① 20. 12. '12

Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II

Úvod: Světlo - elektromagnetické vlnění

Spektrum elektromagnetického vlnění:

λ [m]

excitace: rotační pohyby molekul (FIR)
kmity atomů (iontů) v krystalech a molekulách (FIR, MIR)
atomů a iontů (elektronové) (FIR - UV)
plazmy v dopovaných polovodičích (FIR - MIR)
plazmy elektr. v kovech (FIR - UV)
vazebných el. (mezipás. přechody) (MIR - UV)

Rádiové vlny

3×10^{8} — 1 m

Mikrovlnná oblast

3×10^{11} — 1×10^{-3}

Infračervená oblast
$E = 1.24\,meV - 1.7\,eV$

- ~~IČ A~~ Blízká IČ $\lambda = 750 - 1400\,nm$ IRA
- krátkovlnná $\lambda = 1{,}4 - 3\,\mu m$ IRB
- Střední IČ $\lambda = 3 - 8\,\mu m$
- Dlouhovlnná $\lambda = 8 - 15\,\mu m$ IRC
- Daleká IČ $\lambda = 15 - 1000\,\mu m$

4×10^{14} — 7.6×10^{-7}

Viditelná oblast

7.8×10^{14} — 3.8×10^{-7}

UV záření - $E = 124\,eV - 3{,}1\,eV$

- UV-C $\lambda = 100 - 280\,nm$
- UV-B $\lambda = 280 - 315\,nm$
- UV-A $\lambda = 315 - 380\,nm$

3×10^{16} — 10×10^{-9}

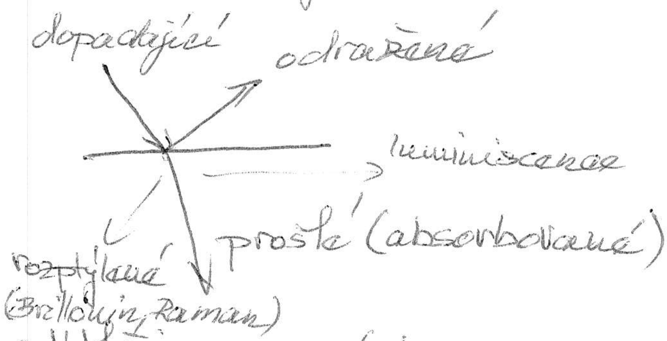
RTG záření - $E = 120\,eV - 100\,keV$

10^{19} — 3×10^{-11}

Záření gama - $E > 100\,keV$

f [Hz]

② • Světlo jako EM záření dopadá na materiál



• Většina zakázaných pásů v polovodičích do 6 eV
⇒ absorbce světla
• optická spektra nesou důležité informace o fyzikálních vlastnostech dané látky
• optické vlastnosti látek jsou důležité pro jejich aplikace v optoelektronice (lasery, diody, detektory, vlnovody)
• Dva přístupy popisu optických vlastností látek: 1) fenomenologický (makroskopický)
2) + mikroskopický (semi-kvantový)

Obsah přednášky: naučit se zacházet s odezvou prostředí na optickou vlnu na fenomenologické úrovni a jak je spojitat s mikroskopického přístupu ⇒ popis různých mechanismů

Cíl přednášky: doplnit do úvodního EM spektra různé mechanismy absorbce v různých materiálech

• prostředí disperzní, absorbující, izotropní, nemagnetické

Doporučená literatura: 1) Yu, Cardona: Fundamentals of semiconductors
2) Y. B. Band: Light and Matter
3) Grosso, Pastori-Parravicini: Solid State Physics
4) Born, Wolf: Principles of Optics
+ rozdané články a obrázky

③ • Fenomenologický popis interakce elektromagnetické vlny s látkou ⇒
⇒ látka složena z nabitých částic

• Elektromagnetické (pole) vlnění je popsáno vektory $\vec{E}, \vec{B}, \vec{D}, \vec{H}$ ⇒ konečné vektory v celém rozsahu pole, spojitými funkcemi času a prostoru + spojité derivace. Nespojitosti pouze se vyskytují pouze na plochách změny fyzikálních vlastností prostředí

• Zdrojem elektromagnetického pole je rozložení elektrického náboje a proudu

• Vektory elektromagnetického pole splňují Maxwellovy ~~r~~ rovnice

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r},t)}{\partial t}$$ Faradayův zákon

Časová změna magnetického pole indukuje elektrické pole (uzavřené smyčky)

$$\nabla \times \vec{B}(\vec{r},t) = \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial \vec{E}(\vec{r},t)}{\partial t} + \mu_0 \vec{j}(\vec{r},t)$$ Ampérův - Maxwellův zákon

magnetické pole je vytvořeno elektrickým proudem a elektrickým polem které se mění v čase

→ člen $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ není skutečný proud
↳ obdoba Faradayova zákona ⇒ možnost šíření ve vakuu

(4) $\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r},t) = \frac{\rho(\vec{r},t)}{\varepsilon_0}$ Gaussův zákon

Elektrické pole produkované elektrickými náboji diverguje od pozitivního náboje a konverguje k negativnímu

Elektrické pole $\vec{E} = \frac{\vec{F_e}}{q_0}$ → testovací náboj (neovlivňuje ostatní)

$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r},t) = 0$ Gaussův magnetický zákon

Magnetické pole: Pomocí Lorentzovy síly

$\vec{F_B} = q\vec{v} \times \vec{B} \Rightarrow |\vec{B}| = \frac{|\vec{F_B}|}{q|\vec{v}|\sin\theta}$

Práce magnetického pole je vždy nulová (síla kolmá na rychlost)

Šíření EM vlnění ve vakuu

- bez zdrojů

M.R.: $\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

$\nabla \cdot \vec{B} = 0$

$\nabla \cdot \vec{E} = 0$

ODVOZENÍ VLNOVÉ ROVNICE:

$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{B}$

$\nabla \times \nabla \times \vec{X} = \nabla(\nabla \cdot \vec{X}) - \Delta \vec{X}$

$\nabla \underbrace{(\nabla \cdot \vec{E})}_{\text{bez zdrojů} \Rightarrow 0} - \Delta \vec{E} = -\mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$

$\Delta \vec{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$ Vlnová rovnice pro šíření EM vlny ve vakuu

(5) Obdobně pro $\vec{B}$

$$\Rightarrow \quad \Delta \vec{B} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0$$

Matematické vyjádření vlnové rovnice (1747 d'Alambert)

1D: $$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$$

$\Rightarrow \mu_0 \varepsilon_0 = \frac{1}{c^2}$ $\quad c$ .... rychlost šíření světla ve vakuu

$c = 299792458$ m/s

$\varepsilon_0 = 8.854187817 6 \times 10^{-12}$ C/Vm $\rightarrow$ F/m permitivita vakua

$\mu_0 = 12,5663706 14 \times 10^{-7} \frac{m\,kg}{C^2}$ $\rightarrow$ H/m $\quad$ N/A^2 permeabilita vakua

$1,2566370614 \times 10^{-6}$ Hm^{-1}

$4\pi \times 10^{-7}$ Hm^{-1}

$\sigma = 0$

Řešení vlnové rovnice:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 \cdot \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \phi) = \mathrm{Re}\{\underbrace{\vec{A}_0}\, e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}\}$$ rovinná vlna

komplexní amplituda

$\vec{A}_{0r} \cdot e^{i\phi} \rightarrow$ počáteční fáze

$\vec{k}$ ... vlnový vektor

$$\vec{k} = |k| \cdot \hat{k} = (k_x, k_y, k_z) = |k| \underbrace{(s_x, s_y, s_z)}$$

jednotkový vektor ve směru šíření

Fázová rychlost $\Rightarrow$ rychlost ~~šíření~~ změny fáze vlny $\Rightarrow$ řešení vlnové rovnice $\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 \cos(\vec{k}(\vec{r} - \vec{v}t))$

$$\Rightarrow \vec{v} = \frac{\omega}{\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \text{ve vakuu}: c = \frac{\omega}{k} \Rightarrow |\vec{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Souvislost s energií: $E = h\nu = \hbar\omega$

$$\hbar\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} = E \Rightarrow E(eV) = \frac{1,2398}{\lambda\,[\mu m]}$$

(6) $E = \hbar\omega = 1\,eV \Rightarrow \lambda = 1{,}2398\,\mu m$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = 8065\,cm^{-1}$$

$$T = 11\,600\,K$$

Planckův zákon: $\underbrace{\frac{dI}{d\omega} u_\omega(T)}_{\text{hustota energie záření o frekvenci } \omega \text{ při teplotě } T} = \frac{\hbar}{4\pi^3 c^2} \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$

~~Spektrální reprezentace~~

Rovinná vlna:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0 \exp i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{B}_0 \exp i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$$

$\Downarrow$

Dosazení do MR

$$i\vec{k} \times \vec{E} = +i\omega\vec{B} \Rightarrow \vec{B} = \frac{\vec{k} \times \vec{E}}{\omega}$$

$$i\vec{k} \times \vec{B} = -i\mu_0\varepsilon_0\omega\vec{E}$$

$$\vec{k}\cdot\vec{E} = 0$$

$$\vec{k}\cdot\vec{B} = 0$$

Linearita vlnové rovnice $\Rightarrow$ obecné řešení je libovolná superpozice harmonických vln ve tvaru

$$\vec{E} = \sum_i \vec{E}_{0i}\, e^{i(\vec{k}_i\cdot\vec{r} - \omega_i t)}$$

$$\vec{B} = \sum_i \frac{\vec{k}_i \times \vec{E}_{0i}}{\omega_i}\, e^{i(\vec{k}_i\cdot\vec{r} - \omega_i t)}$$

(7) Nahrazení sumy integrálem ⇒ reálný svět

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\vec{r},\omega)\, e^{-i\omega t}\, d\omega$$ ... inverzní Fourierova transform.

$\vec{E}(\vec{r},\omega)$ ... spektrum → obsahuje $e^{i\vec{k}(\omega)\cdot\vec{r}}$

$$\vec{E}(\vec{r},\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\vec{r},t)\, e^{i\omega t}\, dt$$

Zavedení grupové rychlosti ⇒ rychlost šíření vlnového balíku

$$\vec{v}_g = \frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}} \; ; \quad v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$$

vakuum - nedisperzní prostředí → všechny vlny se šíří stejnou rychl.

$\Rightarrow \omega = ck$

$$v_g = \frac{\partial ck}{\partial k} = \underline{c}$$

Pro jednu frekvenci prostorová část $\vec{E}(\vec{r},t)$ splňuje $\Delta\vec{E}(\vec{r}) + k^2\vec{E}(\vec{r}) = 0$ Helmholtz

Materiálové prostředí

Doposud šíření ve vakuu ⇒ bez zdrojů

Generace EM pole: Elektrické pole je ~~excitace~~ generováno náboji a časově proměnnými magnetickými poli

Magnetické pole je generováno elektrickými proudy a časově proměnnými elektrickými poli

⇒ Elektromagnetické pole je excitace (porucha) vyvolaná elektrickými náboji

(8) Maxwellovy rovnice

$$\nabla\times\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla\times\vec{B} = \mu_0\vec{j} + \mu_0\varepsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}$$

$$\nabla\cdot\vec{E} = \frac{\varrho}{\varepsilon_0}$$

$$\nabla\cdot\vec{B} = 0$$

vliv nábojů (prostředí): prostřednictvím $\varrho, \vec{j}$

<u>Multipólový rozvoj ϱ a $\vec{j}$</u>

$$\vec{j} = \vec{j}_f + \frac{\partial\vec{P}}{\partial t} + \nabla\times\vec{M} + \frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\overleftrightarrow{Q}) + \ldots$$

$$\varrho = \varrho_f - \nabla\cdot\vec{P} - \nabla(\nabla\cdot\overleftrightarrow{Q}) - \ldots$$

$\vec{P}$ ... hustota dipólového elektrického momentu
$\overleftrightarrow{Q}$ ... hustota kvadrupólového elektrického momentu
$\vec{M}$ ... hustota magnetického momentu
ϱ_f ... hustota volných nábojů (monopólů)
$\vec{j}_f$ ... hustota volných proudů

$\vec{j}_f = \underbrace{\vec{j}_s}_{\text{hustota proudů z vnějších zdrojů} \to \text{většinou} = 0} + \vec{j}_c$ } hustota vodivostních proudů

<u>Ohmův zákon</u>: $\vec{j}_c = \underbrace{\sigma}_{\text{měrná vodivost}}\cdot\vec{E}$

<u>Dipólová hypotéza</u>: Pokud jde o elektrické vlastnosti je neutrální dielektrikum ekvivalentní souboru elektrických dipólů

⑨ Pokud jde o magnetické vlastnosti je neutrální dielektrikum ekvivalentní souboru magnetických dipólů

Elektrostatická a magnetostatická definice $\vec{D}$ a $\vec{H}$

2. MR:

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \vec{E} = \rho = \rho_f - \nabla \cdot \vec{P}$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \rho_f \Rightarrow \boxed{\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\nabla \cdot \vec{D} = \rho_f}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} = \mu_0 (\vec{j}_f + \vec{j}_m) = \mu_0 (\vec{j}_f + \nabla \times \vec{M})$$

$$\nabla \times (\vec{B}/\mu_0 - \vec{M}) = \vec{j}_f \Rightarrow \boxed{\nabla \times \vec{H} = \vec{j}_f}$$

$$\boxed{\vec{H} = \vec{B}/\mu_0 - \vec{M}} \qquad \vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \underbrace{\mu_0 \vec{M}}_{\vec{P}_m}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \left(\vec{j}_f + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \nabla \times \vec{M}\right) + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\nabla \times (\vec{B}/\mu_0 - \vec{M}) = \mu_0 \vec{j}_f + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P})$$

$$\boxed{\nabla \times \vec{H} = \mu_0 \vec{j}_f + \mu_0 \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}}$$

Makroskopická polarizace $\vec{P}$:

$$\vec{P} = \vec{D} - \varepsilon_0 \vec{E}$$

- v prázdném prostoru je nulový ⇒ vázán se složením dielektrika

M. R.: $\nabla \cdot \vec{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} (\rho_f - \nabla \cdot \vec{P})$

(10)

- účinek dielektrika na pole lze vysvětlit ekvivalentní objemovou hustotou náboje

$\rho' = -\nabla \cdot \vec{P}$

V každém vnitřním bodě dielektrika splňuje potenciál upravenou Poissonovu rovnici

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\varepsilon_0}(\rho + \rho')$$

Potenciál v libovolném bodě dielektrika:

$$\varphi(x,y,z) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho - \nabla\cdot\vec{P}}{r}\,dV^3$$

~~upravíme integrál pomocí vztahu~~

$$\cancel{\frac{\nabla\vec{P}}{r} = \nabla\cdot\left(\frac{\vec{P}}{r}\right) - \vec{P}\cdot\nabla\left(\frac{1}{r}\right)}$$

$\vec{P}$ lze považovat za moment dipólů na jednotku objemu, neboli polarizaci

⇒ Přítomnost hmotného tělesa (pevné látky) v elektromagnetickém poli může být plně vyjádřena ekvivalentním rozložením hustoty náboje $-\nabla\cdot\vec{P}$ a ekvivalentním rozložením hustoty proudu $(\partial\vec{P}/\partial t) + \nabla\times\vec{M}$

V izotropních prostředích jsou $\vec{P}$ a $\vec{M}$ rovnoběžné s $\vec{E}$ a $\vec{H}$

Vztah mezi $\vec{E}$ a $\vec{P}$ můžeme vyjádřit pomocí:

$$\vec{P} = \varepsilon_0\left[\chi_e^{(1)}\vec{E} + \chi_e^{(2)}\vec{E}^2 + \chi_e^{(3)}\vec{E}^3 + \ldots\right]$$

(11) Pro náš případ ⇒ lineární prostředí

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_e^{(1)} \vec{E}$$

Dosazením do vztahu pro $\vec{D}$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E} + \varepsilon_0 \chi_e \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} = \varepsilon \vec{E}$$

ε_r ... relativní permitivita

$\varepsilon_r = 1 + \chi_e$

Obdobně pro $\vec{M}$ ... lineární prostředí

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \chi_m^{(1)} \vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H} = \mu \vec{H}$$

$\mu_r = 1 + \chi_m$

- popisují jak materiál reaguje na pole

Vlnová rovnice v prostředí bez volných nábojů a proudů ⇒ dielektrikum

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \qquad \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \qquad \nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{H} = -\mu \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}$$

$$\Delta \vec{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \qquad \frac{1}{v^2} = \mu \varepsilon = \mu_0 \varepsilon_0 \mu_r \varepsilon_r = \frac{1}{c^2} \mu_r \varepsilon_r = \frac{1}{c^2} \cdot n^2$$

↳ index lomu materiálu

řešení ve tvaru

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \qquad k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \cdot n^2$$

⇓

$$\underline{\underline{|k| = \frac{\omega}{c} \cdot n}}$$

Pro viditelné optické frekvence $\mu_r \sim 1$

$$\Rightarrow \underline{\underline{n = \sqrt{\varepsilon_r}}}$$

12

μ_r:

Bi	0,99983	Diamagnetika
Ag	0,99997	
Cu	0,99999	
W	1,00008	Paramagnetika
Al	1,00002	
Mn	1,00083	

Ferromagnetika ⇒ vysoká μ_r ⇒ nelineární vztah mezi $\vec{M}$ a $\vec{H}$

ε_r:

vzduch	1,00054
polystyren	2,6
papír	3,5
porcelán	6,5
sklo	7,6
křemík	12
voda	80 ??

Polarizovatelnost: u molekul $\vec{p} = \alpha \vec{E}$ ← dipól. moment
– deformovatelnost elektronového obalu molekuly

Feroelektrika ⇒ vysoká ε_r ⇒ mají nenulovou spontánní polarizaci

Absorbující / vodivá / prostředí

Doteď $\vec{j} = 0$ protože $\sigma = 0$

Nyní $\sigma \neq 0$ ⇒ vodiče

(13) prostředí bez vnějších zdrojů

M. R.: $\nabla\cdot\vec{E}=0$ $\nabla\cdot\vec{B}=0$

$$\nabla\times\vec{E}=-\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla\times\vec{B}=\mu\vec{j_e}+\mu\varepsilon\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}$$

$$\vec{j_e}=\sigma\vec{E}$$

$$\nabla\times\nabla\times\vec{E}=-\frac{\partial}{\partial t}\left(\nabla\times\vec{B}\right)=-\frac{\partial}{\partial t}\left(\mu\sigma\vec{E}+\mu\varepsilon\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\right)$$

$$-\Delta\vec{E}=-\mu\sigma\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}-\mu\varepsilon\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\boxed{\Delta\vec{E}-\mu\sigma\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}-\mu\varepsilon\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}=0}$$ Telegrafní rovnice

popisuje šíření EM vlny v prostředí s vodivostí σ

V oblasti, kde vodivost není nulová, nemohou být trvale rozložený volné náboje

Důkaz pro homogenní, izotropní, lineární prostředí:

$$\nabla\times\vec{B}=\mu\vec{j}+\mu\varepsilon\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\quad /\nabla\cdot$$

$$\underbrace{\nabla\cdot\left(\nabla\times\vec{B}\right)}_{0}=\mu\nabla\cdot\vec{j}+\mu\frac{\partial}{\partial t}\left(\nabla\cdot\vec{D}\right)$$

$$\nabla\cdot\vec{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$$

$$\nabla\cdot\vec{E}=\frac{\rho}{\varepsilon}$$

$$\nabla\cdot\sigma\vec{E}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$$

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\sigma}{\varepsilon}\rho=0}$$

Řešení: $\frac{d\rho}{\rho}=-\frac{\sigma}{\varepsilon}dt$

$$\rho=\rho_0 e^{-\frac{\sigma}{\varepsilon}t}=\rho_0 e^{-\frac{t}{\tau_D}}$$

(14) $\tau_D = \frac{\varepsilon}{\sigma}$ ... relaxační doba dielektrika

Cu: $\sigma = 6\cdot 10^{8}\,\frac{F}{m\cdot s}$ $\quad \tau_D = \frac{8{,}8\cdot 10^{-12}\cdot 10}{6\cdot 10^{8}} = 1{,}3\cdot 10^{-19}\,s$

$\Rightarrow$ velmi krátká relaxační doba

$\Rightarrow$ $\rho_f = 0 \Rightarrow \nabla\cdot\vec{D} = 0$ oprávněný předpoklad

c.b.d.

$\Rightarrow$ mořská voda $2\times 10^{-10}\,s$

destilovaná voda (špatný vodič) $< 10^{-6}\,s$

$\Rightarrow$ izolanty $\Rightarrow$ křemenné sklo $\Rightarrow$ $10^{6}\,s \Rightarrow \sigma \to 0 \Rightarrow \rho \Rightarrow \rho_0$

1 Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II 27. 2. 12

Řešení telegrafní rovnice:

$$\Delta\vec{E} - \mu\sigma\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} - \mu\varepsilon\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0$$

řešení ve ~~tv~~ tvaru rovinné vlny

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \quad ; \vec{k} = |k|\hat{k} = \frac{\omega}{c}N\hat{k}$$

dosazení do telegrafní rovnice

$$-k^2 + i\mu\sigma\omega + \mu\varepsilon\omega^2 = 0$$

$$k^2 = i\mu\sigma\omega + \mu\varepsilon\omega^2$$

$$\frac{k^2}{\omega^2} = \mu\varepsilon\left(1 + \frac{i\sigma}{\varepsilon\omega}\right) = \frac{N^2}{c^2}$$

$$N^2 = c^2\mu\varepsilon\left(1 + \frac{i\sigma}{\varepsilon\omega}\right) \qquad \mu\varepsilon = \mu_0\varepsilon_0\varepsilon_r\mu_r = \frac{1}{c^2}\varepsilon_r\mu_r$$

$$N^2 = \mu_r\varepsilon_r\left(1 + \frac{i\sigma}{\varepsilon\omega}\right) \dots$$ komplexní index lomu

$\mu_r = 1$

$$N^2 = \varepsilon_r + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega} \quad + \quad N = n + i\varkappa$$ $\varkappa$... index extinkce

z toho plyne:
$$n^2 - \varkappa^2 = \varepsilon_r \quad (1)$$
$$2n\varkappa = \frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \quad (2)$$

Vztah pro n^2:

Vyjádříme $\varkappa$ z (2) $\Rightarrow \varkappa = \dfrac{\sigma}{\omega\varepsilon_0 2n}$ a dosadíme do (1)

$$n^2 - \frac{\sigma^2}{4n^2\omega^2\varepsilon_0^2} = \varepsilon_r$$

$$\Downarrow$$

$$4n^4\omega^2\varepsilon_0^2 - \varepsilon_r 4n^2\omega^2\varepsilon_0^2 - \sigma^2 = 0$$

② kvadratická rovnice pro n^2

$$n_{12}^2 = \frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

$$n^2 = \frac{4\varepsilon_r\omega^2\varepsilon_0^2 + \sqrt{16\varepsilon_r^2\omega^4\varepsilon_0^4 + 16\omega^2\varepsilon_0^2\sigma^2}}{8\omega^2\varepsilon_0^2}$$

$$n^2 = \frac{4\varepsilon_r\omega^2\varepsilon_0^2 + \sqrt{16\omega^4\varepsilon_0^4\left(\varepsilon_r^2+\frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2}\right)}}{8\omega^2\varepsilon_0^2}$$

$$n^2 = \frac{\cancel{4}\varepsilon_r\cancel{\omega^2}\cancel{\varepsilon_0^2} + \cancel{4}\cancel{\omega^2}\cancel{\varepsilon_0^2}\left(\varepsilon_r^2+\frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2}\right)^{1/2}}{2\cancel{4}\cancel{\omega^2}\cancel{\varepsilon_0^2}}$$

$$n^2 = \frac{1}{2}\left[\varepsilon_r + \varepsilon_r\left(1+\frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2\varepsilon_r^2}\right)^{1/2}\right]$$

Obdobně i pro $\varkappa^2$

$$\varkappa^2 = \frac{1}{2}\left[-\varepsilon_r + \varepsilon_r\left(1+\frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2\varepsilon_r^2}\right)^{1/2}\right]$$

σ ... ~~optická~~ při optických frekvencích vodivost

↳ obecně není stejná jako nízkofrekvenční a elektrická vodivost

$N \in \mathbb{C} \Rightarrow \varkappa \in \mathbb{C}$

dosazení komplexního N do ~~ro~~ předpisu pro rovinnou vlnu

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0 e^{i\left(\frac{\omega}{c}N\hat{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} = \vec{E}_0 e^{i\left(\frac{\omega}{c}n\hat{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} e^{-\frac{\omega}{c}\varkappa\hat{k}\cdot\vec{r}}$$

$\Downarrow$

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0 \underbrace{e^{-\frac{\omega}{c}\varkappa\hat{k}\cdot\vec{r}}}_{\text{útlum}} \cos\left(\frac{\omega}{c}n\hat{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)$$

V prostředí s nenulovou vodivostí je EM vlna tlumená. ⇒ absorbce

③ pokud $\sigma = 0 \Rightarrow \varkappa = 0$ a $\varepsilon = n^2$ netlumené šíření

$\Rightarrow$ veškeré optické vlastnosti popsány pomocí $\mu_r, \varepsilon_r \Rightarrow n$

pokud $\sigma \neq 0 \Rightarrow n^2 \neq \varepsilon_r \Rightarrow$ rychlost vlny se definuje jako $\frac{c}{n}$ a ne $\frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r}}$!

Tok energie EM vlny dán Poyntingovým vektorem

$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ ... hustota toku výkonu

$$\vec{B} = \frac{\vec{k} \times \vec{E}_0}{\omega} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

$$\vec{S} = \vec{E} \times \frac{\vec{B}}{\mu_0} \quad (*)$$

$\rightarrow$ bereme v úvahu pouze reálná pole

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\left[\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} + \vec{E}_0^* e^{-i(\vec{k}^*\cdot\vec{r} - \omega t)}\right]$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\left[\frac{\vec{k}\times\vec{E}_0}{\omega} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} + \frac{\vec{k}^*\times\vec{E}_0^*}{\omega} e^{-i(\vec{k}^*\cdot\vec{r} - \omega t)}\right]$$

Po dosazení do $(*)$ $\left[i(\vec{k} - \vec{k}^*) = -2\frac{\varkappa\omega}{c}\hat{k}\right]$

$$\vec{S} = \frac{\hat{k}}{4\mu_0}\left[\frac{k}{\omega}(\vec{E}_0\cdot\vec{E}_0) e^{2i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} + \frac{k}{\omega}(\vec{E}_0\cdot\vec{E}_0^*) e^{-2\frac{\varkappa\omega}{c}\hat{k}\cdot\vec{r}} + c.c.\right]$$

Středování v čase $\rightarrow$ první člen v závorce $\rightarrow 0$ $\Rightarrow$ rapidně osciluje $\Rightarrow$ zůstává pouze druhý člen:

$$\langle \vec{S} \rangle_t = \frac{\hat{k}}{4\mu_0} \frac{k + k^*}{\omega}(\vec{E}_0\cdot\vec{E}_0^*) e^{-2\frac{\varkappa\omega}{c}\hat{k}\cdot\vec{r}} =$$

$$= \frac{\hat{k}}{2\cancel{4}\mu_0} \frac{\frac{\omega}{c}\cdot n}{\omega}(\vec{E}_0\cdot\vec{E}_0^*) e^{-2\frac{\varkappa\omega}{c}\hat{k}\cdot\vec{r}} = \frac{\hat{k}\,\varepsilon_0 n}{2\,\underbrace{\mu_0\varepsilon_0 c}_{\frac{1}{c}}}(\vec{E}_0\cdot\vec{E}_0^*) e^{-2\frac{\varkappa\omega}{c}\hat{k}\cdot\vec{r}}$$

(4) $$\langle \vec{S} \rangle_t = \hat{k}\, \frac{n\varepsilon_0 c}{2}\left(\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0^*\right) e^{-2\frac{\omega\varkappa}{c}\hat{k}\cdot\vec{r}}$$

Intenzita záření:

$$I = \frac{n\varepsilon_0 c}{2}\left(\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0^*\right) e^{-2\frac{\omega\varkappa}{c}\hat{k}\cdot\vec{r}}$$

$$I = I_0 e^{-\alpha \cdot L} \qquad \alpha = \frac{2\omega\varkappa}{c} = \frac{4\pi\varkappa}{\lambda}$$

α ... absorbční koeficient

$$\alpha = \underbrace{\alpha_{abs}}_{\text{absorbce}} + \underbrace{\alpha_{scatt}}_{\text{rozptyl}}$$

(Př) kovy: $\sigma = 10^7\ \mathrm{1/\Omega m}$; $\lambda = 550\ \mathrm{nm}$

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} = 1{,}1\pi\, 10^{15}\ \mathrm{Hz}$$

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c}\varkappa\hat{k}\cdot\vec{r}} \cos\left(\frac{\omega}{c} n\hat{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)$$

$$\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} = \frac{10^7}{1{,}1\pi \cdot 10^{15} \cdot 8{,}8 \cdot 10^{-12}} \sim 10^3 \gg \varepsilon_r$$

imaginární část N^2 mnohem větší než reálná

úbytek $\vec{E}$: $\sim e^{-\frac{\omega}{c}\varkappa \cdot \ell}$

úbytek na $\frac{1}{e} \Rightarrow \frac{\omega}{c}\varkappa \cdot \ell = 1$

$$\ell = \frac{c}{\omega\varkappa} \text{ ... hloubka vniku (skin depth)}$$

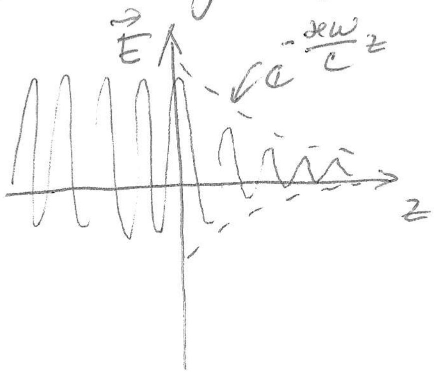
$$\varkappa^2 = \frac{1}{2}\mu_r\left[-\varepsilon_r + \varepsilon_r\left(1 + \frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_0^2\varepsilon_r^2}\right)^{1/2}\right]$$

$$\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \gg \varepsilon_r \Rightarrow \varkappa^2 = \frac{1}{2}\mu_r\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \Rightarrow \varkappa = \sqrt{\frac{\sigma\mu_r}{2\omega\varepsilon_0}}$$

(5)

$$d = \frac{c}{\omega\kappa} = \frac{c}{\omega\sqrt{\frac{\mu_r\sigma}{2\omega\varepsilon_0}}} = \frac{c}{\sqrt{\frac{\mu_r\sigma\omega}{2\varepsilon_0}}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{\mu_r\sigma\omega\,\varepsilon_0\mu_0}} = \underline{\underline{\sqrt{\frac{2}{\mu_r\mu_0\sigma\omega}}}}$$

skin efekt



$\lambda_0 = 550\ \mathrm{nm} \Rightarrow d \doteq \frac{\lambda_0}{140} \Rightarrow$ velmi rychlý útlum

Cu: $\lambda_0 = 100\ \mathrm{nm} \Rightarrow d = 0.6\ \mathrm{nm}$

$\lambda_0 = 10\ \mu\mathrm{m} \Rightarrow d = 6.7\ \mathrm{nm}$

$\lambda_0 = 10\ \mathrm{cm} \Rightarrow d = 0.6\ \mu\mathrm{m}$

$\lambda_0 = 1\ \mathrm{km} \Rightarrow d = 62\ \mu\mathrm{m}$

komplexní permitivita (dielektrická funkce), optická vodivost, susceptibilita

- popis odezvy materiálu různými veličinami
- dosud pomocí n a κ

M.R.

$$\nabla\cdot\vec{D} = \rho_f \qquad \nabla\times\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla\cdot\vec{B} = 0 \qquad \nabla\times\vec{H} = \vec{j}_f + \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}$$

& nemagnetická prostředí

$$\vec{D} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P} \quad \& \quad \vec{P} = \varepsilon_0\chi\vec{E}$$

$$\underbrace{\nabla\times\vec{H} - \varepsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}}_{\text{nenulové všude (i ve vakuu)}} = \underbrace{\vec{j}_f + \frac{\partial\vec{P}}{\partial t}}_{\text{nenulové pouze v nějakém prostředí}}$$

Levá strana rovnice: předpokládané řešení
$\Rightarrow$ rovinná vlna $\Rightarrow \vec{E}, \vec{H}, \vec{P} \sim e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$

$$\Rightarrow L.S. = \sigma\vec{E} - i\varepsilon_0\chi\omega\vec{E} = \hat{\sigma}\vec{E}$$

$\hat{\sigma}$ ... komplexní opt. vodivost

$$\hat{\sigma} = \sigma_1 + i\sigma_2 = \sigma - i\omega\varepsilon_0\chi$$

⑥ $LS = \frac{i\sigma}{\omega}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \varepsilon_0 \chi \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \varepsilon_0 \hat{\chi} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ ... zintegrované $\sigma \cdot \vec{E}$ pro $\vec{E} \sim e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$

$\hat{\chi} = \chi + \frac{i\sigma}{\omega \varepsilon_0}$ .... komplexní susceptibilita

Permitivita: $\varepsilon_r = 1+\chi$

$\Rightarrow \hat{\varepsilon}_r = 1 + \hat{\chi} = 1 + \chi + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} = \varepsilon_r + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} \Rightarrow$ komplexní rel. permitivita (dielektrická fce)

$\hat{\varepsilon}_r = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$

Vzájemné vztahy:

$\sigma_1 = \sigma$; $\sigma_2 = -\omega\varepsilon_0\chi = -\omega\varepsilon_0(\varepsilon_r - 1)$

$\varepsilon_1 = \varepsilon_r$; $\varepsilon_2 = \frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \Rightarrow \varepsilon_1 = 1 - \frac{\sigma_2}{\omega\varepsilon_0}$; $\varepsilon_2 = \frac{\sigma_1}{\omega\varepsilon_0}$

$\sigma_1 = \omega\varepsilon_2\varepsilon_0$; $\sigma_2 = (1-\varepsilon_1)\omega\varepsilon_0$

$$\left.\begin{array}{l} n^2 - \varkappa^2 = \mu_r \varepsilon_1 \\ 2n\varkappa = \mu_r \varepsilon_2 \end{array}\right\} \Rightarrow n^2 = \frac{\mu_r}{2}\left[\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1\right]$$

$$\varkappa^2 = \frac{\mu_r}{2}\left[\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1\right]$$

$$\alpha = \frac{2\omega\varkappa}{c} = \mu_r \frac{\omega\varepsilon_2}{n \cdot c} = \mu_r \cdot \frac{\sigma_1}{n c \varepsilon_0}$$

Typy prostředí:

- lineární: $\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E}$
- izotropní: χ
- anizotropní: $\overleftrightarrow{\chi} = \begin{bmatrix} \chi_{xx} & \chi_{xy} & \chi_{xz} \\ \chi_{yx} & \chi_{yy} & \chi_{yz} \\ \chi_{zx} & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{bmatrix}$
- homogenní: $\chi \neq \chi(\vec{r})$
- nehomogenní: $\chi = \chi(\vec{r})$
- disperzní: $\chi = \chi(\omega)$

7) Disperzní prostředí

- doposud jsme se nezabývali spektrální závislostí materiálových parametrů
- disperzní prostředí - fázová rychlost závisí na frekvenci ω
- pokud $\sigma \neq 0$ $\vec{E}$ a $\vec{B}$ nekmitají ve fázi
  ⇒ pokud uvažujeme vysoké frekvence má látka disperzní vlastnosti i pokud je σ zanedbatelně malá.
- do 10^8 Hz je ε_r na ω v podstatě nezávislá ⇒ relaxační doba je kratší než perioda pole
- u nevodičů jsou disperzní vlastnosti spjaty (většinou) pouze s ε_r

⇒ materiál nemůže okamžitě reagovat na podnět

+ princip kauzality ⇒ odpověď materiálu na pole nemůže vzniknout dříve než aplikace pole.

