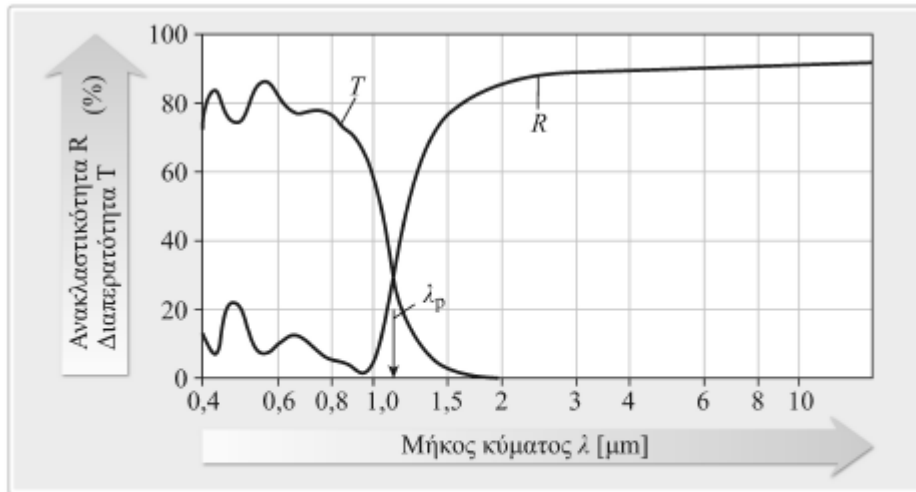
$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{1}{\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2 + i\omega \frac{\varepsilon_0}{\sigma}}$$

$$I_R = \left| \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega)} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega)} + 1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2}$$



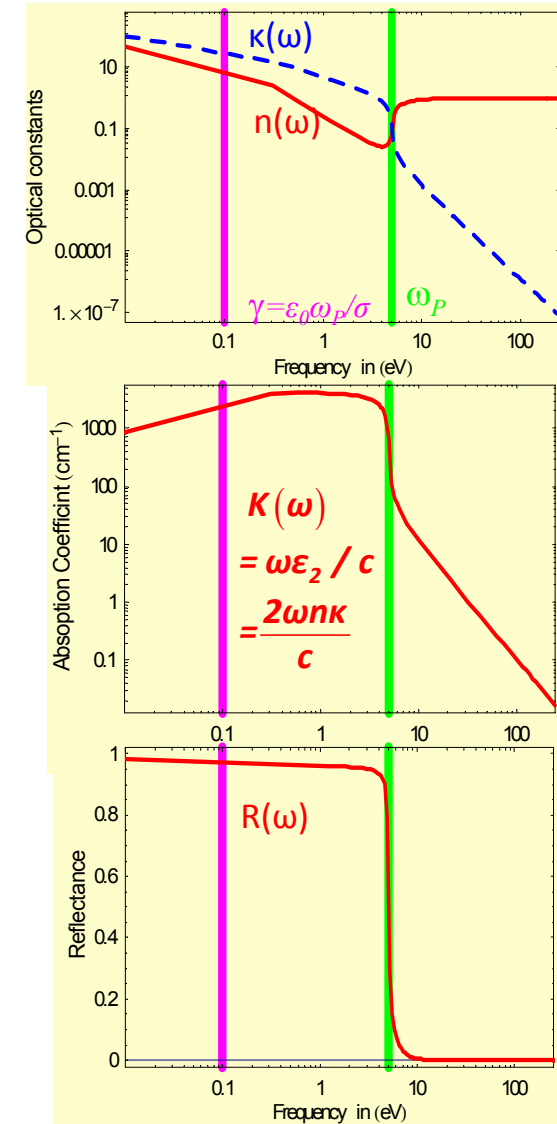
# Αέριο Ελευθέρων Ηλεκτρονίων

- Και τα τρία χαρακτηριστικά μεγέθη παριστάνονται στο διπλανό σχήμα.
- Πλάσμα μπορεί να σχηματισθεί και από τα ηλεκτρόνια σθένους. (Ενέργεια 10 -30 eV)
- Ενδιαφέρουσα περίπτωση είναι ο ημιαγωγός  $\text{In}_2\text{O}_3 : \text{Sn}$ .



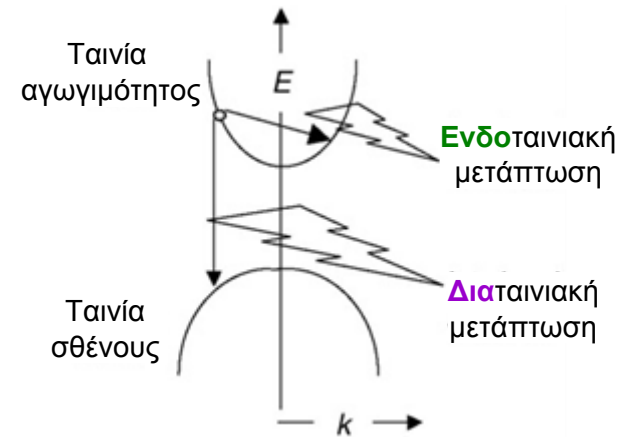
Σχ. 11.12. Ανακλαστικότητα  $R$  και διαπερατότητα  $T$  ως συνάρτηση του μήκους κύματος για ένα υμένιο  $\text{In}_2\text{O}_3$  περιέχον προσμείξεις  $\text{Sn}$ . Το πάχος του υμενίου είναι  $0,3 \mu\text{m}$  και η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων ανέρχεται σε  $1,3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , ενώ το  $\lambda_p$  υποδηλώνει το μήκος κύματος του πλάσματος.

