Fizyka Materii Skondensowanej
Właściwości optyczne

Inżynieria nanostruktur

Wydział Fizyki UW

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

KAPITAŁ LUDZKI NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

EUROPEJSKI FUNDUSZ SPOŁECZNY

Projekt: POKL 04.01.01-00-100/10-00 "Chemia, fizyka i biologia na potrzeby społeczeństwa XXI wieku: nowe makrokierunki studiów I, II i III stopnia"

Właściwości optyczne

Opis właściwości optycznych to opis propagacji fali elektromagnetycznej w krysztale z uwzględnieniem różnych oddziaływań. Należy uwzględnić:

- Swobodne nośniki
- Fonony
- Przejścia międzypasmowe
- Wpływ domieszek na właściwości optyczne

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla_{\vec{r}}f+\frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}}$$

Równanie Boltzmana zależne od czasu:

Jeśli pominiemy rozpraszanie, to pochodna zupełna $f(\vec{r},\vec{k},t)$ wzdłuż trajektorii ruchu opisana równaniem ruchu

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{rr}=0$$

a jej zmiany są wynikiem zderzeń

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{rr}=\left(\frac{df}{dt}\right)_{zd}$$

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{rr}=\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla_{\vec{r}}f+\frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}=-\frac{f_1}{\tau}$$

Właściwości optyczne

Równanie Boltzmana zależne od czasu:

Jeśli pominiemy rozpraszanie, to pochodna zupełna $f(\vec{r},\vec{k},t)$ wzdłuż trajektorii ruchu opisana równaniem ruchu

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{rr}=0$$

a jej zmiany są wynikiem zderzeń

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{rr}=\left(\frac{df}{dt}\right)_{zd}$$

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{rr}=\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla_{\vec{r}}f+\frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}=-\frac{f_1}{\tau}$$

Jeśli zaburzenie ma charakter okresowy (np. fala elektromagnetyczne o częstości ω)

$$f_1=f_1^{(0)}e^{-i\omega t}\quad\Rightarrow\quad\frac{\partial f_1}{\partial t}=-i\omega f_1$$

$$\vec{v}\cdot\nabla_{\vec{r}}f+\frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}f+\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)f_1=0$$

Należy więc dokonać zmiany w poprzednich wyprowadzeniach dla stacjonarnego równania Boltzmana

$$\tau\rightarrow\frac{\tau}{1-i\omega\tau}$$

Właściwości optyczne

Równanie Boltzmana zależne od czasu:

$$\vec{v}\cdot\nabla_{\vec{r}}f+\frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}f+\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)f_1=0$$

Należy więc dokonać zmiany w poprzednich wyprowadzeniach dla stacjonarnego równania Boltzmana

$$\tau\rightarrow\frac{\tau}{1-i\omega\tau}$$

W półprzewodnikach $\tau\sim10^{-9}\div10^{-11}$s zatem człon urojony (przesunięty w fazie) należy uwzględniać dla $\omega\sim10^{9}\div10^{11}$s^{-1} (mikrofale). Przewodnictwo zależne od częstości będzie zespolone:

$$\sigma=N_e\frac{e^2}{m^*}\langle\tilde{\tau}(E)\rangle\quad\Rightarrow\quad\sigma^*=N_e\frac{e^2}{m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}}{1-i\omega\tilde{\tau}}\right\rangle=\sigma_1+i\sigma_2$$

$$\sigma^*=\sigma_1+i\sigma_2=N_e\frac{e^2}{m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}}{1+\omega^2\tilde{\tau}^2}\right\rangle+i\omega N_e\frac{e^2}{m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}^2}{1+\omega^2\tilde{\tau}^2}\right\rangle$$

$$\vec{j}=\sigma^*\cdot\vec{\mathcal{E}}(t)=(\sigma_1+i\sigma_2)\cdot\vec{\mathcal{E}}e^{-i\omega t}=\sigma_1\vec{\mathcal{E}}e^{-i\omega t}+\sigma_2\vec{\mathcal{E}}e^{-i\left(\omega t-\frac{\pi}{2}\right)}$$

prąd przewodnictwa

prąd przesunięcia

Właściwości optyczne

Równania Maxwella:

$$\begin{cases} \mathrm{rot}\vec{\mathcal{E}} = -\dfrac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \mathrm{rot}\,\vec{H} = \dfrac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \\ \mathrm{div}\,\vec{B} = 0 \\ \mathrm{div}\,\vec{D} = \rho \end{cases} \qquad \sigma^* = N_e \frac{e^2}{m^*}\left\langle \frac{\tilde{\tau}}{1 - i\omega\tilde{\tau}} \right\rangle$$

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{\mathcal{E}}, \qquad \vec{B} = \mu\vec{H}, \qquad \vec{j} = \sigma\vec{\mathcal{E}}$$

Niemagnetyczny izolator $\mu = \mu_0$, $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r$, liczymy $\mathrm{rot}(\mathrm{rot}\vec{\mathcal{E}}) = \cdots$, szukamy rozwiązania w postaci fali $\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$itp.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0}$$

W ogólności $\varepsilon(\omega, \vec{k})$ - zespolony tensor.

Rozważając przypadek fali podłużnej i poprzecznej dostajemy

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\varepsilon_0} = \{\ \omega\tau \gg 1\ \} = \varepsilon_r\left(1 - \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r m^*}\frac{1}{\omega^2}\right) = \varepsilon_r\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)$$

Właściwości optyczne

Plazmony:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r\left(1 - \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r m^*}\frac{1}{\omega^2}\right) = \varepsilon_r\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)$$

Plazmony, to kolektywne wzbudzenia elementarne związane z propagacją fali podłużnej w plazmie. Z dokładniejszych rachunków wynika, że

$$\omega_{pl}(\vec{k}) = \omega_p(0) + ak^2$$

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

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

Odbicie najmniejsze dla

$$\omega^2 = \frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_r - 1}\omega_p^2$$

Można wyznaczyć m^*!