- odezva látky popsána $\hat{\varepsilon}, \hat{\sigma}, \hat{N}, \hat{\chi}$ ⇒ komplexní čísla ⇒ komplexní funkce odezvy materiálu
  ⇒ vždy disipace energie či fázová změna (změna fáze) při interakci EM vlny s látkou

⇒ lze odvodit vztahy mezi reálnou a imaginární složkou odezvové fce

(9) – časově proměnné EM pole ⇒ procesy v látce probíhají s ~~konečnou~~ rychlostí ⇒ zpoždění polarizace za příslušnou intenzitou pole

Obecně máme odpověď na ~~vyvolanou~~ vnější podnět popsanou:

response of the system

stimulus

$$\hat{X}(\vec{r},t)=\iint_{-\infty}^{\infty}\hat{G}(\vec{r},\vec{r}',t,t')\,\hat{f}(\vec{r}',t')\,d\vec{r}'dt'$$

$\hat{G}$ … funkce odezvy (může být $\hat{\varepsilon},\hat{\sigma},\hat{\chi},\ldots$)

$\hat{f}$ … funkce podnětu ($\vec{E},\ldots$)

Časová ~~kauzalita~~ invariance ⇒ volba časového počátku nemění $\hat{G}$ ⇒ $\hat{G}(t,t')=\hat{G}(t-t')$

Omezení na prostorově ~~nedisperzní~~ homogenní prostředí ⇒ lokální aproximace odezva závisí pouze na podnětu ve stejném místě v prostoru

$$\Rightarrow \hat{G}(\vec{r},\vec{r}',t,t')=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\,\hat{G}(t-t')$$

$\lambda \gg a$

neplatí pro plazmu

Časová kauzalita: $\hat{G}(t-t')=0$ pro $t<t'$

⇒ omezí $\int_{-\infty}^{\infty}dt'$ na $\int_{-\infty}^{t}dt'$

Homogenní prostředí

$$\hat{X}(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\hat{G}(t-t')\hat{f}(t')dt'$$

⇒ Spektrální reprezentace: F. T.

$$\hat{f}(\omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\hat{f}(t)\,e^{i\omega t}dt$$

$$\hat{X}(\omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\hat{X}(t)\,e^{i\omega t}dt$$

$$\hat{G}(\omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}G(t-t')\,e^{i\omega(t-t')}dt$$

konvoluce ⇒ $\hat{X}(\omega)=\hat{G}(\omega)\hat{f}(\omega)$

⑨ $\hat{G}(\omega)$ ... frekvenčně závislá (zobecněná) susceptibilita

- reálná část popisuje útlum, imaginární část fázovou změnu (fázový rozdíl) mezi $\hat{x}$ a $\hat{f}$

Matematika: (pro matematické metody) zavedeme komplexní frekvenci

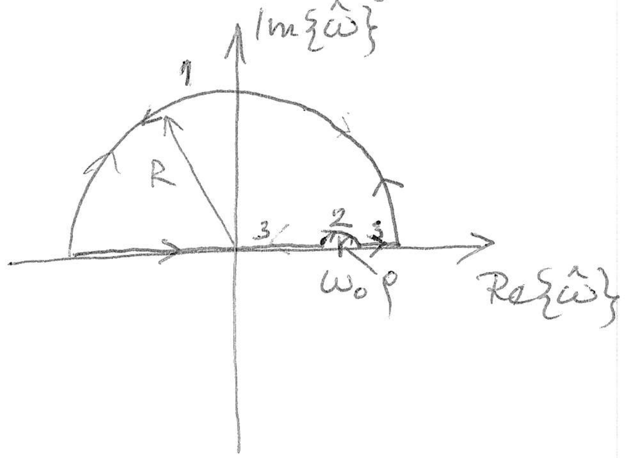
$\hat{\omega} = \omega_1 + i\omega_2$

Potom:

$$\hat{G}(\hat{\omega}) = \int \hat{G}(t-t') e^{i\omega_1(t-t')} e^{-\omega_2(t-t')} dt$$

Druhý člen $e^{-\omega_2(t-t')}$ určuje jestli je fce v horní či dolní polorovině $\Rightarrow t<t'$ (kauzalita) $\hat{G}(\omega)$ určená v horní polorovině (všude konečná).

Uvažujme integrační cestu:



Cauchyho teorém

$$\oint_C h(z')dz' = 0$$

↑ holomorfní

Cauchyho věta o reziduu $\Rightarrow \oint_C \frac{\hat{G}(\hat{\omega}')}{\hat{\omega}'-\hat{\omega}_0} d\hat{\omega}' = 0$ (holomorfní uvnitř C)

integrál lze rozepsat jako

$$\underbrace{\int_1 \frac{\hat{G}(\hat{\omega}')}{\hat{\omega}'-\hat{\omega}_0} d\hat{\omega}'}_{} + \underbrace{\int_2 \frac{G(\hat{\omega}')}{\hat{\omega}'-\hat{\omega}_0} d\hat{\omega}'}_{-\pi G(\hat{\omega}_0)} + \underbrace{\int_3 \frac{\hat{G}(\hat{\omega}')}{\hat{\omega}'-\hat{\omega}_0} d\hat{\omega}'}_{} = 0$$

pokud $R \to \infty$

$\hat{\omega}' \to \infty \Rightarrow \hat{G} \to 0$

$\Downarrow$

0

integrál ve smyslu hlavní hodnoty

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(\hat{\omega}')}{\hat{\omega}'-\hat{\omega}_0} d\hat{\omega}'$$

$$P\int \frac{\hat{G}(\omega')}{\hat{\omega}' - \hat{\omega}_0}\, d\hat{\omega}'$$

$$\hat{\omega}' - \hat{\omega}_0 = \rho e^{i\varphi}$$

$$\omega' = \omega_0 + \rho e^{i\varphi}$$

$$d\omega' = i\rho e^{i\varphi} d\varphi$$

$$\int_{-\pi}^{0} \frac{G(\omega')}{\cancel{\rho e^{i\varphi}}}\, i\cancel{\rho e^{i\varphi}} d\varphi = i G(\omega') \int_{\pi}^{0} d\varphi = \underline{\underline{-i\pi G(\omega')}}$$

(10) Druhý integrál:

Sruber

$$\hat{\omega}' = \hat{\omega}_0 + \rho e^{i\varphi}$$

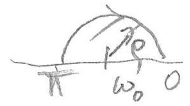
$$\int_{\rho} \frac{\hat{G}(\hat{\omega}')}{\hat{\omega}' - \hat{\omega}_0} d\hat{\omega}'$$

použijeme: $\hat{\omega}' - \hat{\omega}_0 = \rho e^{i\varphi}$

potom $d\hat{\omega} = +i\rho e^{i\varphi} d\varphi$

Potom pro $\rho \to 0$

$$+\int_{\pi}^{0} \hat{G}(\hat{\omega}_0)\, i\, d\varphi = -i\pi \hat{G}(\hat{\omega}_0)$$



$\Rightarrow$ dostaneme: ($\hat{\omega}_0 \to \hat{\omega}$)

$$i\pi \hat{G}(\omega) = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

principal value

$$\hat{G}(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

Víme že: $\hat{G}(\omega) = G_1(\omega) + iG_2(\omega)$

Potom:
$$G_1(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

$$G_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_1(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

Kramersovy - Krönigovy relace (Kramers 1927, Krönig 1926 } nezávisle)

- G_1 a G_2 jsou vzájemné Hilbertovy transformace

Doposud pouze matematické odvozování

Nyní spojení s materiálem: Konečná rychlost odezvy materiálu $\Rightarrow \chi, \varepsilon$, atd jsou fce ω

(11)
$$\vec{P}(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{t} \underbrace{\cancel{f}(t-t')}_{} \vec{E}(\vec{r},t')\,dt' \Rightarrow \text{předp. kauzalita}$$

paměťová fce / fce odezvy

$$\parallel$$

$$\varepsilon_0 \chi(t-t')$$

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

$$\Rightarrow \vec{P}(\omega) = \varepsilon_0 \underbrace{(\varepsilon_r - 1)}_{\chi} \vec{E}(\omega) \dots$$ lokální, lineární, synchronní vztah

předpokládáme: $E \sim e^{-i\omega t}$

$t - t' = u \quad dt' = -du$

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \int_0^\infty \chi(u) \vec{E}_0(\vec{r}) e^{-i\omega(t-u)}\,du$$

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \underbrace{\vec{E}_0(\vec{r}) e^{-i\omega t}}_{} \varepsilon_0 \int_0^\infty \chi(u) e^{i\omega u}\,du$$

instant

okamžitá hodnota $\vec{E}(\vec{r},t)$

~~... přeznačení~~

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \vec{E}(\vec{r},t)\, \varepsilon_0 \underbrace{\hat{\chi}(\omega)}_{\int_0^\infty \chi(u) e^{i\omega u}\,du} \Rightarrow \vec{P}(\omega) = \varepsilon_0 \hat{\chi}(\omega) \vec{E}(\omega)$$

F. T.

$$\Rightarrow \hat{\chi}(\omega) = \int_0^\infty \chi(t') e^{i\omega t'}\,dt' \Rightarrow \text{disperze}$$

Okamžitá odezva:

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{t} \chi(t-t') \delta(t-t') E(\vec{r},t')\,dt'$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \chi \vec{E}(\vec{r},t) \Rightarrow$$ pokud by odezva prostředí byla "nekonečně rychlá", bylo by prostředí nedisperzní

(12)

$$\hat{\chi}(-\omega) = \int_0^\infty \chi(t') e^{-i\omega t'} dt' = \hat{\chi}^*(\omega)$$

$$\hat{\chi}(-\omega) = \chi^*(\omega) \Rightarrow \left.\begin{aligned} \chi_1(-\omega) &= \chi_1(\omega) \\ \chi_2(-\omega) &= -\chi_2(\omega) \end{aligned}\right\} (*)$$

K. K. relace

$$\chi_1(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

$$\chi_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_1(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

S užitím (*) můžeme vyloučit záporné frekvence

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx = P \int_0^\infty \frac{x[f(x) - f(-x)] + a[f(x) + f(-x)]}{x^2 - a^2} dx$$

$$\chi_1(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \chi_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$\chi_1(\omega) \leftrightarrow \sigma(\omega)$

$$\chi_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\chi_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

Dielektrická funkce:

$$\hat{\chi}(\omega) = \hat{\varepsilon}_r(\omega) - 1$$

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

5.3. '12

① Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II

Kramers-Krönigovy relace - pokračování

Výsledek K-K relací ⇒ pokud <u>není absorbce v celém spektrálním oboru</u> ($\varepsilon_2(\omega)=0$) není frekvenční závislost ε_1 ⇒ <u>není disperze</u> ⇒ $\varepsilon_1(\omega)=1$

K-K relace pro komponenty kompl. indexu lomu $N = n(\omega) + i\varkappa(\omega)$

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varkappa(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\varkappa(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{n(\omega) - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

Případ kovů: $\vec{j}$ je úměrné $\vec{E}$ vzhledem k Ohmovu zákonu ⇒ $\hat{\sigma}$ ... funkce odezvy

$$\sigma_1(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \sigma_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\sigma_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_1(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\sigma_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\left.\begin{aligned} \sigma_1 &= \omega \varepsilon_2 \varepsilon_0 \\ \sigma_2 &= (1-\varepsilon_1)\omega\varepsilon_0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \omega \varepsilon_2 \varepsilon_0 = -\frac{2}{\pi\omega} P \int_0^\infty \frac{\omega'^2 (\varepsilon_1 - 1)\varepsilon_0}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$(\varepsilon_1 - 1)\omega\varepsilon_0 = \frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2 \varepsilon_0}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

② S použitím

$$P\int_0^\infty \frac{1}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega' = 0 \quad \text{přepíšeme}$$

K.K. pro $\varepsilon_2(\omega)$

$$\int_0^\infty \frac{\omega'^2[\varepsilon_1(\omega')-1]}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega' = \int_0^\infty \frac{\omega'^2[\varepsilon_1(\omega')-1]}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega' + \omega^2\overbrace{\int_0^\infty \frac{1}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega'}^{0}$$

$$= \int_0^\infty \frac{\omega'^2[\varepsilon_1(\omega')-1]+\omega^2+\varepsilon_1(\omega')\omega^2-\varepsilon_1(\omega')\omega^2}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega' =$$

$$= \int_0^\infty \frac{[1-\varepsilon_1(\omega')](\omega'^2-\omega^2)-\varepsilon_1(\omega')\omega^2}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega' \overset{(*)}{=} \int_0^\infty [1-\varepsilon_1(\omega')]\,d\omega' - \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')\omega^2}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega'$$

Statická vodivost: $\omega \to 0 \Rightarrow \sigma_{dc}$ a $\sigma_2 = (1-\varepsilon_1)\omega\varepsilon_0$

$$\sigma_{dc} = \sigma_1(0) \qquad \sigma_1(\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\omega'}{\omega'^2-\omega^2}(1-\varepsilon_1)\omega'\varepsilon_0\,d\omega'$$

$$\sigma_1(0) = \frac{2\varepsilon_0}{\pi}\int_0^\infty [1-\varepsilon_1(\omega')]\,d\omega' = \sigma_{dc}$$

Potom z (*):

$$\varepsilon_2(\omega) = +\frac{2}{\pi\omega}\left[\underbrace{P\int_0^\infty [1-\varepsilon_1(\omega')]\,d\omega'}_{\frac{\pi\sigma_{dc}}{2\varepsilon_0}} - P\int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')\omega^2}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega'\right]$$

$$\Rightarrow \varepsilon_2(\omega) = +\frac{\sigma_{dc}}{\omega\varepsilon_0} - \frac{2\omega}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}\,d\omega'$$

Pro materiály s $\sigma_{dc} \neq 0$ imaginární část $\hat{\varepsilon}$ diverguje pro $\omega \to 0$

③ Pro izolanty $\sigma_{dc} = 0 \Rightarrow$ klasické k.k. relace

Kauzalita a disperze: viz obrázek ①

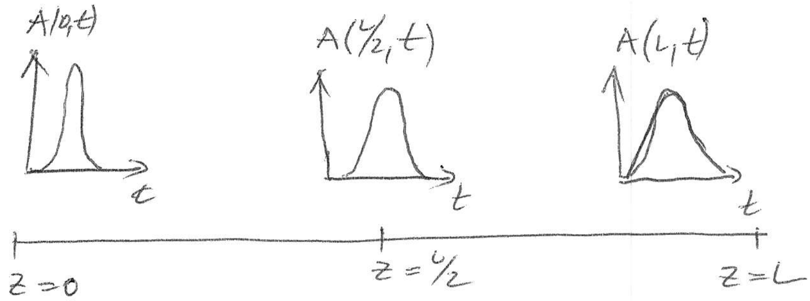
- pokud systém ovlivňuje pouze $1\omega \Rightarrow$
  $\Rightarrow$ odověď materiálu existuje před dopadající vlnou

- K-K relace jsou nelokální ve frekvenci
  $\Rightarrow$ reálná/imaginární odezvy na jedné frekvenci je určena imaginární/reálnou částí odezvy na celém frekvenčním rozsahu
  $\Rightarrow$ to vede k nepřesnostem v určování optických konstant pomocí k.k. relací z experimentálních dat. $\Rightarrow$ možnost kvalitativních odhadů pokud jedna ze složek vykazuje silnou frekvenční závislost u vybraných frekvencí
- obrázek ② $\Rightarrow$ obrázek ③ - disperze H_2O
- oblast $dn/d\omega > 0$ normální disperze
- oblast $dn/d\omega < 0$ anomální disperze

$\Rightarrow$ rezonance v látce - veliká změna indexu lomu $\Rightarrow$ úzká absorbce

- k indexu lomu na frekvenci ω přispívají i všechny rezonance s $\omega_r > \omega$
- každá rezonance na ω_r přispívá ke všem frekvencím $\omega < \omega_r$

④ Disperze má za následek rozšiřování pulzů:



Pulz s centrální frekvencí ω_0 se šíří v disperzním prostředí s grupovou rychlostí $\vec{v}_g = \frac{d\omega}{dk}$

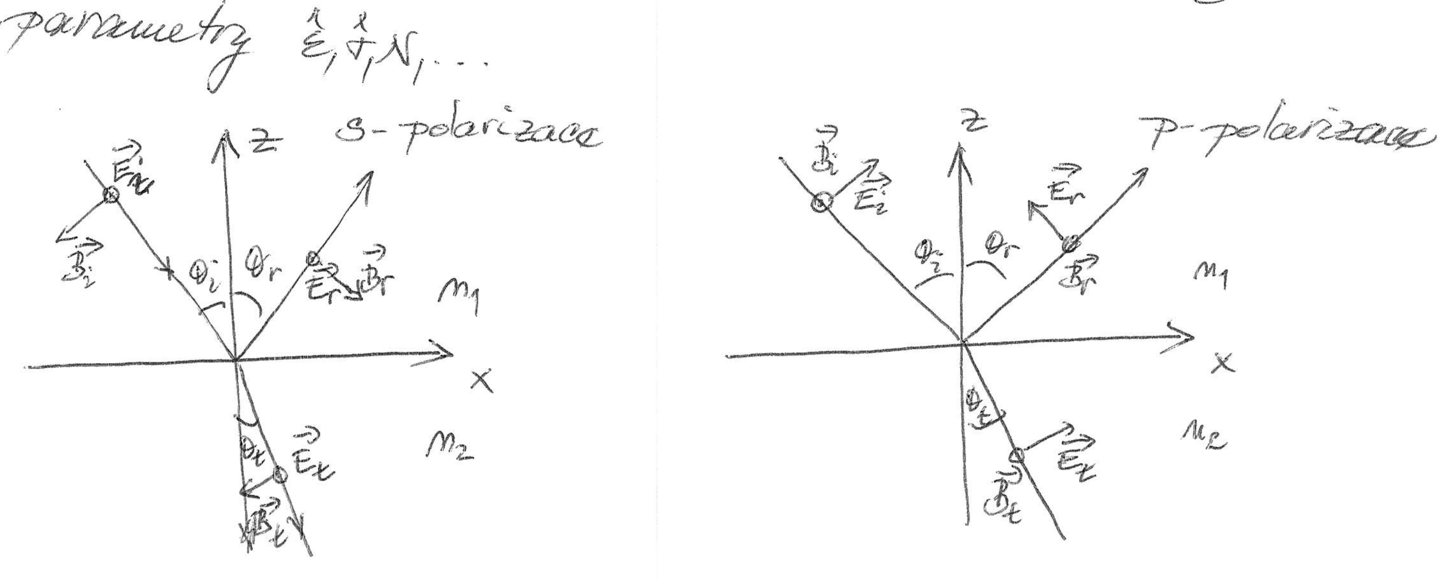
fázová rychlost centrální frekvence: $\vec{v}_p = \hat{k} \cdot \frac{c}{n(\omega_0)}$

$$\Rightarrow v_g = \frac{c}{\left[n(\omega_0) + \omega_0 \frac{\partial n(\omega_0)}{\partial \omega}\right]}$$

$\Rightarrow$ v disperzním prostředí se pulz natahuje protože spektrální komponenty se šíří s rozdílnými rychlostmi v_g

Odraz a lom na rovinném rozhraní

- rozhraní $\Rightarrow$ mění se skokově materiálové parametry $\hat{\varepsilon}, \hat{\mu}, N, \ldots$



⑤ Okrajové podmínky: spojitost tečných složek

s-polarizace:

$$\overleftrightarrow{E}_{0i} + \overleftrightarrow{E}_{0r} = \overleftrightarrow{E}_{0t} \; ; \; \overleftrightarrow{B}_{0i} \cos\theta_i - \overleftrightarrow{B}_{0r} \cos\theta_r = \overleftrightarrow{B}_{0t} \cos\theta_t$$

p-polarizace:

$$B_{0i} + B_{0r} = B_{0t} \; ; \; -E_{0i} \cos\theta_i + E_{0r} \cos\theta_r = -E_{0t} \cos\theta_t$$

M.R.: $\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \Rightarrow \vec{k} \times \vec{E} = \omega \vec{B}$

$$\frac{\omega}{c} n \hat{k} \times \vec{E}_0 = \omega \vec{B}_0$$

$$\hat{k} \times \vec{E}_0 = \frac{c}{n} \vec{B}_0$$

$$\underline{\underline{\overleftrightarrow{E}_0 = \frac{c}{n} B_0}}$$

Potom platí:

s-polarizace: $E_{0i} + E_{0r} = E_{0t}$ & $n_1 E_{0i} \cos\theta_i - n_1 E_{0r} \cos\theta_r = n_2 E_{0t} \cos\theta_t$

p-polarizace: $n_1 E_{0i} + n_1 E_{0r} = n_2 E_{0t}$

& $-E_{0i} \cos\theta_i + E_{0r} \cos\theta_r = -E_{0t} \cos\theta_t$

Vyjádření z jedné rovnice a dosazení do druhé:

s-polarizace:

$$r_s = \frac{E_{0r}}{E_{0i}} = \frac{n_1 \cos\theta_i - n_2 \cos\theta_t}{n_1 \cos\theta_i + n_2 \cos\theta_t}$$

$$t_s = \frac{E_{0t}}{E_{0i}} = \frac{2 n_1 \cos\theta_i}{n_1 \cos\theta_i + n_2 \cos\theta_t}$$

p-polarizace:

$$r_p = \frac{E_{0r}}{E_{0i}} = \frac{n_2 \cos\theta_i - n_1 \cos\theta_t}{n_2 \cos\theta_i + n_2 \cos\theta_t}$$

$$t_p = \frac{E_{0t}}{E_{0i}} = \frac{2 n_1 \cos\theta_i}{n_2 \cos\theta_i + n_1 \cos\theta_t}$$

Fresnellovy rovnice

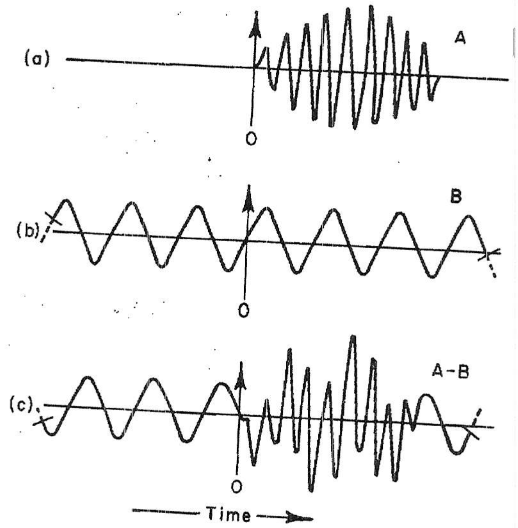


Fig. 6.2 This figure illustrates schematically the basic reason for the logical connection of causality and dispersion. (a) An input A which is zero for times t less than zero is formed as a superposition of many Fourier components (b) such as B, each of which extends from $t = -\infty$ to $t = \infty$. These components produce the zero-input signal by destructive interference for $t < 0$. It is impossible to design a system which absorbs just the component B without affecting other components, for in this case, the output (c) would contain the complement of B during times before the onset of the input wave, in contradication with causality. Thus causality implies that absorption of one frequency must be accompanied by a compensating shift of phase of other frequencies; the required phase shifts are prescribed by the dispersion relation. [From J. S. Toll, *Phys. Rev.* 104, 1760 (1965).]

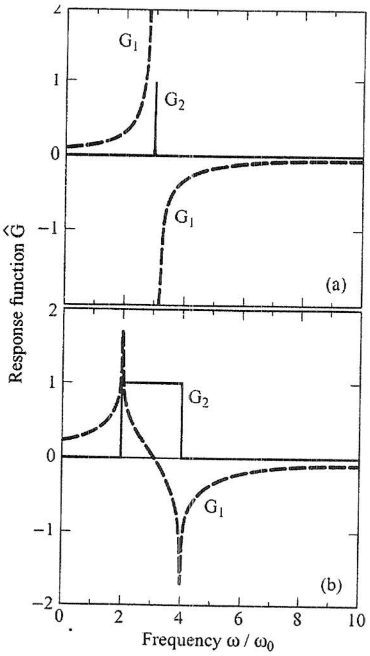
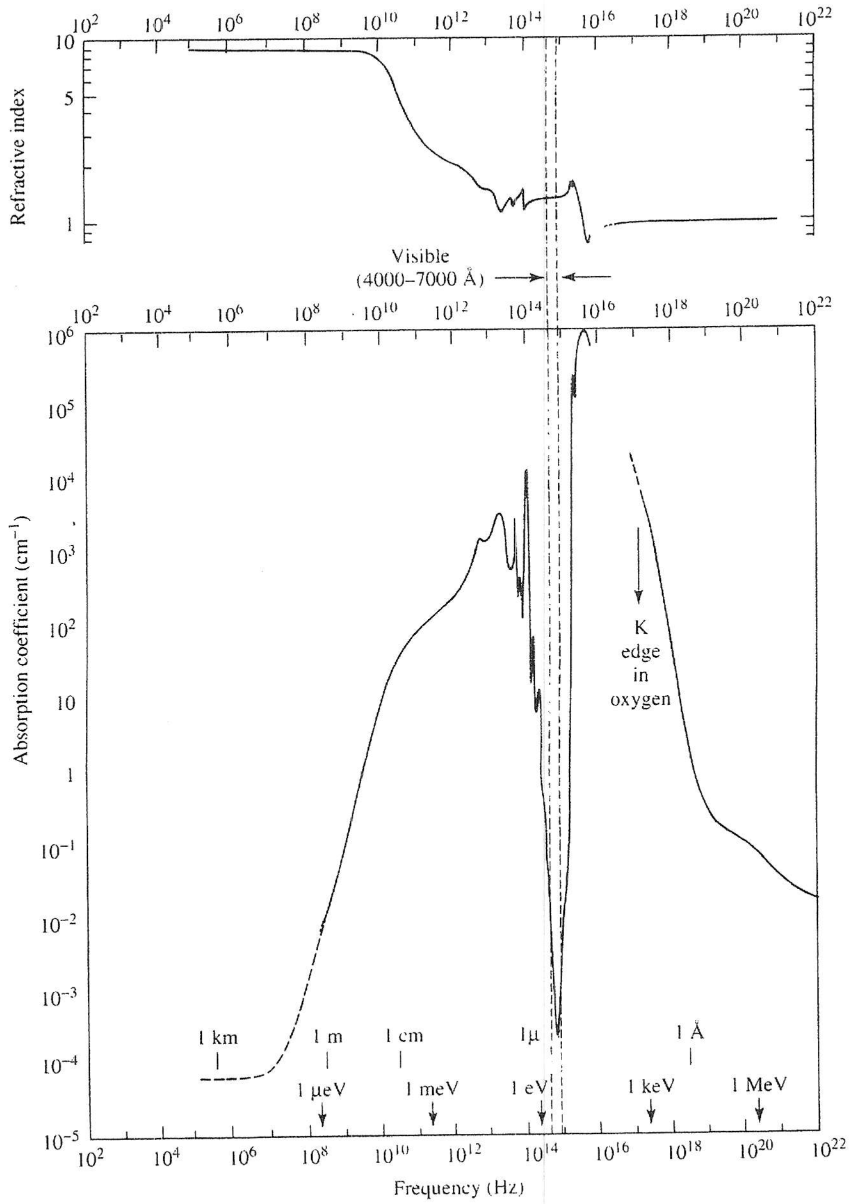


Fig. 3.3. Frequency dependence of the complex response function $\hat{G}(\omega) = G_1(\omega) + iG_2(\omega)$. (a) For $G_2(\omega) = \delta\{3\omega_0\}$ (solid line) the corresponding component $G_1(\omega)$ diverges as $1/(3\omega_0 - \omega)$ (dashed line). (b) The relationship between the real and imaginary parts of a response function if $G_2(\omega) = 1$ for $2 < \omega < 4$ and zero elsewhere.



igure 2.1 (a) Refractive index of water vs frequency. (b) Absorption coefficient of water
Reproduced from Figure 7.9, Jackson [13] with permission from John Wiley & Sons Inc.)

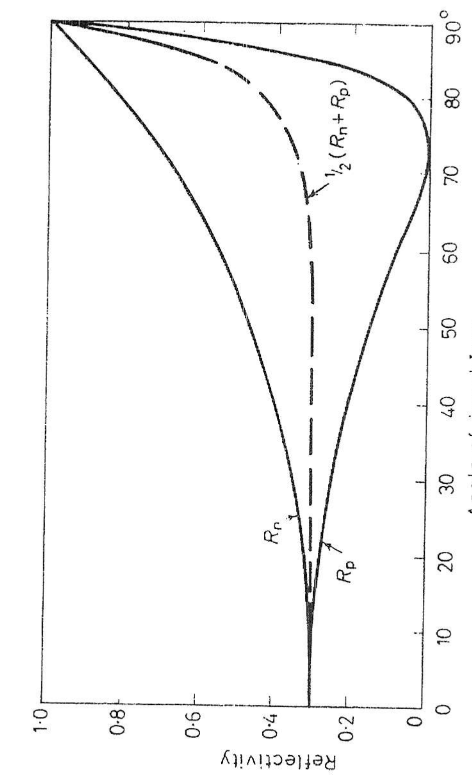


Figure 1.2. Theoretical reflection coefficients for pure Si

5

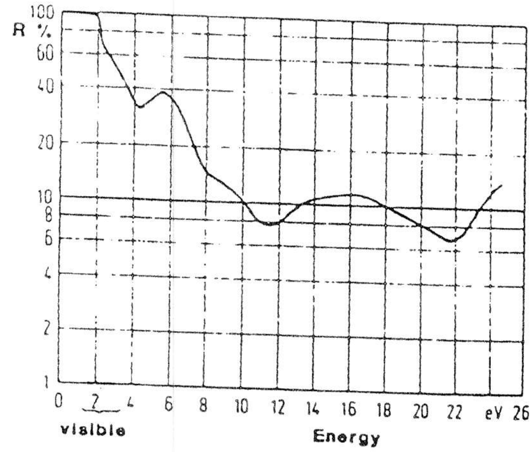


Figure 13.10. Reflectivity spectrum for copper. Adapted from Ehrenreich, H. et al., *IEEE Spectrum* 2, 162. © 1965 IEEE.

6

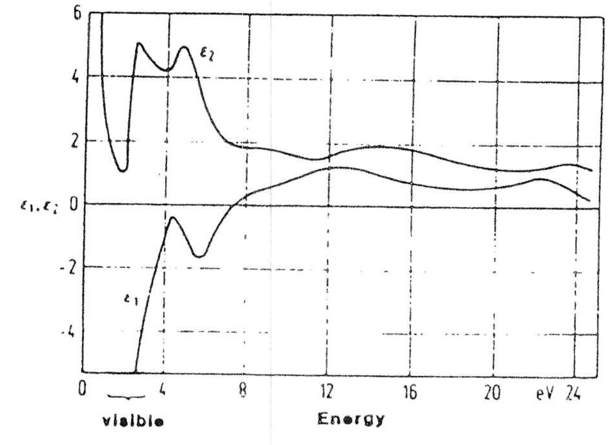


Figure 13.11. Spectral dependence of ε_1 and ε_2 for copper. ε_1 and ε_2 were obtained from Fig. 13.10 by a Kramers–Kronig analysis. Adapted from Ehrenreich, H., et al., *IEEE Spectrum* 2, 162. © 1965 IEEE.