- Διαπερατό στο ορατό.
- Φίλτρο στο υπέρυθρο. ( Επιστρώσεις λυχνιών, θερμικών παραθύρων)



# Διαταινιακές μεταπτώσεις

- Το πρότυπο των ελευθέρων ηλεκτρονίων "παραβλέπει" τη χωρική διασπορά  $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ .
- Η παρουσία επιμέρους ενεργειακών σταθμών  $E = E(\mathbf{k})$  στα στερεά όμως το απαιτεί.
  - Το πρόβλημα απαιτεί στις ενδοταινιακές μεταπτώσεις, ακόμη και στο απλό πρότυπο των ελευθέρων ηλεκτρονίων, να ληφθεί υπόψη και το φαινόμενο της θωράκισης.
- Σύνδεση  $\epsilon(\omega)$  με τις ενεργειακές ταινίες.
- **Θεωρούμε ότι  $\lambda \gg \alpha \Rightarrow \kappa (=2\pi/\lambda) \ll G(=2\pi/\alpha)$**



$$\mathbf{E} = E_{0x} \mathbf{e}_x \cos \omega t$$

## • Χρονο-εξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger.

### • Λύση:

- Την εκφράζουμε ως γραμμικό συνδυασμό λύσεων του αδιαταράκτου συστήματος  $\psi_{0i}(\mathbf{r}, t)$ .
- Αντικαθιστώντας την "θεωρούμενη λύση" στην εξίσωση Schrödinger και θεωρώντας ότι  $\alpha_i(t=0) \equiv 1$  προσδιορίζεται η χρονική εξάρτηση των  $\alpha_i(t)$ .

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{ex}{2} E_{0x} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \dot{\psi}(\mathbf{r}, t)$$

$E = Fx = -eE_x x$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_i a_i(t) \psi_{0i}(\mathbf{r}, t) = \sum_i a_i(t) e^{-\frac{iE_i t}{\hbar}} \phi_i(\mathbf{r})$$

$$a_j(t) = \frac{i}{2\hbar} eE_{0x} \langle j | x | i \rangle \int_0^t (e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) e^{i(\frac{E_j - E_i}{\hbar})t'} dt'$$

$$\omega_{ji} = \frac{E_j - E_i}{\hbar} \quad \langle j | x | i \rangle = \int \phi_j^*(\mathbf{r}) x \phi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$= \frac{eE_{0x}}{2\hbar} \langle j | x | i \rangle \left( \frac{e^{i(\omega_{ji} - \omega)t} - 1}{\omega_{ji} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{ji} + \omega)t} - 1}{\omega_{ji} + \omega} \right)$$

# Διαταινιακές μεταπτώσεις

- Ας δούμε αναλυτικότερα το πίνακοστοιχείο  $\langle j | x | i \rangle = \int \varphi_j^*(\mathbf{r}) x \varphi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$  το μας επιτρέπει να υπολογίσουμε την **αναμενόμενη τιμή της διπολικής ροπής  $p_{ij}$  στη διηγευμένη κατάσταση.**

$$\begin{aligned}
 p &= \int \psi^*(\mathbf{r}) x \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \sum_i a_i^*(t) e^{i\frac{E_i t}{\hbar}} \varphi_i(\mathbf{r}) x \sum_j a_j(t) e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}} \varphi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \xrightarrow[\text{γραμμικούς όρους}]{\text{Μόνο}} \\
 &= \int \overbrace{|a_i^*(t)|^2}^{\equiv 1} \varphi_i^*(\mathbf{r}) e^{i\frac{E_i t}{\hbar}} x e^{-i\frac{E_i t}{\hbar}} \varphi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \sum_j \left( a_j(t) e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}} e^{i\frac{E_i t}{\hbar}} \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) x \varphi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + a_i^*(t) e^{i\frac{E_i t}{\hbar}} e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}} \int \varphi_i(\mathbf{r}) x \varphi_j^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \\
 &= e \langle i | x | i \rangle + e \sum_j \left( \langle i | x | j \rangle a_j(t) e^{-i\omega_{ji}t} + \langle j | x | i \rangle a_j^*(t) e^{i\omega_{ji}t} \right) \\
 &= e x_{ii} + e \sum_j x_{ij} a_j(t) e^{-i\omega_{ji}t} + e \sum_j x_{ij}^* a_j^*(t) e^{i\omega_{ji}t} \leftarrow a_j(t) = \frac{e E_{0x}}{2\hbar} \langle j | x | i \rangle \left( \frac{e^{i(\omega_{ji}-\omega)t} - 1}{\omega_{ji} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{ji}+\omega)t} - 1}{\omega_{ji} + \omega} \right) \\
 &= e x_{ii} + \frac{e^2 E_{0x}}{2\hbar} |x_{ij}|^2 \sum_j \left( \frac{e^{-i\omega t} - e^{-i\omega_{ji}t}}{\omega_{ji} - \omega} + \frac{e^{-i\omega t} - e^{-i\omega_{ji}t}}{\omega_{ji} + \omega} + \frac{e^{i\omega t} - e^{i\omega_{ji}t}}{\omega_{ji} - \omega} + \frac{e^{i\omega t} - e^{i\omega_{ji}t}}{\omega_{ji} + \omega} \right) \\
 &= e x_{ii} + e^2 \frac{e E_{0x}}{2\hbar} |x_{ij}|^2 \sum_j \left( \frac{2\omega_{ji} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})}{\omega_{ji}^2 - \omega^2} - \frac{2\omega_{ji} (e^{-i\omega_{ji}t} + e^{i\omega_{ji}t})}{\omega_{ji}^2 - \omega^2} \right) \\
 p_{ij} &= e x_{ii} + \frac{2e^2 E_{0x}}{\hbar} |x_{ij}|^2 \sum_j \frac{\omega_{ji}}{\omega_{ji}^2 - \omega^2} (\cos \omega t - \cos \omega_{ji} t)
 \end{aligned}$$

# Διαταινιακές μεταπτώσεις

- Η τελευταία σχέση είναι πολύ σημαντική.

$$p_{ij} = ex_{ij} + \frac{eE_{0x}}{2\hbar} |x_{ij}|^2 \sum_j \frac{2\omega_{ji}}{\omega_{ji}^2 - \omega_0^2} (\cos \omega t + \cos \omega_{ji} t)$$

$$P(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) E(\omega) = \varepsilon_0 (\varepsilon(\omega) - 1) E(\omega)$$

- Ο πρώτος όρος δίδει τη ενυπάρχουσα διπολική ροπή. (Χωρίς πεδίο !!). Αν  $\varphi_i(\mathbf{r}) = -\varphi_j(\mathbf{r})$  τότε  $\chi_{ij} = 0$ .