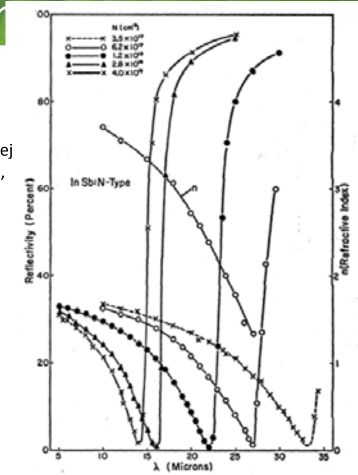


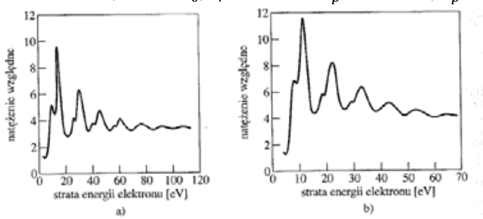
FIG. 8. Reflectivity vs wavelength for five n-type indium antimonide samples. The refractive index curve labeled n is for the sample with $N = 6.2\times10^{17}$ cm^{-3}.

W. G. Spitzer, H.Y. Fan, Phys. Rev. **106**, 882 (1957)

Właściwości optyczne

Plazmony:

W metalach $N_e \approx 3\times10^{22}$ cm^{-3}, $m^* \approx m_0$, $\varepsilon_r \approx 10 \;\Rightarrow\; \omega_p \approx 10^{16}$ s^{-1}, $\lambda_p \approx 200$nm

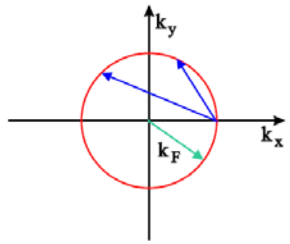


Rys. 8. Widmo strat energii elektronów o energii początkowej 2020 eV, odbitych od cienkiej warstwy: a) glinu i b) magnezu. Dwanaście maksimów zarejestrowanych dla Al składa się z kombinacji procesów, w których elektron traci 10,3 lub 15,3 eV energii; strata 10,3 eV związana jest z plazmonami powierzchniowymi, strata 15,3 eV z plazmonami objętościowymi. Dziesięć maksimów zarejestrowanych dla Mg składa się z kombinacji procesów, w których elektron traci 7,1 eV energii na rzecz plazmonów powierzchniowych i 10,6 eV na rzecz plazmonów objętościowych (wg C. J. Powella, J. B. Swana). Plazmony powierzchniowe są rozpatrywane w zadaniu 1

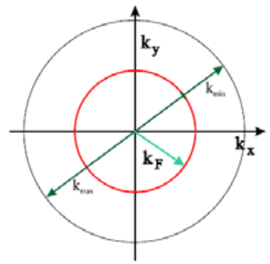
Ch. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*

Właściwości optyczne

Plazmony:



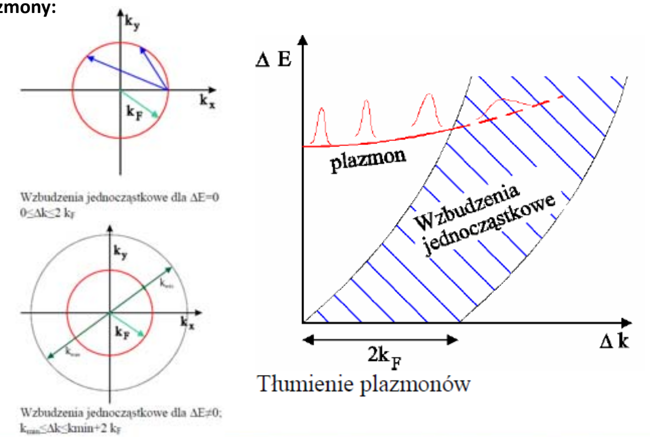
Wzbudzenia jednocząstkowe dla $\Delta E=0$
$0\leq\Delta k\leq 2\ k_F$



Wzbudzenia jednocząstkowe dla $\Delta E\neq0$;
$k_{min}\leq\Delta k\leq k_{min}+2\ k_F$

Właściwości optyczne

Plazmony:



Właściwości optyczne

Plazmony:

Fale poprzeczne:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i\left(\frac{\tilde{n}\omega}{c}r-\omega t\right)} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i\omega\left(\frac{n}{c}r-t\right)} e^{-\omega\frac{\kappa}{c}r}$$

Współczynnik absorpcji $\alpha = 2\omega\frac{\kappa}{c}$. Łatwo jest uporządkować wyrazy:

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_r - N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}^2}{1-\omega^2\tilde{\tau}^2}\right\rangle$$

$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}}{1-\omega^2\tilde{\tau}^2}\right\rangle$$

W przypadku metalicznym (silna degeneracja) $\tilde{\tau} = \tau_F = \tau(\xi) = \tau$

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_r - N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 m^*}\left\langle\frac{\tau_F^2}{1-\omega^2\tau_F^2}\right\rangle = \varepsilon_r\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\gamma^2+\omega^2}\right)$$

$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega m^*}\left\langle\frac{\tau_F^2}{1-\omega^2\tau_F^2}\right\rangle = \varepsilon_r \frac{\omega_p^2}{\omega}\frac{\gamma}{\gamma^2+\omega^2}$$