1

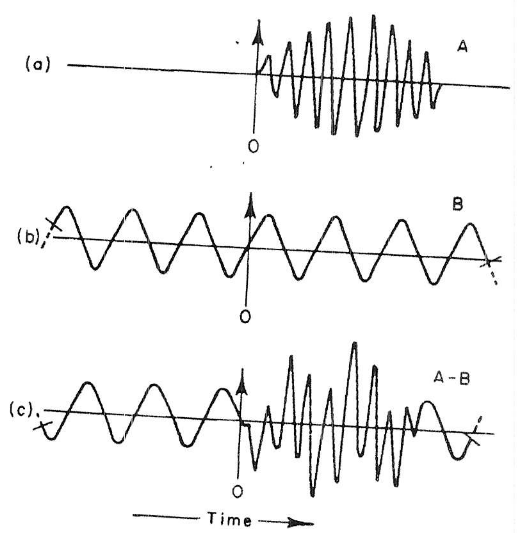


Fig. 6.2 This figure illustrates schematically the basic reason for the logical connection of causality and dispersion. (a) An input A which is zero for times t less than zero is formed as a superposition of many Fourier components (b) such as B, each of which extends from $t = -\infty$ to $t = \infty$. These components produce the zero-input signal by destructive interference for $t < 0$. It is impossible to design a system which absorbs just the component B without affecting other components, for in this case, the output (c) would contain the complement of B during times before the onset of the input wave, in contradication with causality. Thus causality implies that absorption of one frequency must be accompanied by a compensating shift of phase of other frequencies; the required phase shifts are prescribed by the dispersion relation. [From J. S. Toll, *Phys. Rev.* 104, 1760 (1965).]

2

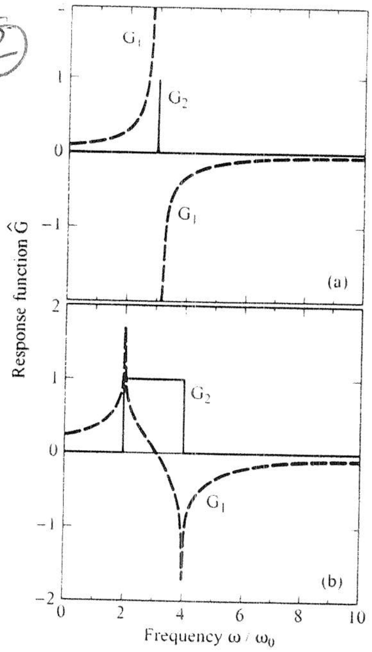


Fig. 3.3. Frequency dependence of the complex response function $\hat{G}(\omega) = G_1(\omega) + iG_2(\omega)$. (a) For $G_2(\omega) = \delta(3\omega_0)$ (solid line) the corresponding component $G_1(\omega)$ diverges as $1/(3\omega_0 - \omega)$ (dashed line). (b) The relationship between the real and imaginary parts of a response function if $G_2(\omega) = 1$ for $2 < \omega < 4$ and zero elsewhere.

3

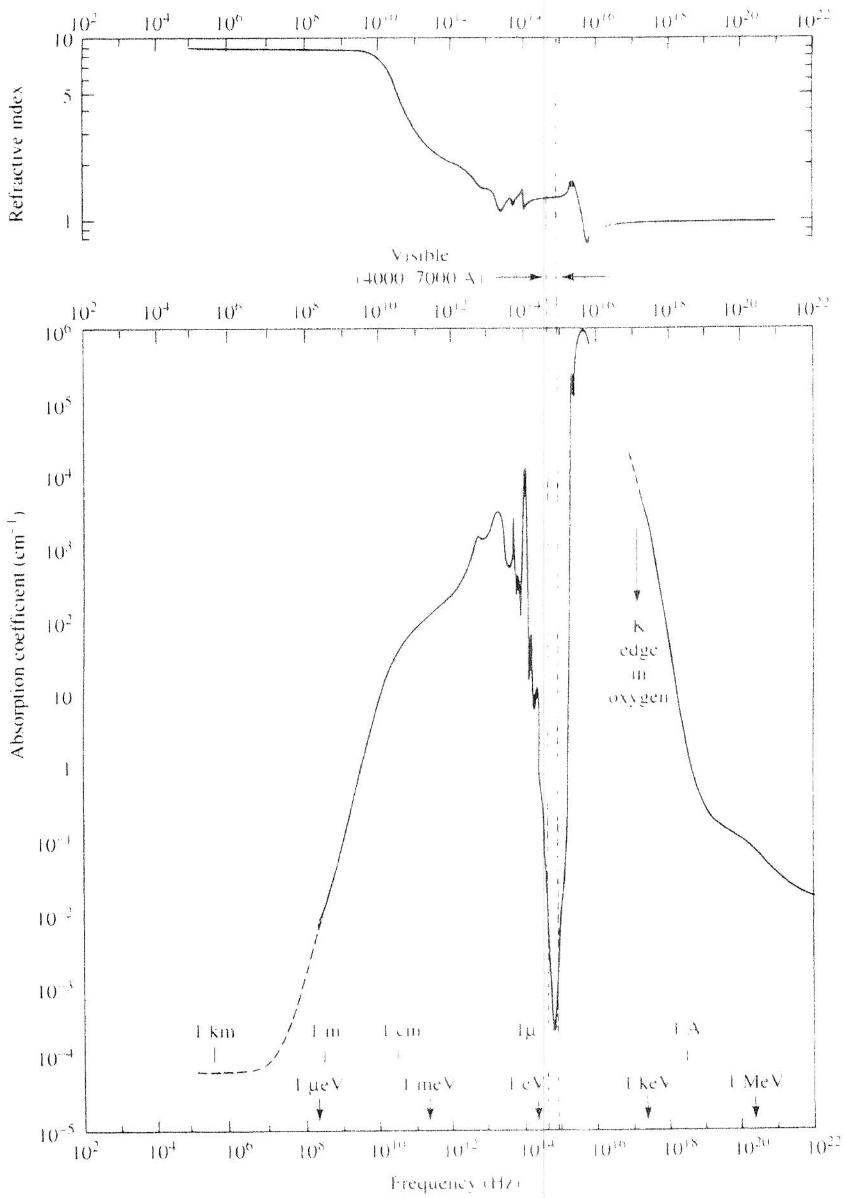


Figure 2.1 (a) Refractive index of water vs frequency. (b) Absorption coefficient of water (Reproduced from Figure 7.9, Jackson [13] with permission from John Wiley & Sons Inc.)

4

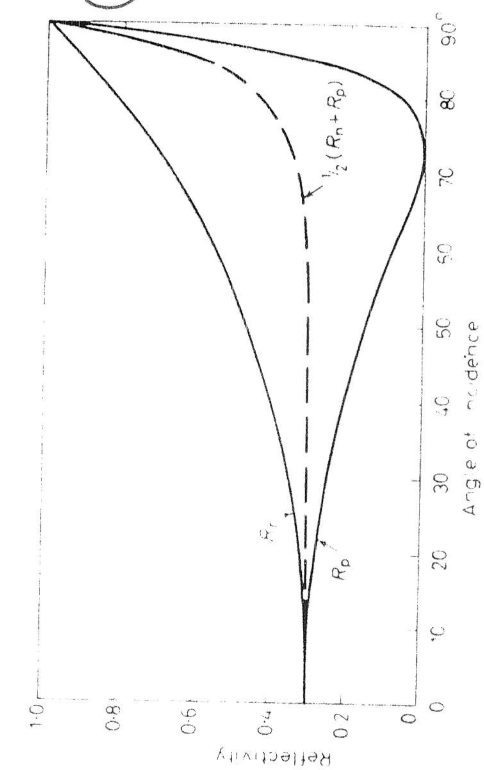


Figure 1.2. Theoretical reflection coefficients for pure Si

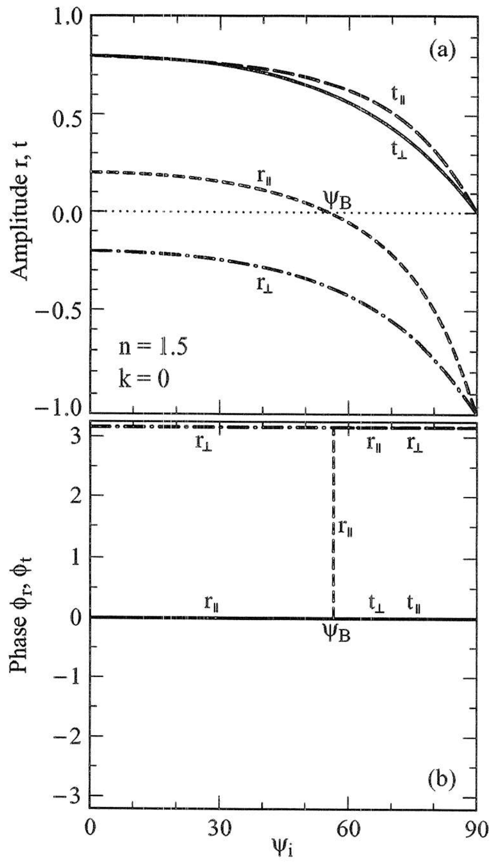


Fig. 2.5. (a) The (real) reflection and transmission coefficients, r and t (in both polarizations parallel and perpendicular to the plane of incidence) as a function of angle of incidence ψ_i for $n = 1.5$, $n' = 1$, $k = k' = 0$, and $\mu_1 = \mu_1' = 1$. The Brewster angle is defined as $r_{\parallel}(\psi_B) = 0$. (b) The corresponding phase shifts, ϕ_r and ϕ_t, of the reflected and transmitted waves; here $\psi_t = 0$ and $\psi_r = \pi$ for the electric field perpendicular to the plane of incidence (referred to as $r_{\perp}$ and $t_{\perp}$). In the case of **E** parallel to the plane of incidence ($r_{\parallel}$ and $t_{\parallel}$), ψ_t remains zero, while the phase ψ_r changes by π at the Brewster angle ψ_B.

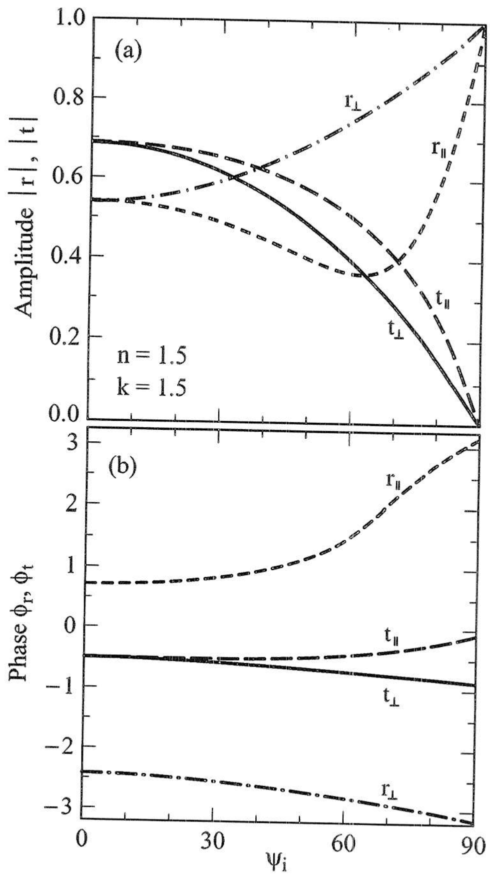


Fig. 2.6. (a) The absolute values of the reflection and transmission coefficients, $|r|$ and $|t|$, as a function of angle of incidence ψ_i in polarizations parallel and perpendicular to the plane of incidence. Besides the refractive index $n = 1.5$, the material also has losses described by the extinction coefficient $k = 1.5$; again $n' = 1$, $k' = 0$, and $\mu_1 = \mu_1' = 1$. (b) The angular dependences of the corresponding phase change upon reflection, ϕ_r, and transmission, ϕ_t. The different cases are indicated by $r_{\parallel}$, $t_{\parallel}$, $r_{\perp}$, and $t_{\perp}$, respectively.

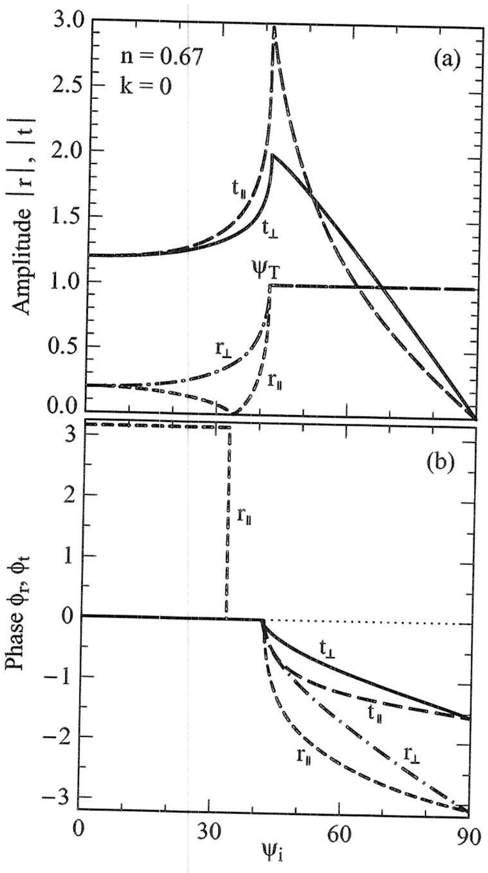
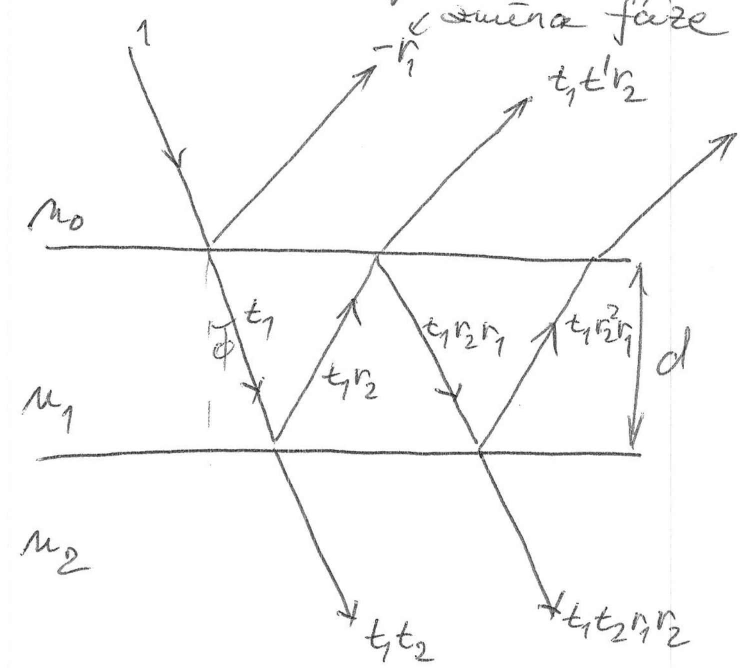


Fig. 2.7. (a) The absolute values of the reflection and transmission coefficients, $|r|$ and $|t|$, in polarizations parallel and perpendicular to the plane of incidence, as a function of angle of incidence ψ_i for $n/n' = 1/1.5$ and $\mu_1 = \mu_1' = 1$. The Brewster angle $r_{\parallel}(\psi_B) = 0$ and the angle of total reflection ψ_T is clearly seen. (b) The phase angles ϕ_r and ϕ_t change significantly in the range of total reflection. The case of **E** parallel to the plane of incidence is referred to as $r_{\parallel}$ and $t_{\parallel}$, while $r_{\perp}$ and $t_{\perp}$ refer to **E** perpendicular to the plane, respectively.

Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II

Odraz a lom na planparalelní desce s uvážením mnohonásobných odrazů

- pokud tloušťka destičky malá vzhledem k absorbci + planparalelní ⇒ mnohonásobné odrazy vedou ke konstruktivní nebo destruktivní interferenci ⇒ maxima a minima v ~~interferenci~~ reflektivitě nebo propustnosti ⇒ velmi přesné určení optických konstant
- umožní stanovení n nezávisle na k u absorbujícího prostředí



$n_0 < n_1 > n_2$

fázová změna při jednom průchodu:

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} n_1 \cdot d \cdot \cos\phi$$

odražený svazek: $r = -r_1 + t_1t_1'r_2e^{+2i\delta} + t_1t_1'r_1r_2^2e^{4i\delta} + t_1t_1'r_1^2r_2^3e^{6i\delta} + \dots$

prošlý svazek: $t = t_1t_2e^{i\delta} + t_1t_2r_1r_2e^{3i\delta} + t_1t_2r_1^2r_2^2e^{5i\delta} + \dots$

⇒ geometrické řady

Tedy: $r = -r_1 + t_1t_1'r_2e^{+2i\delta}(1 - r_1r_2e^{2i\delta})^{-1}$

(2)

$$t = t_1 t_2 e^{i\delta}(1 - r_1 r_2 e^{2i\delta})^{-1}$$

Pokud $n_0 = n_2 \Rightarrow t_2 = t'$ a $r_1 = r_2 \Rightarrow t_1 t' = 1 - r_1^2$

$$\Rightarrow r = -r_1 + \frac{r_1(1-r_1^2)e^{2i\delta}}{(1-r_1^2 e^{2i\delta})} = -\frac{r_1(1-r_1^2 e^{2i\delta}) + r_1(1-r_1^2)e^{2i\delta}}{(1-r_1^2 e^{2i\delta})} = \frac{-r_1 + r_1 e^{2i\delta}}{1-r_1^2 e^{2i\delta}}$$

$$t = \frac{(1-r_1^2)e^{i\delta}}{(1-r_1^2 e^{2i\delta})}$$

Airyho formule

$1 - r_1^2 e^{2i\delta} = 0 \Rightarrow$ opt. vlnovod

maximum propustnosti: pokud fázová ~~změna~~ je celým násobkem $\frac{\lambda}{2}$

- pokud $e^{2i\delta} = 1 \Rightarrow \delta = M\pi \Rightarrow t_{max} = e^{+i\delta}$

$2n_1 d \cos\phi = (M+\frac{1}{2})\lambda$ ... maximum reflektivity

$e^{2i\delta} = -1 \Rightarrow \delta = (M+\frac{1}{2})\pi$

$$r_{max} = -r_1 - \frac{r_1(1-r_1^2)}{(1+r_1^2)} = -\frac{2r_1}{(1+r_1^2)}$$

$$t_{min} = \frac{(1-r_1^2)e^{i\delta}}{(1+r_1^2)}$$

kolmý dopad:

$T = t \cdot t^*$ & $R = r \cdot r^*$

$$\Rightarrow R_{max} = \frac{4r_1^2}{(1+r_1^2)^2} \;;\; T_{min} = \frac{(1-r_1^2)^2}{(1+r_1^2)^2} \;;\; T_{max} = 1$$

$\Rightarrow$ pozorování interferenčních proužků

- důležitý poměr T_{max}/T_{min}

(3) pro typický polovodič

$n_1 \sim 3$ + vzduch $\Rightarrow r_1 = \frac{(n_1-1)}{(n_1+1)} = \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{T_{max}}{T_{min}} \sim 3$

$\Rightarrow$ pro polovodiče dobře pozorovatelná interference

$\Rightarrow$ kontrast zredukován pokud je materiál absorbující

$\Rightarrow$ pro určení indexu lomu z interferenčních maxim nastává problém ohledně řádu maxima $\Rightarrow$ měření dvou maxim

$\Rightarrow$ potom: $\left.\begin{aligned} 2nd &= M\lambda_1 \\ 2nd &= (M+1)\lambda_2 \end{aligned}\right\}$ dvě maxima propustnosti

$\Rightarrow 2nd\lambda_2 - 2nd\lambda_1 = M\lambda_1\lambda_2 - (M+1)\lambda_1\lambda_2$

$$\underline{\underline{2nd = \frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_2-\lambda_1}}}$$

$\Rightarrow$ pouze pro lineární závislost n na λ

- např: InSb od 9 μm do 20 μm

Pokud je prostředí absorbující:

$\delta = \delta \mp i\beta$; kde $\beta = \frac{2\pi}{\lambda}\varkappa d = \frac{1}{2}\alpha d$

dosazení do rovnic pro r a t

Pro absorbující prostředí $\Rightarrow$ reflexní experimenty

④ Reflexní spektroskopická elipsometrie

- Experimentální uspořádání ⇒ viz obr ①
- měření při šikmém dopadu
- měření změny polarizačního stavu světla po odrazu
- měření odrazivosti pro p- a s- vlnu
- elipsometrická rovnice:

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \frac{|r_p|}{|r_s|} e^{i\Delta} = \tan\psi \, e^{i\Delta}$$

$$\Delta = \delta_p - \delta_s \; ; \; \tan\psi = \frac{|r_p|}{|r_s|}$$

⇒ + nové poznámky

⇒ nulovací metoda PSCA

- fixní ~~polarizátor~~ kompenzátor / polarizátor ⇒ rotující ~~kompenzátor~~ polarizátor / kompenzátor a analyzátor (najdu takové Δ, aby výstup byl lineárně polarizován) ⇒ rotující analyzátor ⇒ nuluji intenzitu na detektoru (najdu ψ)
- zjištění optických konstant:

model $\rightarrow \frac{r_p}{r_s} \rightarrow$ fituji do $\tan\psi \, e^{i\Delta}$

Reflektometrie

- uspořádání vakuového reflektometru ⇒ viz obr. ②

5 - velmi vysoká citlivost na kvalitu povrchu vzorku (stejné i u elipsometrie)
↳ světlo nevniká příliš hluboko do vzorku (vysoký absorbční koef. $10^4 - 10^6\ cm^{-1}$)

- citlivost na oxidaci povrchu i znečistění
⇒ atomárně čisté povrchy ⇒ ve vakuu
⇒ viz obr. 3

⇒ typická spektra reflektivity a z nich vypočtená ε ⇒ viz obr. 4 a 5 pro Si a Ge

Fenomenologický model pevné látky

- pevná látka - obsahuje vázané a volné elektrony
- popis pomocí dvou základních modelů Lorentzova a Drudeho
- Lorentzův model ⇒ aplikovatelný na nevodiče
↳ analogie přímých mezipásových přechodů
- Drudeho model ⇒ kovy s volnými elektrony
↳ analogie vnitropásových přechodů

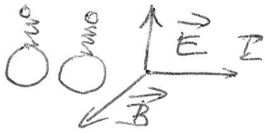
⑥

Lorentzův model pevné látky

- mezipásová absorpce - změna E, ale ne B

- pevná látka je souborem atomárních oscilátorů

- elektron je "svázán" s jádrem jako přes "pružinu" spring



- aproximace → jádro atomu má nekonečnou hmotnost (jinak musíme počítat s redukovanou hmotností elektronu)

- Lorentzova síla:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \underbrace{\vec{v} \times \vec{B}}_{})$$

v našem případě zanedbáme ⇒ rychlost elektronu mnohem menší než rychlost světla

Pohybová rovnice:

damping term, spring term, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} + m\Gamma\frac{d\vec{r}}{dt} + m\omega_0^2\vec{r} = -q\vec{E}_{loc}$$

$\vec{E}_{loc}$ ... lokální pole působící na elektron

$m\Gamma\frac{d\vec{r}}{dt}$ ... útlumový člen (radiační útlum, → u izolovaných atomů; rozptylové mecha~~z~~nismy) ↳ také u pevné látce)

$m\omega_0^2\vec{r}$ ... vazebný člen ↳ Hookův zákon

$\vec{E}_{loc} \sim e^{-i\omega t}$

(7) Předpokládáme $\vec{r}(t) = \vec{r}_0 e^{-i\omega t}$ a dosadíme do pohybové rovnice:

Ansatz (konzistentní s $\hat{N} = n + i\kappa$)

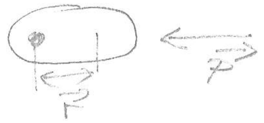
$$-m\omega^2 \vec{r} - im\Gamma\omega\vec{r} + m\omega_0^2 \vec{r} = -q\vec{E}_{loc}$$

$$\vec{r} = \frac{-q\vec{E}_{loc}}{-m\omega^2 - im\omega\Gamma + m\omega_0^2}$$

$$\vec{r} = \frac{-q\,\vec{E}_{loc}/m}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega}$$

- elektron je vychýlen - indukuje se dipólový moment

$$\vec{p} = -q\cdot\vec{r} \Rightarrow \vec{p} = \frac{q^2\vec{E}_{loc}}{m}\frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega}$$



- předpokládáme r malé tak, že platí

$$\vec{p} = \underbrace{\hat{\alpha}(\omega)}_{\text{atomární polarizabilita}} \vec{E}_{loc}$$

$\Rightarrow$ pro jednoelektronový atom: $\hat{\alpha}(\omega) = \frac{q^2}{m}\frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega}$

- komplexní díky útlumu $\rightarrow$ polarizace se liší fází od E_{loc} na všech frekvencích
- pokud je N atomů v jednotkovém objemu, potom je makroskopická polarizace:

$$\vec{P} = N\langle\vec{p}\rangle = N\hat{\alpha}\langle\vec{E}_{loc}\rangle = \hat{\chi}_e\vec{E}$$

Obecně $\langle\vec{E}_{loc}\rangle \neq \vec{E}$ $\rightarrow$ $\langle\vec{E}_{loc}\rangle$ pouze přes atomy $\Rightarrow$ ne přes mezery

$\Rightarrow$ $\vec{P}$ komplexní $\Rightarrow$ $\vec{P}, \vec{D}, \vec{E}$ nejsou ve fázi

(8) Vztah pro permitivitu:

$$\hat{\varepsilon} = 1 + \chi_e = 1 + N\hat{\alpha}$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\varepsilon} = 1 + \frac{Nq^2}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega}$$

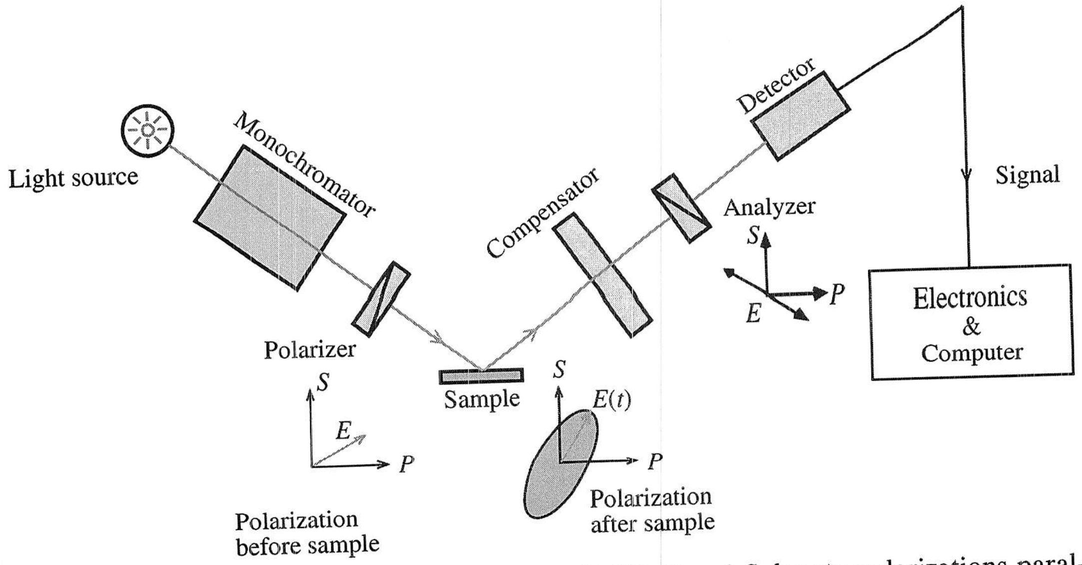


Fig. 6.3. Schematic diagram of an ellipsometer [6.13]. *P* and *S* denote polarizations parallel or perpendicular to the plane of incidence, respectively

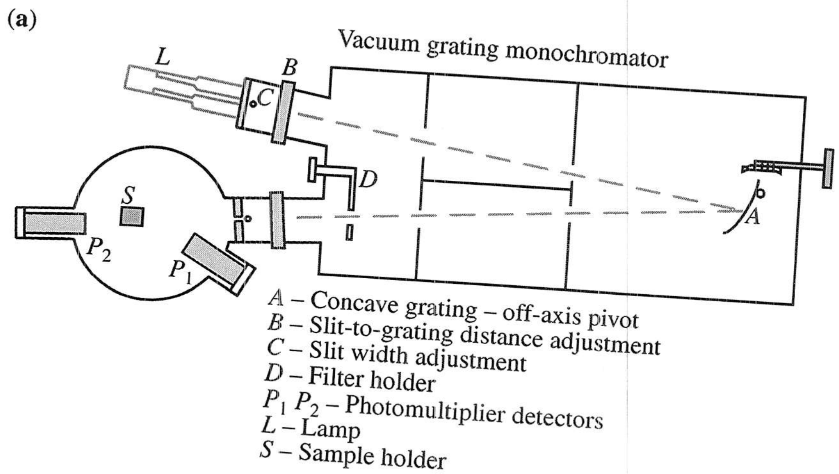


Fig. 6.4. (**a**) The vacuum reflectometer used by *Philipp* and *Ehrenreich* [6.14] to measure the normal incidence reflectance of semiconductors from about 1 to 20 eV. (**b**) Detailed construction of the gas discharge lamp they used

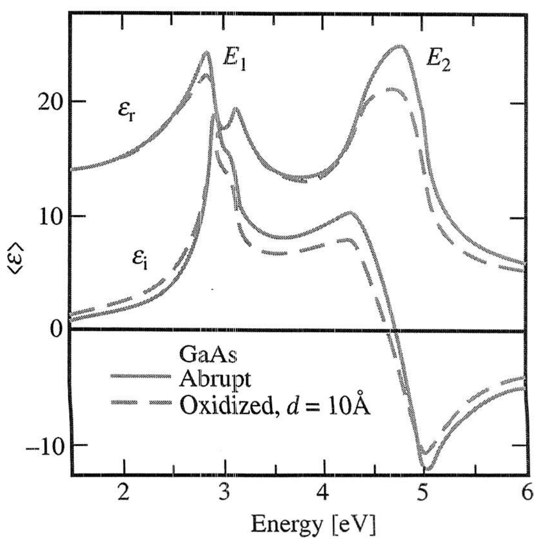


Fig. 6.2. The real and imaginary parts of the dielectric function of GaAs measured by ellipsometry. The *solid curve*, labeled "abrupt", was obtained for an atomically clean surface, the *broken* one for a surface covered by an oxide layer. [6.12]

(4)

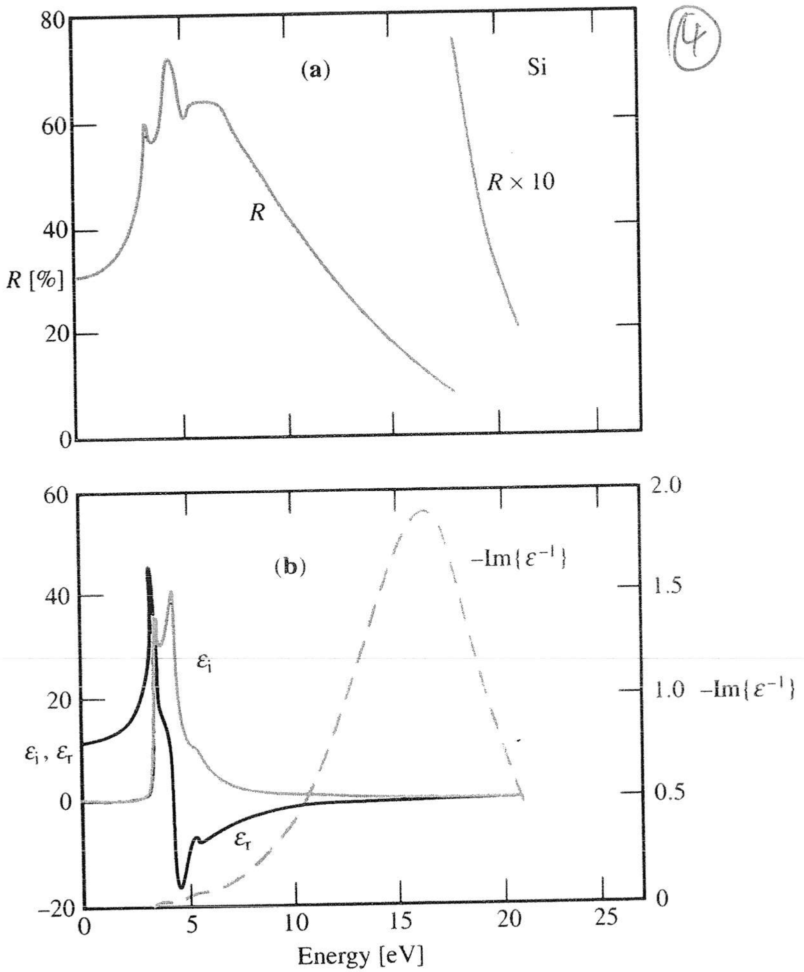


Fig. 6.6. (a) Reflectance curve of Si measured at room temperature. **(b)** The real (ε_r) and imaginary (ε_i) parts of the dielectric function and the imaginary part of $(-1/\varepsilon)$ (known as the energy loss function) of Si deduced from the reflectivity curve in **(a)** using the Kramers–Kronig relation [6.14]. Notice that the peak of $\mathrm{Im}\{-1/\varepsilon\}$, occurs at the plasma energy of the valence electrons (Problem 6.3)

(5)

