

Przejścia międzypasmowe

Funkcja dielektryczna

Przejścia międzypasmowe związane są z polaryzacją chmury elektronowej wewnątrz rdzeni atomowych - są odpowiedzialne za część funkcji dielektrycznej ϵ_{∞}

Wróćmy do formalizmu funkcji dielektrycznej:

$$\epsilon_{klas}(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}$$

- klasycznie z tłumieniem
(N oscylatorów)

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 m} \sum_{j,k} \frac{f_{kl}}{\omega_{kl}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

- kwantowo, z tłumieniem
(sumujemy po wszystkich możliwych przejściach)

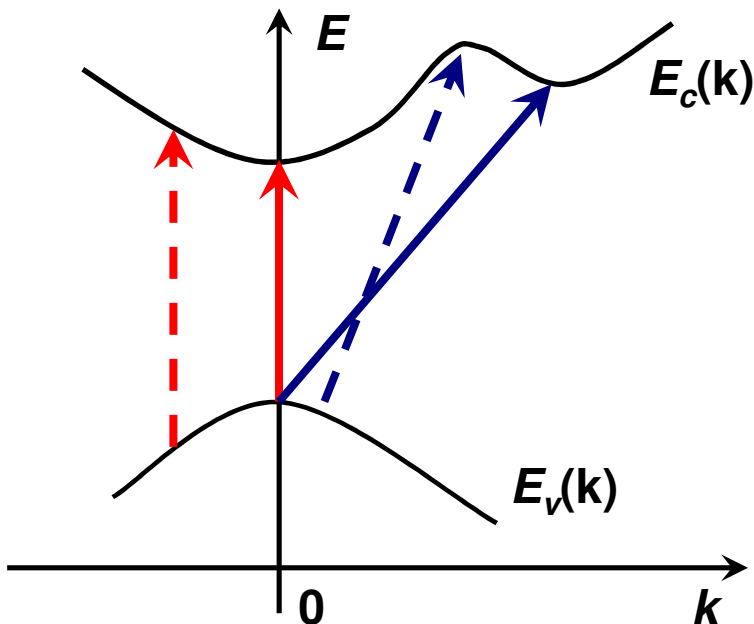
$$f_{kl} = \frac{2}{m} \frac{|p_{kl}|^2}{(E_k - E_l)}$$

Wystarczy wyznaczyć odpowiednie elementy macierzowe przejść...

Należy obliczyć elementy macierzowe przejścia pomiędzy stanami pasma walencyjnego i pasma przewodnictwa. Musimy wziąć pod uwagę funkcje Blocha dla elektronów w paśmie przewodnictwa w paśmie walencyjnym. Korzystamy z tego, $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ jest wolnozmienną funkcją! Zamieniamy całkowanie na sumę całek po strefie Brillouina...

$$\begin{aligned} \langle u_{\mu,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | p | u_{\nu,\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \rangle &= \langle u_{\mu,\mathbf{k}} | p | u_{\nu,\mathbf{k}'} \rangle \langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \rangle + \langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | p | e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \rangle \langle u_{\mu,\mathbf{k}} | u_{\nu,\mathbf{k}'} \rangle = \\ &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle u_{\mu,\mathbf{k}} | p | u_{\nu,\mathbf{k}'} \rangle \end{aligned}$$

(Drugi człon znika, gdyż, że funkcje $u_{\mu,\bar{\mathbf{k}}}$ oraz $u_{\nu,\bar{\mathbf{k}}}$ są ortogonalne. Zamieniamy całkowanie po przestrzeni, na sumę całek po komórkach elementarnych i korzystamy z tego, że funkcje $u_{\mu,\bar{\mathbf{k}}}, u_{\nu,\bar{\mathbf{k}}}$ są periodyczne)



Przejścia proste

$\mathbf{k}=\mathbf{k}'$ (zaniedbujemy pęd fotonu)

Przejścia skośne

$\mathbf{k}\neq\mathbf{k}'$ – np. z udziałem fononów
(fonony przenoszą pęd energii)

Przejścia proste

• **dozwolone** $\langle u_{\mu, \mathbf{k}} | p | u_{\nu, \mathbf{k}} \rangle \neq 0$

W pierwszym przybliżeniu przyjmujemy, że w element macierzowy nie zależy od \mathbf{k}

• **wzbronione** $\langle u_{\mu, 0} | p | u_{\nu, 0} \rangle = 0$

W przybliżeniu przyjmujemy,

$$\langle u_{\mu, \mathbf{k}} | p | u_{\nu, \mathbf{k}'} \rangle \sim |\mathbf{k}|$$

Rozważając przejścia optyczne pomiędzy stanami dwóch continuum, sumujemy przyczynki dla różnych wektorów falowych k

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0 m} \sum_{\mu\nu} \sum_k \frac{2|p_{\mu\nu}|^2}{m\hbar\omega_{\mu\nu k}} \frac{1}{\omega_{\mu\nu k}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma}$$

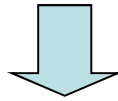
Za absorpcję odpowiedzialna jest część urojona funkcji dielektrycznej:

$$\varepsilon_2(\omega) = \text{Im}(\varepsilon(\omega))$$

Zbadajmy wyrażenie:

$$\operatorname{Im}\left(\frac{1}{\omega_{\mu\nu k}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma}\right) = \frac{\omega\Gamma}{(\omega_{\mu\nu k}^2 - \omega^2)^2 + (\omega\Gamma)^2} =$$

$$= \frac{\omega\Gamma}{(\omega_{\mu\nu k} - \omega)^2(\omega_{\mu\nu k} + \omega)^2 + (\omega\Gamma)^2} \approx \frac{\frac{\Gamma}{2}}{2\omega_{\mu\nu k} \left[(\omega_{\mu\nu k} - \omega)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2 \right]}$$



$$\operatorname{Im}\left(\frac{1}{\omega_{\mu\nu k}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma}\right) \xrightarrow{\Gamma \rightarrow 0} \frac{\pi}{2\omega_{\mu\nu k}} \delta(\omega_{\mu\nu k} - \omega)$$

$$\text{Zatem } \varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 m} \sum_{\mu\nu} \sum_k \frac{2|p_{\mu\nu}|^2}{m\hbar\omega_{\mu\nu k}} \frac{\pi}{2\omega_{\mu\nu k}} \delta(\omega_{\mu\nu k} - \omega)$$

Wynik ten można zapisać w postaci:

$$\text{Im}(\varepsilon) = \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{\mu\nu} \sum_k |M_{\mu\nu}|^2 \delta(\omega_{\mu\nu}(k) - \omega)$$

gdzie $M_{\mu\nu} = \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle$

Skorzystalismy z tego,
że $p = -i\hbar\nabla$

Jeśli można założyć, że $|M_{\mu\nu}|^2 = \text{const}$

i zastąpimy sumowanie po k całkowaniem po strefie Brillouina z uwzględnieniem gęstości stanów:

$$\text{Im}(\varepsilon) = \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{\mu\nu} |M_{\mu\nu}|^2 \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \delta(\omega_{\mu\nu}(\mathbf{k}) - \omega) d^3k$$

Jeśli znane są powierzchnie energetyczne struktury pasmowej $E(k)$ to całkowanie po k można zamienić na całkowanie po powierzchniach stałej energii (częstości)

$$d^3k = dS_\omega dk_\perp \quad \text{biorąc pod uwagę, że} \quad d\omega = (\nabla_k \omega_{\mu\nu}) dk_\perp$$

Dostajemy:
$$d^3k = \frac{dS_\omega d\omega}{\nabla_k \omega_{\mu\nu}(\vec{k})}$$

Stąd po podstawieniu:

$$\begin{aligned} \text{Im}(\varepsilon) &= \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{\mu\nu} |M_{\mu\nu}|^2 \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \delta(\omega_{\mu\nu}(\mathbf{k}) - \omega) \frac{dS_\omega d\omega}{\nabla_k \omega_{\mu\nu}(\vec{k})} = \\ &= \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{\mu\nu} |M_{\mu\nu}|^2 \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\substack{\text{powierzchnia} \\ \omega_{\mu\nu}=\omega}} \frac{dS}{\nabla_k \omega_{\mu\nu}(\vec{k})} \end{aligned}$$

$$\text{Im}(\varepsilon(\omega)) = \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{\mu\nu} |M_{\mu\nu}|^2 J_{\mu\nu}(\omega)$$

gdzie:
$$J_{\mu\nu}(\omega) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\substack{\text{powierzchnia} \\ \omega_{\mu\nu}=\omega}} \frac{dS}{\nabla_k \omega_{\mu\nu}(\vec{k})}$$

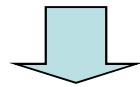
Łączna gęstość stanów
(**joint density of states**)

Osobliwości van Hove

Punkty osobliwe łącznej gęstości stanów $J_{\mu\nu}(\omega)$ noszą nazwę osobliwości van Hove - oczekujemy, że wtedy współczynnik absorpcji ma maksima

Osobliwości van Hove występują gdy:

$$\nabla_k \omega_{\mu\nu}(\vec{k}) = \nabla_k \omega_\mu(\vec{k}) - \nabla_k \omega_\nu(\vec{k}) = 0$$



$$\nabla_k \omega_\mu(\vec{k}) = \nabla_k \omega_\nu(\vec{k})$$

Tzn. nachylenia pasma przewodnictwa i pasma walencyjnego są identyczne!