Relacja dyspersyjna:

$$k = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\,\frac{\omega}{c} = \tilde{n}(\omega)\frac{\omega}{c}$$

Właściwości optyczne

Plazmony:

Fale poprzeczne:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i\left(\frac{\tilde{n}\omega}{c}r-\omega t\right)} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i\omega\left(\frac{n}{c}r-t\right)} e^{-\omega\frac{\kappa}{c}r}$$

Współczynnik absorpcji $\alpha = 2\omega\frac{\kappa}{c}$. Łatwo jest uporządkować wyrazy:

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_r - N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}^2}{1-\omega^2\tilde{\tau}^2}\right\rangle$$

$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega m^*}\left\langle\frac{\tilde{\tau}}{1-\omega^2\tilde{\tau}^2}\right\rangle$$

W przypadku metalicznym (silna degeneracja) $\tilde{\tau} = \tau_F = \tau(\xi) = \tau$

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_r - N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 m^*}\left\langle\frac{\tau_F^2}{1-\omega^2\tau_F^2}\right\rangle = \varepsilon_r\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\gamma^2+\omega^2}\right)$$

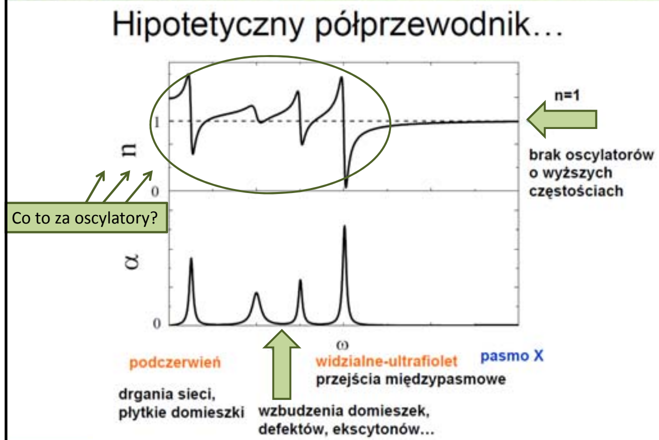
$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = N_e \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega m^*}\left\langle\frac{\tau_F^2}{1-\omega^2\tau_F^2}\right\rangle = \varepsilon_r \frac{\omega_p^2}{\omega}\frac{\gamma}{\gamma^2+\omega^2}$$

Dla metali $\omega_p \approx 10^{16}$ s^{-1}, $\lambda_p \approx 200$nm, natomiast $\gamma \approx 10^{12} - 10^{13}$ s^{-1}, $\gamma \ll \omega < \omega_p$ dla IR-Vis

Relacja dyspersyjna:

$$k = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\,\frac{\omega}{c} = \tilde{n}(\omega)\frac{\omega}{c}$$

Właściwości optyczne



Andrzej Wysmołek Własnosci optyczne półprzewodników
http://www.fuw.edu.pl/~wysmolek/optyczne/

Właściwości optyczne

Zakładamy, że w ośrodku (również półprzewodniku) zachodzą różnego rodzaju wzbudzenia, które można opisać przy użyciu modelu oscylatora harmonicznego. Model ten zakłada istnienie momentów dipolowych, bez wchodzenia w ich naturę. Okazuje się, że taki opis dobrze działa zarówno dla atomów, domieszek, defektów, jak też drgań sieci krystalicznej oraz wzbudzeń swobodnych nośników. Rozsunięciu ładunku jądra i elektronu towarzyszy pojawienie się **momentu dipolowego** $\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$, $\vec{r}_+$ - położenie ładunku dodatniego, $\vec{r}_-$ - ujemnego.

Wstawiamy do równania ruchu ⇒ model Lorentza z FMS IN (III rok) i dostajemy:

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \chi + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = 1 + \chi + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

Siła oscylatora

$$\sum_j f_j = 1$$

Dla wielu oscylatorów $\omega \to 0$ wkład do polaryzacji od różnych przejść

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \sum_j \frac{1}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} = 1 + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \sum_j \frac{f_j}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}$$

W praktyce wkład poszczególnych oscylatorów różni się, wprowadzamy **siłę oscylatora**.

Właściwości optyczne

Zakładamy, że w ośrodku (również półprzewodniku) zachodzą różnego rodzaju wzbudzenia, które można opisać przy użyciu modelu oscylatora harmonicznego. Model ten zakłada istnienie momentów dipolowych, bez wchodzenia w ich naturę. Okazuje się, że taki opis dobrze działa zarówno dla atomów, domieszek, defektów, jak też drgań sieci krystalicznej oraz wzbudzeń swobodnych nośników. Rozsunięciu ładunku jądra i elektronu towarzyszy pojawienie się **momentu dipolowego** $\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$, $\vec{r}_+$ - położenie ładunku dodatniego, $\vec{r}_-$ - ujemnego.

Wstawiamy do równania ruchu ⇒ model Lorentza z FMS IN (III rok) i dostajemy:

Co to za oscylatory?