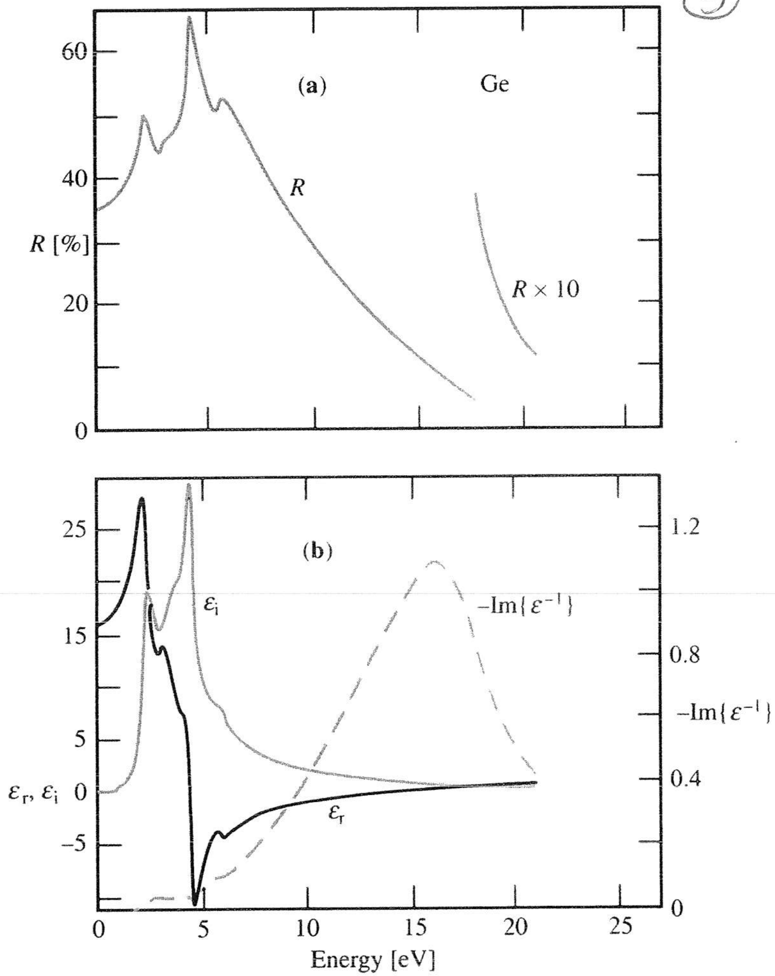


Fig. 6.7a,b. Curves for Ge similar to those for Si in Fig. 6.6

Fyzika polovodičů pro optoelektroniku

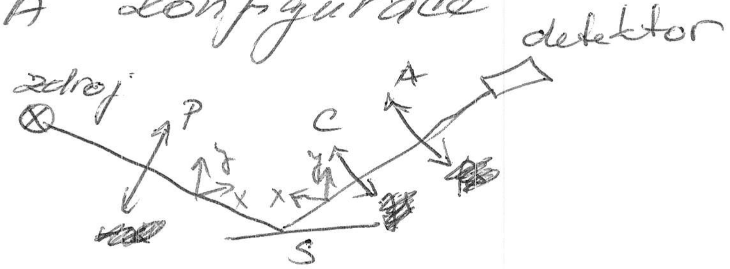
Spektroskopická elipsometrie

viz. starší poznámky

- výhoda ⇒ nezávisí na intenzitě světla
  ⇒ pouze na polarizačním stavu

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \frac{|r_p|}{|r_s|} e^{i\Delta} = \tan\Psi \, e^{i\Delta}$$

PSCA konfigurace



Jonesův formalismus:

izotropní

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\delta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\delta}{2}} \end{bmatrix} \qquad S = \begin{bmatrix} r_s & 0 \\ 0 & r_p \end{bmatrix}$$

matice rotace

$$R(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

Intenzita na výstupu:

$$I^{ex} = I^{in} (\vec{J}^{el})^{\dagger} \vec{J}^{el} = I^{in} |L|$$

$$\vec{J}^{el} = P R(\overset{A}{\cancel{P}} - C) C(\delta) R(C) S R(-P) \vec{J}^{in}$$

po výpočtu

$$L = r_s \cos P \left[e^{i\delta} \cos C \cos(A - C) - \sin C \sin(A - C) \right] + r_p \sin P \left[\cos C \sin(A - C) + e^{i\delta} \sin C \cos(A - C) \right]$$

② Nulovací elipsometrie

$\Rightarrow L = 0$ potom je lepší $\bar{\Omega} = \Omega - \frac{\pi}{2}$

$\bar{P} = P - \frac{\pi}{2}$

$$L = r_s \sin\bar{P}\left[e^{i\delta}\cos C \sin(\bar{\Omega} - C) - \sin C \cos(\bar{\Omega} - C)\right] +$$
$$+ r_p \cos\bar{P}\left[\cos C \cos(\bar{\Omega} - C) + e^{i\delta} \sin C \sin(\bar{\Omega} - C)\right]$$

Pokud $L = 0$ potom $\rho = \frac{r_p}{r_s} =$

$$= -\tan\bar{P}\,\frac{\tan C + e^{i\delta}\tan(\bar{\Omega} - C)}{1 - e^{i\delta}\tan C \tan(\bar{\Omega} - C)}$$

kompenzátor $\Rightarrow$ čtvrtvlnná destička $\Rightarrow \delta = \frac{\pi}{2}$ a dvě fixní polohy $C = \pm\frac{\pi}{4}$

$$\Rightarrow \rho = -\tan\bar{P}\,\frac{\pm 1 + i\tan(\bar{\Omega} \mp \frac{\pi}{4})}{1 \mp i\tan(\bar{\Omega} \mp \frac{\pi}{4})}$$

$$\Rightarrow \tan\Psi e^{i\Delta} = -\tan\bar{P}\, e^{2i(\bar{\Omega} - \frac{\pi}{4})}$$
$$\tan\Psi e^{i\Delta} = \tan\bar{P}\, e^{-2i(\bar{\Omega} - \frac{\pi}{4})}$$

- 4 různé kombinace polohy pro natočení analyzátor vs. polarizátor $\Rightarrow$ průměrování s nulou na detektoru

① 2.4. '12

FYZIKA POLOVODIČŮ PRO OPTOELEKTRONIKU II

DĚLENÍ PEVNÝCH LÁTEK

Pásová struktura: omezení na krystalické látky

Izolovaný atom ⇒ diskrétní energetické hladiny

např.: $_{3}Li \rightarrow 1s^2 2s^1$

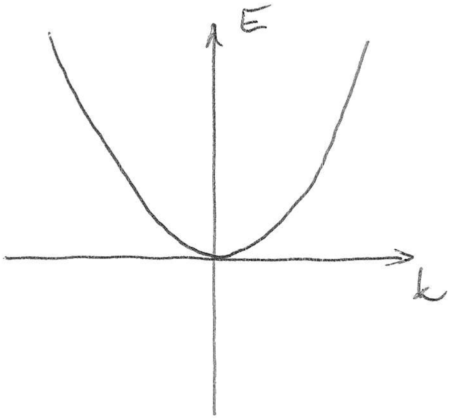
$_{29}Cu \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Pevná látka ⇒ atomy uspořádány v krystalové mříži ⇒ vzdálenosti v řádech ~Å

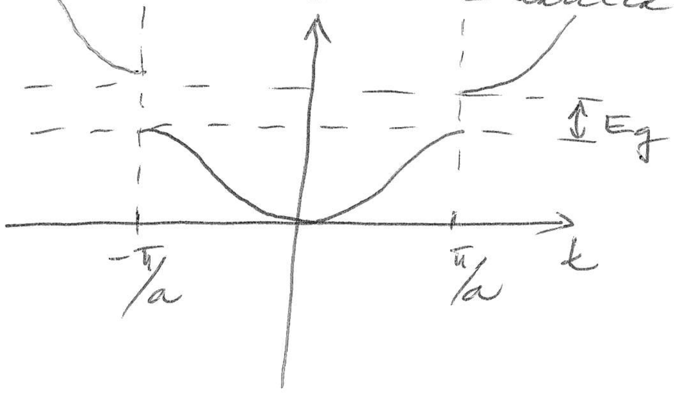
⇒ periodický potenciál atomů ⇒ rozštěpení energetických hladin do pásů ⇒ vznik zakázaných pásů

Viz obr. 1 - Litium

Volný elektron:



1D mřížka
mřížková konstanta a



klasifikace pevných látek z hlediska elektrických vlastností: pomocí tří základních parametrů

1, měrný elektrický odpor (rezistivita) $\rho = \frac{E}{J}$

⇒ vodivost: $\sigma = \frac{1}{\rho}$

② 2) teplotní součinitel měrného odporu α

$\alpha = \frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dT}$ → stanoven měřením teplotní závislosti ρ

3) koncentrace nosičů elektrického náboje n

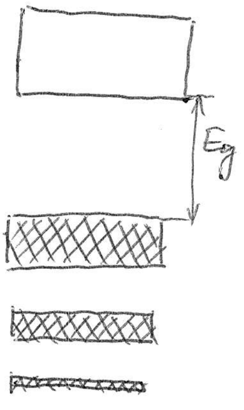
- nejčastěji stanovena měřením Hallova napětí

IZOLÁTORY × KOVY × POLOKOVY × NEKOVY

- dělení podle zaplnění energetických pásů
- obr 2. → periodická tabulka prvků

1) <u>Izolátory</u>: látka která po přiložení elektrického napětí nevede elektrický proud

- dovolené energetické pásy jsou zcela zaplněné nebo prázdné ⇒ elektrony se nemohou pohybovat v přiloženém poli



→ široký zakázaný pás E_g

→ Diamant: $E_g = 5.5\,eV$ ⇒ cca 140x více než střední kinetická energie volné částice při pokojové teplotě

rezistivita typických izolátorů:

sklo: $\rho = 10^{10} - 10^{14}\ \Omega m$

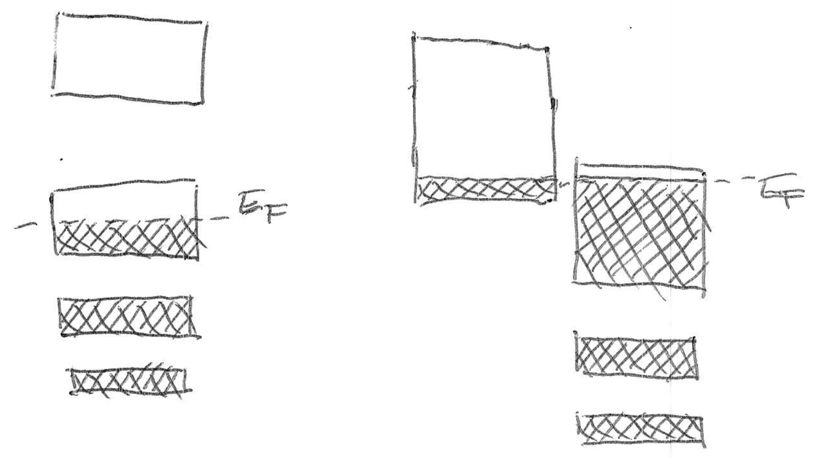
tavený křemen: $\rho \doteq 10^{16}\ \Omega m$

diamant: $\rho = 10^{18}\ \Omega m$

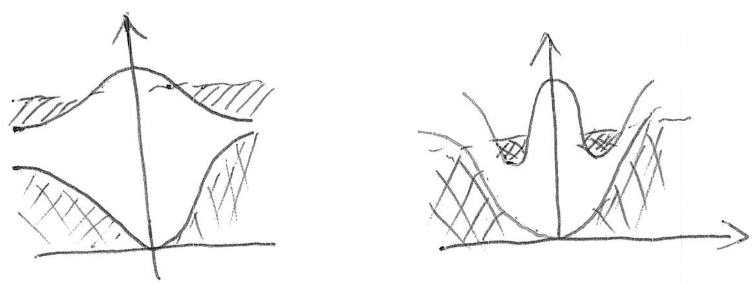
Krystal může být izolátorem pokud je počet valenčních elektronů v primitivní buňce sudé číslo (až na výjimky)

③ 2) kovy: nejvíce prvků v periodické tabulce

- po přiložení pole vedou elektrický proud



E_F … Fermiho energie
⇒ energie nejvyšší zaplněné hladiny v základním stavu



- dobré tepelné a elektrické vodiče (většinou)
- veliký počet volných (vodivostních) elektronů
- obvykle 1 nebo 2 na atom
- metalická vazba ⇒ interakce mezi soustavou kladných nábojů (atomů) ponořených v téměř homogenním moři záporného náboje ⇒ vazby vytvořené vodivostními elektrony nejsou příliš silné (alkalické kovy)
- u některých kovů (přechodné kovy) mají veliké d slupky ⇒ přispívají k vazbě ⇒ vyšší vazebná energie ⇒ např. Fe, W
↳ kovalentní vazba
- krystalizace v těsných uspořádaních (fcc, bcc)

④ Typické hustoty nosičů náboje pro kovy

Li (78 K)	$4{,}7 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$	$E_F = 4{,}72\ \mathrm{eV}$
Na (5 K)	$1{,}4 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$	$E_F = 3{,}23\ \mathrm{eV}$
Cu (RT)	$8.47 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$	$E_F = 7{,}0\ \mathrm{eV}$
Ag (RT)	$5.86 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$	$E_F = 5{,}48\ \mathrm{eV}$
Au (RT)	$5.90 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$	$E_F = 5{,}51\ \mathrm{eV}$
Fe (RT)	$17.0 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$	$E_F = 11{,}1\ \mathrm{eV}$

Typické relaxační časy ~~(273 K)~~ (τ)

	273 K	77 K
Li	$0.88 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$	$7{,}3 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$
Na	$3{,}2 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$	$17 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$
Cu	$2{,}7 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$	$21 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$
Ag	$4{,}0 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$	$20 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$
Au	$3{,}0 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$	$12 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$
Fe	$0{,}24 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$	$3{,}2 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}$

plazmová frekvence: $\omega_p = \sqrt{\dfrac{q^2 N}{m \varepsilon_0}}$

$\Rightarrow$ plazmové frekvence kovů v UV

např. Au – $\omega_p \sim 9\ \mathrm{eV}$ (experiment $8{,}7\ \mathrm{eV}$) $\rightarrow$ obr. 3

Typické hodnoty rezistivity ρ

Ag	$1{,}62 \cdot 10^{-8}\ \Omega\mathrm{m}$	Al	$2{,}75 \cdot 10^{-8}$
Cu	$1{,}69 \cdot 10^{-8}\ \Omega\mathrm{m}$	Fe	$9{,}68 \cdot 10^{-8}$

⑤ Teplotní součinitel rezistivity

Ag $4{,}1 \cdot 10^{-3}\ K^{-1}$
Cu $4{,}3 \cdot 10^{-3}\ K^{-1}$
Al $4{,}4 \cdot 10^{-3}\ K^{-1}$
Fe $6{,}5 \cdot 10^{-3}\ K^{-1}$

kladné ⇒ se vzrůstající teplotou roste odpor (kmity mříže)

Pro nás ~~z~~ z hlediska optických vlastností zajímavé zejména vzácné kovy (noble metals) ⇒ pozor na definici ⇒ pro nás pouze ty, co mají zcela zaplněné d stavy ⇒ nejlépe aplikovatelný model volných elektronů ⇒ pouze Cu, Ag, Au

pásové schéma mědi obr. 4a & 4b

[Ar] = $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Cu: $3d^{10} 4s^1$ - 6 pásů stačí pro 11 elektronů

5 pásů ⇒ úzké rozhraní - 2-5 eV ⇒ d elektrony (těsná vazba)

6. pás ⇒ od ~7 - 9 eV - s elektron

↳ skoro volný elektron

- schematický obrázek pásové struktury vzácného kovu ⇒ obr 5

⑥ d-pás leží pod Fermiho mezí
⇒ a to "dost" hluboko

- spektra reflektivit Ag, Au, Al, ⇒ obr 6.
- rezonance u stříbra ⇒ reflektivita klesne a pak zase stoupne ⇒ mezipásové přechody vázaných elektronů
⇒ d stavy leží 4eV pod E_F
- u Cu d-stavy leží 2 eV
⇒ absorbce Ag začíná ~~na~~ pod 300 nm
absorbce Cu začíná na 600 nm ⇒ červená
⇒ "rozseparování" ε ⇒ obr 7.
- pokud E_F v d-pásu ⇒ mezipásové přechody začínají při nižších energiích ⇒ Ni ⇒ obr 6.
⇒ není vidět plazmová hrana

3, Polovodiče: úzký zakázaný pás
- elektrony se mohou dostat do vodivostního pásu; E_F v zakázaném pásu

rezistivita ρ: čistý Si $2{,}5\cdot 10^{3}\ \Omega m$

Fosfor $n = 10^{23} m^{-3}$ ← n-Si $8{,}7\cdot 10^{-4}\ \Omega m$

p-Si $2{,}8\cdot 10^{-3}\ \Omega m$ → Hliník $n = 10^{23} m^{-3}$

⇒ obr 8.

⑦ teplotní součinitel rezistivity α

Si $\alpha = -70 \cdot 10^{-3}\,K^{-1}$ ⇒ záporný ⇒ s rostoucí teplotou klesá odpor ~~vodivost~~ ⇒ termální excitace nosičů

⇒ není zcela přesná hranice mezi izolátorem a polovodičem $E_g \sim 4\,eV$

⇒ čisté krystaly (bez dopování) při $T = 0\,K$ jsou izolanty ⇒ při vzrůstající teplotě ~~začínají~~ ~~rezistivi~~ začínají vést ⇒ vlastní vodivost

Si: bandgap 1,124 eV (1,170 při 0 K)

$n = 1{,}45 \cdot 10^{10}\,cm^{-3}$ (RT) intrin.

Donory: Sb, P, As

Akceptory: B, Al, Ga, In } okolo "polovodivé čáry"

- optické procesy: pokud je dopovaný
⇒ volné elektrony ⇒ Drudeho model plazm. frekvence v IČ
- není tolik elektronů jako v kovu

obr. 9 ⇒ InSb

- mezipásové přechody ⇒ ve viditelné a UV oblasti

- na rozdíl od kovů výrazný podíl iontové vazby (stejně jako u izolantů)

8) ⇒ rozkmitá se mříž ⇒ sousední ionty kmitají proti sobě ⇒ dipól ⇒ mřížková reflexe ⇒ Reststrahlen band ⇒ v ní ⇒ oblast 100% reflexe

⇒ další mechanismy ⇒ viz obr.

4) Polokovy:

- s překryvem pásů ⇒ Bi, grafit
- s nulovým překryvem ⇒ HgTe, grafen

grafen ⇒ Dirac cone

Metalloid vs. semimetal vs. half metal

BiSe

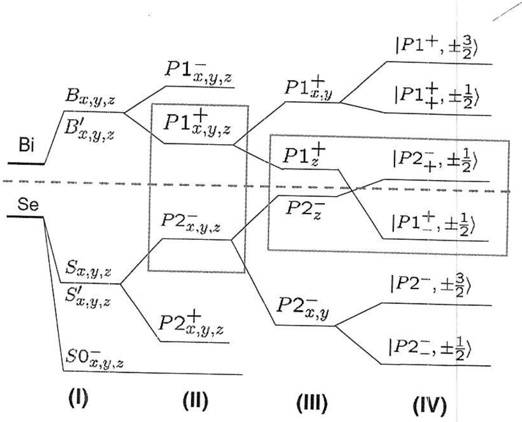
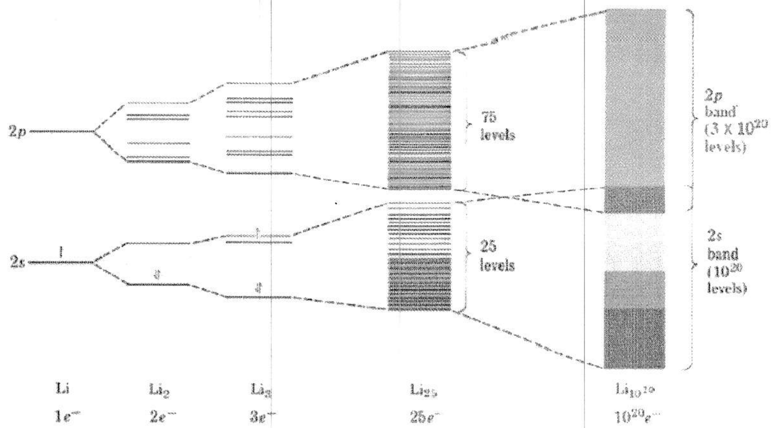
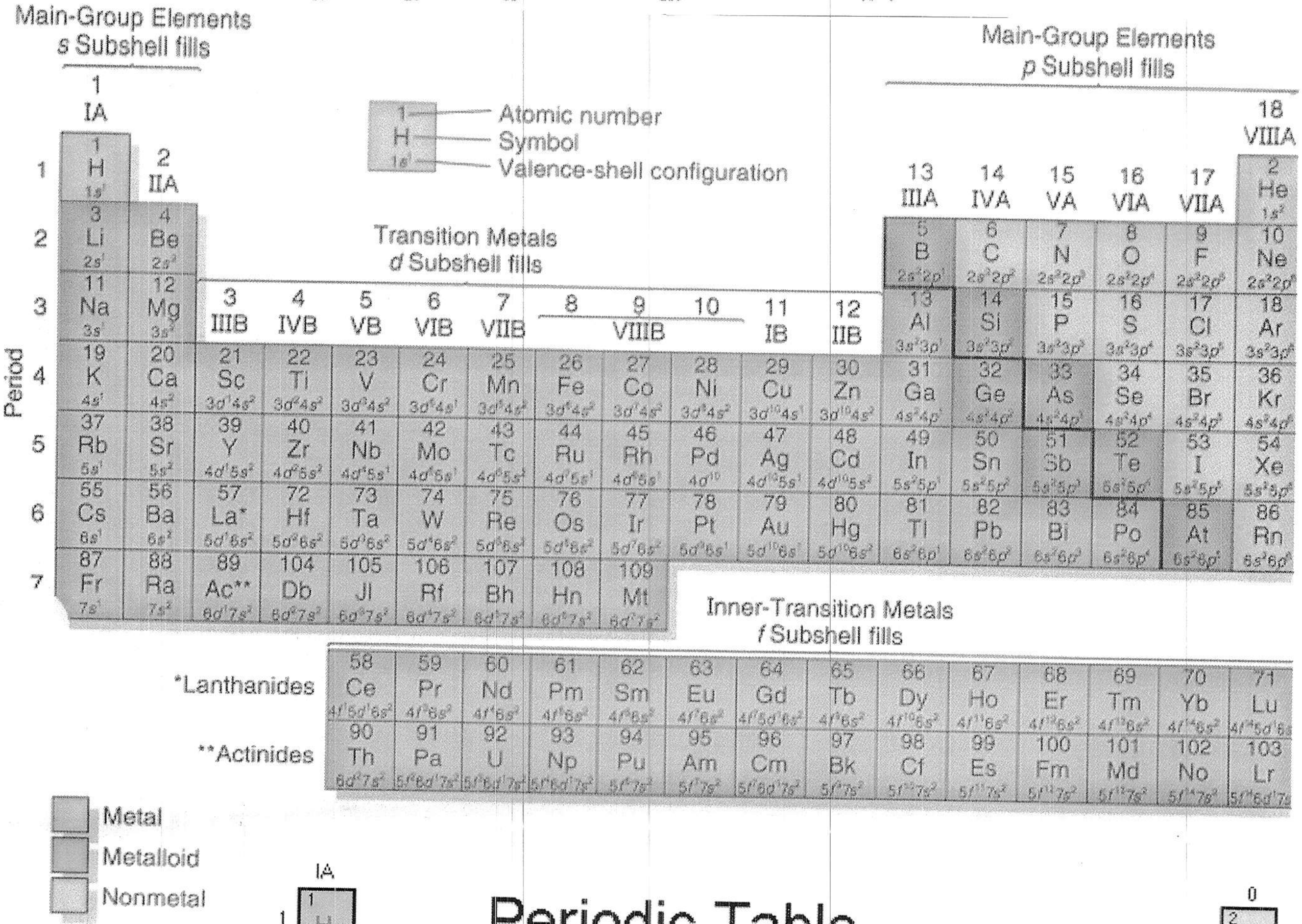
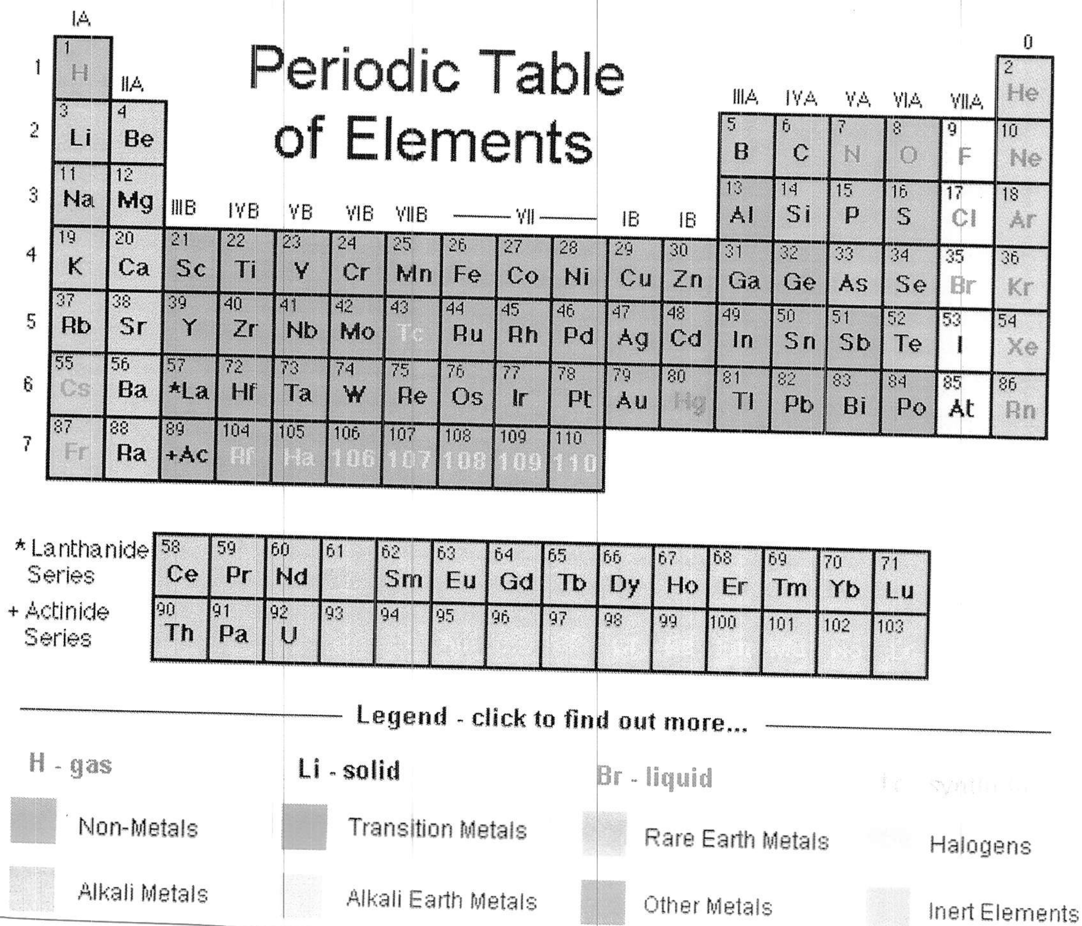


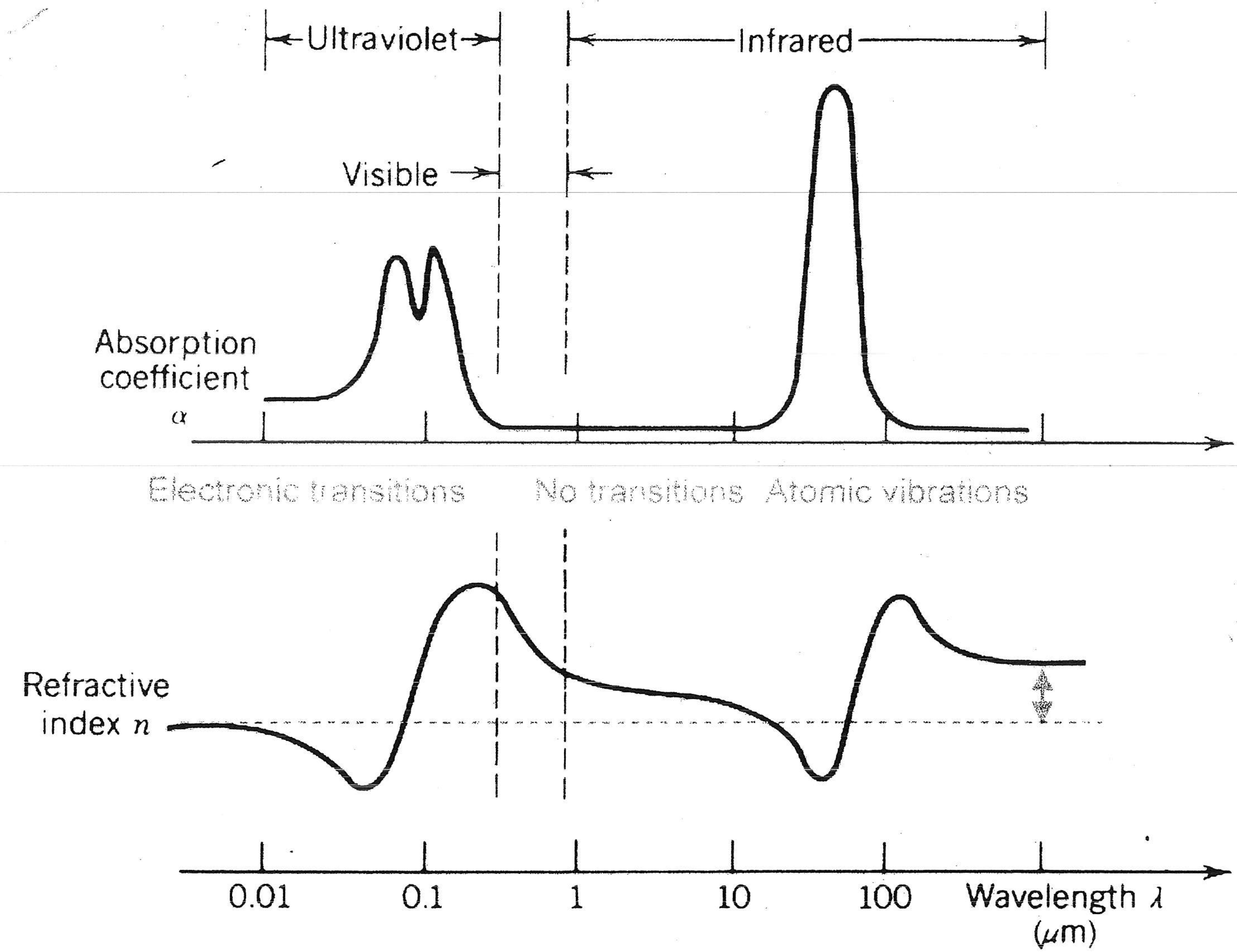
FIG. 2. (Color online) Schematic picture of the origin of the band structure of Bi_2Se_3. Starting from the atomic orbitals of Bi and Se, the following four steps are required to understand the band structure: (I) the hybridization of Bi orbitals and Se orbitals, (II) the formation of the bonding and antibonding states due to the inversion symmetry, (III) the crystal field splitting, and (IV) the influence of the SOC.

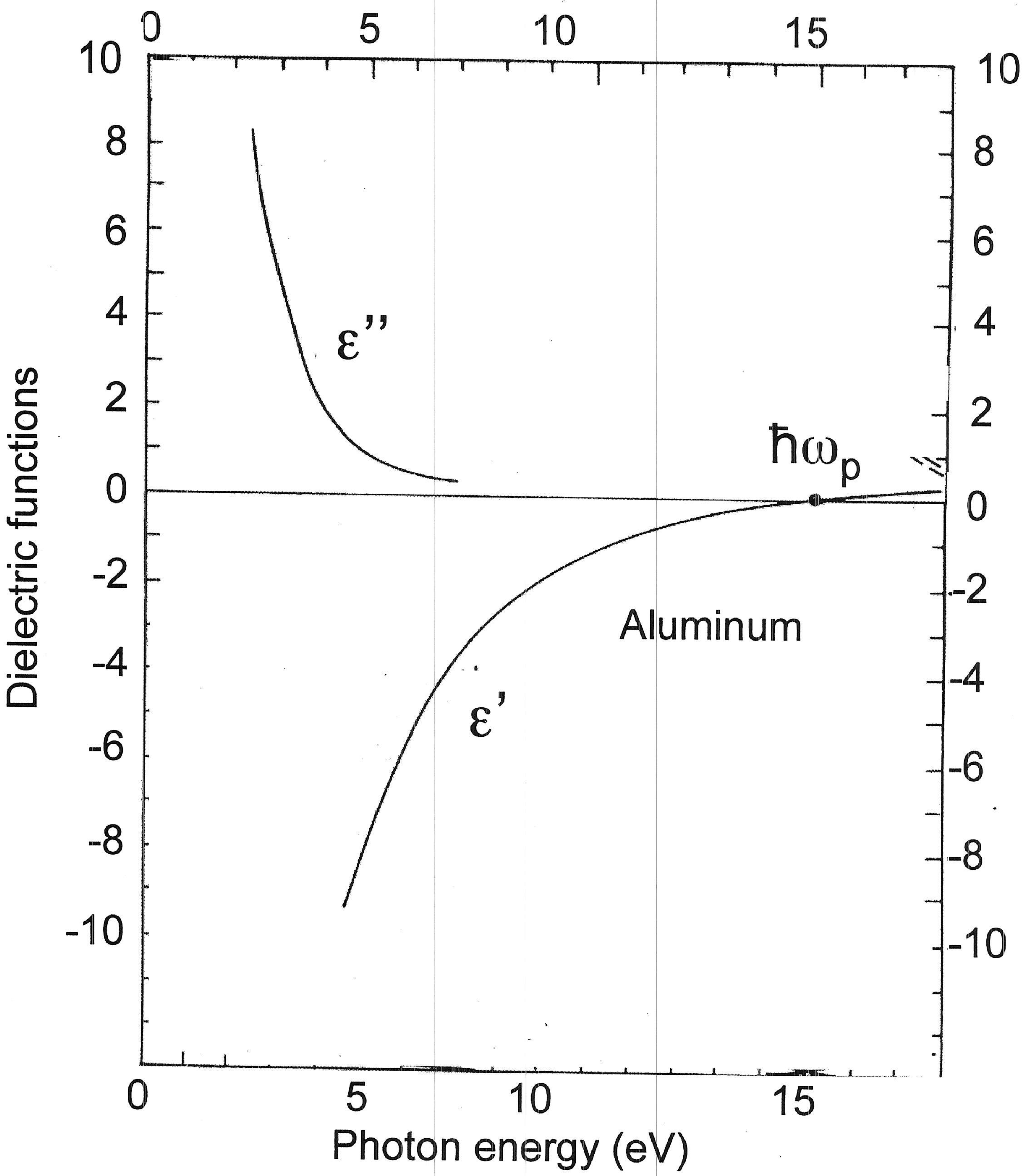

2p
2s
75 levels
25 levels
2p band (3 X 10^20 levels)
2s band (10^20 levels)
Li 1e⁻
Li2 2e⁻
Li3 3e⁻
Li25 25e⁻
Li10^20 10^20e⁻


Main-Group Elements
s Subshell fills
Main-Group Elements
p Subshell fills
Atomic number
Symbol
Valence-shell configuration
Transition Metals
d Subshell fills
Inner-Transition Metals
f Subshell fills
Period
*Lanthanides
**Actinides
Metal
Metalloid
Nonmetal


Periodic Table
of Elements
*Lanthanide Series
+Actinide Series
Legend - click to find out more...
H - gas
Li - solid
Br - liquid
Non-Metals
Transition Metals
Rare Earth Metals
Halogens
Alkali Metals
Alkali Earth Metals
Other Metals
Inert Elements

Dispersion and Absorption in Insulators



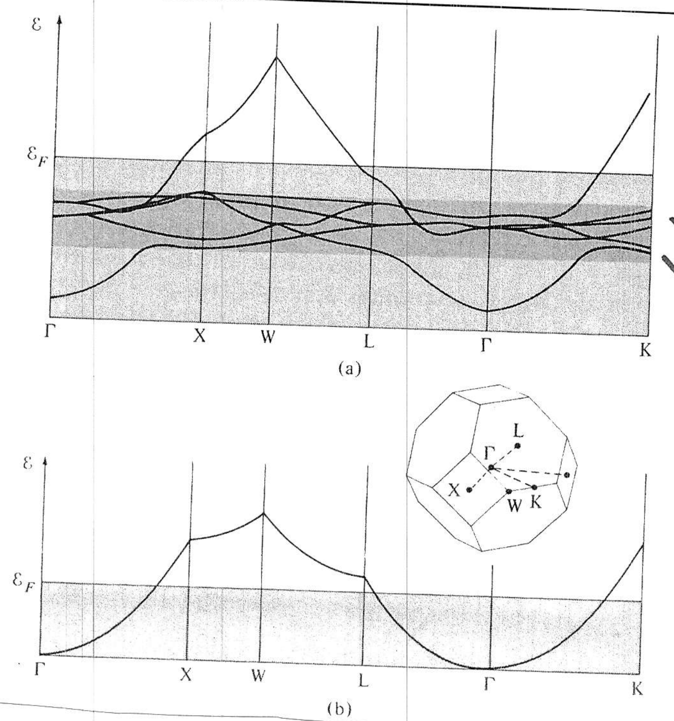


Dielectric functions
Photon energy (eV)
ε''
ε'
ħω_p
Aluminum
0
5
10
15
10
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
-10

Table 12.1. *Plasma frequencies of simple metals, as obtained from the onset of transparency, from electron energy loss (EEL), and from theory [Kit63, Rae80].* The values are given in energy $\hbar\omega_p$ or in wavenumber $\nu_p = \omega_p/2\pi c$.