- Ο δεύτερος όρος είναι γραμμικός ως την E.

- Συνεπώς δίδει την πολωσιμότητα  $\chi$  του μέσου.
- Περιέχει δύο συνιστώσες. Η μία ταλαντούται με τη συχνότητα του διεγείροντος πεδίου ( $\omega$ ).
- Η δεύτερη ταλαντούται με τις "ατομικές συχνότητες"  $\omega_{ji} \gg \omega$ 
  - ΔΕΝ μπορούμε να την παρατηρήσουμε. (  $1 \text{ eV} = 2.41 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$  )
- Απειρίζεται αν η συχνότητα διέγερσης συμπίπτει με μια ατομική συχνότητα.
  - Εδώ ο υπολογισμός της γίνεται με τη βοήθεια των σχέσεων Kramers-Kronig.
  - Προσθέτουμε μια μικρή μιγαδική ποσότητα  $\gamma$  την οποία στη συνέχεια αφήνουμε να τείνει στο μηδέν.

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{z - i\gamma} = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{i\gamma}{z^2 + \gamma^2} = \wp \frac{1}{z} + i\pi\delta(z)$$

$$\delta(z^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} (\delta(z - a) - \delta(z + a))$$

$$\varepsilon(\omega) - 1 = P(\omega) / E(\omega) / \varepsilon_0 = \sum_i (p_{ij} / V) / E(\omega) / \varepsilon_0 = \frac{e^2}{\hbar V \varepsilon_0} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \sum_{ij} \frac{|x_{ij}|^2 2\omega_{ji}}{\omega_{ji}^2 - \omega_0^2 + \gamma^2} =$$

$$\frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 \hbar V} \sum_{ij} \frac{|x_{ij}|^2 2\omega_{ji}}{\omega_{ji}^2 - \omega_0^2} + i \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 2\hbar V} \sum_{ij} |x_{ij}|^2 2\omega_{ji} \delta(\omega^2 - \omega_{ji}^2)$$

$$= \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 \hbar V} \sum_{ij} \frac{|x_{ij}|^2 2\omega_{ji}}{\omega_{ji}^2 - \omega_0^2} + i \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 \hbar V} \sum_{ij} |x_{ij}|^2 [\delta(\omega - \omega_{ji}) + \delta(\omega + \omega_{ji})]$$

# Διαταινιακές μεταπτώσεις

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$$

$$= 1(\rightarrow \varepsilon_\infty) + \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 V} \sum_{ij} \frac{|x_{ij}|^2 2(E_j - E_i)}{(E_j - E_i)^2 - \hbar^2 \omega^2} + i \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 V} \sum_{ij} |x_{ij}|^2 [\delta(\hbar\omega - (E_j - E_i))] + \delta(\hbar\omega + (E_j - E_i))]$$

- Αυτή η έκφραση είναι γενική και ισχύει για κάθε κβαντομηχανικό σύστημα (= διακριτές καταστάσεις)!! **Περιοδικό ή μη.**
- Το ***i*** αριθμεί τις **αρχικές** και το ***j*** τις **τελικές** καταστάσεις.
- Ο παραπέρα υπολογισμός της  $\varepsilon(\omega)$  απαιτεί τη γνώση των ιδιοκαταστάσεων του κβαντομηχανικού συστήματος.
- Σημαντική "ελάφρυνση" παρέχει η παρουσία περιοδικότητας.
- Σε ένα περιοδικό υλικό οι καταστάσεις περιγράφονται μέσω συναρτήσεων Bloch. (χωρικό τμήμα)

$$\langle \mathbf{r} | i, \mathbf{k}_i \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \quad \langle \mathbf{r} | i, \mathbf{k}_j \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k}_j}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}$$

- Με τη βοήθεια αυτών μπορούμε να υπολογίσουμε τα πινακοστοιχεία  $\chi_{ij}$ .

$$\langle i\mathbf{k}_i | x | j, \mathbf{k}_j \rangle = \int \varphi_j^*(\mathbf{r}) x \varphi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$p_{ij} = im\omega x_{ij}$$

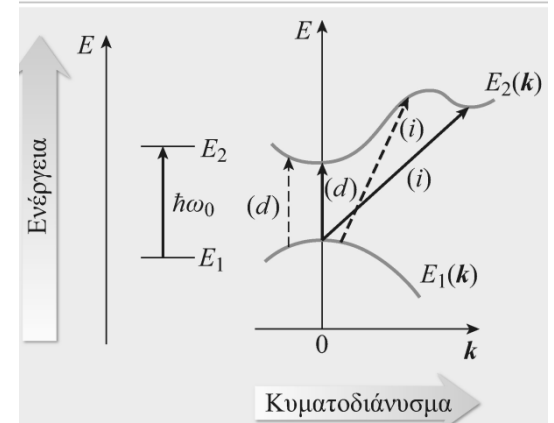
$$\langle i\mathbf{k}_i | p | j, \mathbf{k}_j \rangle \xrightarrow{k=k+G} = \langle i\mathbf{k}_i | p | j, \mathbf{k}_j \rangle_{\text{κυψελίδα}} \frac{1}{N} \sum_n e^{(k_i - k_j) \cdot \mathbf{r}_n}$$

$$\Rightarrow \neq 0 \text{ μόνο αν } k_i = k_j$$

- Δηλ. ισούται με το πινακοστοιχείο  $\chi_{ij}$  σε μια κυψελίδα επί τις συνεισφορές των άλλων κυψελίδων.