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \chi + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

$$\varepsilon'(\omega) = n^2 - \kappa^2 = 1 + \chi + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

$$\varepsilon''(\omega) = 2n\kappa = \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^*} \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

W granicy $\omega \to 0$

$$\varepsilon_r(0) = 1 + \chi + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m^* \omega_0^2}$$

(definicja statycznej stałej dielektrycznej)

Właściwości optyczne

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

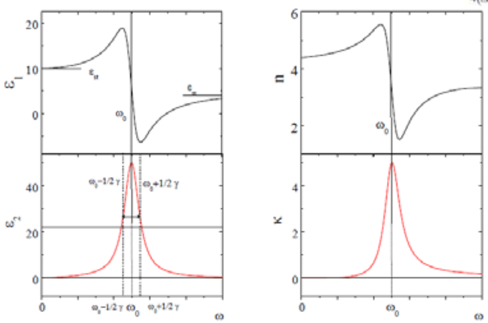
$$\varepsilon_2(\omega) = (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty)\omega_0^2 \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

$\omega_0^2 - \omega^2 \cong 2\omega_0\Delta\omega$ gdzie $\Delta\omega = \omega - \omega_0$

$$\varepsilon_1(\Delta\omega) = \varepsilon_\infty - (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) \frac{2\omega_0\Delta\omega}{4(\Delta\omega)^2 + (\gamma)^2}$$

Loretzowski kształt linii

$$\varepsilon_2(\Delta\omega) = (\varepsilon_{st} - \varepsilon_\infty) \frac{\gamma\omega_0}{4(\Delta\omega)^2 + (\gamma)^2}$$



Właściwości optyczne

Jakiego rodzaju „oscylatory"/przejścia optyczne są obecne w materii skondensowanej?
- Drgania sieci (fonony, drgania lokalne) – energie meV
- Wzbudzenia domieszek, defektów (meV-eV)
- Wzbudzenia w krysztale (ekscytony, biekscytony, triony) (eV)
- Przejścia miedzy pasmowe (eV, IR-VIS-UV), wewnątrz pasma (np. w studniach kwantowych – meV, IR)

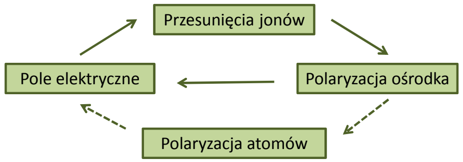
Fonony:
Obok sił sprężystych (lokalnych), istnieją siły wynikające z polaryzacji ośrodka – dalekozasięgowe. Pojawia się oddziaływanie wymagające samouzgodnienia

Przesunięcia jonów → Polaryzacja ośrodka → Pole elektryczne → Przesunięcia jonów

Polaryzacja ośrodka ⇢ Polaryzacja atomów ⇢ Pole elektryczne

Właściwości optyczne

Fonony:
Obok sił sprężystych (lokalnych), istnieją siły wynikające z polaryzacji ośrodka – dalekozasięgowe. Pojawia się oddziaływanie wymagające samouzgodnienia



Polaryzacja ośrodka:
polaryzacja związana z przesunięciem jonów + **wewnętrzna polaryzacja jonu**

$$\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$$

Wychylenia z położenia równowagi $\xi_\pm = \vec{r}_{0\pm} - \vec{r}_\pm$
Znormalizowany wektor przesunięcie $\eta = (\xi_+ + \xi_-)/\sqrt{\rho}$
Gęstość energii kinetycznej $K = \frac{1}{2}\rho\dot{\eta}^2$
Gęstość energii potencjalnej ośrodka sprężystego (energia elastyczna) $U = \frac{1}{2}\omega^2\eta^2$

Właściwości optyczne

Fonony:
Polaryzacja ośrodka: **polaryzacja związana z przesunięciem jonów** + **wewnętrzna polaryzacja jonu**

$$\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$$

Wychylenia z położenia równowagi $\xi_\pm = \vec{r}_{0\pm} - \vec{r}_\pm$
Znormalizowany wektor przesunięcie $\eta = (\xi_+ + \xi_-)/\sqrt{\rho}$
Gęstość energii kinetycznej $K = \frac{1}{2}\rho\dot{\eta}^2$
Gęstość energii potencjalnej ośrodka sprężystego (energia elastyczna) $U_{elast} = \frac{1}{2}\omega^2\eta^2$

W przypadku fononów podłużnych $\vec{\eta} \parallel \vec{k}$, dla fononów poprzecznych $\vec{\eta} \perp \vec{k}$

Właściwości optyczne

Fonony:
Polaryzacja ośrodka: **polaryzacja związana z przesunięciem jonów** + **wewnętrzna polaryzacja jonu**

$$\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$$

Wychylenia z położenia równowagi $\xi_\pm = \vec{r}_{0\pm} - \vec{r}_\pm$
Znormalizowany wektor przesunięcie $\eta = (\xi_+ + \xi_-)/\sqrt{\rho}$
Gęstość energii kinetycznej $K = \frac{1}{2}\rho\dot{\eta}^2$
Gęstość energii potencjalnej ośrodka sprężystego (energia elastyczna) $U_{elast} = \frac{1}{2}\omega^2\eta^2$

Fonony optyczne dają wkład do makroskopowej polaryzacji dielektrycznej ośrodka - **Dynamiczna Funkcja Dielektryczna** – DFD (Dynamic Dielectric Function - DDF)

$$\vec{P} = \underbrace{\gamma_{12}\vec{\eta}}_{\text{przesunięcie jonów}} + \underbrace{\gamma_{22}\vec{\mathcal{E}}}_{\text{polaryzacja jonu}}$$

Będziemy szukali rozwiązania $\varepsilon(\omega)$ z równań Maxwella, spełniającego równanie falowe

$$\vec{D} = \varepsilon_0\varepsilon(\omega)\vec{\mathcal{E}} = \varepsilon_0\vec{\mathcal{E}} + \vec{P}$$
$$\vec{P} = \varepsilon_0(\varepsilon(\omega) - 1)\vec{\mathcal{E}}$$
$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Właściwości optyczne