Material	Number of electrons in conduction band	Optics		EEL		Calculated	
		ν_p (cm^{-1})	$\hbar\omega_p$ (eV)	ν_p (cm^{-1})	$\hbar\omega_p$ (eV)	ν_p (cm^{-1})	$\hbar\omega_p$ (eV)
Li	1	6.4×10^4	8.0	7.7×10^4	9.5	6.6×10^4	8.2
Na	1	4.6×10^4	5.9	4.4×10^4	5.4	4.6×10^4	5.7
Ca	1	3.1×10^4	3.9	3.1×10^4	3.8	3.1×10^4	3.9
Au	1	7.0×10^4	8.7	6.3×10^4	7.8	7.3×10^4	9
Al	3	12.1×10^4	15	12.1×10^4	15.0	12.7×10^4	15.8
Si	4			13.3×10^4	16.5	13.4×10^4	16.6

Figure 15.4
(a) Calculated energy bands in copper. (After G. A. Burdick, *Phys. Rev.* **129**, 138 (1963).) The $\mathcal{E}$ vs. k curves are shown along several lines in the interior and on the surface of the first zone. (The point Γ is at the center of the zone.) The d-bands occupy the darkest region of the figure, whose width is about 3.5 eV. (b) The lowest-lying free electron energies along the same lines as in (a). (The energy scales in (a) and (b) are not the same.)



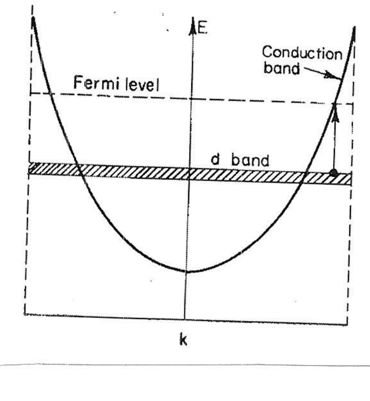
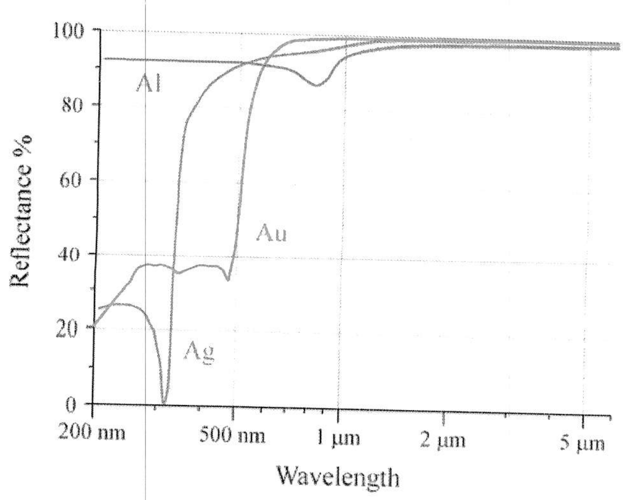


Fig. 3.16 Schematic band diagram for the noble metals.



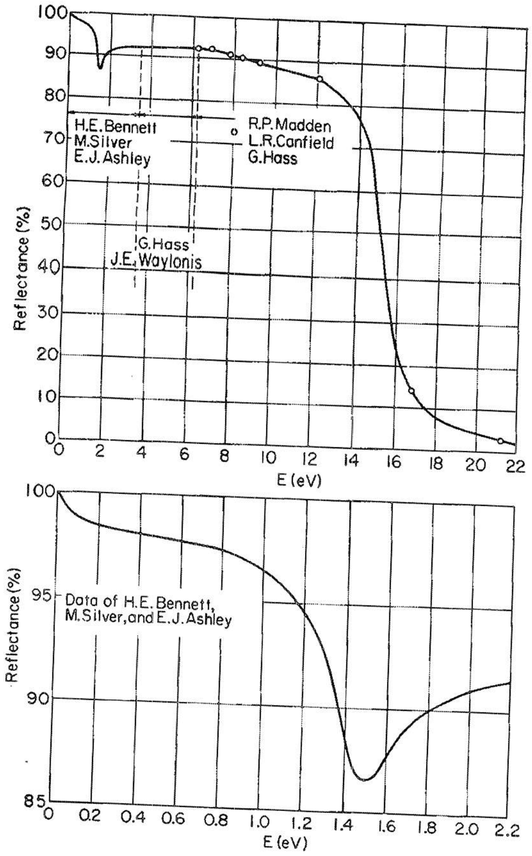
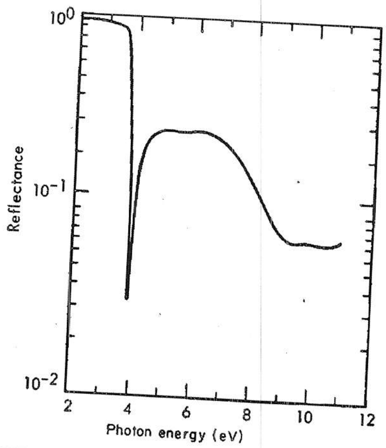


Fig. 3.13 Reflectance of aluminum. The decrease in reflectance at $\hbar\omega = 1.4$ eV arises from a weak interband transition. The large decrease in reflectance at $\hbar\omega = 14.7$ eV identifies the plasma resonance. [From H. Ehrenreich, H. R. Philipp, and B. Segall, *Phys. Rev.* **132**, 1918 (1963).]

Fig. 3.15 Reflectance of Ag. [From G. B. Irani, T. Huen, and F. Wooten, *Phys. Rev.* **3B**, 2385 (1971).]



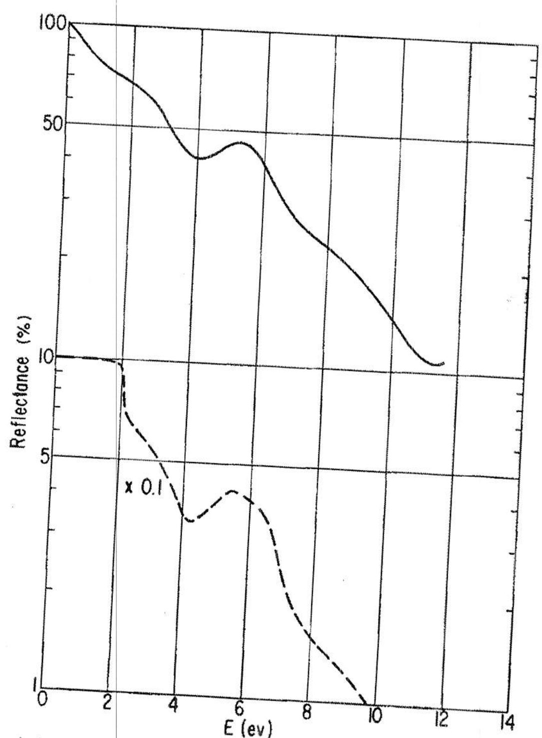


Fig. 3.21 Spectral dependence of the reflectance of Cu (lower curve) and Ni (upper curve). [Cu data from H. Ehrenreich and H. R. Philipp, *Phys. Rev.* **128**, 1622 (1962); Ni data from H. Ehrenreich, H. R. Philipp, and D. J. Olechna, *Phys. Rev.* **131**, 2469 (1963).]

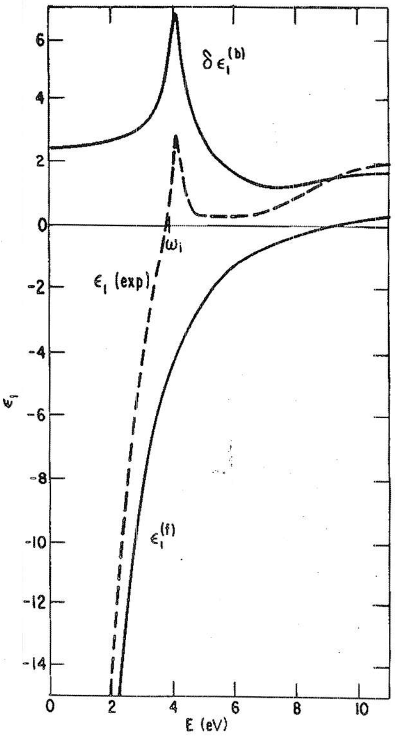


Fig. 3.18 Decomposition of the experimental values of $\varepsilon_1(\omega)$ for Ag into free and bound contributions $\varepsilon_1^{(f)}$ and $\delta\varepsilon_1^{(b)}$. The threshold energy for interband transitions is indicated by ω_i. [From H. Ehrenreich and H. R. Philipp, *Phys. Rev.* **128**, 1622 (1962).]

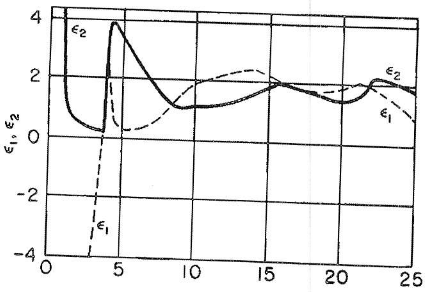


Fig. 3.17 Spectral dependence of the real and imaginary dielectric functions for Ag. [From H. Ehrenreich and H. R. Philipp, *Phys. Rev.* **128**, 1622 (1962).]

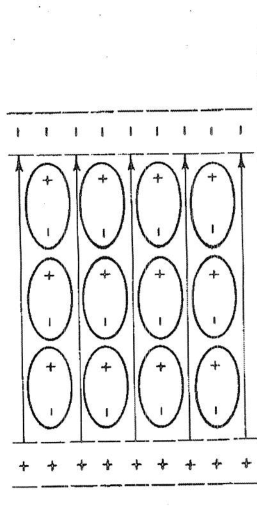
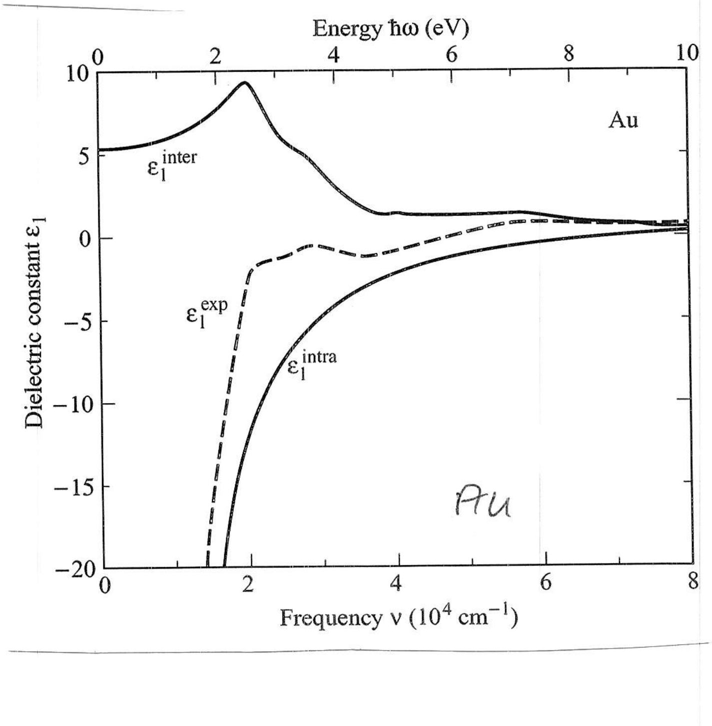


Fig. 3.20 Screening of plasma oscillations by polarization of localized electrons. Compare with Fig. 3.19. The d electrons are highly localized on atomic sites. However, their polarizability may be high enough to cause appreciable screening of the forces between fluctuations in the charge densities of conduction electrons. The result can be a significant shift in the plasma frequency.



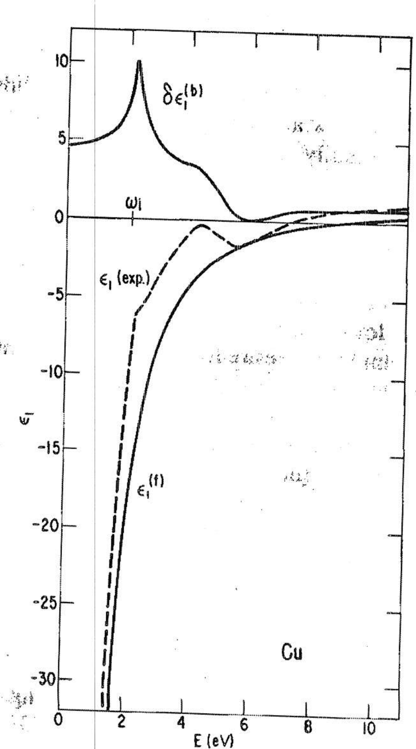


Fig. 3.22 Decomposition of the experimental values of $\varepsilon_1(\omega)$ for Cu into free and bound contributions $\varepsilon_1^{(f)}$ and $\delta\varepsilon_1^{(b)}$. The threshold energy for interband transitions is indicated by ω_i. [H. Ehrenreich and H. R. Philipp, *Phys. Rev.* **128**, 1622 (1962).]

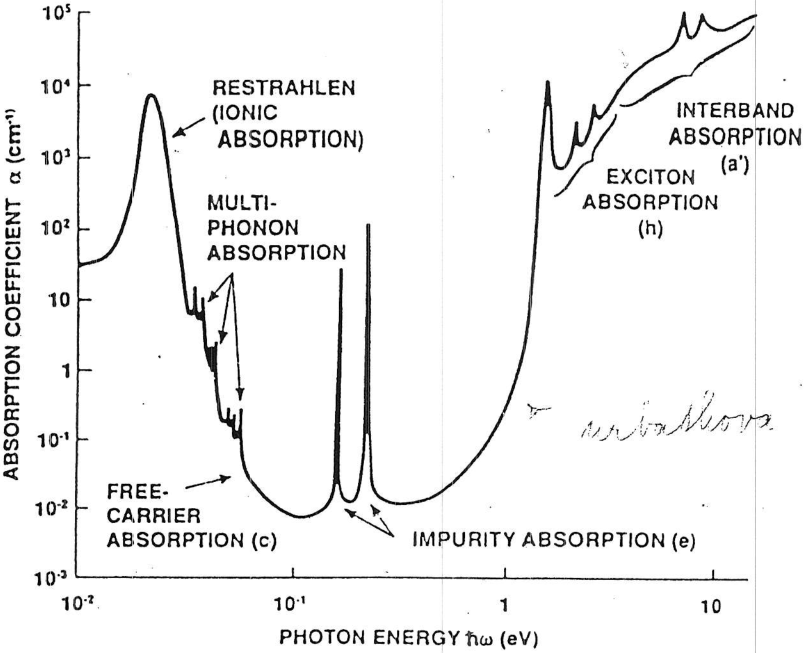


FIG. 6. Tyical low-intensity absorption spectrum for a hypothetical direct-band-gap semiconductor ($E_g \simeq 1$ eV) whose band structure is represented schematically in Fig. 5. The semiconductor is assumed to be at low temperatures and doped with deep-level impurities. The letters in parentheses designate transitions shown in Fig. 5. (From Jain and Klein, 1983.)

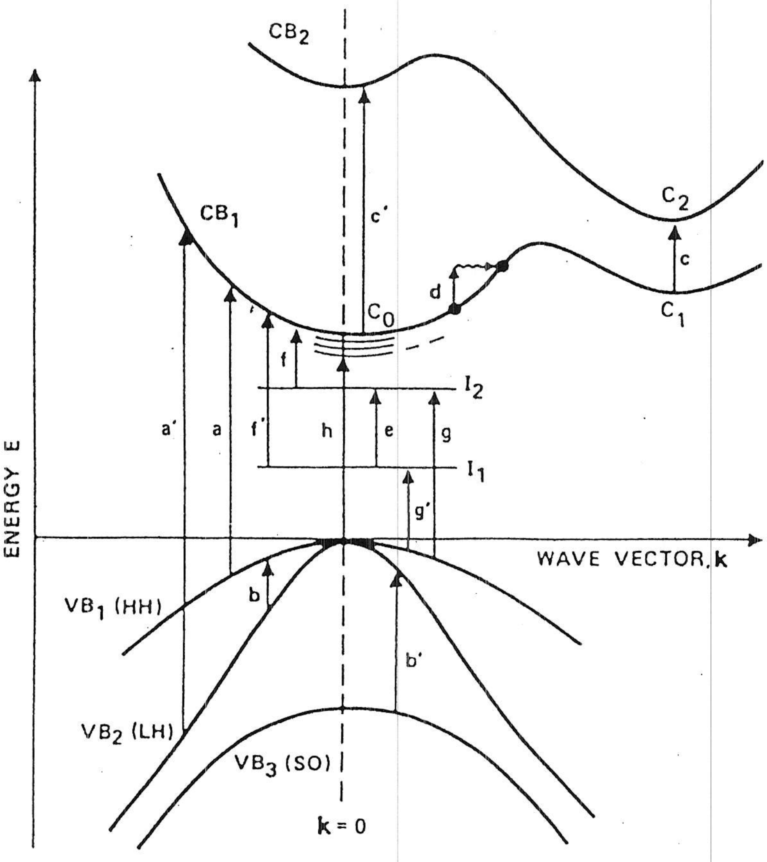
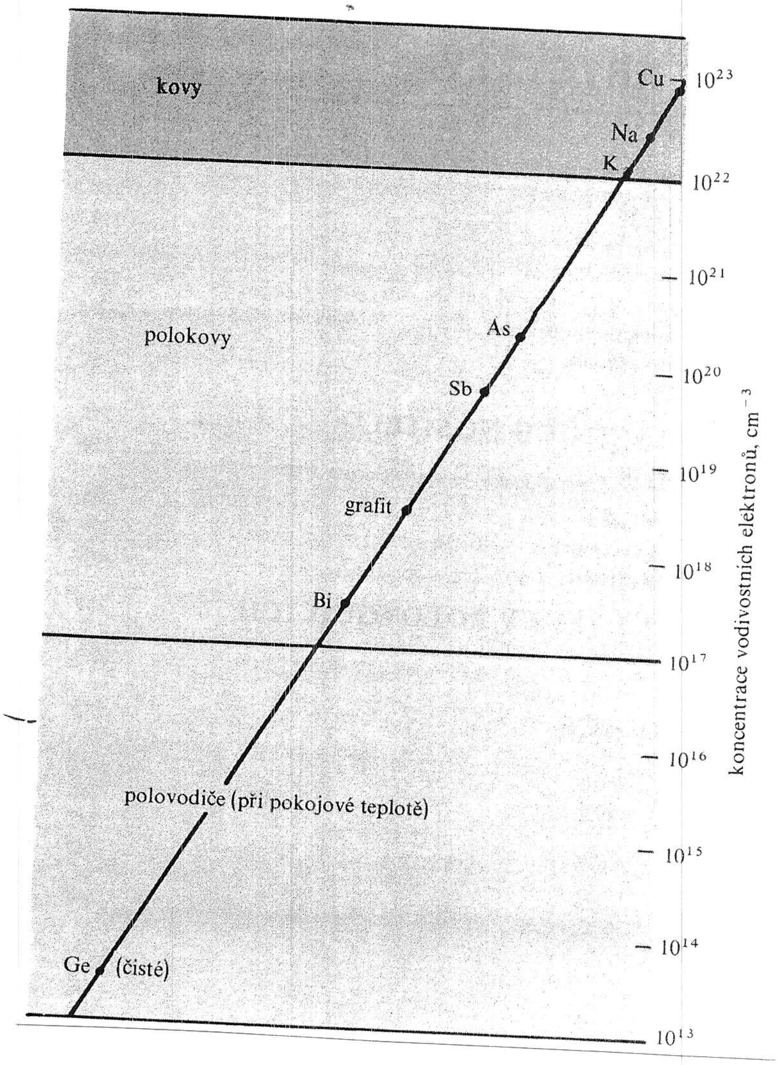


FIG. 5. Schematic representation of the most prominent types of transitions present in a semiconductor. CB_i are the conduction bands and VB_i are the valence bands, with HH, LH, and SO the heavy-hole, light-hole, and split-off bands, respectively. The vertical arrows indicate a variety of transitions that may be induced by optical radiation (From Jain and Klein, 1983.)



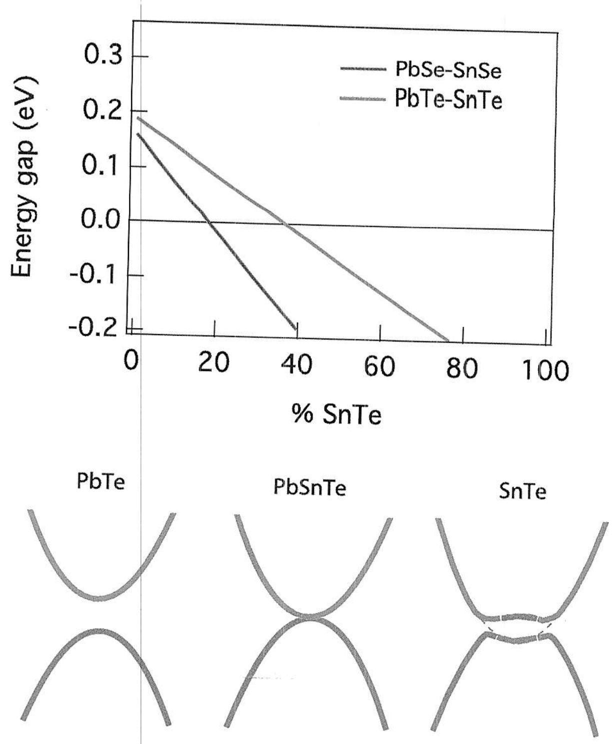
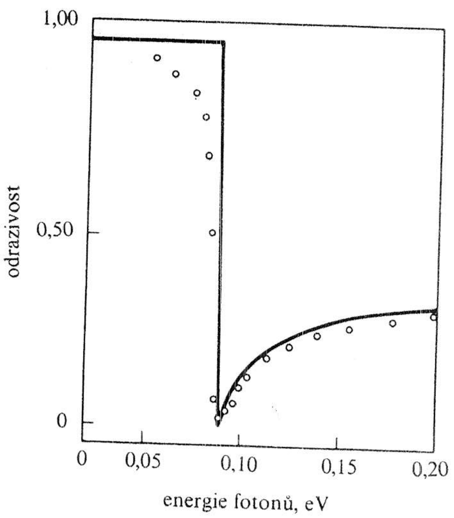


Figure 1. Upper panel: energy gap of the PbTe-SnTe (red line, after [8]) and PbSe-SnSe (blue line, after [5]) quasibinary alloys at low temperature. Lower panel: schematics of the band inverstion along the quasibinary tie-lines.



Obr. 10.3 Odrazivost antimonidu india s koncen-trací vodivostních elektronů $n = 4 . 10^{18}$ cm^{-3} (Po-dle W. G. Spitzera a H. Y. Fana, Phys. Rev. [illegible] 88 (1957); převzato od J. N. Hodgsona.)

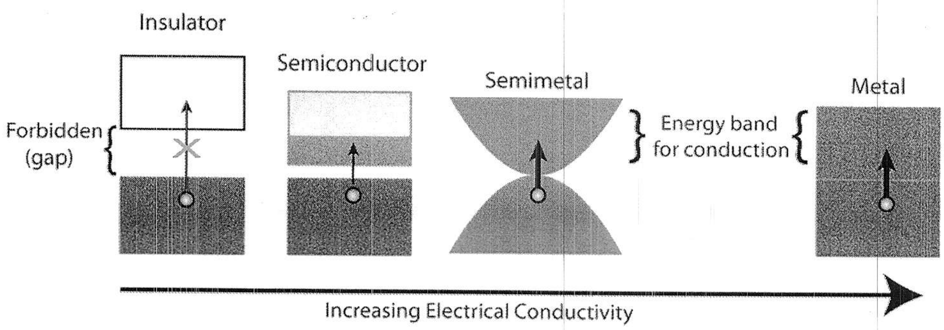
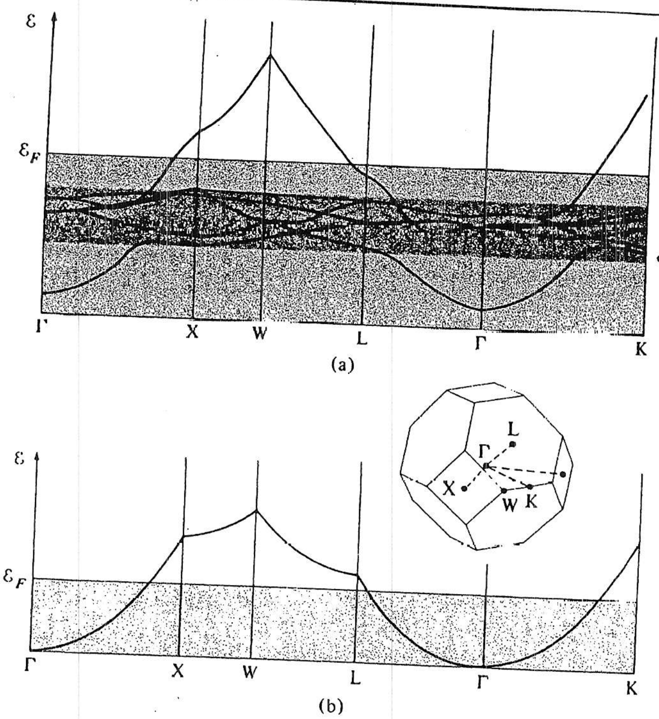


Table 12.1. *Plasma frequencies of simple metals, as obtained from the onset of transparency, from electron energy loss (EEL), and from theory [Kit63, Rae80].* The values are given in energy $\hbar\omega_p$ or in wavenumber $\nu_p = \omega_p/2\pi c$.

Material	Number of electrons in conduction band	Optics		EEL		Calculated	
		ν_p (cm^{-1})	$\hbar\omega_p$ (eV)	ν_p (cm^{-1})	$\hbar\omega_p$ (eV)	ν_p (cm^{-1})	$\hbar\omega_p$ (eV)
Li	1	6.4×10^4	8.0	7.7×10^4	9.5	6.6×10^4	8.2
Na	1	4.6×10^4	5.9	4.4×10^4	5.4	4.6×10^4	5.7
Ca	1	3.1×10^4	3.9	3.1×10^4	3.8	3.1×10^4	3.9
Au	1	7.0×10^4	8.7	6.3×10^4	7.8	7.3×10^4	9
Al	3	12.1×10^4	15	12.1×10^4	15.0	12.7×10^4	15.8
Si	4			13.3×10^4	16.5	13.4×10^4	16.6

Figure 15.4
(a) Calculated energy bands in copper. (After G. A. Burdick, *Phys. Rev.* **129**, 138 (1963).) The $\mathcal{E}$ vs. k curves are shown along several lines in the interior and on the surface of the first zone. (The point Γ is at the center of the zone.) The d-bands occupy the darkest region of the figure, whose width is about 3.5 eV. (b) The lowest-lying free electron energies along the same lines as in (a). (The energy scales in (a) and (b) are not the same.)



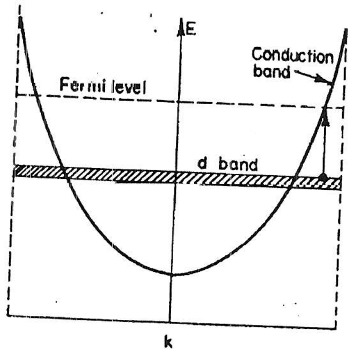


Fig. 3.16 Schematic band diagram for the noble metals.

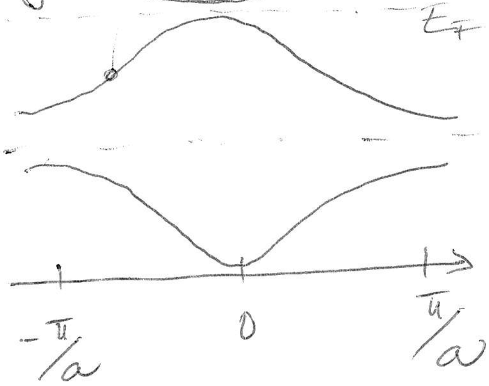
① Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II

24.4.13

~~Mezipásová~~ Mikroskopická teorie absorpce světla v krystalických látkách

- semiklasická

Hypotetická pevná látka:



záření

$$E = E_0 \cos(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t) = \frac{E_0}{2}\left(e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} + e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\right)$$

Vlastní stavy elektronu popsány Blochovými funkcemi:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$\vec{k}$ → kvazihybnost

n → index pásu

Jednočásticový hamiltonián:

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Popis EM záření ⇒ zavedení vektorového a skalárního potenciálu ⇒ ~~Lorentzova~~ Coulombova kalibrace

$$\phi = 0 \qquad \nabla\cdot\vec{A} = 0$$

$$\Rightarrow \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

⇒ záření ⇒ $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$

② Celkový Hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{(\vec{p}-e\vec{A})^2}{2m_0} + V(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e^2A^2}{2m_0} - \frac{e}{2m_0}\vec{p}\cdot\vec{A} - \frac{e}{2m_0}\vec{A}\vec{p} + V(\vec{r})$$

$$(\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A})f(\vec{r}) = A\cdot\left(\underbrace{\frac{\hbar}{i}}_{-i\hbar}\nabla f\right) + \left(\underbrace{\frac{\hbar}{i}}_{-i\hbar}\underbrace{\nabla\cdot\vec{A}}_{=0}\right)f \Rightarrow \vec{p}\cdot\vec{A} = \vec{A}\cdot\vec{p}$$

$$(\vec{p}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{p})\psi = -i\hbar(\nabla(\vec{A}\psi) + \vec{A}\nabla\psi) = -i\hbar(\psi\nabla\vec{A} + A\nabla\psi + \vec{A}\nabla\psi) = -2i\hbar\vec{A}\nabla\psi$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m_0} + \cancel{\frac{e^2A^2}{2m_0}} - \frac{e}{m_0}\vec{p}\cdot\vec{A} + V(\vec{r})$$

$\sim E_0^2$ ... nelineární jevy
$\rightarrow$ nízké intenzity $\Rightarrow = 0$

$$\hat{H} = H_0 + H_I$$

interakční Hamiltonián

$$= -\frac{e}{m_0}\vec{p}\cdot\vec{A} = -\frac{e}{m_0}\vec{A}\cdot\vec{p}$$

Absorpce světla $\Rightarrow$ dynamický proces
$\Rightarrow$ časová Schrödingerova rovnice

1) Pro krátké časy, ~~silné~~ slabé buzení, silná relaxace
$\Rightarrow$ Fermi Golden Rule

2) silná excitace, pomalé relaxace, dlouhé časy
plné řešení S.R. $\Rightarrow$ Rabiho oscilace

Možnosti 1, i 2) relevantní ve fyzice pevných látek

1) běžná lineární odezva materiálů

2) spec. experimenty se silnou excitací
(pump & probe time resolved, ...)