# Διαταινιακές μεταπτώσεις

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 V} \sum_{ijk} \frac{|\langle i\mathbf{k}_i | p | j, \mathbf{k}_j \rangle|^2}{m^2 \omega^2} \left[ \overbrace{\delta(\hbar\omega - (E_j - E_i))}^{\text{Απορρόφηση}} + \overbrace{\delta(\hbar\omega + (E_j - E_i))}^{\text{Εκπομπή}} \right]$$



$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \quad p_{ij} \equiv \langle i\mathbf{k}_i | p | j, \mathbf{k}_j \rangle$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2 (2\pi)^3} \sum_{ij} \int |p_{ij}|^2 d\mathbf{k} \left[ \overbrace{\delta(\hbar\omega - (E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})))}^{\text{Απορρόφηση}} \right]$$

$$\int g(\mathbf{r}) \cdot \delta\{f(\mathbf{r})\} = \int_{S=\text{const}} g(\mathbf{r}) \cdot |\nabla f(\mathbf{r})|^{-1} \cdot dS$$

$$d\mathbf{k} = df_{\omega} d\mathbf{k}_{\perp} \quad dE(\mathbf{k}) = dk_{\perp} |\nabla_{\mathbf{k}}[E(\mathbf{k})]| \quad \delta(0) = 1$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{ij} |p_{ij}|^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\hbar\omega - (E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}))=0} \frac{df_{\omega}}{|\nabla_{\mathbf{k}}[E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})]|}$$

$$\begin{aligned} Z_{ij}(\hbar\omega) &= Z_{ij}(E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\hbar\omega - (E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}))=0} \frac{df_{\omega}}{|\nabla_{\mathbf{k}}[E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})]|} \end{aligned}$$

Φωνόνια

$$Z(\omega)d\omega = Z(\mathbf{q})d\mathbf{q} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega}^{\omega+d\omega} d\mathbf{q}$$

$$\omega(\mathbf{q}) = \text{σταθερά} \quad d\mathbf{q} = df_{\omega} d\mathbf{q}_{\perp}$$

$$d\omega(\mathbf{q}) = |\text{grad}_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q})| d\mathbf{q}_{\perp}$$

$$Z(\omega) d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega=\text{σταθερό}} \frac{df_{\omega}}{|\text{grad}_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q})|}$$

**Συνδυασμένη** πυκνότητα καταστάσεων

Πυκνότητα καταστάσεων



# Διατανιακές μεταπτώσεις

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{ij} |p_{ij}|^2 Z_{ij}(\omega) \approx \frac{\pi e^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} |p_{ij}|^2 \sum_{ij} Z_{ij}(\omega)$$

$$\nabla_k [E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})] = 0 \quad \text{Κρίσιμα σημεία ή}$$

$$\nabla_k E_j(\mathbf{k}) = \nabla_k E_i(\mathbf{k}) \quad \text{Ανωμαλία van Hove}$$

Αν  $p_{ij} = 0$   $\epsilon_2(\omega) = 0$   
Απαγορευμένες μεταπτώσεις

- Θεωρούμε υλικό με άμεσο χάσμα.

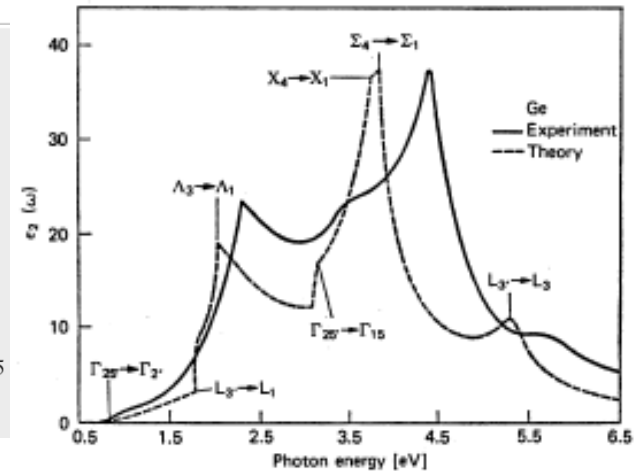
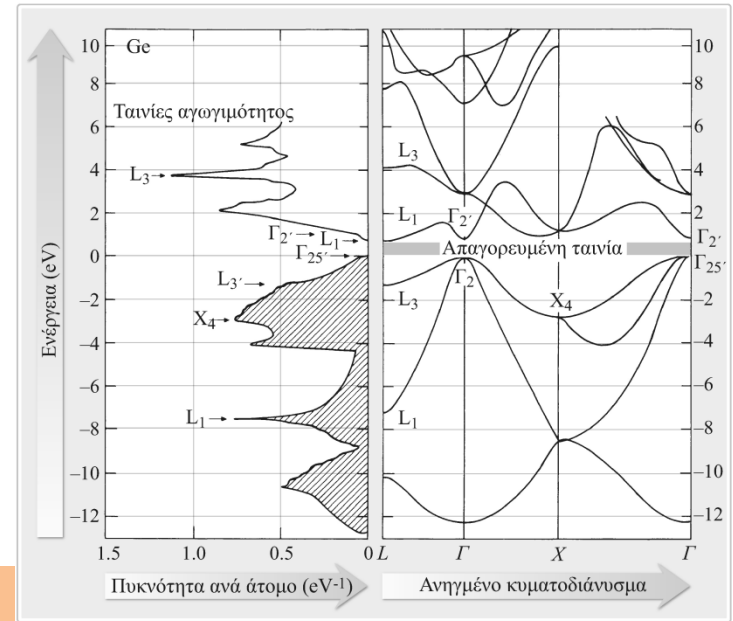
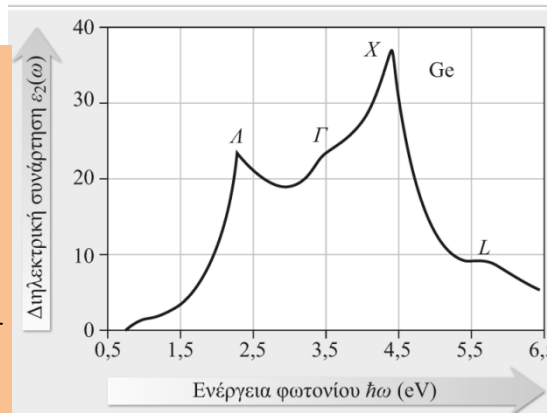
- Οπότε