Fonony:
Polaryzacja ośrodka: **polaryzacja związana z przesunięciem jonów** + **wewnętrzna polaryzacja jonu**

$$\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$$

Wychylenia z położenia równowagi $\xi_\pm = \vec{r}_{0\pm} - \vec{r}_\pm$
Znormalizowany wektor przesunięcie $\eta = (\xi_+ + \xi_-)/\sqrt{\rho}$
Gęstość energii kinetycznej $K = \frac{1}{2}\rho\dot{\eta}^2$
Gęstość energii potencjalnej ośrodka sprężystego (energia elastyczna) $U_{elast} = \frac{1}{2}\omega^2\eta^2$

Fonony optyczne dają wkład do makroskopowej polaryzacji dielektrycznej ośrodka - **Dynamiczna Funkcja Dielektryczna** – DFD (Dynamic Dielectric Function - DDF)

$$\vec{P} = \underbrace{\gamma_{12}\vec{\eta}}_{\text{przesunięcie jonów}} + \underbrace{\gamma_{22}\vec{\mathcal{E}}}_{\text{polaryzacja jonu}}$$

Wewnętrzna polaryzacja jonów daje polaryzację dla dużych częstości (w porównaniu z częstością fononów) $P_\infty = \gamma_{22}\vec{\mathcal{E}}$ - wprowadzamy ε_∞ - parametr charakteryzujący polaryzację ośrodka dla częstości dużo większych niż częstotliwość drgań sieci, a mniejszych niż polaryzacja wewnątrz jonów (poniżej przejść międzypasmowych).

$$\vec{D} = \varepsilon_0\varepsilon_\infty\vec{\mathcal{E}} = \varepsilon_0\vec{\mathcal{E}} + \vec{P}_\infty \Rightarrow \vec{P}_\infty = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\vec{\mathcal{E}} \Rightarrow \gamma_{22} = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)$$

Właściwości optyczne

Fonony:

Polaryzacja ośrodka: **polaryzacja związana z przesunięciem jonów** + **wewnętrzna polaryzacja jonu**

$$\vec{p} = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$$

Gęstość energii kinetycznej $K = \frac{1}{2}\rho\dot{\eta}^2$

Gęstość energii potencjalnej ośrodka sprężystego (energia elastyczna) $U_{elast} = \frac{1}{2}\omega^2\eta^2$

$$\vec{P} = \gamma_{12}\vec{\eta} + \gamma_{22}\vec{\mathcal{E}}$$

$$\vec{D} = \varepsilon_0\varepsilon_\infty\vec{\mathcal{E}} = \varepsilon_0\vec{\mathcal{E}} + \vec{P}_\infty \;\Rightarrow \vec{P}_\infty = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\vec{\mathcal{E}} \;\;\Rightarrow \gamma_{22} = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)$$

Gęstość energii potencjalnej (elektrostatycznej)

$$U_p = -\int_0^{\mathcal{E}} \vec{P}\, d\vec{\mathcal{E}} = \gamma_{12}\vec{\eta}\vec{\mathcal{E}} + \frac{1}{2}\gamma_{22}\mathcal{E}^2$$

Całkowita gęstość energii potencjalnej

$$U = U_{elast} + U_p = \frac{1}{2}\left(\omega^2\eta^2 + 2\gamma_{12}\vec{\eta}\vec{\mathcal{E}} + \gamma_{22}\mathcal{E}^2\right)$$

Z U możemy wyprowadzić równanie ruchu w polu elektrycznym

$$F = -\frac{dU}{d\eta}$$

Właściwości optyczne

Fonony:

Polaryzacja ośrodka: **polaryzacja związana z przesunięciem jonów** + **wewnętrzna polaryzacja jonu**

$$U = U_{elast} + U_p = \frac{1}{2}\left(\omega^2\eta^2 + 2\gamma_{12}\vec{\eta}\vec{\mathcal{E}} + \gamma_{22}\mathcal{E}^2\right)$$

Z U możemy wyprowadzić równanie ruchu w polu elektrycznym

$$F = -\frac{dU}{d\eta}$$

$$\ddot{\vec{\eta}} = -\omega_0^2\vec{\eta} + \gamma_{12}\vec{\mathcal{E}}$$

Stąd dla stałego pola w czasie

$$\vec{\eta}_0 = \frac{\gamma_{12}}{\omega_0^2}\vec{\mathcal{E}}_0 \quad\Rightarrow\quad \vec{P}_0 = \gamma_{12}\vec{\eta}_0 + \gamma_{22}\vec{\mathcal{E}}_0 = \left(\frac{\gamma_{12}^2}{\omega_0^2} + \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\right)\vec{\mathcal{E}}_0$$

Wprowadzamy **statyczną stałą dielektryczną** ε_s:

$$\vec{D} = \varepsilon_0\varepsilon_s\vec{\mathcal{E}}_0 = \varepsilon_0\vec{\mathcal{E}} + \vec{P}_0 \quad\Rightarrow\quad \vec{P}_0 = \varepsilon_0(\varepsilon_s - 1)\vec{\mathcal{E}}_0$$

$$\Rightarrow \varepsilon_0(\varepsilon_s - 1) = \left(\frac{\gamma_{12}^2}{\omega_0^2} + \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\right)$$

Czyli

$$\gamma_{12} = \omega_0\sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)}$$

Właściwości optyczne

Fonony:

$$\vec{D} = \varepsilon_0\varepsilon(\omega)\vec{\mathcal{E}} = \varepsilon_0\vec{\mathcal{E}} + \vec{P}$$

$$\vec{P} = \varepsilon_0(\varepsilon(\omega) - 1)\vec{\mathcal{E}}$$

Ogólny problem: $\vec{P} = \gamma_{12}\vec{\eta} + \gamma_{22}\vec{\mathcal{E}}$

Równanie ruchu: $\ddot{\vec{\eta}} = -\omega_0^2\vec{\eta} + \gamma_{12}\vec{\mathcal{E}}$ - ω_0 odpowiada częstości drgań fononów optycznych TO w pobliżu $\vec{k} = 0$.

