Zusammenfassung vom 01.02.2011

Bewegungsgleichung der TO Phononen

$$M\ddot{\vec{r}} + M\omega_{TO}^2 \vec{r} = q\vec{E}$$

$\vec{r}$ = Auslenkung der Ionen aus der Ruhelage

mit Ansatz einer ebenen Welle für $\vec{E}$ und $\vec{P} = N q \vec{r}$

$$\Rightarrow \quad \left(-\omega^2 + \omega_{TO}^2\right)\vec{P} = \frac{Nq^2}{M}\vec{E}$$

mit $\varepsilon_0 c^2 k^2 \vec{E} = \omega^2\left(\varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}\right)$

Dispersionsrelation des Polaritons für $k \neq 0$

$$\Rightarrow \det\begin{pmatrix} \varepsilon_0\left(\omega^2 - c^2k^2\right) & \omega^2 \\ N q^2/M & \omega^2 - \omega_{TO}^2 \end{pmatrix} = \varepsilon_0\left(\omega^2 - c^2k^2\right)\left(\omega^2 - \omega_{TO}^2\right) - \omega^2\frac{N q^2}{M} = 0$$

Dispersionsrelation für $k = 0$

$$\Rightarrow \quad \omega_1^2 = \omega_{TO}^2 + \frac{Nq^2}{\varepsilon_0 M}$$ *phononenartiger Ast*

$$\Rightarrow \quad \omega_2 = 0$$ *photonenartiger Ast*

Dispersionsrelation für $k \to \infty$

$$\Rightarrow \quad \omega_1 = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_\infty}}k$$ *photonenartiger Ast*

$$\Rightarrow \quad \omega_2 = \omega_{TO}$$ *phononenartiger Ast*

Zusammenfassung vom 01.02.2011

aus $\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon(\omega)\varepsilon_0 \vec{E}$ *und* $\left(-\omega^2 + \omega_{TO}^2\right)\vec{P} = \frac{Nq^2}{M}\vec{E}$

dielektrische Funktion des Polaritons ➔ $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{Nq^2}{\varepsilon_0 M\left(\omega_{TO}^2 - \omega^2\right)}$

ε_∞ berücksichtigt die energetisch höher liegenden Interbandübergänge

aus $\varepsilon(0) = \varepsilon_\infty + \frac{Nq^2}{\varepsilon_0 M \omega_{TO}^2}$ ➔ $\frac{Nq^2}{\varepsilon_0 M} = \omega_{TO}^2\left[\varepsilon(0) - \varepsilon_\infty\right]$

aus $\varepsilon(\omega = \omega_{LO}) = 0 = \varepsilon_\infty + \frac{Nq^2}{\varepsilon_0 M\left(\omega_{TO}^2 - \omega_{LO}^2\right)} = \frac{\omega_{TO}^2\varepsilon(0) - \omega_{LO}^2\varepsilon_\infty}{\omega_{TO}^2 - \omega_{LO}^2}$

Lyddane-Sachs-Teller-Relation ➔ $\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} = \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}$

dielektrische Funktion des Polaritons ➔ $\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty)\frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2}$

$\omega \to \omega_{LO}$ ➔ $\varepsilon \to 0,$

$\omega \to \omega_{TO}$ ➔ $\varepsilon \to \infty,$

Bandlücke des Polaritons $\omega_{TO} < \omega < \omega_{LO}$ ➔ $\varepsilon < 0$ ➔ *keine propagierenden Wellen mehr, da k imaginär wird!*

➔ *$\exists$ Bandlücke !*

➔ *Totalreflexion in der Bandlücke*

Zusammenfassung vom 01.02.2011

Exziton gebundener Elektron-Loch-Zustand in der Bandlücke

- ➔ *Bindungsenergie:* 1 meV - 1 eV
- ➔ *Analogie zum Wasserstoffatom*
- ➔ *nicht stabil: Zerfall durch Elektron $\rightarrow$ Loch-Rekombination*

Mott-Wannier-Exziton delokalisiertes Exziton

- ➔ *schwach gebunden*
- ➔ *erstreckt sich über mehrere Gitterkonstanten*

Frenkel-Exziton lokalisiertes Exziton

- ➔ *Exziton ist an einem Atom oder Molekül gebunden*
- ➔ *können sich mittels Hopping nur langsam durch den Kristall bewegen*

Energie-Niveaus des Exzitons Beschreibung mittels Wasserstoffatom-Modell

- ➔ *betrachte Exziton als Quasiteilchen mit reduzierter Masse μ^* und Impuls des Schwerpunktes $\vec{K}$:*

$$E_{n,\vec{K}} = E_g - \underbrace{\frac{\mu^* e^4}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon^2\varepsilon_0^2}\frac{1}{n^2}}_{\text{Wasserstoff-Niveau}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 K^2}{2\left(m_e^* + m_h^*\right)}}_{\text{parabolisches Band}} \qquad \frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$$

Zusammenfassung vom 01.02.2011

Raman-Effekt inelastische Streuung von Photonen durch Erzeugung oder Vernichtung von Phononen (oder Magnonen)

Auswahlregeln für Raman-Effekt *(1. Ordnung)*

$$\omega' = \omega \pm \Omega$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{K}$$

$\hbar\omega, \hbar\vec{k} =$ *Energie, Impuls des einfallenden Photons*

$\hbar\omega', \hbar\vec{k}' =$ *Energie, Impuls des gestreuten Photons*

$\hbar\Omega, \hbar\vec{K} =$ *Energie, Impuls des erzeugten oder vernichteten Phonons*

➔ *beim Raman-Effekt 2.Ordnung sind zwei Phononen beteiligt*

Stokes-Prozess Erzeugung eines Phonons: $\omega' = \omega - \Omega$

Anti-Stokes-Prozess Vernichtung eines Phonons: $\omega' = \omega + \Omega$

Ursache des Raman-Effekts Abhängigkeit der Polarisierbarkeit α von der Auslenkung der Ionen

➔ *betrachte eine Phononen-Schwingung mit Auslenkung r(t):*

nichtlineare Polarisierbarkeit

$$\alpha(r) = \alpha_0 + \alpha_1 r(t) + \alpha_2 r^2(t) + \cdots$$

mit $r(t) = r_0 \cos(\Omega t)$ ➔ $p(t) = \alpha(r)E(t) = \alpha_0 E_0 \cos(\omega t) + \alpha_1 r_0 E_0 \cos(\omega t)\cos(\Omega t)$

und $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$

induzierte Polarisation

$$p(t) = \underbrace{\alpha_0 E_0 \cos(\omega t)}_{\text{elastische Streuung}} + \underbrace{\tfrac{1}{2}\alpha_1 r_0 E_0 \left\{ \underbrace{\cos[(\omega+\Omega)t]}_{\text{Anti-Stokes-Linie}} + \underbrace{\cos[(\omega-\Omega)t]}_{\text{Stokes-Linie}} \right\}}_{\text{inelastische Streuung: Raman-Effekt}}$$