$$E_c = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k^2 \quad E_v = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_v^*} k^2 \quad p_{ij}(\mathbf{k}) = p_{ij}$$

$$E_c - E_v = E_g + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \right) k^2$$

$$= E_g + \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 = \hbar\omega$$

$$\nabla(E_j - E_i) = \frac{\hbar^2}{\mu} k = \hbar \sqrt{\frac{2}{\mu}} \sqrt{(\hbar\omega - E_g)}$$



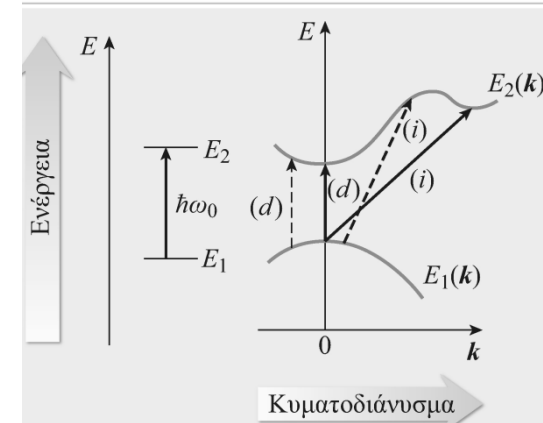
# Άμεσες Διαταινιακές μεταπτώσεις

$$Z(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\hbar\omega=(E_c-E_v)} \frac{df_\omega}{|\nabla_{\mathbf{k}}[E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})]|} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\mu}{\hbar^2} \int_0^{2\pi} \frac{(\hbar\omega - E_g)d\phi}{\sqrt{(\hbar\omega - E_g)}}$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \frac{\mu}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{e^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} \frac{|p_{ij}|^2}{4\pi} \frac{\mu}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{1/2} \propto A(\hbar\omega - E_g)^{1/2}$$

Επιτρεπτές μεταπτώσεις



- Αν  $p_{ij}(\mathbf{k}) = 0$  τότε το αναπτύσσουμε ως προς  $\mathbf{k}$

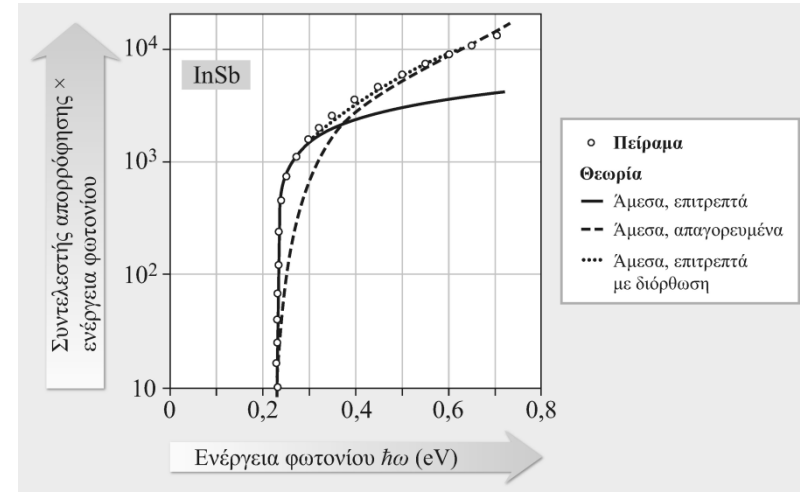
$$p_{ij}(\mathbf{k}) \cong p_{ij}(\mathbf{k}_0) + \frac{\partial p_{ij}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) + \dots$$

$$Z(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\mu}{\hbar^2} \int_{\hbar\omega=(E_c-E_v)} \frac{C \sqrt{\hbar\omega - E_g - d(\hbar\omega - E_g)}}{\sqrt{(\hbar\omega - E_g)}}$$

$$= \frac{C}{(2\pi)^3} \frac{\partial p_{ij}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\mu}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$$

$$\epsilon_2(\omega) \propto A'(\hbar\omega - E_g)^{3/2}$$

Απαγορευμένες μεταπτώσεις



Επειδή  $p_{ij}(\mathbf{k}) \neq 0$  η όλη θεώρηση είναι ποιοτική

# Έμμεσες Διαταϊνιακές μεταπτώσεις

- Το ελάχιστο της ταινίας αγωγιμότητας σε διαφορετικό  $k$  από το μέγιστο της ταινίας σθένους.
- Η υλοποίηση απαιτεί τη συμμετοχή και φωνονίων.
  - Παρέχουν την απαιτούμενη "ψευδοορμή"
- Διαδικασία δύο βημάτων.
  - Συμμετοχή τριών "ημι-σωματιδίων".
  - Η ενδιάμεση κατάσταση μπορεί να είναι πραγματική ή "δυνατή"
- Διατήρηση Ορμής: Σε κάθε βήμα!
- Διατήρηση ενέργειας: Αρχική και τελική.  $\Delta E \cdot \Delta t = \hbar$