Taka sytuacja może być realizowana w różny sposób, np.:

- oba gradienty = 0 (maksima, minima)
- oba gradienty $\neq 0$ ale równe sobie.

Trochę analizy matematycznej...

W okolicach punktu osobliwego \mathbf{k}_0 można $\omega_{\mu\nu}$ rozwinąć w szereg (człony liniowe =0).

Uwzględniając człony drugiego rzędu względem k , po sprowadzeniu do osi głównych:

$$\omega_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = \omega_{\mu\nu}(\mathbf{k}_0) + \alpha_1 (k_1 - k_{01})^2 + \alpha_2 (k_2 - k_{02})^2 + \alpha_3 (k_3 - k_{03})^2$$

Punkty osobliwe klasyfikuje się w zależności od tego ile współczynników α jest ujemnych a ile dodatnich:

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 > 0$	odpowiada minimum $\omega_{\mu\nu}$	- punkt M_0
$\alpha_1, \alpha_2 > 0; \alpha_3 < 0$	punkt siodłowy $\omega_{\mu\nu}$	- punkt M_1
$\alpha_1 > 0; \alpha_2, \alpha_3 < 0$	punkt siodłowy $\omega_{\mu\nu}$	- punkt M_2
$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 < 0$	odpowiada maksimum $\omega_{\mu\nu}$	- punkt M_3

Twierdzenie o punktach krytycznych

Funkcja N zmiennych, periodyczna w każdej z nich musi posiadać co najmniej C_n^N punktów krytycznych typu n w każdej N -wymiarowej komórce prymitywnej, przy czym:

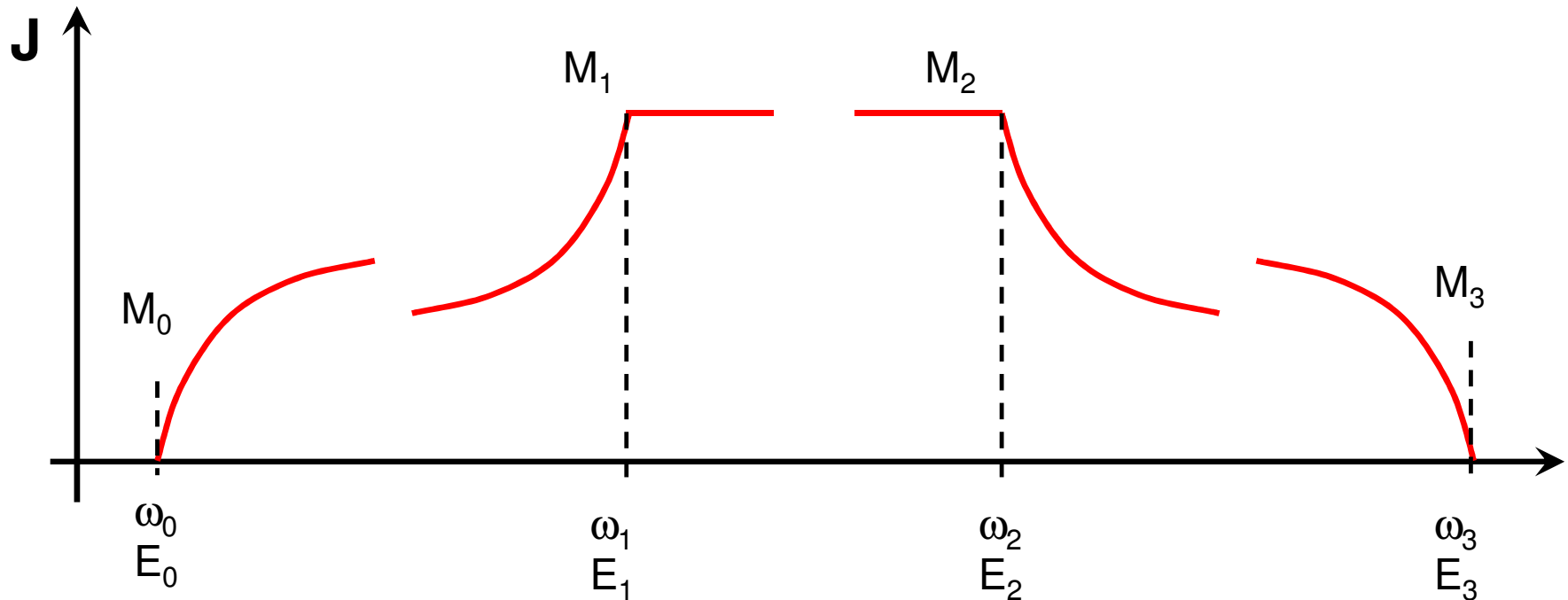
$$C_n^N = \frac{N!}{n!(N-n)!}, \text{ dla } n \leq N$$

Liczba punktów krytycznych (w każdej strefie Brillouina) w przestrzeni o wymiarze N

		N=3		N=2		N=1	
n = 0	(M ₀)	$C_0^3 = 1$	jedno minimum	$C_0^2 = 1$	jedno minimum	$C_0^1 = 1$	jedno minimum
n = 1	(M ₁)	$C_1^3 = 3$	trzy punkty siodłowe	$C_1^2 = 2$	dwa punkty siodłowe	$C_1^1 = 1$	jedno maksimum
n = 2	(M ₂)	$C_2^3 = 3$	trzy punkty siodłowe	$C_2^2 = 1$	jedno maksimum		
n = 3	(M ₃)	$C_3^3 = 1$	jedno maksimum				

Dla $N=3$ mamy w sumie 8 punktów krytycznych (część z nich może być zdegenerowana, stąd można obserwować mniejszą ich liczbę)

Łączna gęstość stanów w pobliżu punktów krytycznych (3D)



Można pokazać że najniższym energetycznym punktem osobliwym jest M_0
(podstawowa krawędź absorpcji)