③ Zatím situace 1)

FGR: $P_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle i|H_I|f\rangle|^2\,\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$

občas psané $\frac{2\pi}{\hbar^2}|\langle \quad \rangle|\,\delta(\omega_f-\omega_i-\omega)$

Celková absorpce na frekvenci ω

$$P_{total}(\omega) = \sum_{i,f}{}' P_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{i,f}{}' |\langle i|H_I|f\rangle|^2\,\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

Podmínky platnosti FGR $\Rightarrow$ velmi krátké časy, pokud se systém nevzdálí z poč. stavu, silné relaxace

$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\alpha x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(u)\frac{du}{|\alpha|} = \frac{1}{|\alpha|}$

Rozměrová analýza: $P_{total}(\omega)\,[s^{-1}] = \frac{1}{J\cdot s}\cdot J^2\cdot\frac{1}{J}$

$\Rightarrow$ počet absorbovaných fotonů o frekv. ω za 1s

Absorbovaná energie za 1s:

$$W_{total} = \hbar\omega P_{total}$$

Hustota elmag. energie: $U = \frac{1}{2}(\vec{E}\cdot\vec{D} + \vec{B}\cdot\vec{H}) = \vec{E}\cdot\vec{D}$ pro EM vlny

$$\Rightarrow \langle U\rangle = \langle \tfrac{1}{4}\varepsilon_0(E+E^*)(\varepsilon^*E^*+\varepsilon E)\rangle = \frac{1}{4}\,2\varepsilon_1|E|^2\cdot\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\varepsilon_1\varepsilon_0|E|^2$$

Aprox. slabě absorb. prostředí: $\varepsilon_1 \sim n^2 \Rightarrow U = \frac{n^2\varepsilon_0}{2}|E|^2$

$$-\frac{dU^I}{dt} = W_{total} = -\frac{dU^I}{dx}\cdot\frac{dx}{dt} = \alpha U\cdot v = \alpha U\cdot\frac{c}{n}$$

$I = I_0 e^{-\alpha x}$

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c} = \frac{2\omega\kappa}{c}\cdot\frac{n}{n} = \frac{\omega\varepsilon_2}{c\,n}$$

$\varepsilon_2 = 2\kappa n$ $\qquad N = n + i\kappa$

$$W_{tot} = P_{tot}\,\hbar\omega = \frac{\omega\varepsilon_2}{cn}\cdot\frac{c}{n}\cdot\frac{n^2\varepsilon_0}{2}|E|^2 = \frac{1}{2}\omega\,\varepsilon_0\,\varepsilon_2|E|^2$$

(34) Z toho:

$$\varepsilon_2 = 2P_{total} \cdot \hbar \cdot \frac{1}{|E|^2} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0}$$

↳ máme dief fci $\Rightarrow \varepsilon_1 \overset{K.K.}{\Leftrightarrow} \varepsilon_2$

Zbývá "drobnost" ⇒ dopočítat $\langle f | H_I | i \rangle$

Zde začíná fyzika pevných látek

$$H_I = -\frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \vec{p}$$

Nyní vlnový vektor záření značen $\vec{q}$

$$H_I' = -\frac{e}{m_0} \frac{A_0}{2} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \cdot e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

Pozor: $\vec{A} = \vec{\alpha}\frac{A_0}{2}\Big(\underbrace{e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}}_{\text{Absorbce}} + \underbrace{e^{-i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}}_{\text{Stimulovaná Emise}}\Big)$

integrace podle času:

$$\int e^{\frac{iE_c t}{\hbar}} e^{-i\omega t} e^{-i\frac{E_v t}{\hbar}} dt \sim \delta(E_c(\vec{k}_c) - E_v(\vec{k}_v) - \hbar\omega)$$

$P_{total} = \ldots \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ $\quad P_{total} \ldots \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)$

popisují absorpci a emisi v přítomnosti EM pole

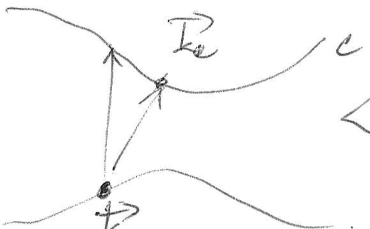
elektronové stavy:

$$|f\rangle = \psi^c_{\vec{k}_c}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_c\cdot\vec{r}} u^c_{\vec{k}_c}(\vec{r})$$

$$|i\rangle = \psi^v_{\vec{k}_v}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_v\cdot\vec{r}} u^v_{\vec{k}_v}(\vec{r})$$

polovodiče
↳ není problém rozšířit na více pásů → více indexů

⇒ přechod valenční → vodivostní pás



$$\langle f | H_I' | i \rangle = \frac{e}{m_0}\frac{A_0}{2} \int_{V_{krystal}} e^{-i\vec{k}_c\cdot\vec{r}} u^{c*}_{\vec{k}_c}(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} (\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) u^v_{\vec{k}_v}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_v\cdot\vec{r}} dV$$

$\int dV = 0$ protože u^c a u^v jsou ortogonální

$$\vec{p}\, u^v_{k_v} e^{ik_v r} = e^{ik_v r}\, \vec{p}\, u^v_{k_v} + \underbrace{\hbar k_v u^v_{k_v} e^{ik_v r}}_{0}$$

po přenásobení $u^{c*}_{k_c}$

⑤

$$\langle f | H_I' | i \rangle = \frac{e}{m_0} \frac{A_0}{2} \int e^{i(-\vec{k}_c + \vec{k}_v + \vec{q})\cdot\vec{r}} \, u^{c*}_{\vec{k}_c} (\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) \, u^{v}_{\vec{k}_v} \, dV$$

Integrace přes celý krystal d^3r

$r \longrightarrow \vec{R}_i + \vec{r}' \longrightarrow$ relativní souřadnice

$\vec{R}_i$ ... polohy unitárních cel

$$= \frac{e}{m_0} \frac{A_0}{2} \left[\int_{\substack{\text{unitární}\\ \text{buňka}}} e^{i(\vec{k}_v - \vec{k}_c + \vec{q})\cdot\vec{r}} \, u^{c*}_{\vec{k}_c}(\vec{r}') (\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) \, u^{v}_{\vec{k}_v}(\vec{r}') \, d^3\vec{r}' \right] \times$$

$$\times \underbrace{\sum_{\forall \text{ celý } i} e^{i(\vec{k}_v - \vec{k}_c + \vec{q})\cdot\vec{R}_i}}_{\delta(\vec{k}_v - \vec{k}_c + \vec{q})}$$

zákon zachování: $\vec{k}_v - \vec{k}_c + \vec{q} = 0$ .. jinak výsledek $= 0$

Velikost $|\vec{q}| = \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow \sim 1\,\mu m$ $\quad \vec{k}_v, \vec{k}_c \approx \frac{2\pi}{a_0} \rightarrow$ mřížková konst. $\sim$ Å

$u_{c,\vec{k}_v+\vec{q}} = u_{c,\vec{k}_v} + \vec{q}\cdot\nabla_{\vec{k}} u_{c,\vec{k}_v} + \dots$

dipól. aprox.

ekvivalentní

$e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = 1 + i(\vec{q}\cdot\vec{r}) + \dots$

menší o faktor $\left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$

$\Rightarrow \vec{q} \doteq 0 \Rightarrow$ vertikální přechody $\quad u^{c}_{\vec{k}_c+\vec{q}} = u^{c}_{\vec{k}_c}$

dipólová aprox $\vec{k}_c = \vec{k}_v$

$V_{krystal} = 1$

$$= \frac{e}{m_0} \frac{A_0}{2} \cdot N \cdot V_{cela} \cdot \frac{1}{V_{cela}} \int_{\substack{\text{unitární}\\ \text{cela}}} d^3r' \, u^{c*}_{\vec{k}_c}(\vec{r}') (\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) \, u^{v}_{\vec{k}_v}(\vec{r}') \cdot \delta_{k_v k_c}$$

→ pokud vyměníme normovací fce, musíme normovat výsledek

$$\langle f | H_I' | i \rangle = \langle c | H_I | v \rangle = \frac{e A_0}{m_0 2} \underbrace{\boxed{\frac{1}{V} \int d^3r' \, u^{c*}_{\vec{k}_c}(\vec{r}') (\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) \, u^{v}_{\vec{k}_v}(\vec{r}')}}_{|p_{cv}|^*} \cdot \delta_{\vec{k}_v \vec{k}_c}$$

(6) $\qquad \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$

$$P_{total} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \left(\frac{e A_0}{2 m_0}\right)^2 |p_{cv}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \left(\frac{e E_0}{2\omega m_0}\right)^2 |p_{cv}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$$

$\Rightarrow$ dielektrická funkce pro jeden mezipásový přechod : $\varepsilon_2 = 2 P_{total} \hbar \cdot \frac{1}{|E_0|^2} \frac{1}{\varepsilon_0}$

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi}{\varepsilon_0} \frac{1}{|E_0|^2} \sum \left(\frac{e E_0}{\omega m_0 2}\right)^2 |p_{cv}|^2 \delta(\dots)$$

$$= \frac{\pi}{\varepsilon_0} \frac{e^2}{\omega^2} \frac{1}{m_0^2} \sum_k |p_{cv}|^2 \delta(\dots)$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{1}{\hbar} \delta(\omega_c - \omega_v - \omega)$$

$\varepsilon_1 = ? \Rightarrow$ k. k. relace

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' = 1 + \frac{\pi}{2\hbar} \frac{4}{\pi} \frac{e^2}{m_0^2} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0} \cdot$$

$$\cdot \sum_k |p_{cv}|^2 \int_0^\infty \frac{\omega'}{\omega'^2} \frac{\delta(\omega_c - \omega_v - \omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' = 1 + \frac{2}{\hbar} \frac{e^2}{m_0^2} \frac{1}{\varepsilon_0} \cancel{\frac{\delta}{4}}$$

$$\sum_k |p_{cv}|^2 \cdot \frac{1}{\omega_{cv}} \cdot \frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2} \quad \text{kde} \quad \omega_{cv}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}))$$

Lorentzův model pro $\Gamma = 0$: $\varepsilon_1 = 1 + \sum_i \frac{q_i^2 N_i}{m_i \varepsilon_0} \frac{1}{\omega_i^2 - \omega^2}$

$$\varepsilon_1 = 1 + \underbrace{\frac{N q^2}{m \varepsilon_0}}_{f} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \qquad \text{síla oscilátoru}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2}{m_0} \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_k \boxed{\frac{2}{\hbar m_0} \frac{|p_{cv}|^2}{\omega_{cv}}} \frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}$$

7

$$\Rightarrow \varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2}{m_0 \varepsilon_0} \sum_k \frac{f(k)}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}$$

Pokud $f(k)$ nezávisí příliš, pak

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2 f_{cv}}{m_0 \varepsilon_0} \sum_k \frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}$$

Speciální případ ⇒ izolátor s velkým gapem
např. CaF_2

⇒ pokud $\omega_{cv} \gg E_{g}$ pak $\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2 f_{cv}}{m_0 \varepsilon_0} \frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}$

gap je tak velký, že průběh pásů v k je maličký

↳ Sellmaier

Zpět k ε_1 a ε_2

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2 f_{cv}}{m_0 \varepsilon_0} \sum_k \frac{1}{\omega_{cv}^2(k) - \omega^2} \quad a \quad \varepsilon_2 = \frac{\pi}{2\varepsilon_0} \frac{e^2}{\omega} \cdot \frac{1}{m_0} f_{cv} \underbrace{\hbar \sum_k \delta(E_c - E_v - \hbar\omega)}_{j_{DOS}(\omega)}$$

① Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II 24.3.'12

Malé opakování: Mezipásová absorpce

- <u>přímé přechody</u>:

semiklasický přístup ⇒ interakční Hamiltonián

$$H_I = -\frac{e}{m_0}\vec{p}\cdot\vec{A}$$

Fermiho zlaté pravidlo: $P_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle i|H_I|f\rangle|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$

Celková absorpce: $P_{tot} = \sum_{i,f} P_{i\to f}$

$$\varepsilon_2 = 2P_{tot}\hbar\frac{1}{|E^{\omega}|^2}\frac{1}{\varepsilon_0}$$

$i \to$ valenční pás $\to \psi^v_{\vec{k}_v}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_v\cdot\vec{r}}\, u^v_{\vec{k}_v}(\vec{r})$

$f \to$ vodivostní pás $\to \psi^c_{\vec{k}_c}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_c\cdot\vec{r}}\, u^c_{\vec{k}_c}(\vec{r})$

Coulombova (příčná) kalibrace

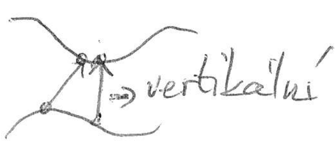
$\phi = 0$ & $\nabla\cdot\vec{A} = 0$ $\qquad \vec{A} = \frac{A_0}{2}\Big(\underbrace{e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}}_{\text{uvažujeme pouze absorpci}} + e^{-i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}\Big)$

$$\langle f|H_I|i\rangle \to \frac{e}{m_0}\frac{A_0}{2}\int_{\text{unit. cela}} e^{-i(\vec{k}_v - \vec{k}_c + \vec{q})\cdot\vec{r}}\, u^{*c}_{k_c}(\vec{r}')(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\, u^v_{\vec{k}_v}(\vec{r}')\,d\vec{r}' \times$$

$$\times \underbrace{\sum_{\text{přes } \forall R_i \text{ v krystalu}} e^{i(\vec{k}_v - \vec{k}_c + \vec{q})\cdot\vec{R}_i}}_{\delta(\vec{q} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)} \Rightarrow \vec{q} + \vec{k}_v = \vec{k}_c$$

dipólová aproximace: $\vec{q} \doteq 0 \Rightarrow$ skoro vertikální přechod

$$u_{c,\vec{k}_v+\vec{q}} = u_{c,\vec{k}_v} + \vec{q}\cdot\nabla_{\vec{k}}\, u_{c,\vec{k}_v} + \dots$$



②

$$\varepsilon_2 = \frac{\pi}{\varepsilon_0}\frac{e^2}{\omega^2}\frac{1}{m_0^2}\sum_k' |p_{cv}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$$

ε_1 z K.K relací

$$\varepsilon_2 = \frac{\pi}{2\varepsilon_0}\frac{e^2}{\omega}\cdot\frac{1}{m_0} f_{cv}\hbar \underbrace{\sum_k' \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)}_{j_{DOS}(\omega)}$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2}{m_0}\frac{1}{\varepsilon_0}\sum_k' \frac{2}{\hbar m_0}\frac{|p_{cv}|^2}{\omega_{cv}}\frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2 f_{cv}}{m_0 \varepsilon_0}\sum \frac{1}{\omega_{cv}^2(\vec{k}) - \omega^2}$$

$$\boxed{f_{cv} = \frac{2}{\hbar m_0}\frac{|p_{cv}|^2}{\omega_{cv}}}$$

$$|p_{cv}|^2 = \frac{1}{V_{cell}}\int d^3r'\, u^{c*}_{\vec{k}c}(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\, u^{v}_{\vec{k}v}$$

Soubor klasických oscilátorů:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0 m}\left(\sum_i' \frac{N_i}{\omega_i^2 - \omega^2}\right) \quad \text{Lorentzův model}$$

⇒ síla oscilátoru

$$f = \frac{2|p_{cv}|^2}{m\hbar\omega_{cv}}$$

aproximace ⇒ nezávisí na $\vec{k}$

$$\Rightarrow \quad \underline{\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2 f_{cv}}{m_0\varepsilon_0}\sum_k' \frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2}}$$

tvar disperze závisí na DOS

Sdružená hustota stavů

- počet dovolených stavů pro danou vlastní hodnotu energie
- kvantový systém s diskrétním energetickým spektrem:

$$j(E) = \sum_n' \delta(E - E_n)$$

⇒ v našem případě: $j(\hbar\omega) = \sum_k' \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$

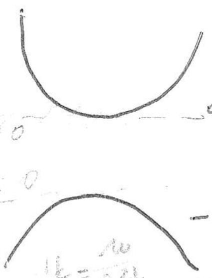
(3) $E_{cv} = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$

$E_v = -E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$ → těžké díry

$\Downarrow \frac{1}{m} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_h}$ ⇒ redukovaná hmotnost

$$\left.\begin{aligned} 1D &: E_g + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \\ 2D &: E_g + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m} \\ 3D &: E_g + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} \end{aligned}\right\}$$ parabolické, symetrické pásy



$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + E_g = E_c$

$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} = E_v$

kvazispojité spektrum:

$$j = \frac{\overset{\to\, \text{spin}}{2}}{\underbrace{(2\pi)^3}_{V_{B.Z.}}} \int_{B.Z.} \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)\, d\vec{k}$$

dimenze

$1D: \frac{2}{2\pi} \int dk\, \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$2D: \frac{2}{(2\pi)^2} \int 2\pi k\, dk\, \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$

$dE = \frac{\cancel{2} \hbar^2 k\, dk}{\cancel{2} m}$

$3D: \frac{2}{(2\pi)^3} \int 4\pi k^2 dk\, \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$

$dk = \frac{dE\, m}{\hbar^2 k}$

$\Downarrow$

$1D: \frac{1}{\pi} \int \frac{dE\, m}{\hbar^2 k} \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega)$

$2D: \frac{1}{\pi} \int \frac{dE\, m}{\hbar^2} \delta$ —— 〃 ——

$3D: \frac{1}{\pi^2} \int \frac{dE\, m}{\hbar^2} k\, \delta$ —— 〃 ——

$E = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2m(E - E_g)}}{\hbar}$

④

$$1D: \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}\int \frac{dE\,\delta(E-\hbar\omega)\hbar}{\sqrt{2m(E-E_g)}}$$

$$2D: \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}\cdot\int \frac{dE\,\delta(E-\hbar\omega)\cancel{\hbar}}{\cancel{\sqrt{2m(E-E_g)}}}$$

$$3D: \frac{1}{\pi^2}\frac{m}{\hbar^2}\int dE\,\frac{\sqrt{2m(E-E_g)}}{\hbar}\,\delta(E-\hbar\omega)$$

$$\Downarrow$$

$$1D: \quad j = \frac{m^{1/2}}{\hbar\pi}\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega-E_g}}$$

$$2D: \quad j = \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}$$

$$3D: \quad j = \frac{1}{\pi^2}\frac{m^{3/2}\sqrt{2}}{\hbar^3}\sqrt{\hbar\omega-E_g}$$

$$\boxed{j(\omega) \sim m^{D/2}(\hbar\omega-E_g)^{\frac{D-2}{2}}}$$

3D:

$$j = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{BZ}\delta(E_c(\vec{k})-E_v(\vec{k})-\hbar\omega)\,d^3k$$

nově:

$$d^3k = dS\,dk_n$$

$$|\nabla_k E|\,dk_n = dE$$

$$\Downarrow$$

$$|\nabla_k(E_c-E_v)|\,dk_n = d(E_c-E_v)$$

$$d^3k = dS\,dk_n = dS\left[\frac{d(E_c-E_v)}{|\nabla_k(E_c-E_v)|}\right]$$

$$j = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{BZ}\frac{dS\,d(E_c-E_v)\,\delta(\ldots)}{|\nabla_k(E_c-E_v)|}$$

integrace přes $d(E_c-E_v)$

$$j = \frac{2}{(2\pi)^3}\int\frac{dS}{|\nabla_k(E_c-E_v)|_{E_c-E_v=\hbar\omega}}$$

$$\delta(E_c(\vec{k})-E_v(\vec{k})-\hbar\omega) = \delta(f(\vec{k})-\hbar\omega)$$

$$\vec{k}=\vec{k}_0 \Rightarrow f(\vec{k})=\hbar\omega$$

$$f(\vec{k}) = f(\vec{k}_0) + \frac{df}{d\vec{k}}(\vec{k}-\vec{k}_0) + \ldots$$

$$\Rightarrow \delta\left(f(\vec{k}_0) + \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k})\big|_{\vec{k}=\vec{k}_0}(\vec{k}-\vec{k}_0) - \hbar\omega\right) = \delta\left(\nabla_{\vec{k}} f(\vec{k})\big|_{\vec{k}=\vec{k}_0}(\vec{k}-\vec{k}_0)\right)$$

$$= \delta\left(\nabla_{\vec{k}} f(\vec{k})\big|_{\vec{k}=\vec{k}_0}\Delta\vec{k}_\perp\right)$$

(5)

$$\delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) = \delta\left(\nabla_{\vec{k}}(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}))\Big|_{\hbar\omega = E_c - E_v} \cdot \Delta\vec{k}_\perp\right)$$

$\Downarrow$

$$j = \frac{2}{(2\pi)^3}\int \frac{\delta(\Delta\vec{k}_\perp)}{|\nabla_{\vec{k}}(E_c - E_v)|_{\hbar\omega = E_c - E_v}} d^3k = \frac{2}{(2\pi)^3}\int \frac{\delta(\Delta k_\perp)\, dS\, dk_\perp}{|\nabla_{\vec{k}}(E_c - E_v)|_{\hbar\omega = E_c - E_v}}$$

$\Downarrow$

$$\underline{\underline{j = \frac{2}{(2\pi)^3}\int \frac{dS}{|\nabla_{\vec{k}} E_{cv}|}}}$$

S ... energetický povrch kde $E_{cv}(\vec{k}) = \text{konst.}$

$\nabla_{\vec{k}} E_{cv} = 0 \Rightarrow$ kritické body v B. Z.

$\nabla_{\vec{k}} E_c(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} E_v(\vec{k}) \Rightarrow$ největší příspěvek

$\Rightarrow$ tam kde pásy běží rovnoběžně

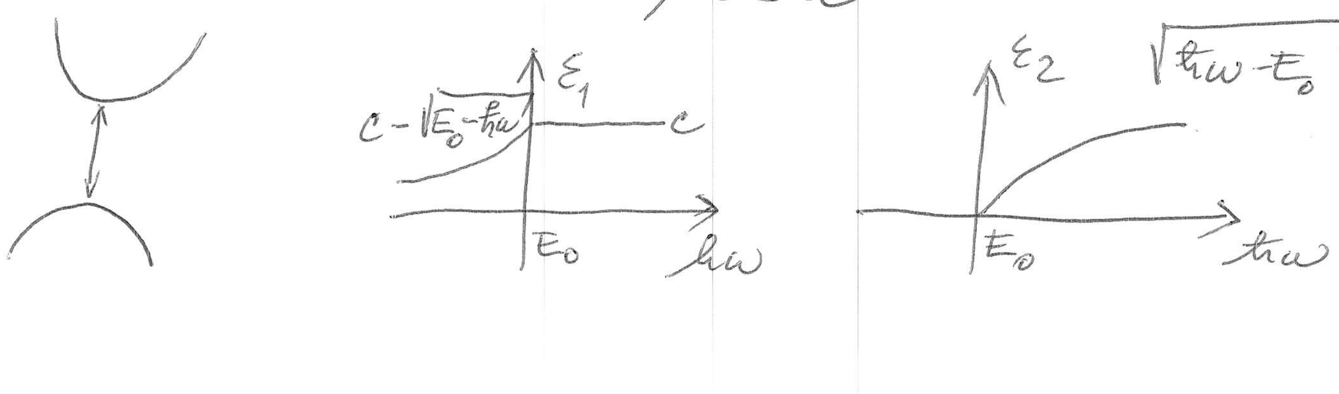
4 typy kritických bodů: $M_0 \dots M_3$
- ve 3D

3 typy ve 2D a 2 typy ve 1D

3D:

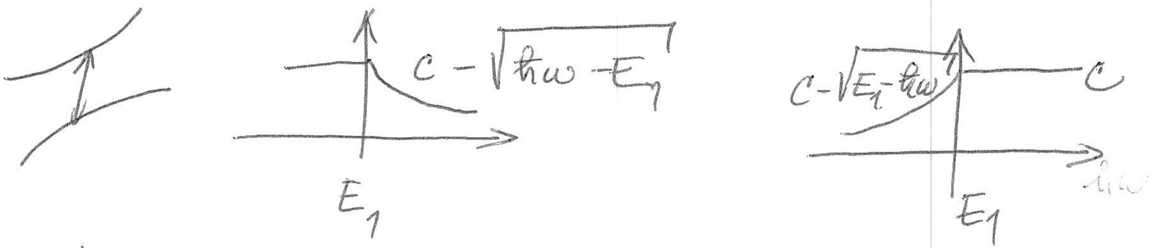
$$E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = E_0 + \sum_{i=1}^{3} \frac{\hbar^2}{2m_i^*}(k_i - k_{0i})^2$$

1) M_0 ... $\forall m_i^* > 0$ ... lokální minimum pásu

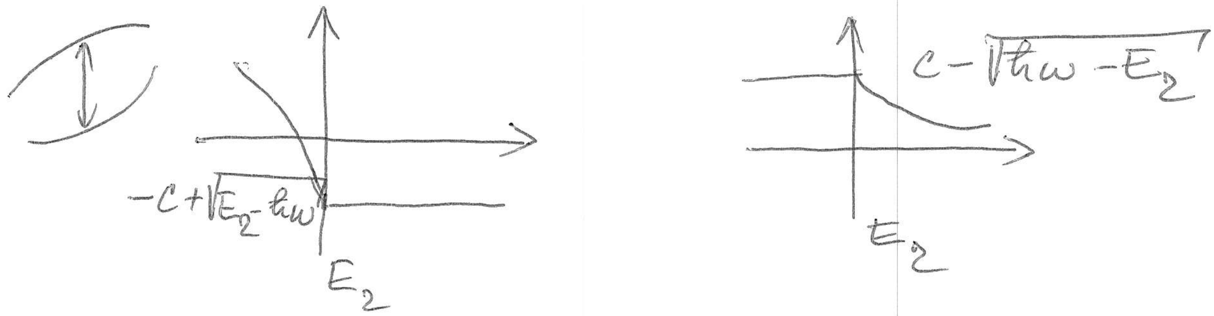


⑥

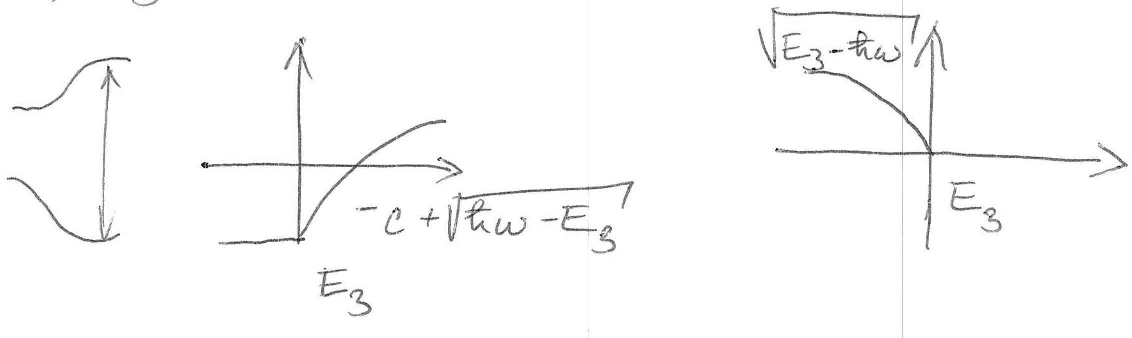
2) M_1 . . . $1 \times m_i < 0$ . . . sedlový bod (saddle point)



3) M_2 . . . $2 \times m_i < 0$ . . . sedlový bod

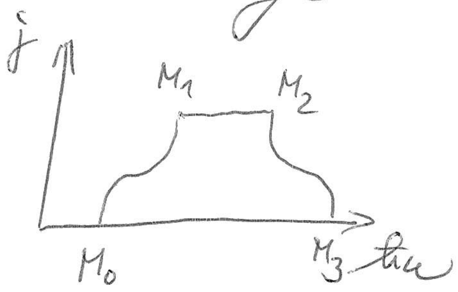


4) M_3 . . . $\# m_i < 0$ . . . lok. maximum



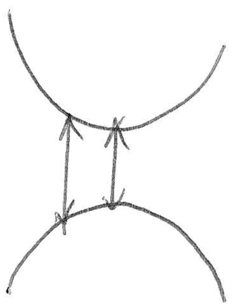
Van Hoveovy singularity

Van Hoveův teorém: Každý absorbční pás má alespoň jednu singularitu každého z uvedených typů



obr. 1 a 2

7 Přímá absorbční hrana:

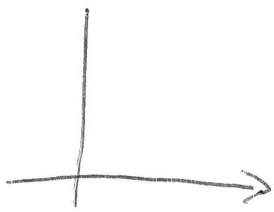


dipólově povolené přechody

GaAs, CdTe, PbS, InSb, GaN

všechny II – ~~VI~~

$$E_{cv} = E_g + \frac{\hbar k^2}{2m_r} \quad ; \quad \frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_{h(v)}}$$ valenční



$$j = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}\, m_r^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\hbar\omega - E_g} & \text{pro } \hbar\omega > E_g \\ 0 & \text{pro } \hbar\omega < E_g \end{cases}$$

⇒ dosazení do rovnice pro ε_2 :

$$\varepsilon_2 = \frac{\pi}{\varepsilon_0} \frac{e^2}{\omega^2} \frac{1}{m_0^2} \sum_k |p_{cv}|^2 \delta(E_c(k) - E_v(k) - \hbar\omega)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\pi}{\varepsilon_0} \frac{e^2}{\omega^2} \frac{1}{m_0^2} |p_{cv}|^2 \cdot \frac{\sqrt{2}\, m_r^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\hbar\omega - E_g}$$

zavedeme $x = \frac{\hbar\omega}{E_g}$

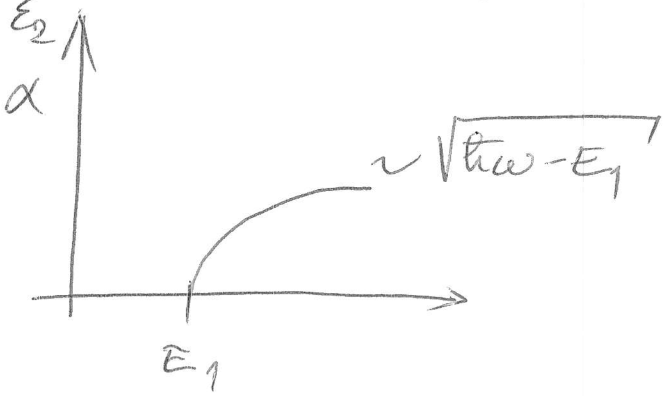
$$\varepsilon_2 = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{(2m_r)^{3/2} e^2}{2\pi m_0^2 \hbar} \underbrace{\frac{1}{\omega^2 \hbar^2}}_{x^{-2} \cdot E_g^{-2}} \cdot E_g^{1/2} \sqrt{x - 1}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_2 = \begin{cases} A x^{-2} (x-1)^{1/2} & \text{pro } x > 1 \\ 0 & \text{pro } x < 1 \end{cases}$$

$$A = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{(2m_r)^{3/2} e^2}{2\pi m_0^2 \hbar} |p_{cv}|^2 E_g^{-3/2}$$

⇒ $(\varepsilon_2)^2$ jako fce $\hbar\omega$ přímka v blízkosti $x = 1$ ⇒ určení E_g a m_r nebo $|p_{cv}|^2$ ⇒ obr. 3

7) Náběh absorpce polovodičů s přímým gapem



začátek absorbce v důsledku mezipásových přechodů ⇒ absorpční hrana
⇒ většinou mezi nejnižším vodivostním pásem a nejvyšším valenčním
- diamantová a zinc-blende struktura
⇒ většinou ve středu B.Z. $\Gamma_{4v} \to \Gamma_{1c}$
⇒ E_0 přechod. Pokud spin-orbitální vazba (In, As, Sb) ⇒ $E_0 + \Delta_0$
- nad hranou ε_2 roste asymetricky ($\langle 111 \rangle$ směr)
E_1 přechod (pokud spin-orbit. ⇒ 2 piky $E_1 + \Delta_1$)
$L \to M_1$ kritický bod $\quad \Delta_1 \approx \frac{2}{3}\Delta_0$
- maximum ε_2 ⇒ E_2 pík (přes velkou část B.Z. podél $\langle 100 \rangle$ a $\langle 110 \rangle$) ⇒ některé přechody M_2 kritický bod
- z valenčního pásu do vyšších vodivostních
⇒ E_0' a E_1' obr 4,5,6,7

(9) obr 7. ⇒ tabulka

Si má $E_0 = 4{,}185$ jakto že není transparentní? ⇒ nepřímý gap ⇒ nepřímé přechody

Ge- obdobně

Zakázaná přímá absorpce

- dipólový přechod je zakázán výběrovým pravidlem
- například Cu_2O, TiO_2, GeO_2
- Cu_2O ⇒ centrosymetrický krystal ⇒ zakázaný přechod v důsledku parity ⇒ $|P_{cv}|^2$ nulový v k_0

$|P_{cv}|^2$ má nenulovou složku závislou na $\vec{k}$

$$|P_{cv}|^2 = \frac{1}{V_{cel}} \int d^3r' \, u^{*c}_{\vec{k}c} (\vec{e} \cdot \vec{p}) u^{v}_{\vec{k}v}$$

pro $\vec{k}_0$ $|\vec{P}_{cv}|^2(k_0) = 0$

rozvoj: $\vec{P}_{cv}(\vec{k}) = \vec{P}_{cv}(\vec{k}_0) + \nabla_k \vec{P}_{cv}(\vec{k})(\vec{k} - \vec{k}_0)$

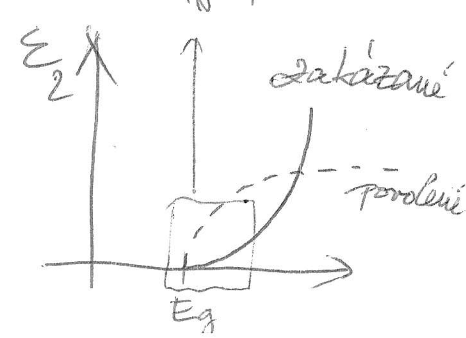
$$\Rightarrow \underline{|P_{cv}|^2 \sim k^2} \sim (\overset{\hbar\omega}{E} - E_g)$$