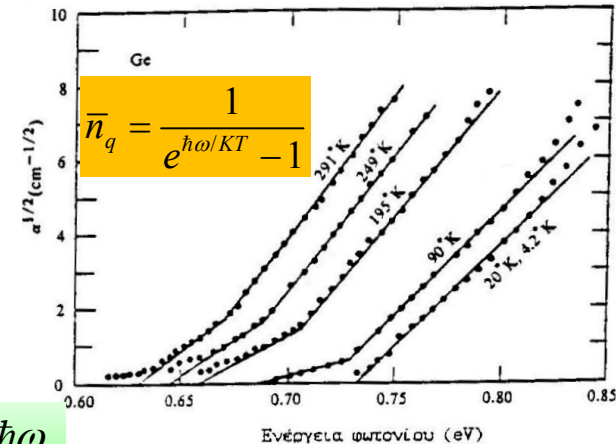
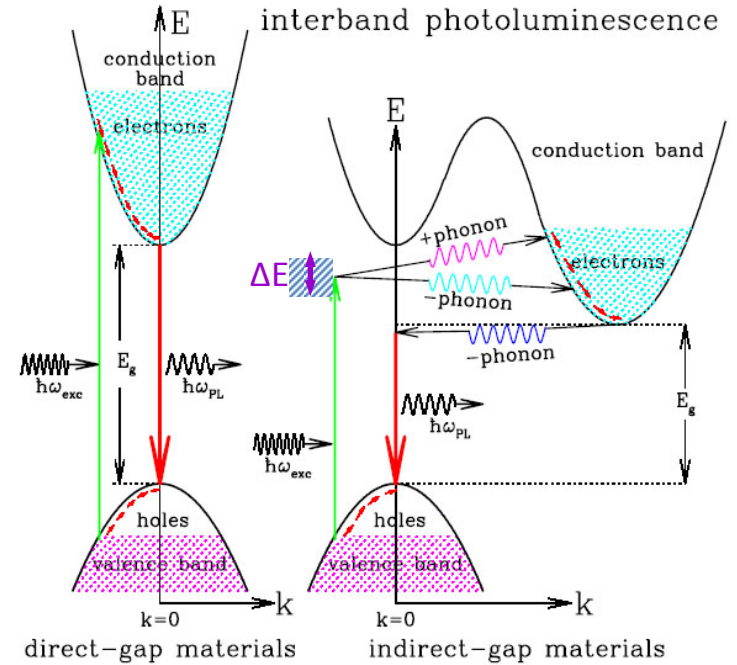
$$k_j = k_i + k_L \pm q \quad E(k_j) = E(k_i) + \hbar\omega \pm \hbar\omega_q$$

$$k_L \ll k_i, k_j \ll q \quad \hbar\omega_q \ll (E_j - E_i) \approx \hbar\omega$$

- Έχουν μικρή ένταση. ( μικρή πιθανότητα "σύμπραξης" τριών "ημι-σωματιδίων"
  - $\Rightarrow$  Εμφανίζονται όταν δεν υπάρχουν άμεσες μεταπτώσεις.

$$\varepsilon_2(\omega) = C^{abs} \bar{n}_q \cdot \omega^{-2} (\hbar\omega + \hbar\omega_q - E_g)^2 \quad \text{για} \quad E_g - \hbar\omega_q < \hbar\omega < E_g + \hbar\omega_q$$

$$\varepsilon_2(\omega) = C^{abs} \bar{n}_q \cdot \omega^{-2} (\hbar\omega + \hbar\omega_q - E_g)^2 + C^{em} (\bar{n}_q + 1) \cdot \omega^{-2} (\hbar\omega - \hbar\omega_q - E_g)^2 \quad \text{για} \quad \hbar\omega > E_g + \hbar\omega_q$$



# Διαταινιακές μεταπτώσεις + Ελεύθεροι φορείς

$$\varepsilon_2(\omega) = C^{\text{abs}} \bar{n}_q \cdot \omega^{-2} (\hbar\omega + \hbar\omega_q - E_g)^3 \quad \text{για} \quad E_g - \hbar\omega_q < \hbar\omega < E_g + \hbar\omega_q$$

$$\varepsilon_2(\omega) = C^{\text{abs}} \bar{n}_q \cdot \omega^{-2} (\hbar\omega + \hbar\omega_q - E_g)^3 + C^{\text{em}} (\bar{n}_q + 1) \cdot \omega^{-2} (\hbar\omega - \hbar\omega_q - E_g)^3 \quad \text{για} \quad \hbar\omega > E_g + \hbar\omega_q$$