Otrzymaliśmy $\gamma_{12} = \omega_0\sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)}$, $\gamma_{22} = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)$

Szukamy rozwiązania w postaci fali płaskiej

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}, \qquad \vec{\eta} = \vec{\eta}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}, \qquad \vec{P} = \vec{P}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Wstawiamy fale płaskie do układu równań [...]

$$\vec{\eta}_0 = \left[\frac{\gamma_{12}}{\omega_0^2 - \omega^2}\right]\vec{\mathcal{E}}_0 \quad\Rightarrow\quad \vec{P}_0 = \left[\frac{\gamma_{12}^2}{\omega_0^2 - \omega^2} + \gamma_{22}\right]\vec{\mathcal{E}}_0$$

$$\vec{P}_0 = \varepsilon_0(\varepsilon(\omega) - 1)\vec{\mathcal{E}}_0 = \cdots = \left[\frac{\omega_0^2\varepsilon_0(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2} + \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\right]\vec{\mathcal{E}}_0$$

Właściwości optyczne

Fonony:

$$\vec{P}_0 = \varepsilon_0(\varepsilon(\omega) - 1)\vec{\mathcal{E}}_0 = \cdots = \left[\frac{\omega_0^2\varepsilon_0(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2} + \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\right]\vec{\mathcal{E}}_0$$

Dynamiczna funkcja dielektryczna:

$$\varepsilon(\omega) \equiv \varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2}(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)$$

Z równań Maxwella możemy znaleźć warunki rozchodzenia się fal poprzecznych i podłużnych w ośrodku $\vec{j} = \sigma(\omega)\vec{\mathcal{E}}$, o przenikalności $\mu = \mu_0$ oraz $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_L(\omega)$ - w ten sposób zapisano wkład do funkcji dielektrycznej pochodzący od swobodnych nośników (zależny od $\sigma(\omega)$) oraz polaryzacji sieci $\varepsilon_L(\omega)$ (bez nośników) :

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{\mathcal{E}}) = \mu_0\varepsilon_L\frac{\partial^2\vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} + \mu_0\sigma\frac{\partial\vec{\mathcal{E}}}{\partial t} \quad\Rightarrow$$

$$-\nabla\cdot(\nabla\cdot\vec{\mathcal{E}}) + \Delta\vec{\mathcal{E}} = \varepsilon_L\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{\mathcal{E}}}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\sigma}{\varepsilon_0}\frac{\partial\vec{\mathcal{E}}}{\partial t}$$

$$\vec{k}\cdot(\vec{k}\cdot\vec{\mathcal{E}}_0) - k^2\vec{\mathcal{E}}_0 = -\varepsilon_L\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0 - \frac{i\omega\sigma}{c^2\varepsilon_0}\vec{\mathcal{E}}_0 \equiv \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0$$

Właściwości optyczne

Fonony:

$$\vec{k}\cdot(\vec{k}\cdot\vec{\mathcal{E}}_0) - k^2\vec{\mathcal{E}}_0 = -\varepsilon_L\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0 - \frac{i\omega\sigma}{c^2\varepsilon_0}\vec{\mathcal{E}}_0 \equiv \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0$$

Gdzie szukana zależność $\varepsilon(\omega)$

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_L + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0}$$

Fale poprzeczne $\vec{k}\perp\vec{\mathcal{E}}_0$:

$$k^2\vec{\mathcal{E}}_0 = \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0$$

Zatem dostajemy propagację fal elektromagnetycznych w ośrodku

$$k = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\frac{\omega}{c} \equiv \tilde{n}\frac{\omega}{c}$$

$$\tilde{n} = n + i\kappa$$

Fale podłużne $\vec{k}\parallel\vec{\mathcal{E}}_0$ - istnieje rozwiązanie dla:

$$0 = \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0$$

Wzbudzenia podłużne pojawiają się dla częstości ω_L, w której $\varepsilon(\omega_L) = 0$

$$\varepsilon_r(\omega_L) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2-\omega^2}(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) = 0 \quad\Rightarrow\quad \omega_L = \omega_0\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_\infty}} = \omega_{TO}\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_\infty}}$$

Właściwości optyczne

Fonony:

$$\vec{k}\cdot(\vec{k}\cdot\vec{\mathcal{E}}_0) - k^2\vec{\mathcal{E}}_0 = -\varepsilon_L\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0 - \frac{i\omega\sigma}{c^2\varepsilon_0}\vec{\mathcal{E}}_0 \equiv \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0$$

Fale poprzeczne $\vec{k}\perp\vec{\mathcal{E}}_0$:

$$k^2\vec{\mathcal{E}}_0 = \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0, \qquad k = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\frac{\omega}{c} \equiv \tilde{n}\frac{\omega}{c}$$

$$\tilde{n} = n + i\kappa$$

Fale podłużne $\vec{k}\parallel\vec{\mathcal{E}}_0$ - istnieje rozwiązanie dla:

$$0 = \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{\mathcal{E}}_0$$

$$\varepsilon_r(\omega_L) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2-\omega^2}(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) = 0 \quad\Rightarrow\quad \omega_L = \omega_{TO}\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_\infty}}$$

Jest to **relacja Lyddena, Sachsa, Tellera (LST).** $\varepsilon(\omega) = 0$ nie oznacza, że pole elektryczne wewnątrz ośrodka wynosi zero. $\vec{P}_L = \varepsilon_0(\varepsilon(\omega_L) - 1)\vec{\mathcal{E}}_L = -\varepsilon_0\vec{\mathcal{E}}_L$ zatem $\vec{\mathcal{E}}_L = -\vec{P}_L/\varepsilon_0$, czyli $\vec{D} = 0$. Pojawia się makroskopowe pole elektryczne, wynikające z makroskopowej polaryzacji środka. To pole ma przeciwny kierunek niż polaryzacja, dlatego daje dodatkową siłę zwrotną dla oscylacji podłużnych (w porównaniu z poprzecznymi). Dlatego energia fononu LO jest zawsze większa od energii fononu TO.