Metody badań punktów osobliwych

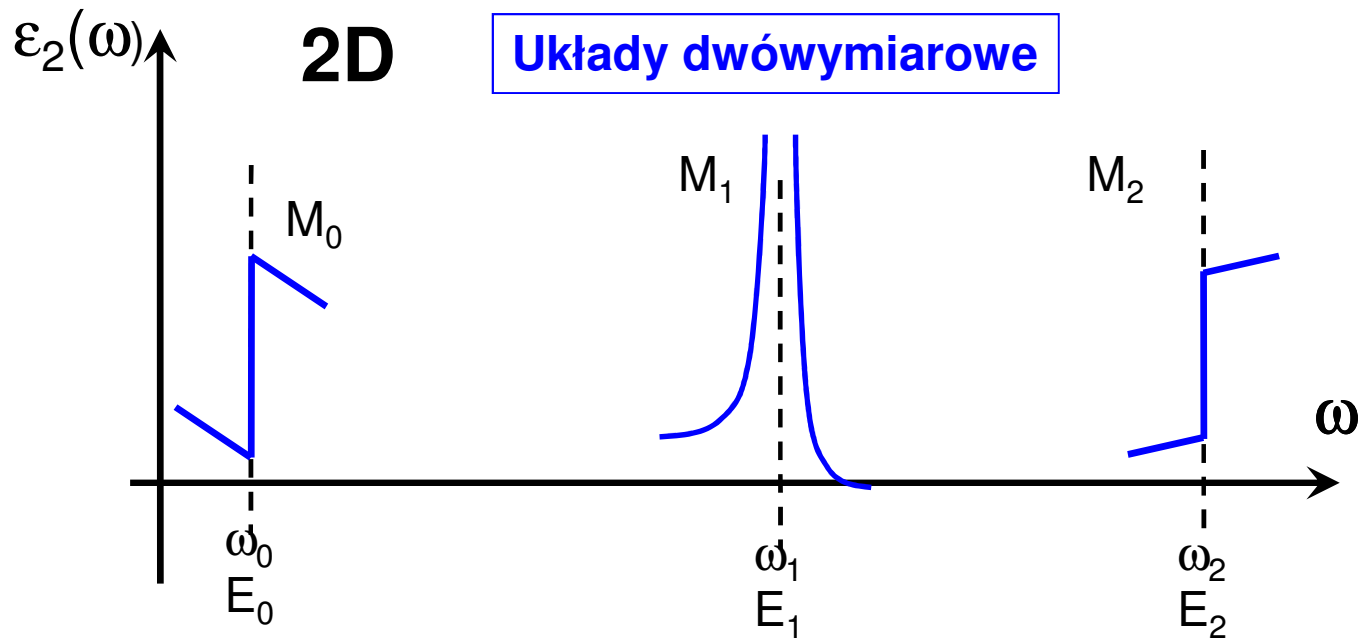
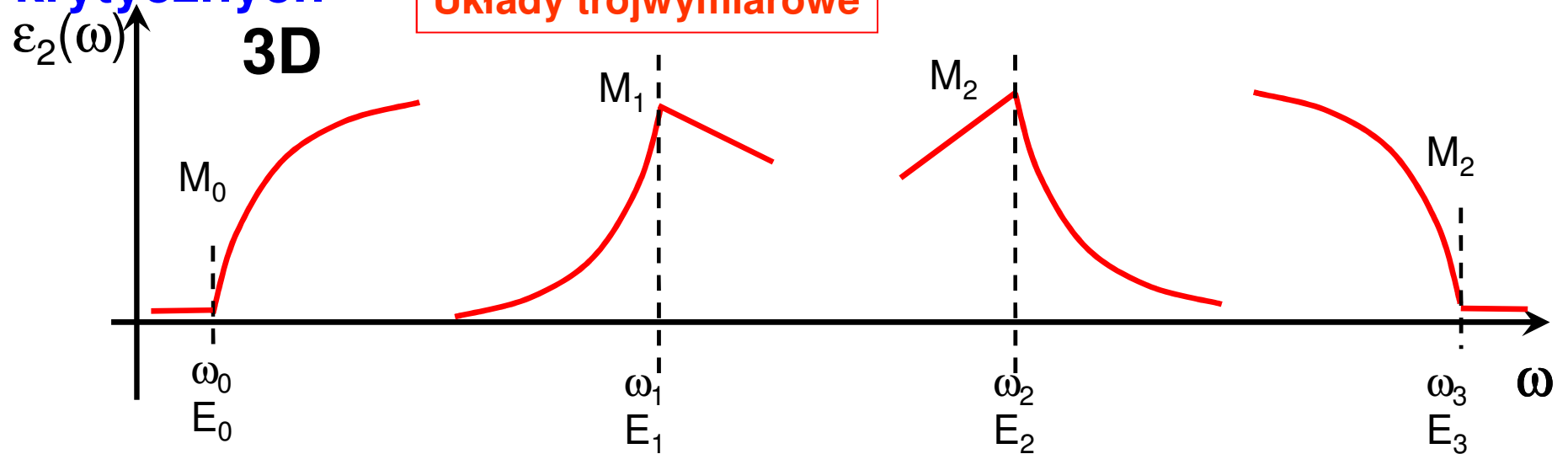
M_0 – np. absorpcja, fotoprzewodnictwo, odbicie, luminescencja,...

M_1, M_2, M_3 – metody odbiciowe

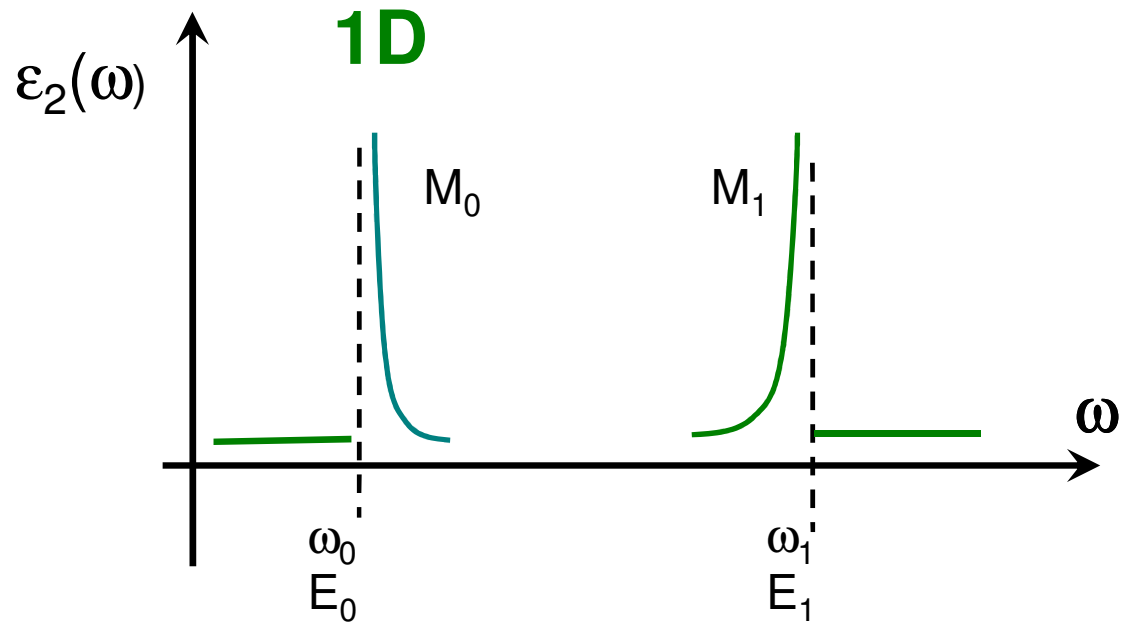
Kształt zależność gęstości stanów od częstości

Wymiarowość		$J_{\mu\nu}$	
		$E < E_0$	$E > E_0$
3D	M_0	0	$C(E-E_0)^{1/2}$
	M_1	$D_0 - C(E-E_0)^{1/2}$	D_0
	M_2	D_0	$D_0 - C(E-E_0)^{1/2}$
	M_3	$C(E-E_0)^{1/2}$	0
2D	M_0	0	D_0
	M_1	$-\ln(E_0-E)$	$-\ln(E-E_0)$
	M_2	D_0	0
1D	M_0	0	$C_1(E-E_0)^{-1/2}$
	M_1	$C_1(E-E_0)^{-1/2}$	0

Urojona część funkcji dielektrycznej w pobliżu punktów krytycznych



Urojona część funkcji dielektrycznej w pobliżu punktów krytycznych – układy jednowymiarowe



Łączna gęstość stanów dla struktury jednowymiarowej rozbiega się do nieskończoności choć całka z niej pozostaje skończona.