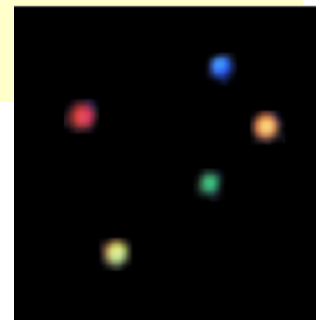
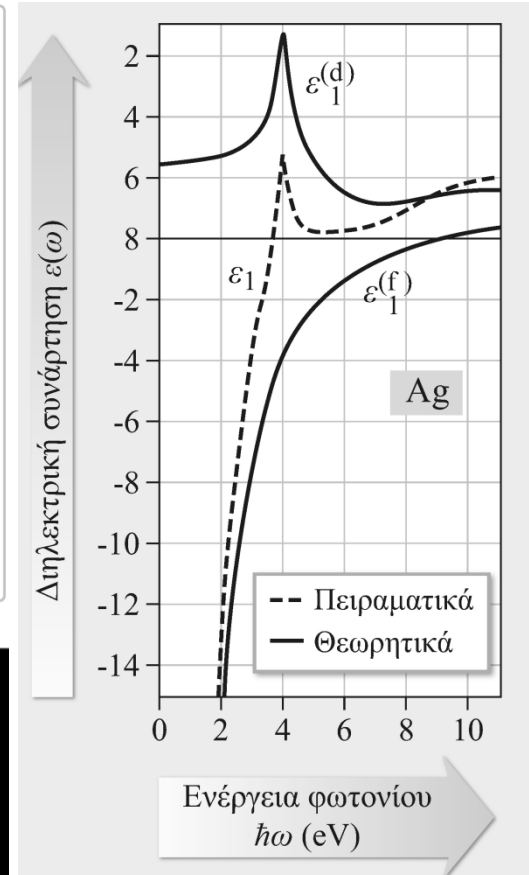
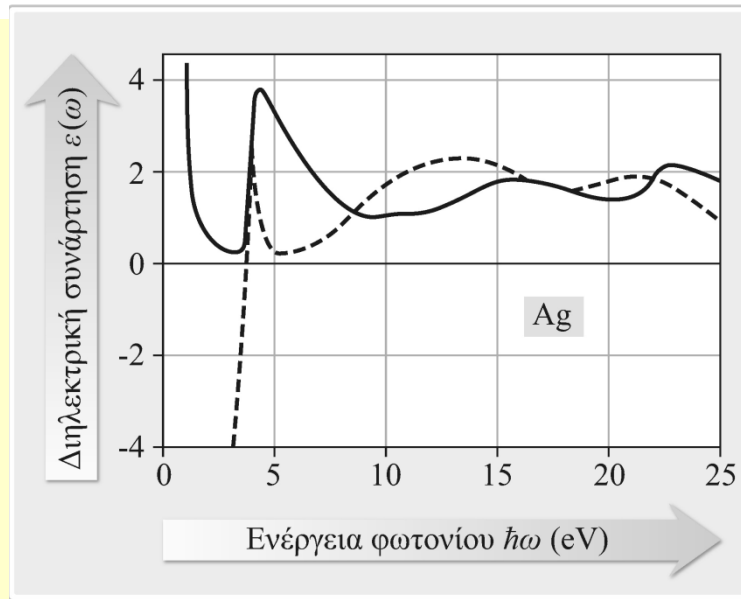
Έμμεσες  
Απαγορευμένες  
Μεταπτώσεις

- Σε αρκετά κρυσταλλικά υλικά οι διαταινιακές μεταπτώσεις βρίσκονται στην ίδια ενεργειακή περιοχή με αυτή των ελευθέρων φορέων.

– Ιδίως σε υλικά με d-στάθμες. (Ag, Cu, Au).

- Ενδιαφέρουσες οπτικές ιδιότητες.

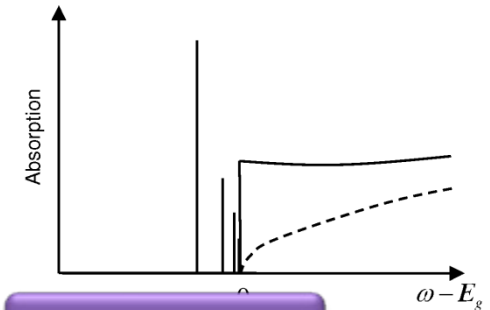
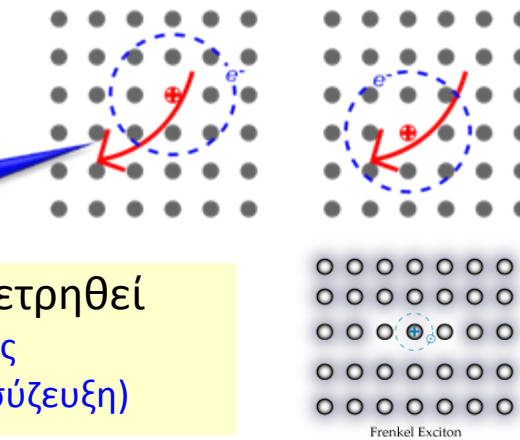
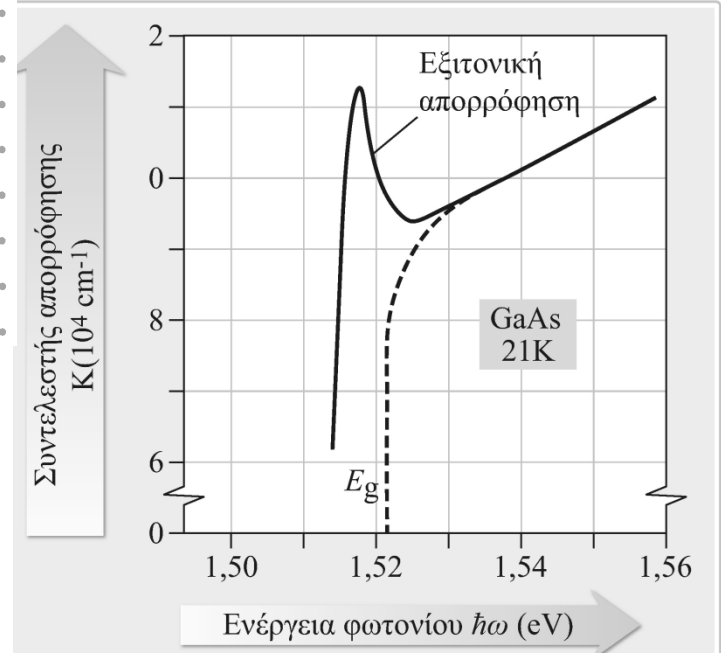
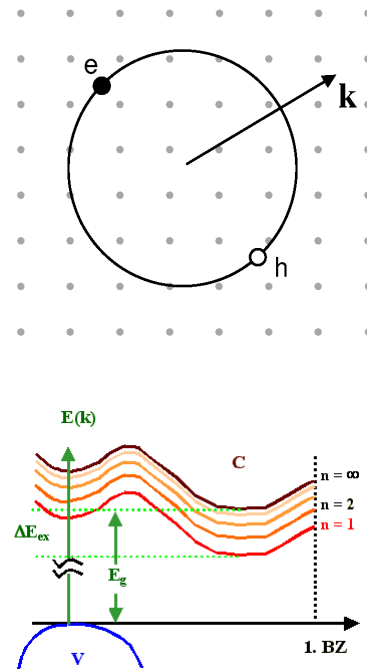
- Μηδενισμός της  $\varepsilon_1(\omega)$  στην οπτική περιοχή.
- Υψηλή απορρόφηση, Εκπομπή, Ανακλαστικότητα
- Νανοπηγές