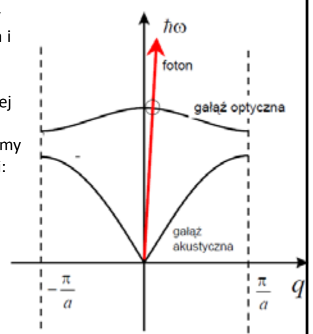
Właściwości optyczne

Fonony:

Przejścia optyczne w podczerwieni, wzbudzające fonony optyczne, możliwe są tylko gdy dopasowana jest energia i pęd.

Absorpcja światła pojawia się w kryształach (przynajmniej częściowo) jonowych!
Korzystając z relacji **LST** (**Lyddena, Sachsa, Tellera**) możemy dynamiczną funkcję dielektryczną przedstawić w postaci:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty\frac{\omega_L^2-\omega^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty\left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}{1-\left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}$$



Właściwości optyczne

Fonony:

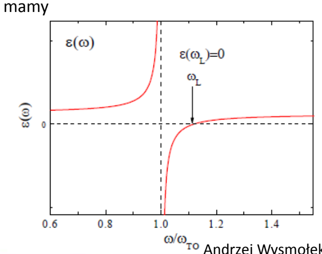
Absorpcja światła pojawia się w kryształach (przynajmniej częściowo) jonowych!
Korzystając z relacji **LST** (**Lyddena, Sachsa, Tellera**) możemy dynamiczną funkcję dielektryczną przedstawić w postaci:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty\frac{\omega_L^2-\omega^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty\left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}{1-\left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}$$

Dla częstości spełniających warunek $\omega_{TO} < \omega < \omega_L$ mamy $\varepsilon(\omega) < 0$ czyli całkowite odbicie $R(\omega) = 1$.

Wzbudzenia poprzeczne $\varepsilon(\omega) \to \infty$

Wzbudzenia podłużne $\varepsilon(\omega) = 0$



Andrzej Wysmołek

Właściwości optyczne

Fonony:

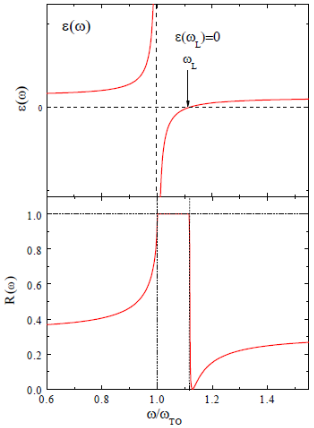
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}$$

Dla częstości spełniających warunek $\omega_{TO} < \omega < \omega_L$ mamy $\varepsilon(\omega) < 0$ czyli całkowite odbicie $R(\omega) = 1$.

Wzbudzenia poprzeczne $\varepsilon(\omega) \to \infty$

Wzbudzenia podłużne $\varepsilon(\omega) = 0$

Reststrahlen (promieniowanie resztkowe)
- brak penetracji próbki w obszarze częstości pomiędzy ω_{TO} i ω_L
- współczynnik odbicia bliski 1



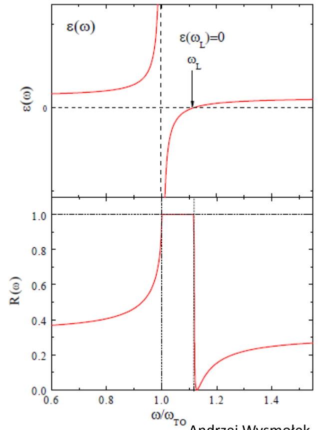
Właściwości optyczne

Fonony:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}$$

Gdy w układzie mamy tłumienie

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

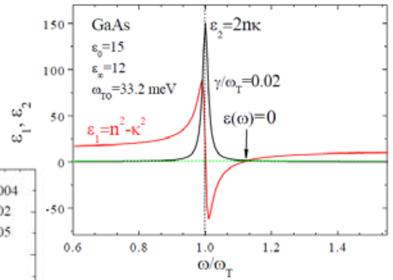


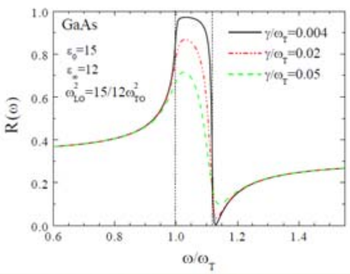
Andrzej Wysmołek

Właściwości optyczne

Fonony:
Gdy w układzie mamy tłumienie

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

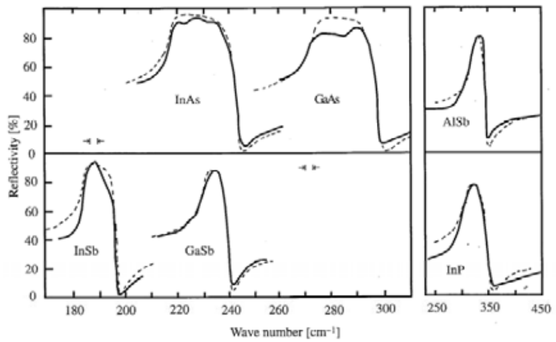




Andrzej Wysmołek

Właściwości optyczne

Fonony:



M. Hass: Lattice reflections, *Optical properties of III-V Compounds*, Semiconductors and Semimetals, Vol. 3 (Academic, New York 1967), pp.3-16

Andrzej Wysmołek

Właściwości optyczne

Fonony:

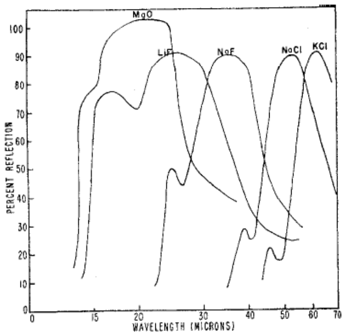


Fig. 1. Infrared reflection spectra of alkali halides and magnesium oxide.