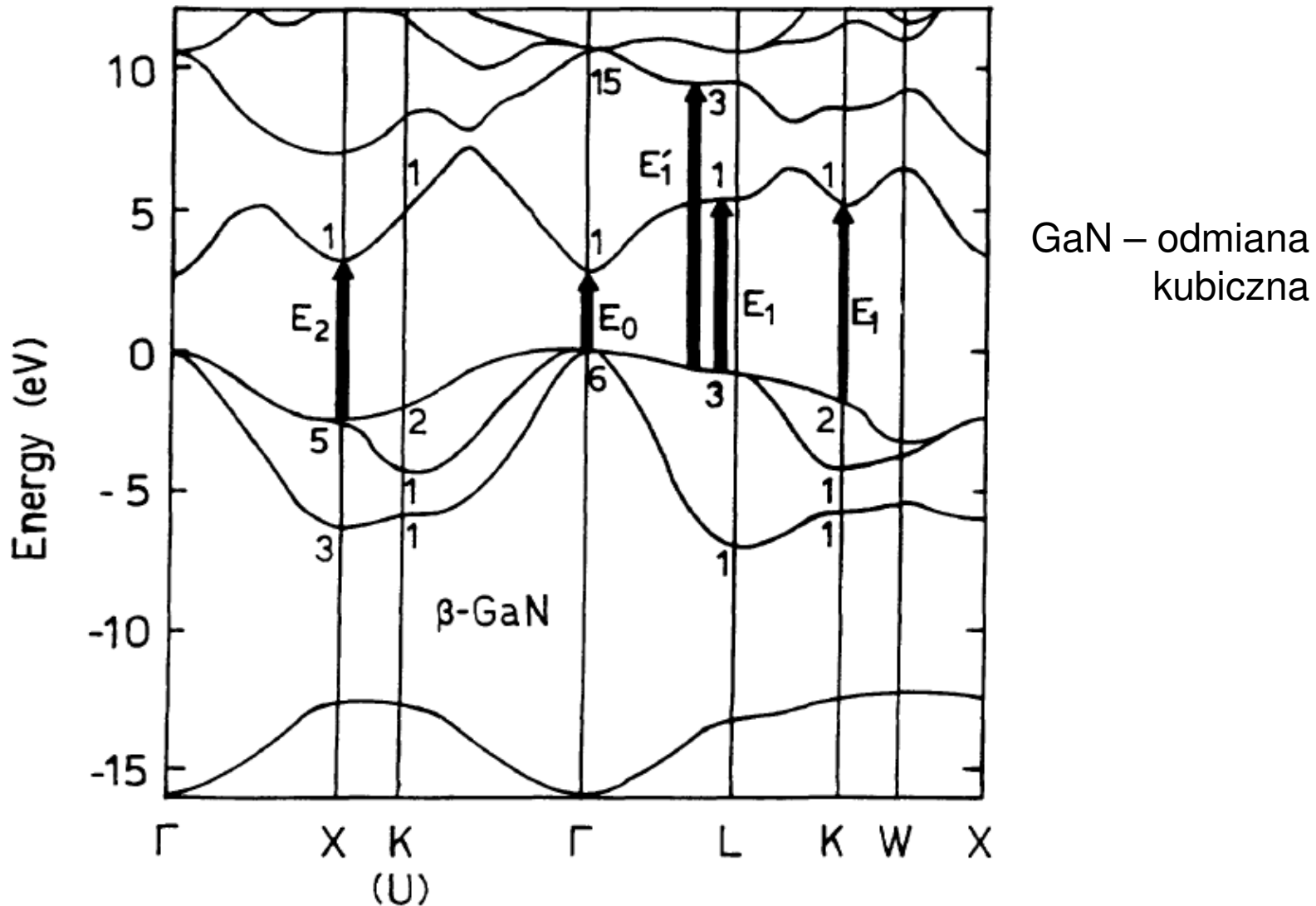
(Dobry opis dla jednowymiarowych półprzewodników organicznych.)

Półprzewodniki o wiązaniach tetraedrycznych

- diament, Ge, Si (grupa IV)
- GaN, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb (grupa III-V)
- CdTe, CdS, ZnS (II-VI)

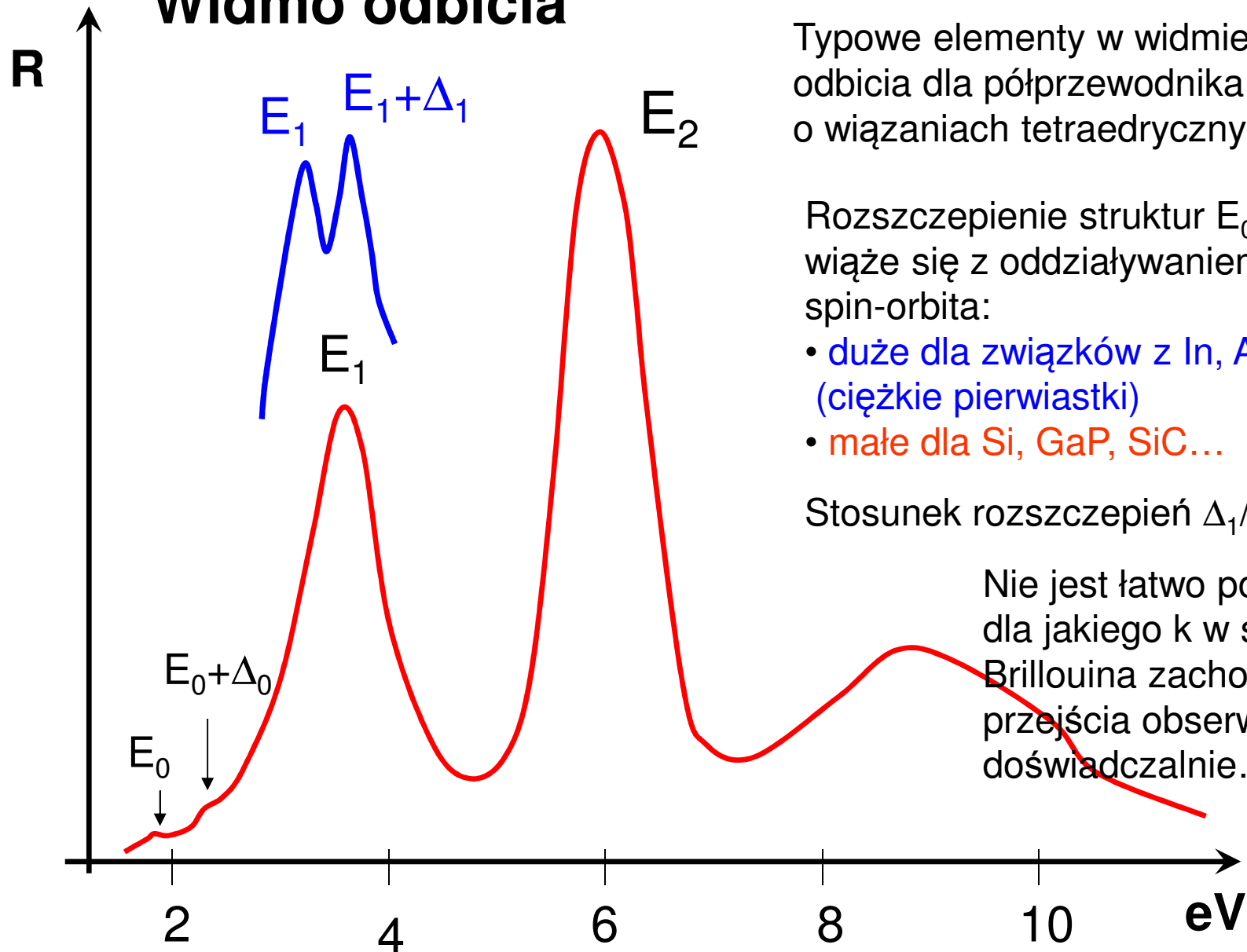
Istnieje wiele podobieństw w zachowaniu urojonej funkcji dielektrycznej dla półprzewodników o wiązaniach tetraedrycznych!

Typowa struktura pasmowa dla związku III-V



Logothetidis et al. PRB 50, 1870 (1994)

Widmo odbicia



Typowe elementy w widmie odbicia dla półprzewodnika o wiązaniach tetraedrycznych

Rozszczepienie struktur E_0 oraz E_1 wiąże się z oddziaływaniem spin-orbita:

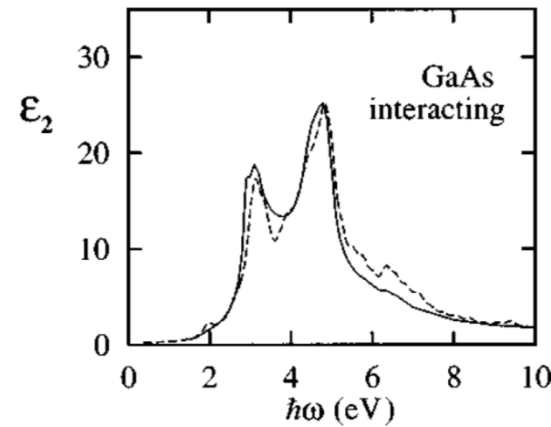
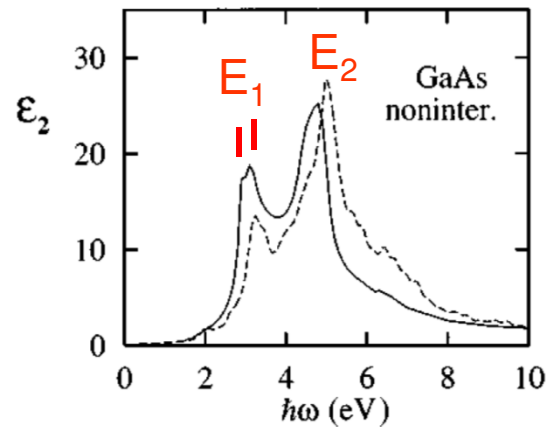
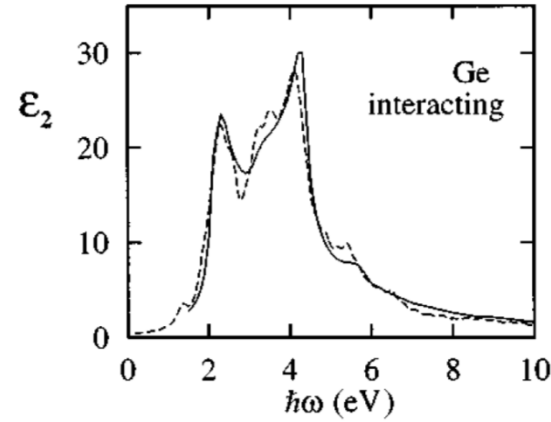
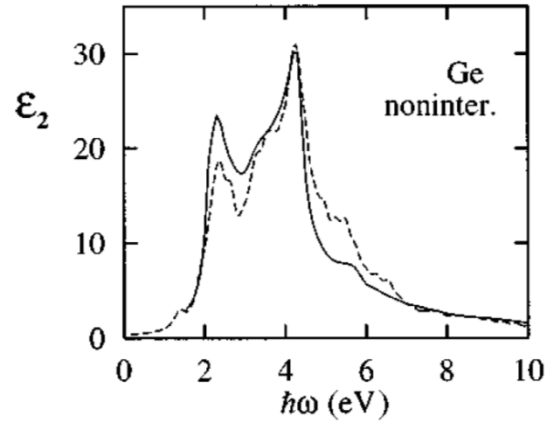
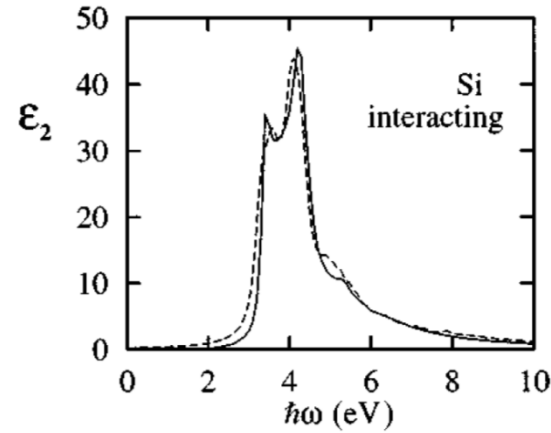
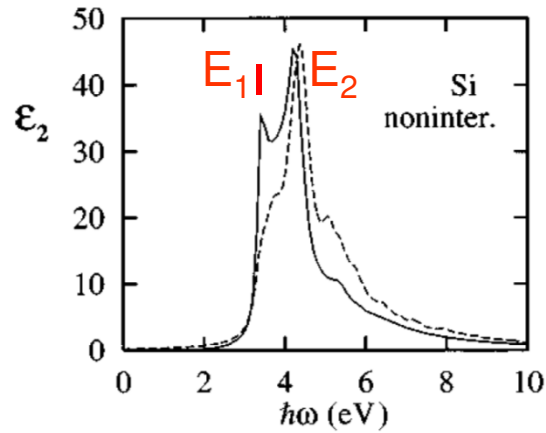
- duże dla związków z In, As, Sb (ciężkie pierwiastki)
- małe dla Si, GaP, SiC...

Stosunek rozszczepień $\Delta_1/\Delta_0 \cong 2/3$

Nie jest łatwo powiedzieć dla jakiego k w strefie Brillouina zachodzą przejścia obserwowane doświadczalnie...

Badając widma odbicia można uzyskać informacje o funkcji $\epsilon_2(\omega)$

Badania w UV próżniowym – wygodnie przy użyciu synchrotronu



Bardzo ważne jest porównanie wyników doświadczalnych z teorią!

(linia ciągła - doświadczenie)

E_0 – bardzo słabo widoczne!

L.X. Benedict et al.
PRB 57 R9385 (1998)

Odbicie światła i relacje Kramersa-Kroniga...

Przy odbiciu od granicy ośrodków następuje także zmiana fazy fali odbitej.

Dla fali padającej w kierunku prostopadłym do granicy ośrodków, amplitudowy współczynnik odbicia wynosi:

$$r = \frac{E^{(R)}}{E^{(I)}} = \frac{1 - \tilde{n}}{1 + \tilde{n}} = \frac{1 - (n + i\kappa)}{1 + (n + i\kappa)} = \rho e^{i\Phi}$$

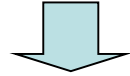
$E^{(I)}$ – pole elektryczne fali padającej, $E^{(R)}$ – pole elektryczne fali odbitej

W pomiarze wyznaczamy zależność współczynnika odbicia R od częstości (energii) fotonów:

$$R = (r \cdot r^*) = \frac{(1 - n)^2 + \kappa^2}{(1 + n)^2 + \kappa^2}$$

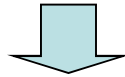
(Szczęśliwie) wielkości ρ , Φ są powiązane ze sobą **relacjami Kramersa-Kroniga**

**Zasada przyczynowości
(skutek następuje po przyczynie).**



Związek pomiędzy rzeczywistą i urojoną funkcji liniowej odpowiedzi ośrodka na działanie zaburzenia - relacje **Kramersa-Kroniga**

W przypadku fali elektromagnetycznej, liniową reakcję ośrodka opisuje funkcja dielektryczna $\epsilon(\omega)$



Części rzeczywista i urojona funkcji dielektrycznej $\epsilon(\omega)$ spełniają relacje:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_2(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$\epsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_1(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$\epsilon_2(\omega) = \text{Im}(\epsilon) \equiv \epsilon_i$$

$$\epsilon_1(\omega) = \text{Re}(\epsilon) \equiv \epsilon_r$$

W przypadku współczynnika odbicia dla

$$r = \rho e^{i\Phi}, \rho(\omega) \text{ i } \Phi(\omega)$$

mamy relacje

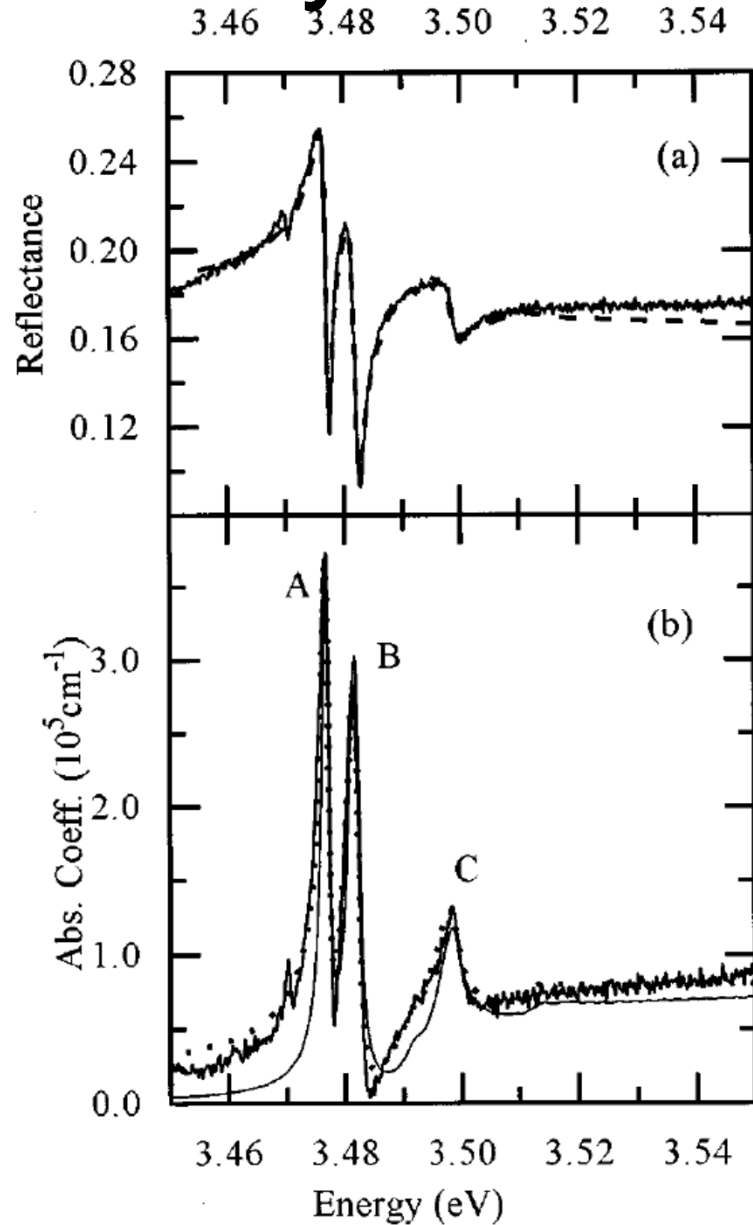
$$\Phi(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln \rho(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

Mierząc zależność $R(\omega)$ a więc $\rho(\omega)$ możemy wyliczyć z relacji KK $\Phi(\omega)$, a następnie \tilde{n} uzyskując informacje o współczynniku załamania i absorpcji.