# Εξιτόνια

- Λαμβάνεται υπόψη η αλληλεπίδραση Coulomb e-οπής.
  - Οδηγεί σε συσχετισμένη "κίνηση" των e-οπής.
  - Το εξιτόνιο έχει τη δυνατότητα "κίνησης" εντός του υλικού.
  - Εμφανίζονται αν  $\nabla E_c(k) = \nabla E_v(k)$
- Εμφάνιση οξέων δομών (κορυφών) εντός του ενεργειακού χάσματος.
  - Λίγο πριν από την ακμή απορρόφησης.
  - Η ένταση των εν λόγω κορυφών μειώνεται όσο πλησιάζουμε στην ακμή.
- Δεν συνεισφέρουν στην αγωγιμότητα.
- Είναι Bosons ( Συμπύκνωση)
 

Wannier  
(Ασθενικά προσδεδεμένα)
- Η ενέργεια σύνδεσης μπορεί να μετρηθεί
  - Με μετρήσεις οπτικής απορρόφησης
  - Με μετρήσεις φωταύγειας. (Επανασύζευξη)



Hopping

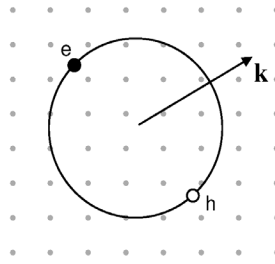
Frenkel  
(Ισχυρά προσδεδεμένα)

# Εξιτόνια

## Υδρογονικό πρότυπο

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h$$

$$E_{n,K} = E_g - \underbrace{\frac{\mu^* e^4}{32\pi^2 \epsilon^2 \epsilon_0^2 n^2}}_{\text{Ενέργεια Σύνδεσης}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 K^2}{2(m_c^* + m_v^*)}}_{\text{Κινητική Ενέργεια}}$$



$$E_{n,K} = E_g - \frac{E_b}{n^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_e^* + m_h^*)}$$

$$E_b = \frac{\mu^*}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty)^2} \cdot \frac{e^4}{2\hbar^2} = \frac{\mu^*}{m_0} \cdot \frac{1}{\epsilon_\infty^2} \cdot E_H \quad E_H = 13,6\text{eV}$$

$$\langle r_n \rangle = \left| \frac{m_0}{\mu^*} \right| \cdot \epsilon_\infty \alpha_0 n^2 \quad \alpha_0 = 0,529 \text{ \AA}$$

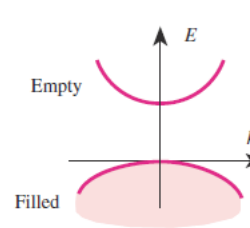
GaAs

$$\epsilon = 12,8 \quad m_e^* = 0,067m_0 \quad m_h^* = 0,2m_0 \quad \mu = 0,05m_0$$

$$\langle r_n \rangle = n^2 \frac{12,8}{0,05} 0,529 \text{ \AA} = n^2 130 \text{ \AA} \gg a = 5,6 \text{ \AA}$$

$$E_b = \frac{0,05}{12,8^2} 13,6\text{eV} = 4,2\text{meV} \Rightarrow \text{Σταθερά } T \leq 49\text{K}$$

(a) One-electron picture



(b) Two-particle picture

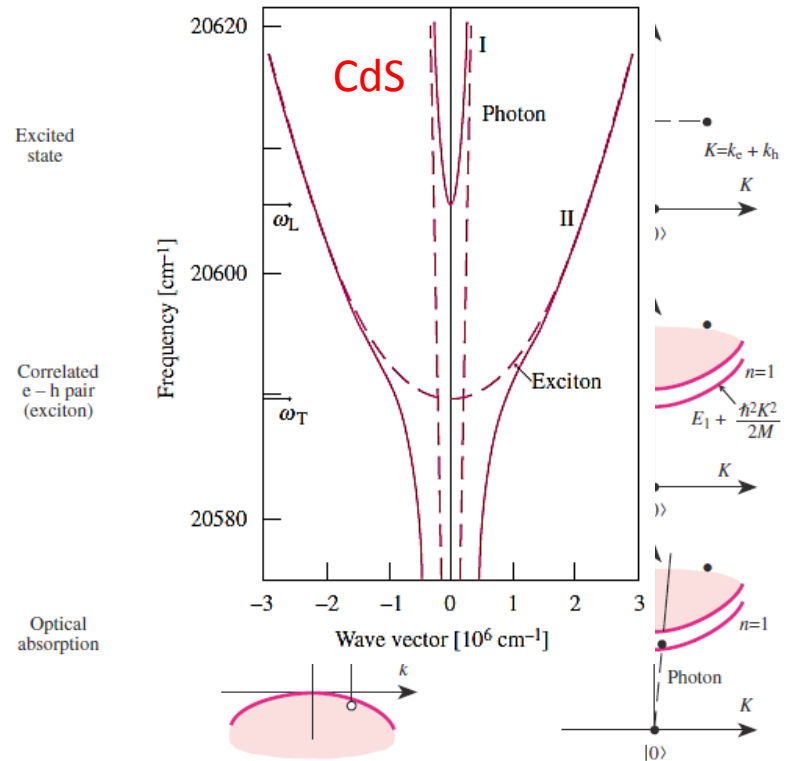
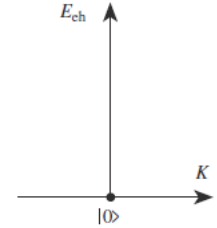


Fig. 6.20. Comparison between the energy levels of the ground state and excited states of a semiconductor in a one-electron band picture (a) and in a two-particle picture (b). Also, schematic diagrams showing processes in which a photon is absorbed while producing an electron-hole pair