M. Lax and E. Burstein Phys. Rev. B **97**, 39 (1995)

Andrzej Wysmołek

Właściwości optyczne

Polariton fononowy:

Dotychczas rozpatrując oddziaływanie pomiędzy falami elektromagnetycznymi a oscylatorami zaniedbywaliśmy promieniowanie wywołane oscylacjami makroskopowej polaryzacji.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}$$

$$k^2 = \varepsilon(\omega)\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\omega^2}{c^2}\left(\varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2}\right)$$

dla $k \to 0$ częstość drgań poprzecznych staje się zdegenerowana z częstością drgań podłużnych. Efekt symetrii (kubicznej).

$k \to 0 \quad \Rightarrow \omega \to 0$ (**dolna gałąź polaritonowa**), $\omega \approx ck/\sqrt{\varepsilon_s}$

lub

$k \to 0 \quad \Rightarrow \omega \to \omega_L$ (**górna gałąź polaritonowa**) , $\omega \approx ck/\sqrt{\varepsilon_\infty}$

Właściwości optyczne

Polariton fononowy:

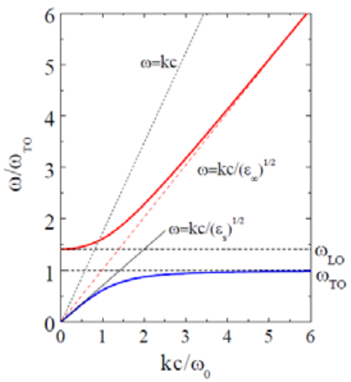
dla $k \to 0$ częstość drgań poprzecznych staje się zdegenerowana z częstością drgań podłużnych. Efekt symetrii (kubicznej).

$k \to 0 \quad \Rightarrow \omega \to 0$ (**dolna gałąź polaritonowa**), $\omega \approx ck/\sqrt{\varepsilon_s}$

lub

$k \to 0 \quad \Rightarrow \omega \to \omega_L$ (**górna gałąź polaritonowa**) $\omega \approx ck/\sqrt{\varepsilon_\infty}$

Występowanie efektu polaritonowego wynika z silnego sprzężenia dwóch wzbudzeń: fononu TO oraz fotonu.
W wyniku oddziaływania pojawiają się nowe now mody własne systemu:
ośrodku propagują się więc polaritony (ani fonon TO, ani foton!)



Właściwości optyczne

Mody sprzężone plazmon-fonon:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} - \varepsilon_\infty \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

Wzbudzenia podłużne

$$\omega_\pm = \frac{1}{2}\sqrt{\omega_p^2 + \omega_{LO}^2 \pm \sqrt{\left(\omega_p^2 + \omega_{LO}^2\right)^2 - 4\omega_p^2\omega_{TO}^2}}$$

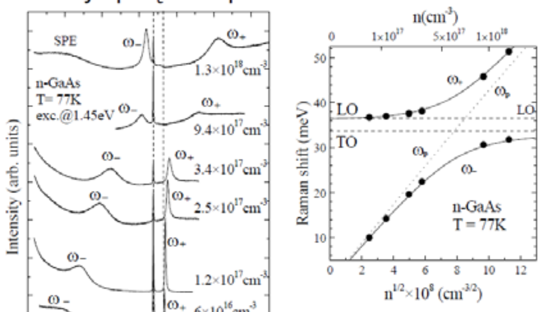
Dwa rozwiązania:

dla $\omega_p \ll \omega_{LO}$ mamy $\omega_- \to \omega_p$ (plasmono-podobny) i $\omega_+ \to \omega_{LO}$ (fonono-podobny)

dla $\omega_p \gg \omega_{LO}$ mamy $\omega_- \to \omega_{TO}$ (fonono-podobny) i $\omega_+ \to \omega_p$ (plasmono-podobny)

Właściwości optyczne

Mody sprzężone plazmon-fonon w GaAs



$$\omega_p = \sqrt{\omega_+^2 + \omega_-^2 - \omega_{LO}^2}$$

Można wyznaczyć koncentrację elektronów swobodnych!

Andrzej Wysmołek

Właściwości optyczne

Opis właściwości optycznych to opis propagacji fali elektromagnetycznej w krysztale z uwzględnieniem różnych oddziaływań. Należy uwzględnić:

- Swobodne nośniki
- Fonony
- Przejścia międzypasmowe
- Wpływ domieszek na właściwości optyczne

Na tym wykładzie zatrzymaliśmy się na modelu kwaziklasycznym oddziaływania fali elektromagnetycznej z kryształem. Dalej należałoby rozważyć kwantowo:

- przejścia na pasmo-donor, pasmo-akceptor, donor-akceptor
- przejścia pasmo-pasmo
- ekscytony, triony, biekscytony, polaritony

Więcej na temat przejść optycznych w półprzewodnikach:

Andrzej Wysmołek Własnosci optyczne półprzewodników
http://www.fuw.edu.pl/~wysmolek/optyczne/