Sdružená hustota stavů $\sim k$

$\Rightarrow j \sim (\hbar\omega - E_g)^{3/2}$ ⇒

$$\varepsilon_2(\omega) \sim \begin{cases} (\hbar\omega - E_g)^{3/2} & \text{pro } \hbar\omega > E_g \\ 0 & \text{pro } \hbar\omega < E_g \end{cases}$$

zakázané přechody těžko identifikovatelné



1D

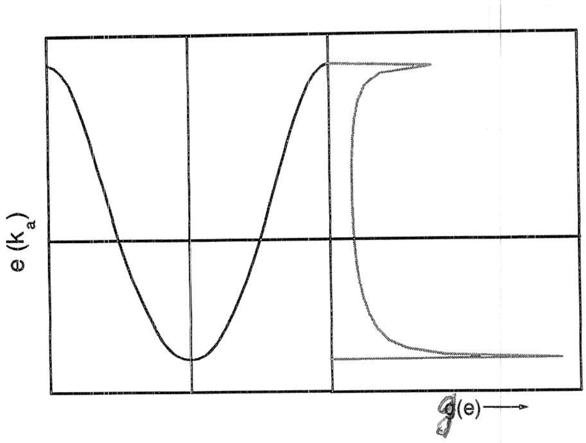


Figure 1: Pásová struktura $\epsilon(\mathbf{k})$ a hustota stavů $g(\epsilon)$ pro lineární řetízek s-orbitalů

3D

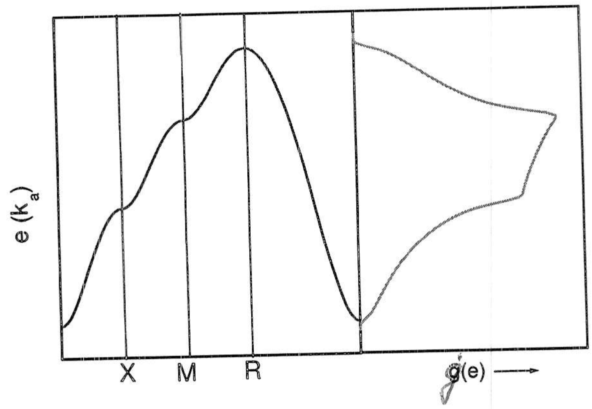
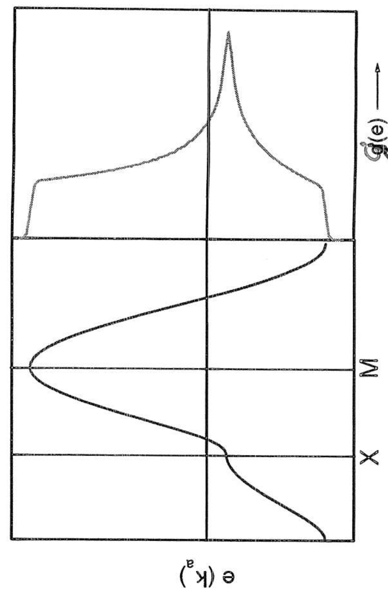


Figure 3: Pásová struktura $\epsilon(\mathbf{k})$ a hustota stavů $g(\epsilon)$ pro primitivní kubickou mříž s-$p_{x,y,z}$



2D

Figure 2: Pásová struktura $\epsilon(\mathbf{k})$ a hustota stavů $g(\epsilon)$ pro tetragonální mříž Cu($3d_{x^2-y^2}$)-O($2p_{x,y}$)$_2$

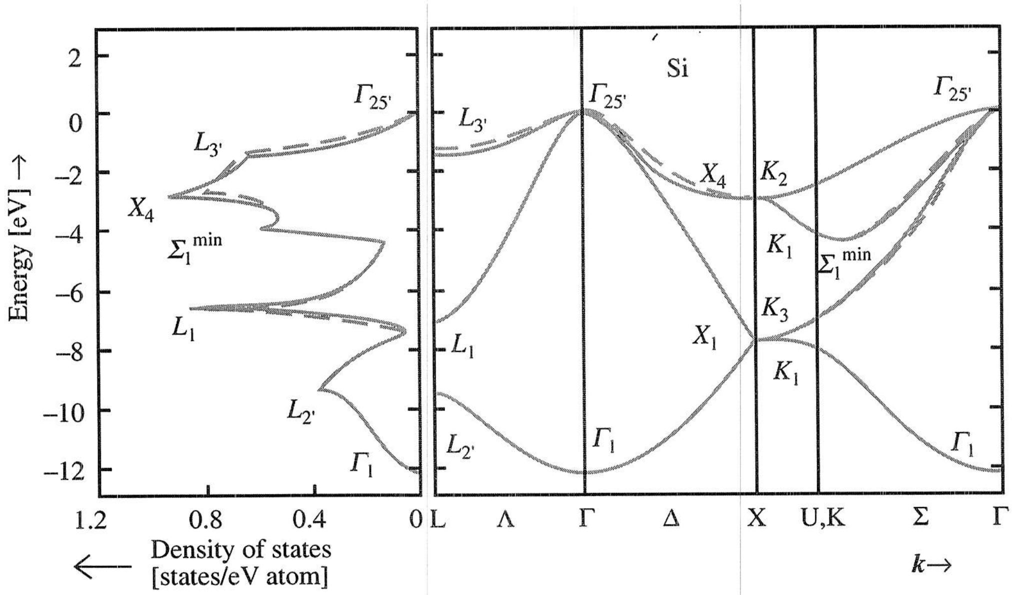


Fig. 2.24. The valence band structure and density of states (see Sect. 4.3.1 for definition) of Si calculated by the tight-binding method (*broken curves*) and by the empirical pseudopotential method (*solid lines*) [2.25]

obr 4.

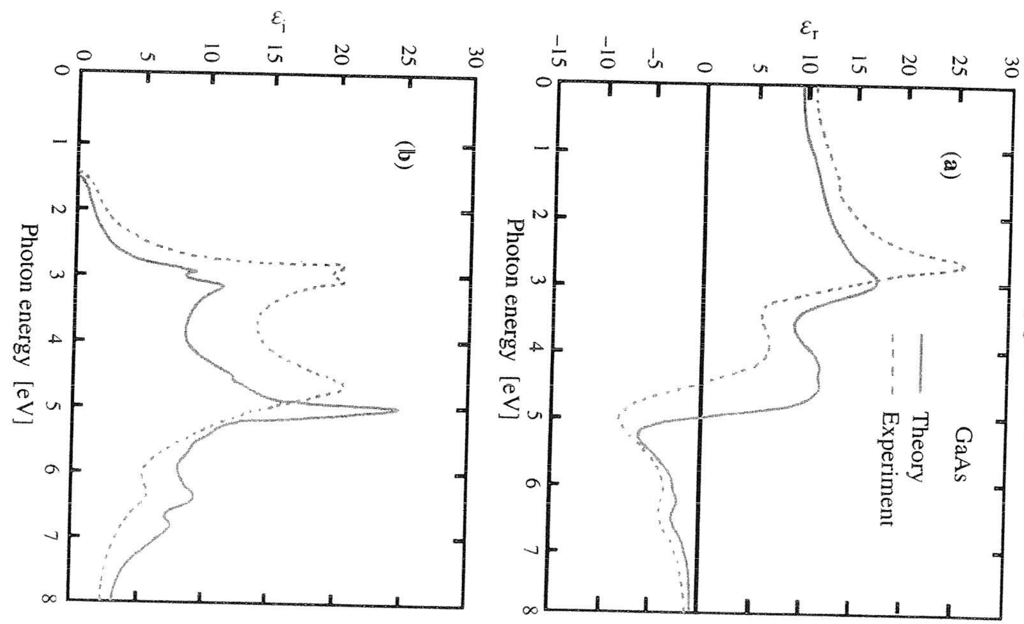


Fig. 6.11a,b. Results for GaAs similar to those presented in Fig. 6.10 for Si (the theoretical results do not include local field corrections) [2.8] p. 105

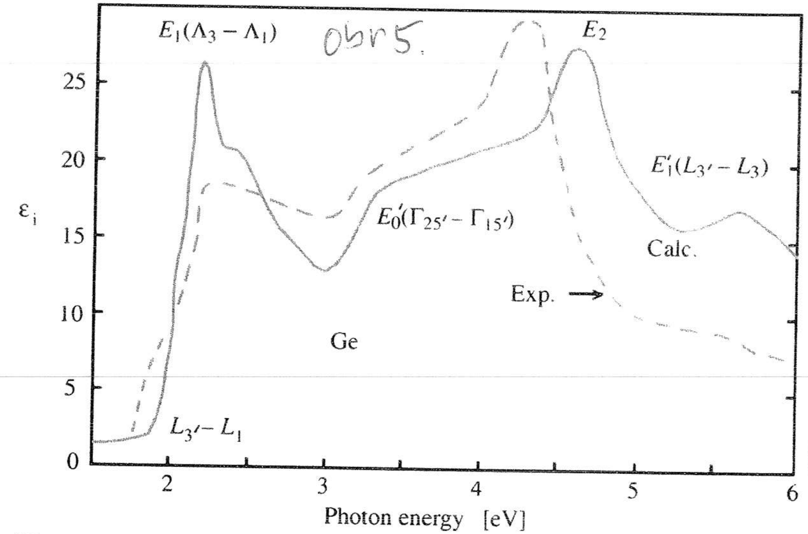
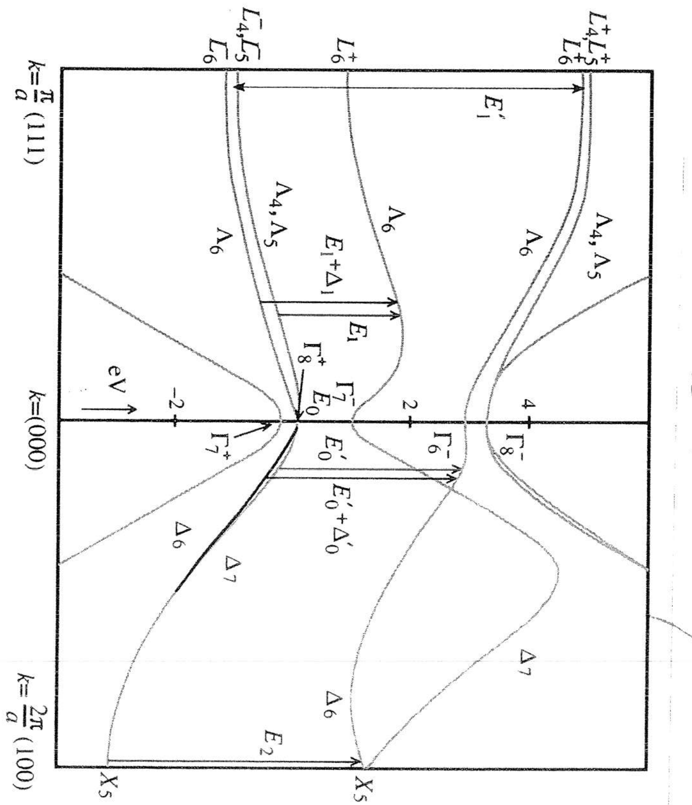


Fig. 6.12. A comparison between the experimental and calculated imaginary part of the dielectric function in Ge. The theoretical curve was calculated from a band structure obtained by the $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ method without spin-orbit interaction [6.25]

Fig. 6.13. The band structure of Ge showing the various direct transitions responsible for the structures in the imaginary part of the dielectric function shown in Fig. 6.12. The transitions giving rise to the various structures in the dielectric function are identified

obr 6



obr 7.

Table 6.3. The measured energies [eV] of the prominent structures in the optical spectra of some diamond and zinc-blende-type semiconductors. All energies are low temperature values except that of the E_0 transition in Si, which was measured at room temperature. Compiled from data listed in [6.27], [6.28] and [6.29].

Transition	Si	Ge	GaAs	InP	GaP	GaN
E_0	4.185	0.898	1.5192	1.4236	2.869	3.302[a]
$E_0+\Delta_0$	4.229	1.184	1.859	1.532	2.949	3.319[a]
E_1	3.45	2.222	3.017	3.287	3.780	7.03
$E_1+\Delta_1$	—	2.41	3.245	3.423	3.835	
E_0'	3.378	3.206	4.488	4.70	4.72	
$E_0'+\Delta_0'$	—	3.39	4.659	5.17	4.88	
E_2	4.330	4.49	5.110	5.05	5.22	7.63
E_1'	5.50	5.65	6.63		6.8	

[a] Grown on MgO.

Obr 3.

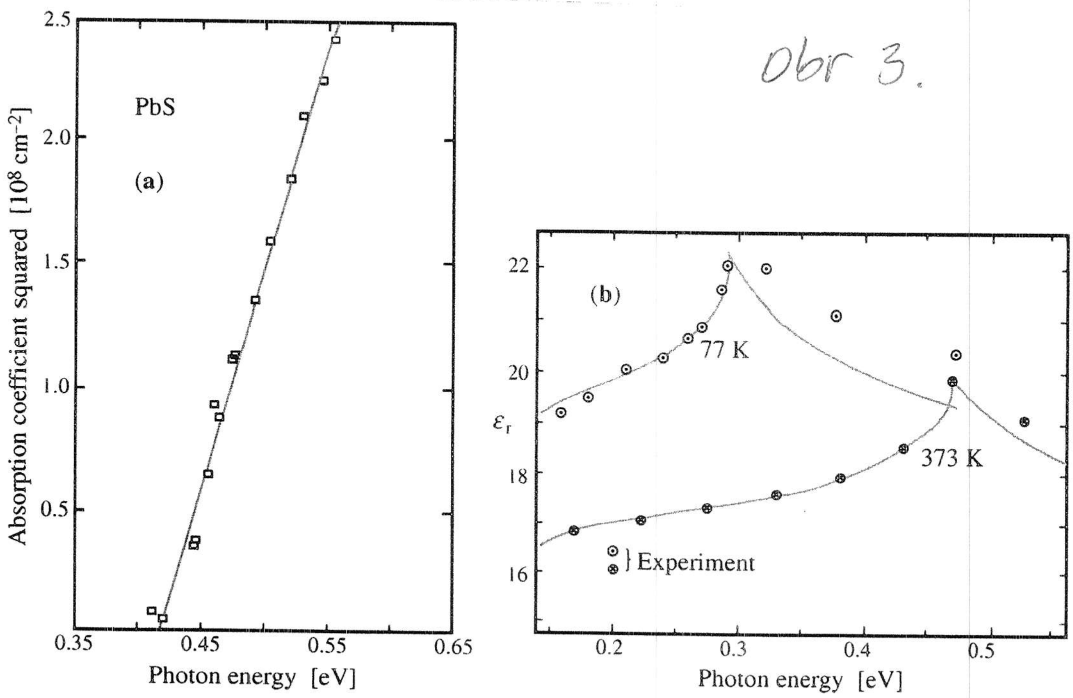


Fig. 6.14. (**a**) Plot of the square of the absorption coefficient of PbS as a function of photon energy showing the linear behavior discussed in the text. The intercept with the x-axis defines the direct energy gap. Reproduced from [6.30]. (**b**) Fits (*curves*) to the experimental values of the real part of the dielectric function of PbS (*data points*) measured at 77 and 373 K with the expression in (6.59). Reproduced from [6.144].

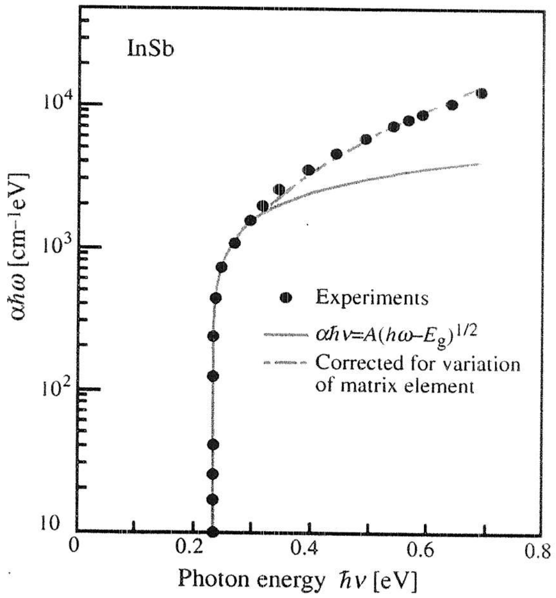
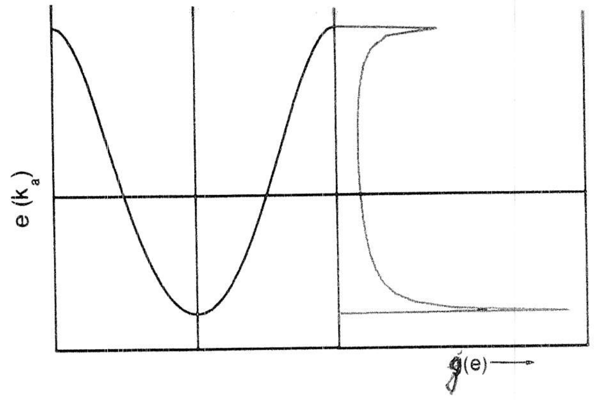


Fig. 6.15. Semilogarithmic plot of the absorption coefficient of InSb at 5 K as a function of photon energy. The *filled circles* represent experimental results from [6.31]. The *curves* have been calculated using various models. The intercept with the x-axis gives the direct bandgap of InSb [6.32]

1D



Obr 1.

Figure 1: Pásová struktura $\epsilon(\mathbf{k})$ a hustota stavů $g(\epsilon)$ pro lineární řetízek s-orbitalů

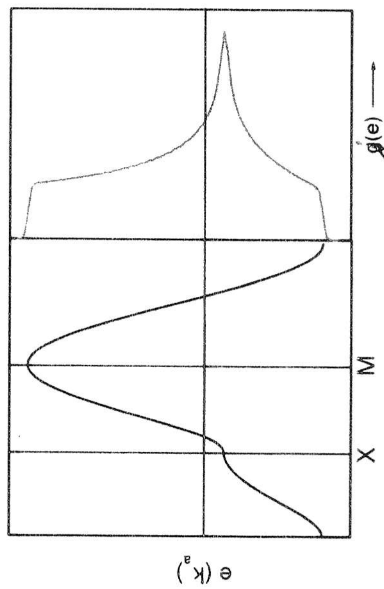


Figure 2: Pásová struktura $\epsilon(\mathbf{k})$ a hustota stavů $g(\epsilon)$ pro tetragonální mříž $Cu(3d_{x^2-y^2})$-$O(2p_{x,y})_2$

2D

3D

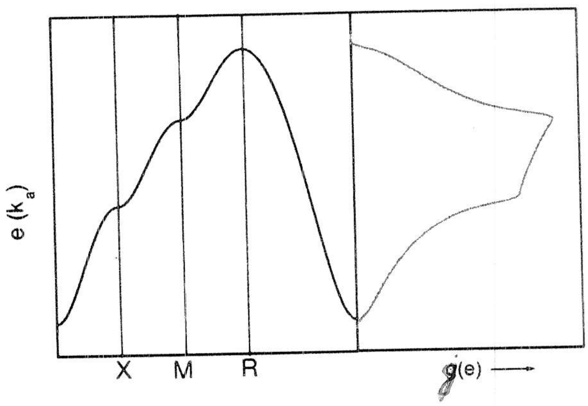


Figure 3: Pásová struktura $\epsilon(\mathbf{k})$ a hustota stavů $g(\epsilon)$ pro primitivní kubickou mříž s-$p_{x,y,z}$

Obr 2.

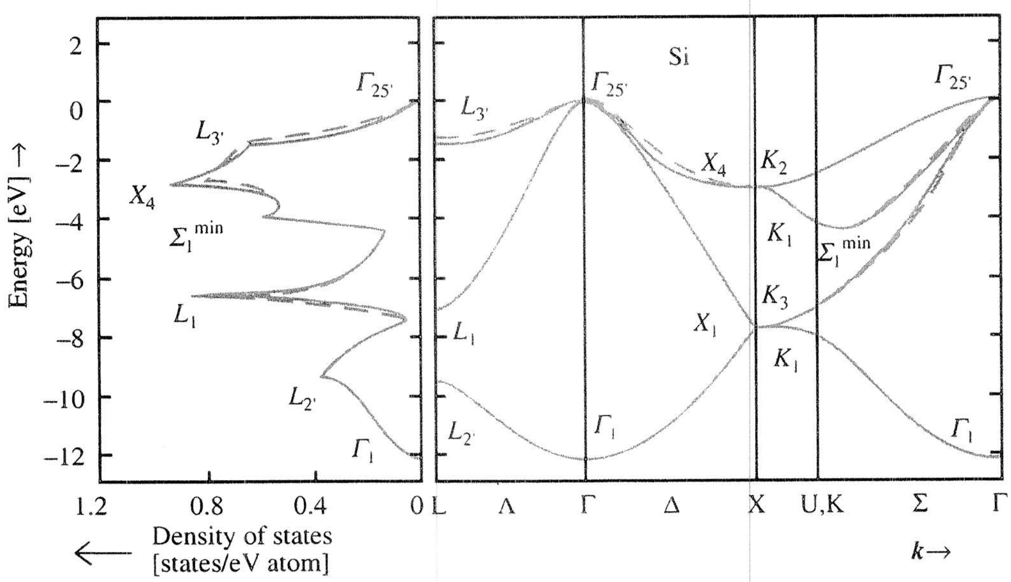


Fig. 2.24. The valence band structure and density of states (see Sect. 4.3.1 for definition) of Si calculated by the tight-binding method (*broken curves*) and by the empirical pseudopotential method (*solid lines*) [2.25]

Appendix A1 The Joint Density of States

In order to obtain the frequency dependence for the joint density of states $\rho(\omega)$ (Equation (4.32)), we assume the parabolic band structure given in Figure 4.8(a). For simplicity, we suppose that the bottom of the conduction band ($E_f = E_g$) and the top of the valence band ($E_i = 0$) are both at $\vec{k} = 0$, as shown in Figure A1.1. Then, the E–k relationships are given by:

$$E_f = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \tag{A1.1}$$

$$E_i = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \tag{A1.2}$$

where m_e^* and m_h^* are the effective masses of the electron and hole, respectively. These formulas indicate iso-energetic surfaces in k-space, as the energy does not depend on the direction of $\vec{k}$ ($E = E(|\vec{k}|)$).

Let us suppose an incident photon of energy $\hbar\omega$. The number of energy states in the frequency range $\omega \to \omega + \mathrm{d}\omega$ (see Figure A1.1) is given by $\rho(\omega)\mathrm{d}\omega$. This number of energy states can also be expressed as a function of the density of states in k-space, so that we can write

$$\rho(\omega)\mathrm{d}\omega = \rho_k \Delta k \tag{A1.3}$$

where ρ_k is the number of states per unit k-volume and $\Delta k = 4\pi k_1^2\,\mathrm{d}k$ is the incremental volume between two spheres of radius k_1 and k_2 ($\mathrm{d}k = k_2 - k_1$). Taking into account expressions (A1.1) and (A1.2) and Figure A1.1, these two k values can easily

An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids J. García Solé, L. E. Bausá, and D. Jaque
 ISBNs: 0-470-86885-6 (HB); 0-470-86886-4 (PB)

as $(dk)^2$ is a very small quantity in comparison to the other terms. Now, combining expressions (A1.8) and (A1.9), we can obtain $(2\mu/\hbar)\,d\omega \cong 2k_1 dk$, or

$$dk \cong \frac{\mu}{\hbar k_1} d\omega \tag{A1.10}$$

and, consequently,

$$\Delta k \cong \frac{4\pi k_1^2 \mu}{\hbar k_1} d\omega = \frac{4\pi k_1 \mu}{\hbar} d\omega \tag{A1.11}$$

Let us now determine ρ_k. This value is given by

$$\rho_k = 2 \times \frac{1}{8\pi^3} = \frac{1}{4\pi^3} \tag{A1.12}$$

where the factor of 2 is due to the fact that there are two electron spin states for each allowed k-state and the factor $1/8\pi^3$ is the density of states in k-space.[1]

Now, inserting Equations (A1.11) and (A1.12) in expression (A1.3) and using (A1.6), we obtain

$$\rho(\omega)d\omega = \frac{1}{4\pi^3} \times \frac{4\pi\mu}{\hbar}\left[\frac{2\mu(\omega-\omega_g)}{\hbar}\right]^{1/2} d\omega \tag{A1.13}$$

and, after simplifying,

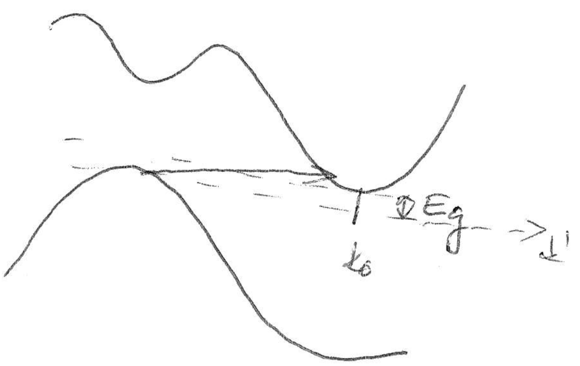
$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2\mu}{\hbar}\right)^{3/2}(\omega-\omega_g)^{1/2} \tag{A1.14}$$

which is just the expression for the joint density of states given by Equation (4.32).

[1] $\boldsymbol{k} = (2\pi/L)(n_x, n_y, n_z)$, where (n_x, n_y, n_z) are integers and L is a macroscopic length. Thus, it can be seen that each allowed $\boldsymbol{k}$ state occupies a k-space volume of $(2\pi/L)^3$, so that the number of states in a unit volume of k-space is $(L/2\pi)^3$. Consequently, a unit volume of material will have $(1/2\pi)^3 = 1/8\pi^3$ states per unit volume of k-space.

① Fyzika polovodičů pro optoelektroniku II 2.5.12

Mezipásová absorpce - nepřímé přechody
- minimum vodivostního pásu není proti maximu valenčního pásu



příklady polovodičů s nepřímým pásem: Si, Ge, AlAs, GaP

obr 1.

- musí dojít k interakci s fononem
- rozdíl ve vlnových vektorech elektronů ve valenčním a vodivostním pásu je kompenzován fononem

⇒ výpočet pravděpodobnosti přechodu pomocí poruchové teorie druhého řádu (fotony i fonony)

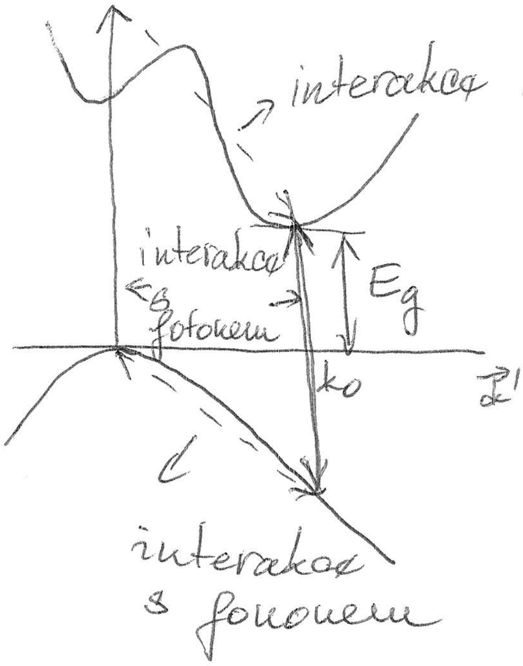
⇒ přechod mezi základním a konečným stavem přes virtuální mezistav $|i\rangle$, $|i'\rangle$
- interakce s fotonem → žádná změna v $\vec{k}$, jen v E
- interakce s fononem → změna v E i $\vec{k}$
- doba života virtuálního stavu je velmi krátká ($\tau \sim 10^{-12}$ s) ⇒ Heisenbergovi relace neurčitosti

$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$ ⇒ krátký čas rozmaže E

a vyrazí elektron i do $E > \hbar\omega$

$E_p \ll E$
↳ ~~skoro~~ konst. pro $\forall$ fonony

② - interakce s fononem musí být rychlá, jinak zase spadne dolu
- celková energie v procesu musí být zachována



Zákony zachování pro celý proces:

$$\hbar\omega = E_g \pm E_p$$
$$(\omega)$$

$$\hbar\vec{q}_p = \hbar(\vec{k} - \vec{k}_0)$$

konstantní v okolí nepřímého gapu

$$P = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{q,k'}\left|\sum_i \frac{\langle f|H_{ep}|i\rangle\langle i|H_{eR}|0\rangle}{E_{i0} - \hbar\omega}\right|^2 \times \delta(E_c(k) - E_v(k') - \hbar\omega \pm E_p)$$

Pravděpodobnost přechodu

$$P \sim \iint \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}') \pm E_p - \hbar\omega)\, d^3k\, d^3k'$$

$$E_c(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_e}k^2 \sim k^2$$

$$E_v(\vec{k}') = -E_g - \varepsilon'(\vec{k}')$$

$$\varepsilon'(\vec{k}') = \frac{\hbar^2}{2m_h}k'^2$$

$$d^3k \Rightarrow dS\, dk_\perp$$

dS … plocha konst. energie

$$dE_c = \frac{\hbar^2}{2m_c}k\,dk \sim k\,dk$$

$$\int dS \sim k^2$$

$$d^3k \sim k^2 dk = k\,k\,dk \sim \sqrt{E_c}\,dE_c$$

$$d^3k' \to dS'dk' \sim k'^2 dk' = k'k'dk' \sim \sqrt{\varepsilon(k')}\,dk'$$

3

$$\int \delta\left(E_c(\vec{k}) + E_g + \varepsilon'(\vec{k}') - (\hbar\omega \pm E_p)\right)\sqrt{\varepsilon'(\vec{k}')}\, d\varepsilon' \sqrt{E_c}\, dE_c =$$

$$= \int \sqrt{E_c(\vec{k})\varepsilon'(\vec{k}')}\, \delta\left(E_c(\vec{k}) + \varepsilon'(\vec{k}') + E_g - (\hbar\omega \pm E_p)\right) d\varepsilon' dE_c = *$$

$$\int f(x)\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0)$$

$$* = \int_0^b \sqrt{E_c(\vec{k})(\hbar\omega \pm E_p - E_c - E_g)}\, dE_c \qquad E_c(\vec{k}) \geq 0$$

↳ nula ≥ minimum E_c

$$\hbar\omega \pm E_p - E_c - E_g \geq 0$$

$$E_c(\vec{k}) \leq \hbar\omega \pm E_p - E_g = b$$

integrál typu:

$$\int_0^b \sqrt{\varepsilon(b-\varepsilon)}\, d\varepsilon = \frac{b^2}{8}\cdot\pi$$

$$\Rightarrow j \sim \begin{cases} (\hbar\omega \pm E_p - E_g)^2 & \text{pro } \hbar\omega \geq E_g \mp E_p \\ 0 & \text{jinde} \end{cases}$$

$+ \Rightarrow$ absorpce fononu ~

$- \Rightarrow$ emise fononu

$\Rightarrow$ dvě absorpční hrany $E_g + E_p$ a $E_g - E_p$

1) $E_g + E_p$ ... absorpce fononu → mizí při nízkých teplotách

maticový element úměrný N_p ... obsazovací číslo fononu $\Rightarrow$ Bose-Einstein $N_p = \dfrac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_p}{kT}} - 1}$

④ $\alpha_{abs.} \sim |c| \left(\frac{2m_v}{\hbar^2} \cdot \frac{2m_c}{\hbar^2}\right)^{3/2} N_p \left(\hbar\omega - E_g + E_p\right)^2$

2) $E_g - E_p$ ... emise fononu

$$N_p + 1 = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_p}{kT}}}$$

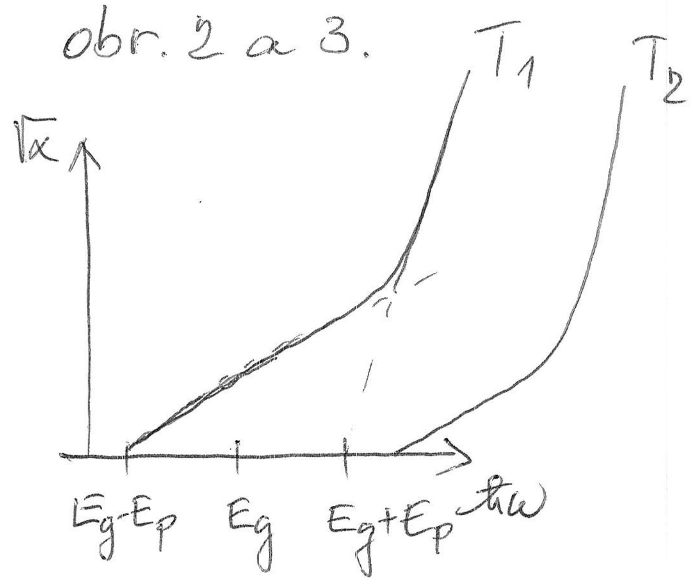
$$\alpha_{emis.} \sim |c| \left(\frac{2m_v}{\hbar^2} \cdot \frac{2m_c}{\hbar^2}\right)^{3/2} (N_p + 1)\left(\hbar\omega - E_g - E_p\right)^2$$

Maticový element : potenciál fononů

$$|c| = \left| \frac{\langle \psi^f_{ck_2} | V_p(\vec{q}, \vec{r}) | \psi^i_{\beta k_1} \rangle \langle \psi^i_{\beta k_1} | \vec{\alpha}\vec{p} | \psi_{v k_1} \rangle}{E_\beta(k_1) - E_v(k_1) - \hbar\omega} \right|^2$$

$$\alpha = \underbrace{\frac{|c|(\hbar\omega - E_g + E_p)^2}{e^{\frac{E_p}{kT}} - 1}}_{\text{absorpce fononu}} + \underbrace{\frac{|c|(\hbar\omega - E_g - E_p)^2}{1 - e^{-E_p/kT}}}_{\text{emise fononu}}$$

obr. 2 a 3.