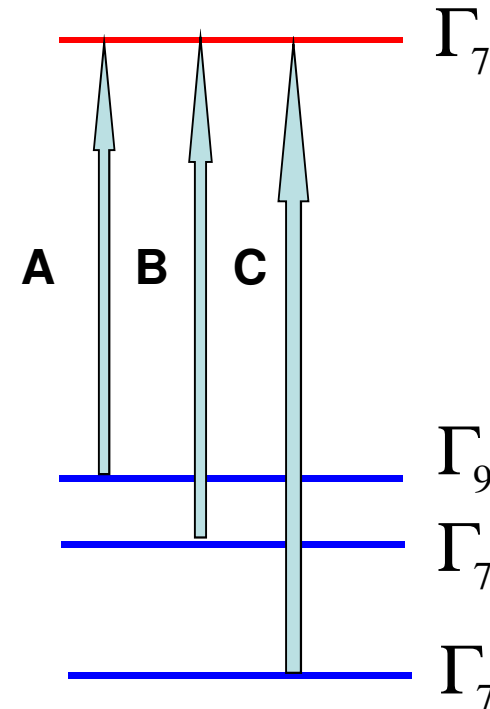
Konieczna jest znajomość $R(\omega)$ w szerokim zakresie energetycznym!

Bardziej wyrafinowana metoda pomiaru odbicia - elipsometria...

Przykład - odbicie w GaN



W widmie odbiciowym pojawiły się struktury odpowiadające trzem rodzajom ekscytonów swobodnych w GaN



Podstawowa krawędź absorpcji, punkt M_0

Przejścia proste dozwolone

Energia fotonu w okolicy punktu M_0 :

$$\hbar\omega_{\mu\nu} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r^*} \quad \Rightarrow \quad \omega_{\mu\nu} = \frac{E_g}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_r^*}$$

Obliczamy

m_r^* - masa zredukowana

$$\nabla_k \omega_{\mu\nu} = \frac{\hbar k}{m_r^*} \quad k = \sqrt{\frac{2m_r^* \omega'}{\hbar}}, \text{ gdzie } \omega' = \omega_{\mu\nu} - \frac{E_g}{\hbar}$$

Stąd

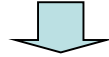
$$J_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\omega=\omega_{\mu\nu}} \frac{ds}{|\nabla_k \omega_{\mu\nu}(k)|} = \frac{1}{4\pi^3} \frac{4\pi k^2 m_r^*}{\hbar k} \Big|_{\omega_{\mu\nu}=\omega} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m_r^*}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_r^* \omega'}{\hbar}} \Big|_{\omega_{\mu\nu}=\omega}$$

$$J_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Pamiętamy, że :

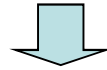
$$\text{Im}(\varepsilon(\omega)) = \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} \sum_{\mu\nu} |M_{\mu\nu}|^2 J_{\mu\nu}(\omega)$$

Jeśli przyjmiemy, że $|M_{\mu\nu}| = \text{const}$



Dla przejść pomiędzy pasmami μ, ν część urojona funkcji dielektrycznej:

$$\varepsilon_2(\omega) = \text{Im}(\varepsilon(\omega)) = \frac{\pi e^2 \hbar}{\varepsilon_0 m^2 \omega^2} |M_{\mu\nu}|^2 \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$



$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\varepsilon_0 \hbar m^2 \omega^2} |M_{\mu\nu}|^2 (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Przy założeniu, że współczynnik załamania n (w pierwszym przybliżeniu) nie zależy od częstości, współczynnik absorpcji:

$$\alpha(\omega) \approx \frac{\omega}{cn} \varepsilon_2(\omega)$$

Pamiętamy, że :

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(\omega) &= 2n\kappa \Rightarrow 2\kappa = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{n} \\ \alpha(\omega) &= \frac{2\kappa\omega}{c} = \frac{\varepsilon_2\omega}{nc} \end{aligned}$$

Po podstawieniu mamy:

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\epsilon_0 \hbar m^2 n c \omega} |M_{\mu\nu}|^2 (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Wykorzystując pojęcie siły oscylatora:

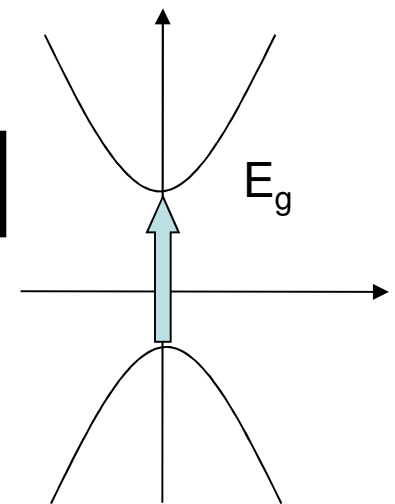
$$f_{\mu\nu} = \frac{2 \hbar |M_{\mu\nu}|^2}{m \omega_{\mu\nu}}$$

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}} f_{\mu\nu}}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 m n c} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Wstawiając współczynniki liczbowe

$$\alpha(\omega) = \frac{2.7 \times 10^5}{n} \left(\frac{2m_r^*}{m} \right)^{\frac{3}{2}} f_{\mu\nu} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}} [cm^{-1}]$$

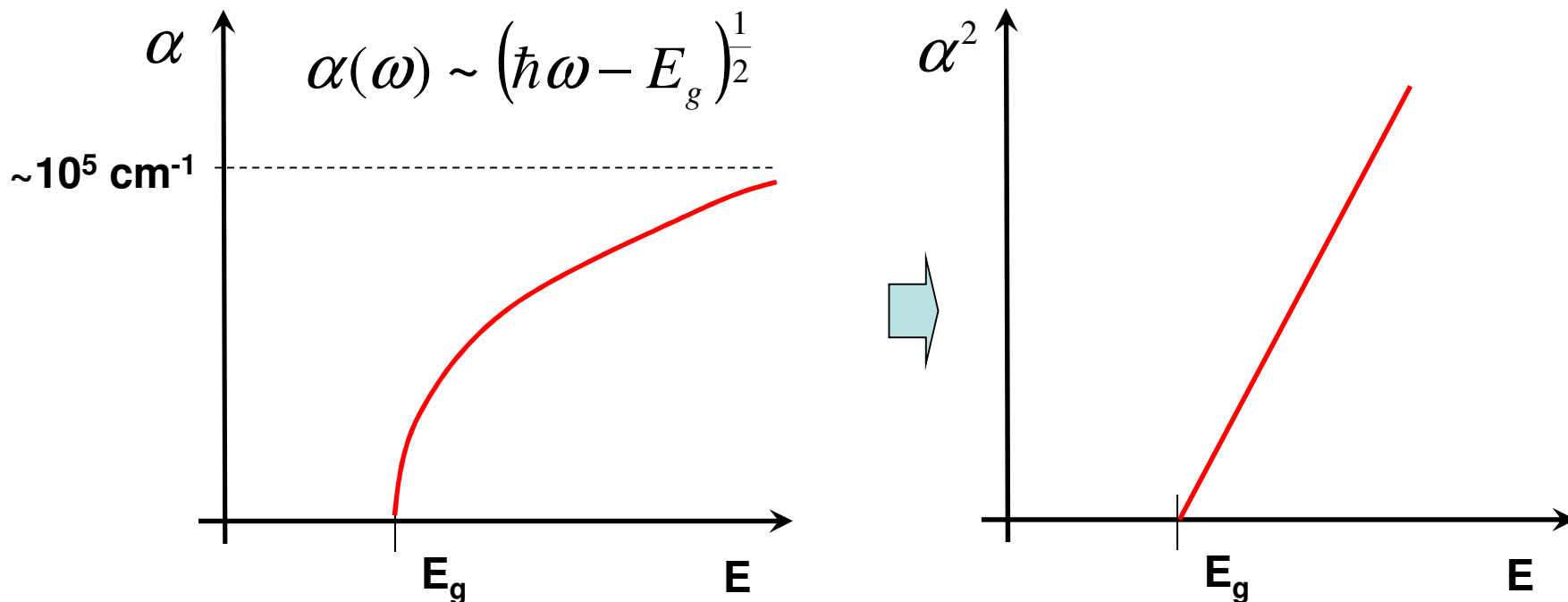
gdzie $(\hbar\omega - E_g)$ w eV



Przejścia proste dozwolone w obszarze podstawowej krawędzi absorpcji (M_0)



Rysując zależność kwadratu współczynnika absorpcji od energii powinniśmy dostać prostą:



Krawędź pierwiastkowa bardzo rzadko występuje, zwykle jest zaburzana przez efekty ekscytonowe...