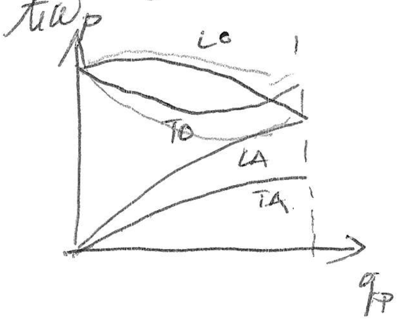


⇒ možnost stanovení E_g a E_p

$\alpha \sim 10\,cm^{-1}$ ... malá absorpce
⇒ vidíme jen pokud nejsou překryty přímými přechody

5) Fonony – polaritony a mřížková absorpce

- optické a akustické fonony
- v krystalech s více atomy v primitivní buňce



EM vlna: $\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$

Izotropní, rovnoměrně rozloženy v krystalu (šedé pozadí)

Soubor klasických oscilátorů: M ... hmotnost
Q ... náboj

$$M\frac{d^2\vec{u}}{dt^2} = -M\omega_T^2\vec{u} + Q\vec{E}$$

Řešení: $\vec{u} = \vec{u}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$] dosadíme

$\Downarrow$

$$\vec{u}_0 = \frac{Q\vec{E}_0}{M(\omega_T^2-\omega^2)}$$ $\Rightarrow$ každé vychýlení $\Rightarrow$ makroskopická polarizace $\vec{P} = NQ\vec{u}$ (N ... hustota oscilátorů)

$$\vec{D} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0\varepsilon\vec{E}$$

dosadíme $\Rightarrow$ $$\varepsilon = 1 + \frac{NQ^2}{\varepsilon_0 M(\omega_T^2-\omega^2)}$$

více rezonančních frekvencí

$$\Rightarrow n^2 = 1 + \sum_i \frac{N_i Q^2}{\varepsilon_0 M(\omega_T^2-\omega^2)}$$ $\Rightarrow$ Sellmeier

popis anomální disperze v plynech

Vliv valenčních elektronů $\varepsilon_e(\omega)$

elektronů ε_e $\rightarrow$ nemění

$E_g \gg \hbar\omega$

- $E_g \gg \hbar\omega \Rightarrow \varepsilon_e(\omega) = \varepsilon_e(0)$ ... statický případ

ε_e

6) Pokud $\omega \gg \omega_T$ oscilátory "nestíhají" pole $\Rightarrow \underbrace{\varepsilon_\ell}_{\text{lattice}} \to 1$

$\Downarrow$

proto $\frac{E_g}{\hbar} \gg \omega \gg \omega_T \Rightarrow \varepsilon \approx \varepsilon_e(0)$

normálně $\varepsilon_e(0)$ píšeme jako ε_∞ → nad vibračními ω, pod excitačními ω

$$\Rightarrow \varepsilon = \varepsilon_\ell + \varepsilon_e = \varepsilon_\infty + \frac{NQ^2}{\varepsilon_0 M(\omega_T^2 - \omega^2)} \; ; \; \omega \ll \frac{E_g}{\hbar} \quad (*)$$

Platí: $\nabla \cdot \vec{D} = 0$

$$\varepsilon(\vec{k} \cdot \vec{E}_0) = 0$$

Dva případy: 1) $\vec{k} \cdot \vec{E}_0 = 0 \Rightarrow$ Transverzální pole

$\vec{E}_0 \perp \vec{k}$

ε popsána (*)

ω_T ... transverzální rezonanční frekvence

2) $\vec{k} \cdot \vec{E}_0 \neq 0$ $\vec{E}_0 \parallel \vec{k}$ a $\varepsilon = 0$ ... Longitudinální pole

$\varepsilon = 0$ při $\omega_L \Rightarrow \varepsilon(\omega_L) = 0$

$\Rightarrow$ z (*)

$$\boxed{\omega_L^2 = \omega_T^2 + \frac{NQ^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty M}}$$

$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \Rightarrow \vec{E} = \frac{1}{\varepsilon} \vec{D}$ pro $\varepsilon = 0$ $\vec{E}$ nemusí být 0 pro $\vec{D} = 0$

(4) $\underset{0}{\vec{D}} = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E}$

$$\varepsilon_\infty \varepsilon_0 \vec{E}_L = -\vec{P}$$

$$E_L = -\frac{\vec{P}}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} = -\frac{NQ\vec{u}}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty}$$

$\vec{E}_L$ ... longitudinální pole

⇒ žádný vnější náboj není nutný ke generování pole pokud soubor oscilátorů kmitá na ω_L

- pole má opačný směr než $\vec{P}$ ⇒ přispívá ke kmitání ⇒ $\omega_L > \omega_T$

⇒ mikroskopicky: LO fonony → indukují dipól. momenty ⇒ polarizaci ⇒ E_L

$\varepsilon_0 = \varepsilon(0)$ ... nízkofrekvenční permitivita

⇒ $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2}\right)$

mikroskop. veličiny Q, M_T ⇒ nedají se měřit
ω_T, ω_L dají se měřit

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 - (\omega^2/\omega_T^2)}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty} = \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2}$$ Lyddane-Sachs-Teller

$$k = \frac{\omega}{c} \cdot n \Rightarrow k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \cdot \varepsilon$$

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\left(\varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 - (\omega^2/\omega_T^2)}\right)$$

(8) Mřížková reflexe (polární krystaly)
(Reststrahlen band)

- TO fonony

$$M\frac{d^2\vec{u}}{dt^2} - M\gamma\left(\frac{d\vec{u}}{dt}\right) = -M\omega_T^2\vec{u} + Q\vec{E}$$

$$\Downarrow$$

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{NQ^2}{\varepsilon_0 M(\omega_T^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)}$$

$$\Downarrow$$

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{\left(1-\left(\omega^2/\omega_T^2\right)\right) - i\left(\omega\gamma/\omega_T^2\right)}$$

- objeví se ~~úzká~~ oblast vysoké reflexe

obr 4 a 5.

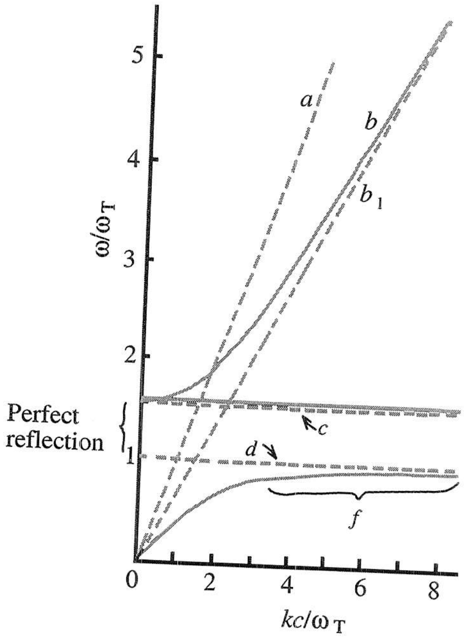


Fig. 6.30. Schematic diagram of the dispersion curves of an uncoupled light wave and lattice vibrations and of their coupled optical wave (called a phonon-polariton) in a polar crystal [6.68]. *a*: light in vacuo; *b*: photon-phonon coupled mode (upper polariton); b_1: photon dispersion in the medium but without coupling to the phonons; *c*, *d*: longitudinal and transverse uncoupled lattice vibrations, respectively; *f*: transverse phonons coupled to the photons (lower polaritons)

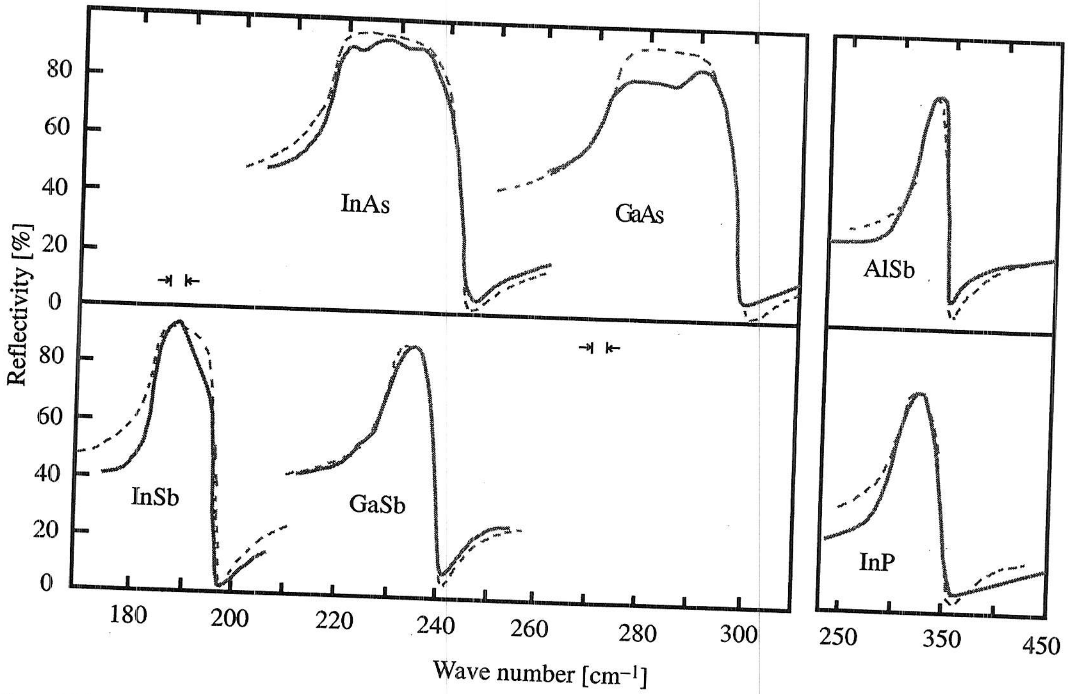


Fig. 6.32. Comparison between experimental (*solid curves*) lattice reflection spectra in several zinc-blende-type semiconductors with those calculated from (6.117b) using (6.8) (*broken curves*). The TO and LO phonon frequencies and the corresponding damping constants were adjusted to fit the experimental spectra. The spectra on the left-hand side were measured at liquid helium temperature; those on the right are room temperature spectra [6.69]

Table 6.5. The TO (ω_T) and LO phonon (ω_L) frequencies and the ratio of the damping constant (γ) to ω_T determined from lattice reflection spectra in several zinc-blende-type semiconductors [6.69] and from Raman scattering [6.72]

Semiconductor	Temperature [K]	ω_T [cm^{-1}]	ω_L [cm^{-1}]	γ/ω_T
InSb	4.2	184.7	197.2	<0.01
	300	179.1	190.4	0.016
InAs	4.2	218.9	243.3	<0.01
InP	300	307.2	347.5	0.01
GaSb	4.2	230.5	240.3	<0.01
GaAs	4.2	273.3	297.3	<0.01
	296	268.2	291.5	0.007
GaP	300	366.3	401.9	0.003
GaN	300	555	740	–
AlSb	300	318.8	339.6	0.0059
CdTe	1.2	145	170	–
ZnSe	80	211	257	0.01

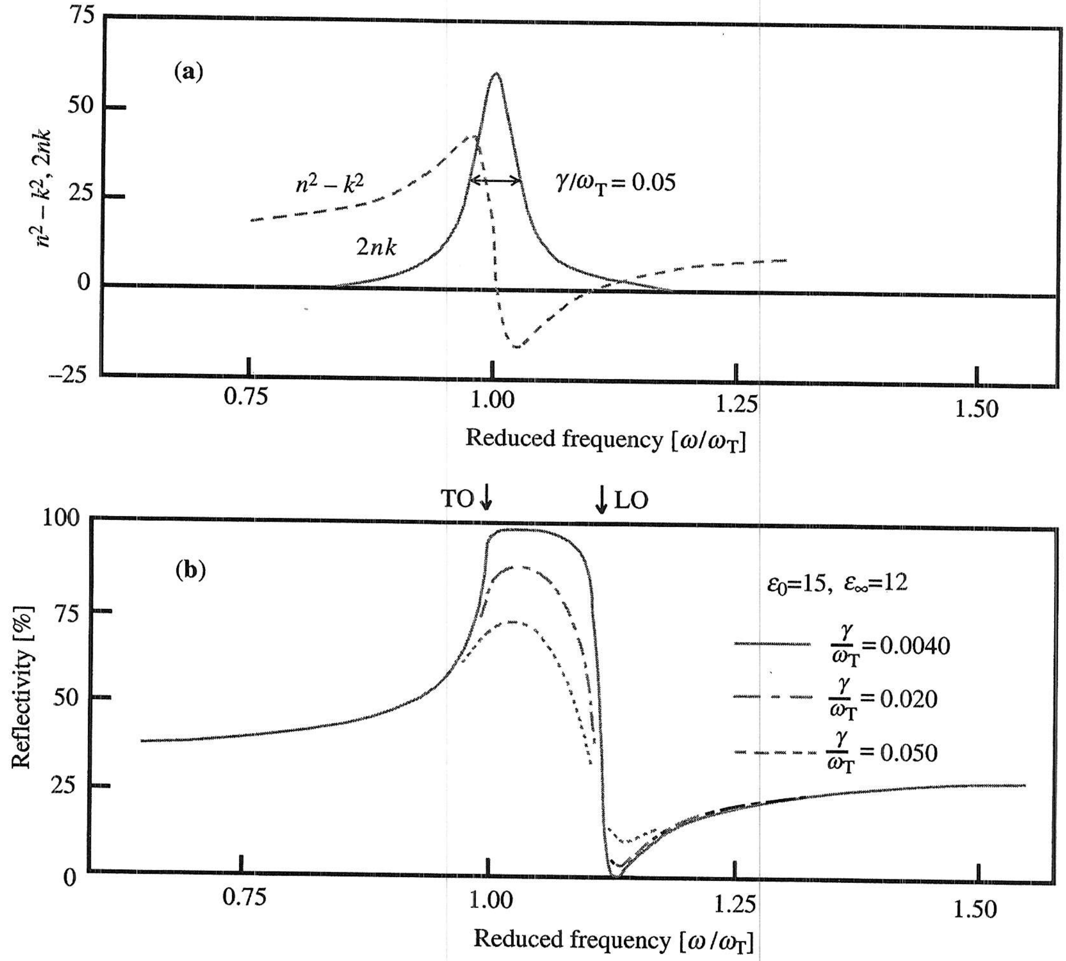


Fig. 6.31. Plot of (**a**) the real and imaginary parts of the complex dielectric constant and (**b**) the reflectivity coefficients calculated from (6.117b). The vertical arrows indicate the frequencies of the TO and LO phonons. Note the deep minimum in the reflectivity which corresponds to $\varepsilon_r \approx 1$ [6.69]

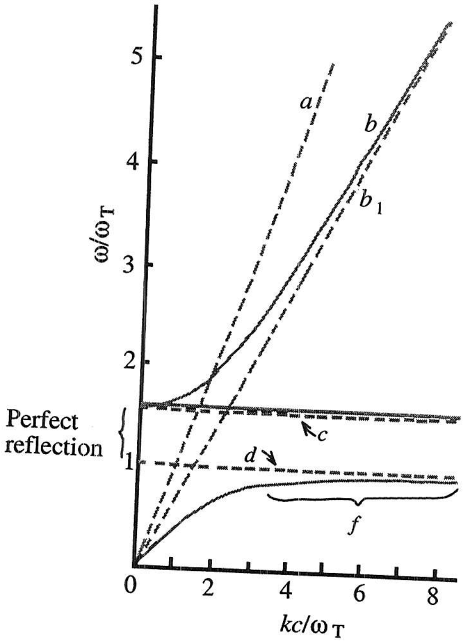


Fig. 6.30. Schematic diagram of the dispersion curves of an uncoupled light wave and lattice vibrations and of their coupled optical wave (called a phonon-polariton) in a polar crystal [6.68]. *a*: light in vacuo; *b*: photon-phonon coupled mode (upper polariton); b_1: photon dispersion in the medium but without coupling to the phonons; *c*, *d*: longitudinal and transverse uncoupled lattice vibrations, respectively; *f*: transverse phonons coupled to the photons (lower polaritons)

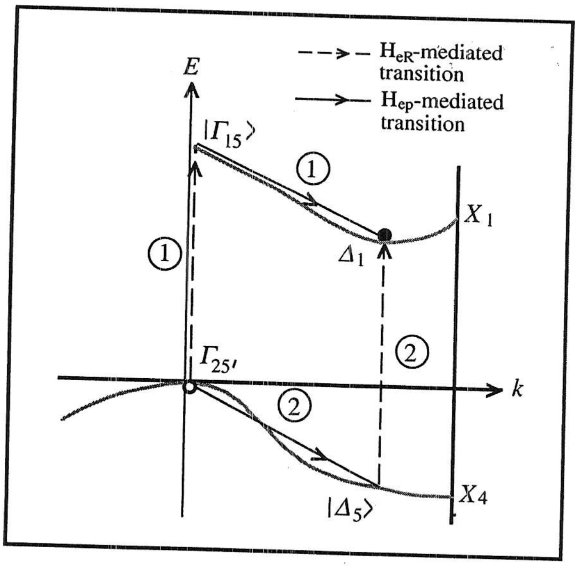
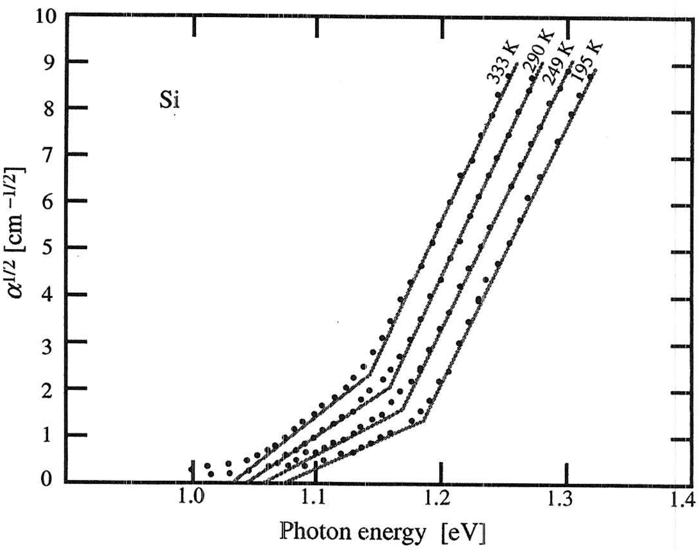
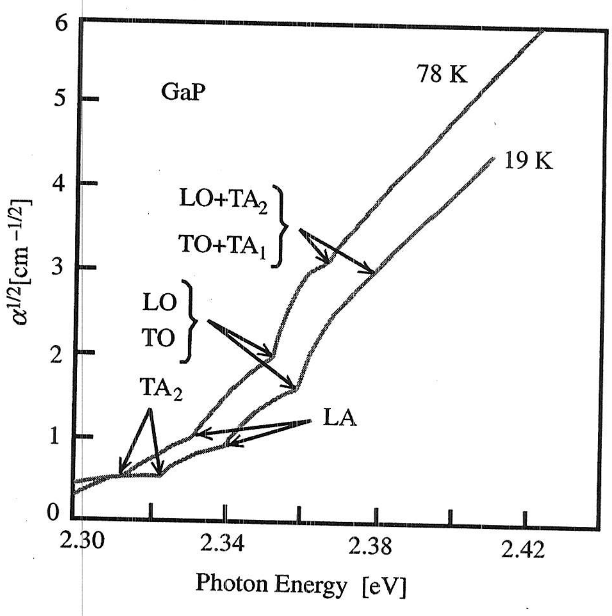


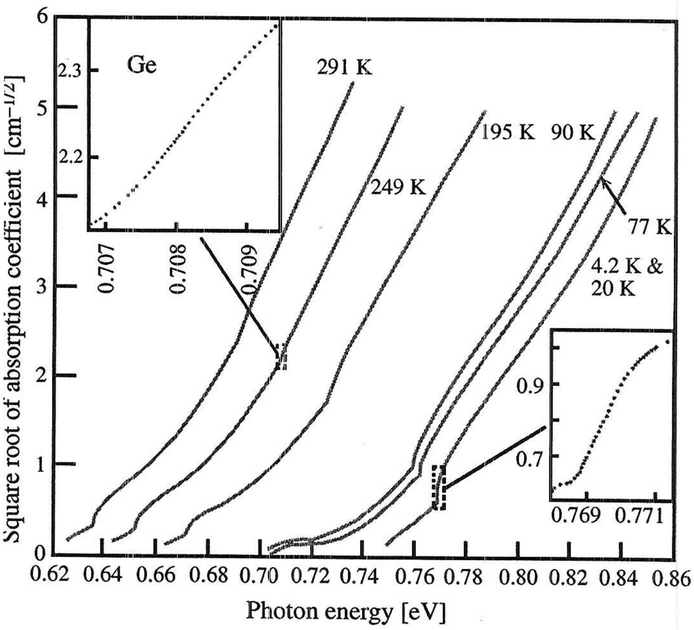
Fig. 6.16. Schematic band structure of Si as an indirect-bandgap semiconductor showing the phonon-assisted transitions (labeled **1** and **2**) which contribute to the indirect absorption edge. $|\Gamma_{15}\rangle$ and $|\Delta_5\rangle$ represent intermediate states



ig. 6.17. Plots of the square root of the absorption coefficients of Si versus photon en-rgy at several temperatures. The two segments of a straight line drawn through the ex-erimental points represent the two contributions due to phonon absorption and emission 6.33]

Fig. 6.19. Plots of the square root of the absorption coefficients of GaP versus photon energy at two different temperatures. The labels denote the exciton-enhanced absorption thresholds associated with the emission of various phonon modes. Note the square-root singularities at the onset of the various phonon-aided processes. These square-roots are typical of indirect excitonic absorption (e.g. without k conservation) [6.35]





ig. 6.18. Plots of the square root of the absorption coefficients of Ge versus photon nergy at several temperatures. The two *insets* compare the exciton-induced abruptness f the absorption edge due to phonon emission at high and low temperatures [6.34]

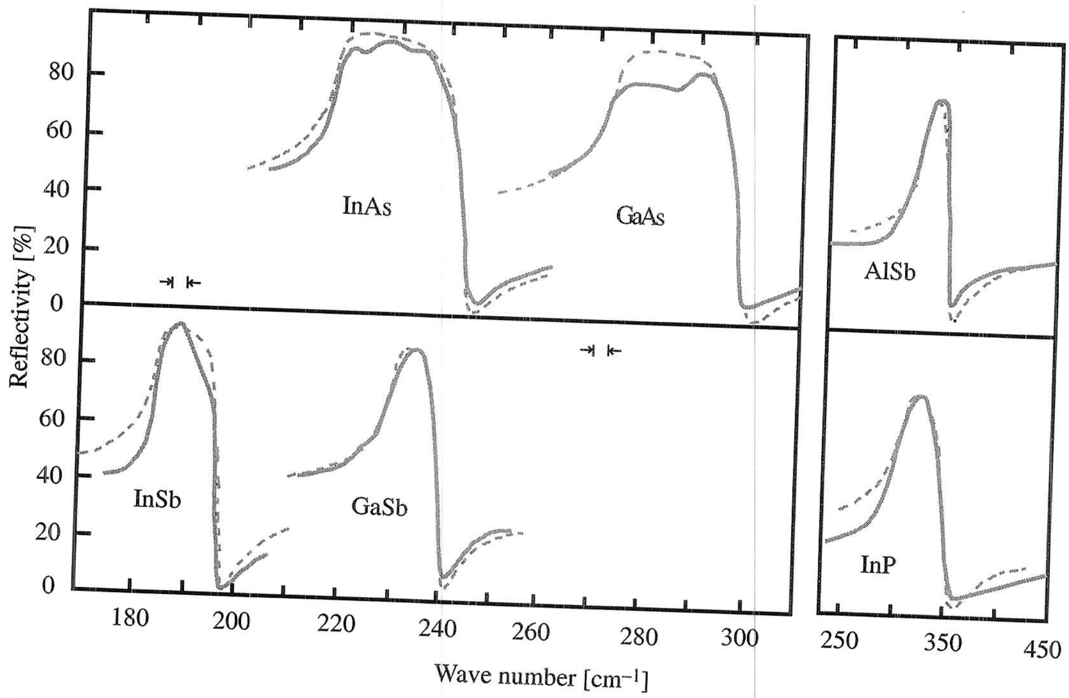


Fig. 6.32. Comparison between experimental (*solid curves*) lattice reflection spectra in several zinc-blende-type semiconductors with those calculated from (6.117b) using (6.8) (*broken curves*). The TO and LO phonon frequencies and the corresponding damping constants were adjusted to fit the experimental spectra. The spectra on the left-hand side were measured at liquid helium temperature; those on the right are room temperature spectra [6.69]

Table 6.5. The TO (ω_T) and LO phonon (ω_L) frequencies and the ratio of the damping constant (γ) to ω_T determined from lattice reflection spectra in several zinc-blende-type semiconductors [6.69] and from Raman scattering [6.72]

Semiconductor	Temperature [K]	ω_T [cm^{-1}]	ω_L [cm^{-1}]	γ/ω_T
InSb	4.2	184.7	197.2	<0.01
	300	179.1	190.4	0.016
InAs	4.2	218.9	243.3	<0.01
InP	300	307.2	347.5	0.01
GaSb	4.2	230.5	240.3	<0.01
GaAs	4.2	273.3	297.3	<0.01
	296	268.2	291.5	0.007
GaP	300	366.3	401.9	0.003
GaN	300	555	740	–
AlSb	300	318.8	339.6	0.0059
CdTe	1.2	145	170	–
ZnSe	80	211	257	0.01

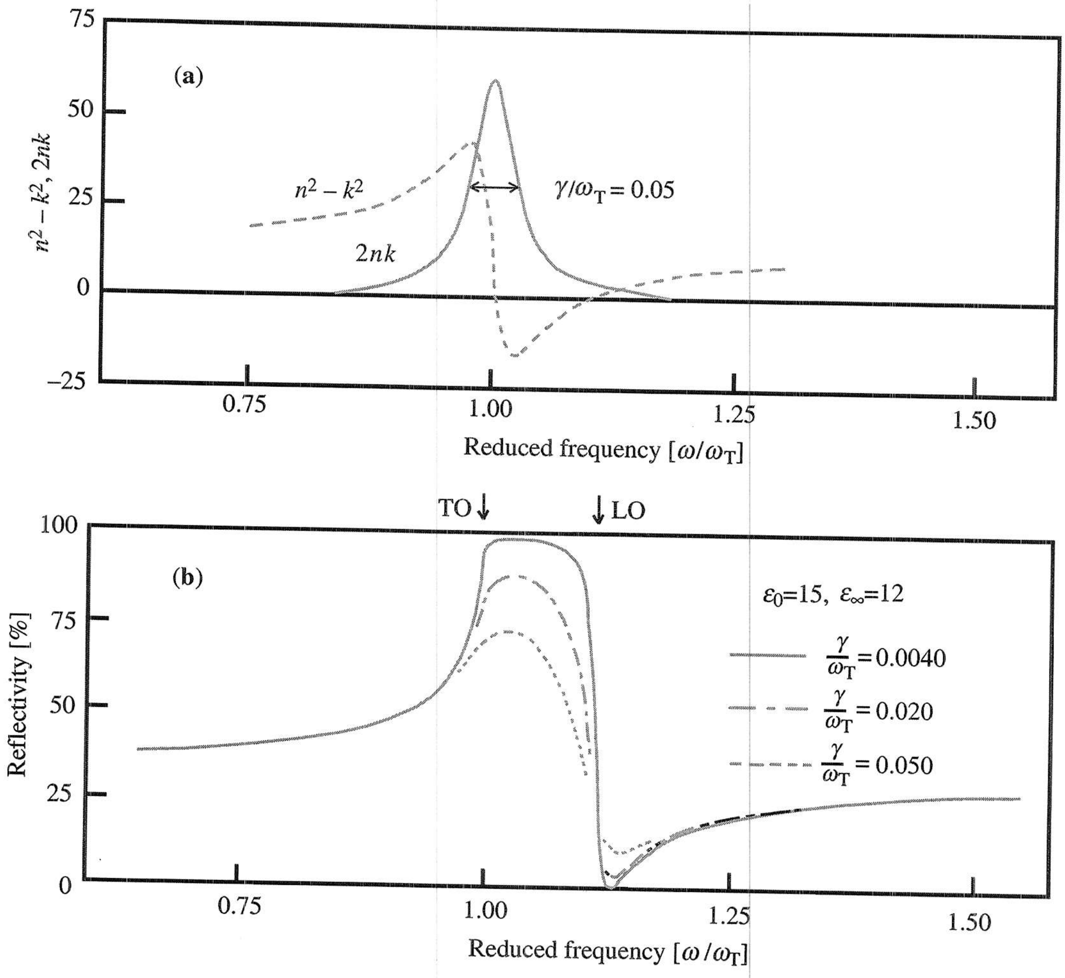


Fig. 6.31. Plot of (**a**) the real and imaginary parts of the complex dielectric constant and (**b**) the reflectivity coefficients calculated from (6.117b). The vertical arrows indicate the frequencies of the TO and LO phonons. Note the deep minimum in the reflectivity which corresponds to $\varepsilon_r \approx 1$ [6.69]

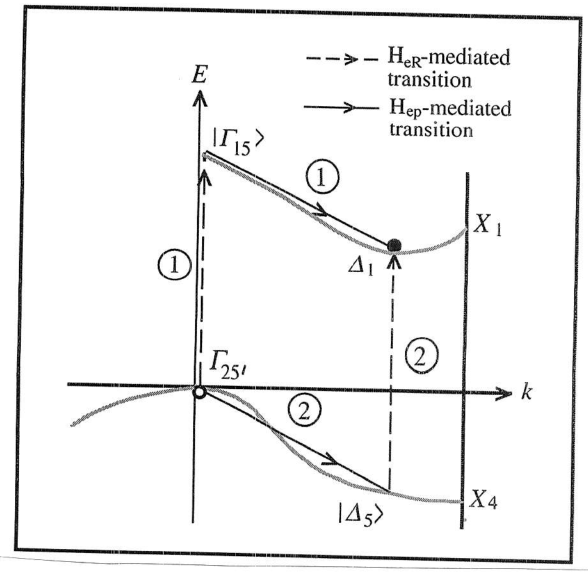


Fig. 6.16. Schematic band structure of Si as an indirect-bandgap semiconductor showing the phonon-assisted transitions (labeled **1** and **2**) which contribute to the indirect absorption edge. $|\Gamma_{15}\rangle$ and $|\Delta_5\rangle$ represent intermediate states

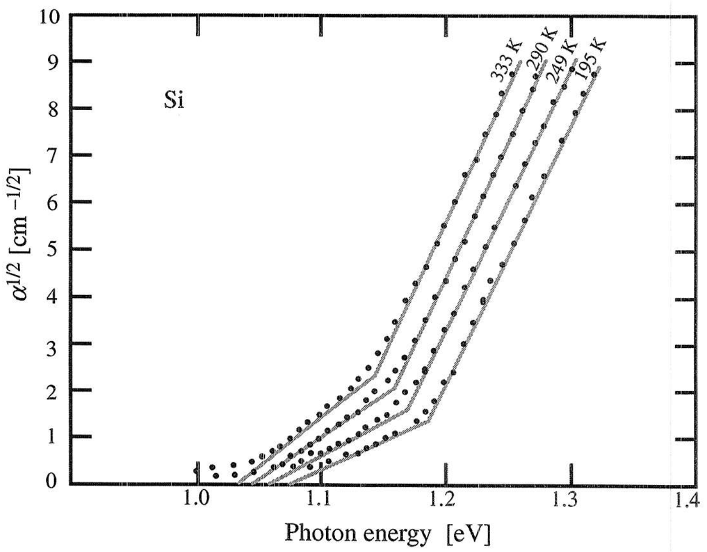


Fig. 6.17. Plots of the square root of the absorption coefficients of Si versus photon energy at several temperatures. The two segments of a straight line drawn through the experimental points represent the two contributions due to phonon absorption and emission [6.33]

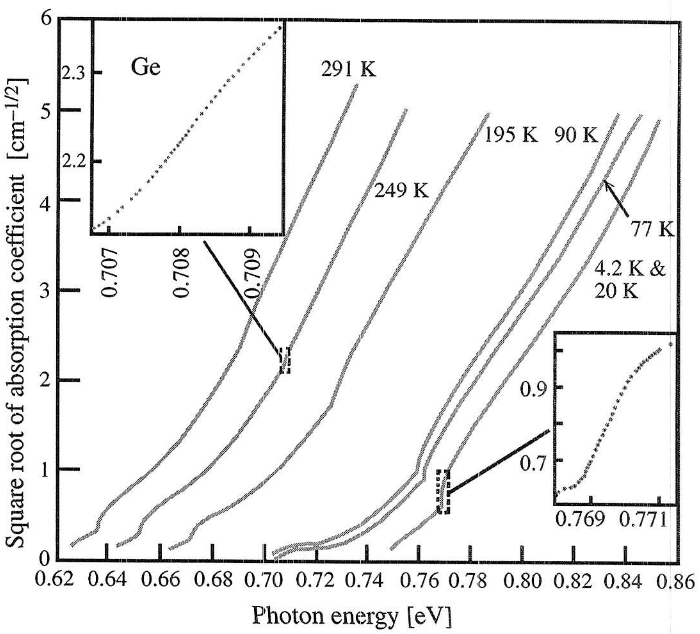


Fig. 6.18. Plots of the square root of the absorption coefficients of Ge versus photon energy at several temperatures. The two *insets* compare the exciton-induced abruptness of the absorption edge due to phonon emission at high and low temperatures [6.34]

Fig. 6.19. Plots of the square root of the absorption coefficients of GaP versus photon energy at two different temperatures. The labels denote the exciton-enhanced absorption thresholds associated with the emission of various phonon modes. Note the square-root singularities at the onset of the various phonon-aided processes. These square-roots are typical of indirect excitonic absorption (e.g. without k conservation) [6.35]