Do eksperymentów konieczne są bardzo cienkie próbki najlepsze warunki dla badań $\alpha d \approx 1$ \Rightarrow próbki o grubości $\sim 1 \mu\text{m}$!

W krysztalach domieszkowanych przeszkadza też efekt Burstina – wypełnianie pasm nośnikami...

Wpływ swobodnych nośników efekt Burstina-Mossa

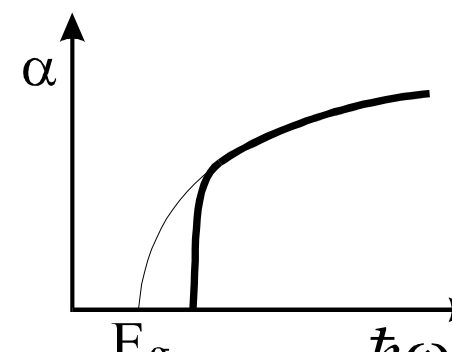
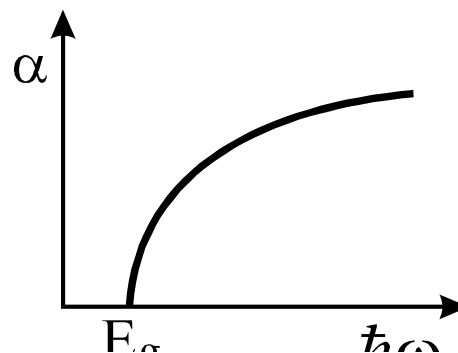
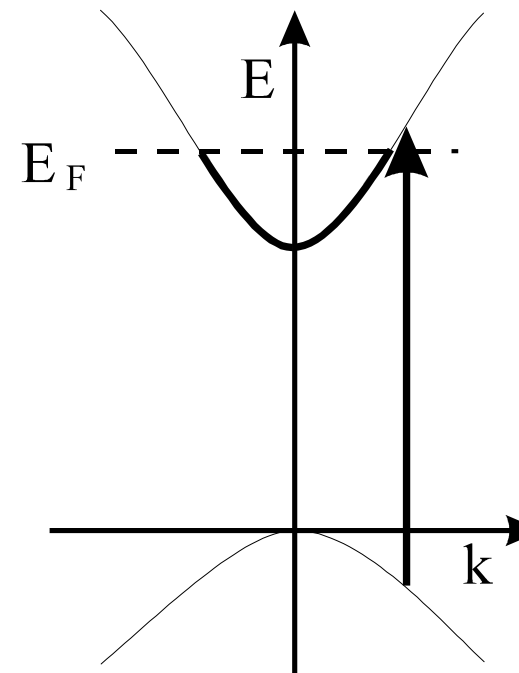
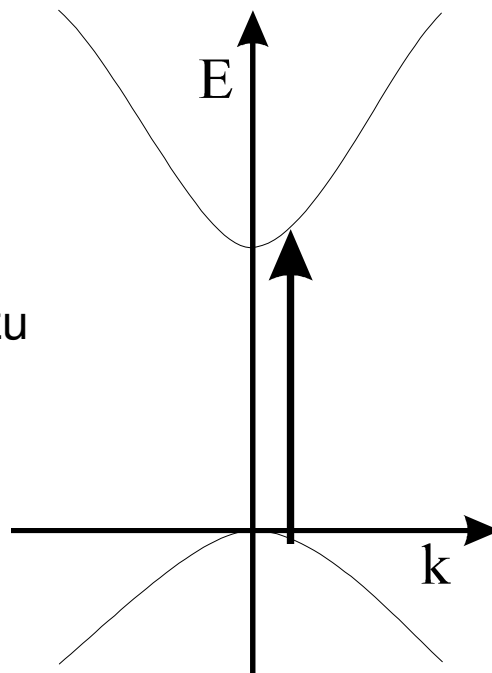
Przejścia optyczne mogą zachodzić pomiędzy stanami obsadzonymi i pustymi. Dla półprzewodników domieszkowanych musimy uwzględnić efekty wynikające z obsadzenia stanów w pobliżu dna pasma



Przesunięcie krawędzi absorpcji:

$$E_{\min} = E_g + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_h^*}$$

„blue shift” – przesunięcie w kierunku wyższych energii, zależne od koncentracji nośników...



Przejścia proste wzbronione

$$M_{\mu\nu} = \langle u_{\mu\mathbf{k}} | \nabla | u_{\nu\mathbf{k}} \rangle_{k=0} = 0$$

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 (2m_r^*)^{\frac{3}{2}} f_{\mu\nu}}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 m n c} (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

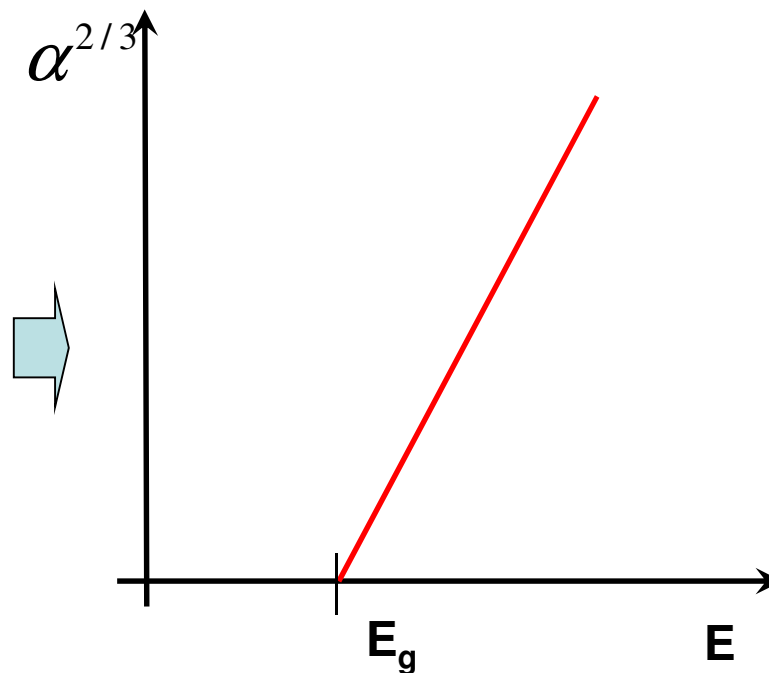
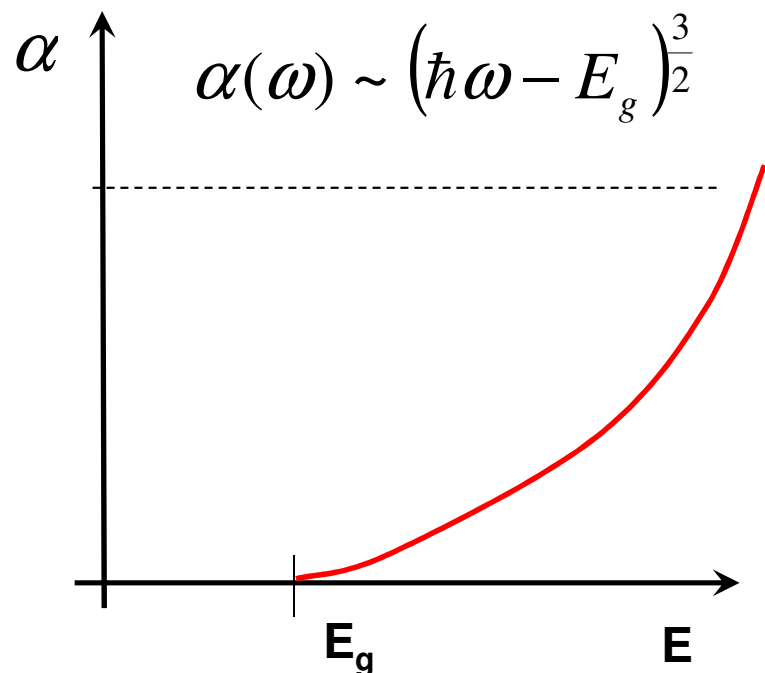
Jeśli dla $k \neq 0$ $M_{\mu\nu} \neq 0$ i $M_{\mu\nu} \sim k$

$$f_{\mu\nu} = \frac{2 \hbar |M_{\mu\nu}|^2}{m \omega_{\mu\nu}} \sim k^2$$



$$\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$$

Przejścia proste wzbronione



Zauważmy:

dla przejść prostych dozwolonych

dla przejść prostych wzbronionych

$$\left. \frac{d\alpha}{dE} \right|_{E_e}$$

$\rightarrow \infty$

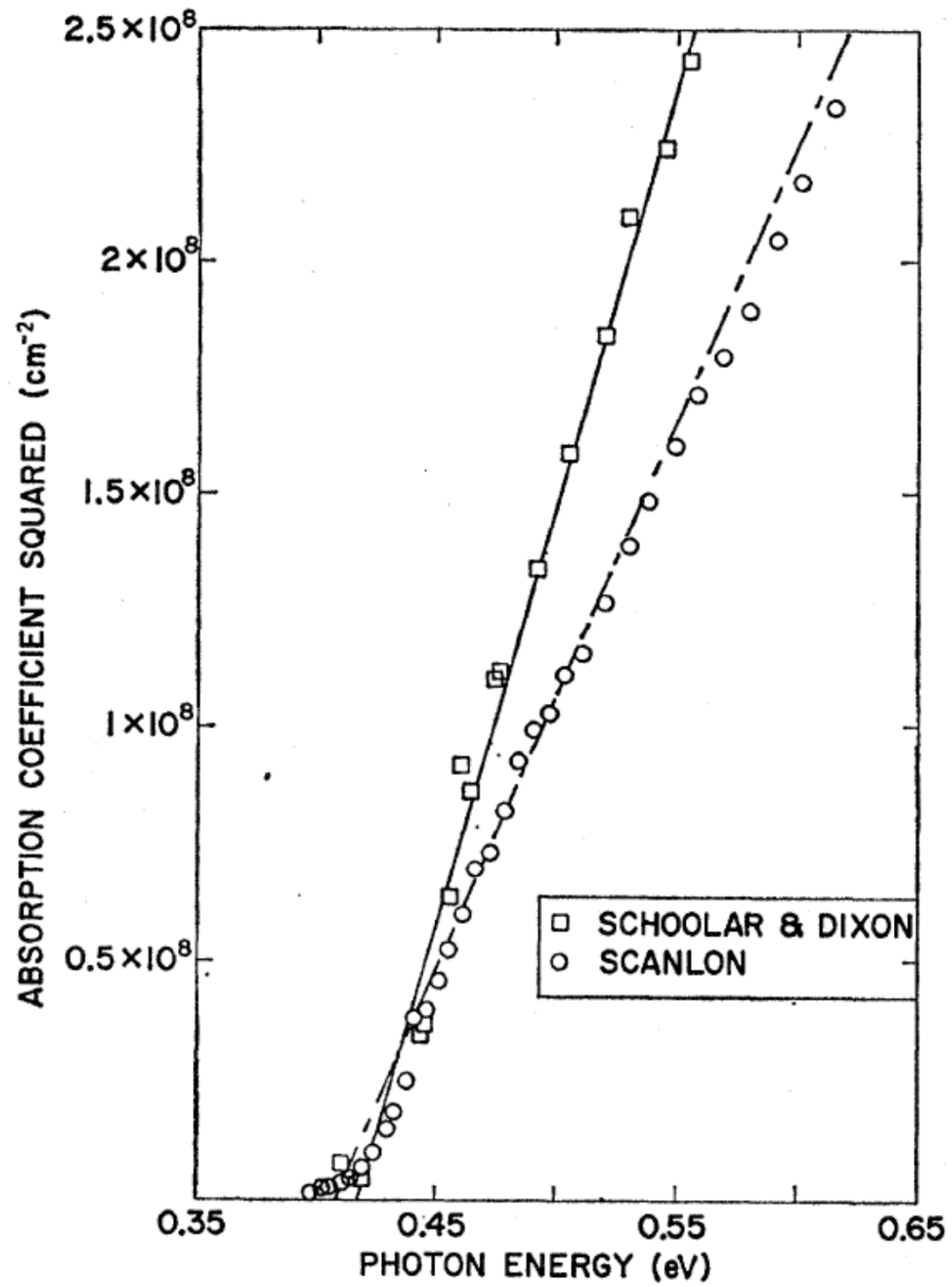
$$\left. \frac{d\alpha}{dE} \right|_{E_e}$$

$\rightarrow 0$

Czyli badając absorpcję możemy stwierdzić czy mamy do czynienia z przejściami dozwolonymi czy też wzbronionymi...

Krawędź pierwiastkowa

PbS

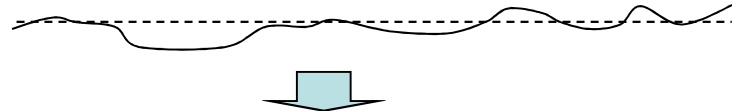


Schoolar&Dixon Phys. Rev 137, A667 (1964)

Realny kształt krawędzi absorpcji dla przejść prostych w kryształach dużej przerwie energetycznej

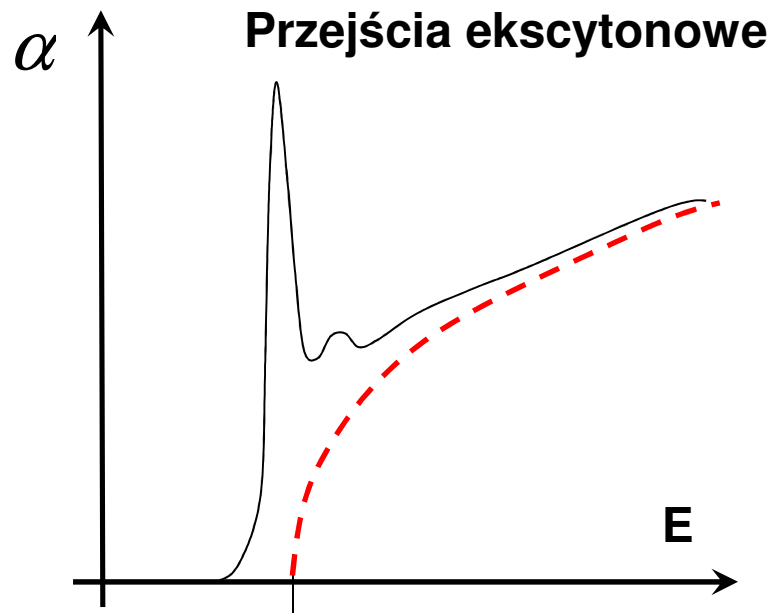
- Istnienie stanów związanych elektron-dziura (efekty ekscytonowe) dla energii niższych niż E_g (wybiega poza przybliżenie jednoelektronowe)
- Istnienie pól elektrycznych związanych ze stanami lokalnymi i defektami w kryształach (perforacja dna pasma przewodnictwa)

p. p. 

p. w. 

W niskich temperaturach obserwuje się tzw. krawędź Elliota.

W wyższych temperaturach obserwuje się tzw. krawędź Urbacha (o kształcie wykładniczym).



Przypomnienie (wykład 2):

$$\alpha = \frac{2\kappa\omega}{c} = \frac{4\pi\kappa}{\lambda_0}$$

λ_0 - długość fali
w próżni

Związek pomiędzy zespolonym współczynnikiem załamania
i stałą dielektryczną:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{n} = n + i\kappa &\equiv \sqrt{\tilde{\epsilon}_r} \\ \tilde{\epsilon}_r &= \epsilon_1 + i\epsilon_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} \epsilon_1 &= n^2 - \kappa^2 \\ \epsilon_2 &= 2n\kappa \end{aligned}$$

Związek pomiędzy
częścią rzeczywistą
i częścią urojoną
funkcji dielektrycznej

Dla słabo absorbującego medium κ jest małe i wtedy:

$$\varepsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \cong n^2$$

$$\varepsilon_2 = 2n\kappa$$

$$n = \sqrt{\varepsilon_1}$$

$$\kappa = \frac{\varepsilon_2}{2n}$$



**Czyli współczynnik załamania
związany jest z częścią rzeczywistą
zespolonej funkcji dielektrycznej**

**Współczynnik ekstynkcji
określony jest (głównie) przez część
urojoną zespolonej funkcji
dielektrycznej**

W ogólności zachodzą związki:

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} \right)^{1/2}$$

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} \right)^{1/2}$$