

Hunklinger Bild 13.1: Querschnitt durch eine dünne dielektrische Platte. Die Elektroden (dunkelblau) tragen Ladungen. Das äußere Feld  $E_a$ im Luftspalt wird durch Polarisationsladungen auf der Probe reduziert. Das Feld im Lochinnern ist größer als im umgebenden Medium.



Hunklinger Bild 13.2: Schnitt durch Probe mit Loch im Zentrum. Die Ladung auf der Lochoberfläche stammt von der homogenen Polarisation der Probe. Die Ladung auf dem dunkelblauen Streifen ist d*q*.



## **ε(ω): polarer Kristall** Übersicht

Hunklinger Bild 13.3: Schema der Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätskonstanten eines polaren Kristalls. Größe und Lage der einzelnen Beiträge sind sind festkörperspezifisch.



Hunklinger Bild 13.4: Frequenzgang des Realund Imaginärteils der dielektrischen Funktion  $\varepsilon$ . Bei schwacher Dämpfung liegt die erste Nullstelle von  $\varepsilon'$  etwa bei der Resonanzfrequenz  $\omega_1$  nah am Maximum von  $\varepsilon''$ .

### **ε(ω): polarer Kristall**



ε von Ge

Hunklinger Bild 13.5: Real- (blau) und Imaginärteil (schwarz) der dielektrischen Funktion von Ge. Nach H.R. Philipp, H. Ehrenreich, Phys. Rev. **129**, 1550 (1963).



Hunklinger Phononendispersion von Bild 6.21: Si. Nach P. Giannozzi et al., Phys. Rev. B 43, 7231 (1991) Bild 6.20: LiF. Nach G. Dolling et al., Phys. Rev. 168, 970 (1968)



Hunklinger Bild 13.6: Zur Herleitung des lokalen Feldes bei optischen Gitterschwingungen in Ionenkristallen. Die Knotenebenen (durchgezogene Linien) sind bei langwelligen Phononen viele Atomlagen von einander entfernt.

- a) Bei LO-Phononen verläuft das lokale Feld antiparallel zur Polarisation.
- b) Bei TO-Phononen verlaufen die beiden Felder parallel zu einander.



Kreisfrequenz  $\omega$ 

Hunklinger Bild 13.7: Frequenzgang von  $\varepsilon$ eines Ionenkristalls aufgrund der optischen Phononen. Real- (blau) und Imaginärteil (schwarz). Nullstellen von  $\varepsilon'$ liegen bei  $\omega_{I}$  und in der Nähe von  $\omega_{t}$ . Im Band von  $\omega_{t} \dots \omega_{I}$  werden Wellen an der Oberfläche reflektiert.

Tabelle 13.2:  $\varepsilon_{st}$  und  $\varepsilon_{oo}$  und Frequenzen optischer Phononen einiger dielektrischer Kristalle. (Die meisten Daten wurden E. Kartheuser, Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors, J.T. Devreese, ed., North Holland, 1972, entnommen.)

	LiCl	NaCl	NaJ	KC1	KBr	CsCl	GaAs	CdS	ZnSe	PbS
$\varepsilon_{ m st}$	11,95	5,9	7,28	4,85	4,52	6,68	12,83	8,42	8,33	190
$\varepsilon_{\infty}$	2,79	2,40	3,15	2,22	2,43	2,69	10,90	5,27	5,90	18,50
$\omega_{\rm t}/10^{13}{\rm Hz}$	4,16	3,35	2,34	2,67	2,15	2,02	5,14	4,60	3,90	1,26
$\omega_\ell/10^{13}{\rm Hz}$	8,19	5,10	3,43	4,07	3,18	3,16	5,58	5,80	4,63	4,03





**Bild 14.13b:** Dielektrische Funktion (Realteil) von SrF<sub>2</sub>, gemessen über einen weiten Frequenzbereich Man erkennt die Abnahme der ionischen Polarisierbarkeit bei hohen Frequenzen. (Nach A. von Hippel)



### Polaritonendispersion

Hunklinger Bild 13.8: Dispersionrelation der Polaritonen. Gestrichelt die Dispersionskurven des Lichts. Die Dispersion der optischen Phononen ohne Kopplung verläuft waagrecht. Die blauen Kurven wurden mit Werten für Kochsalz berechnet:  $\omega_t = 31$ ,  $\omega_l = 50$  THz,  $\varepsilon_{st} =$ 5,9,  $\varepsilon_{oo} = 2,25$ . Die verbotene Zone ist hellblau markiert.



#### **Polaritonen von GaP**

Hunklinger Bild 13.9: Polaritonen (dunkelblaue Punkte) in GaP gemessen mit Raman-Streuung. Zusätzlich sind noch Messwerte für LO-Phononen hellblau eingezeichnet. Die Dispersion der ungekoppelten TO-Phononen ist gestrichelt. Nach C.H. Henry, J.J. Hopfield, Phys. Rev. Lett. **15**, 964 (1965)



Hunklinger Bild 13.23: Absorptionsspektrum von festem Kr. Nach G. Baldini, Phys. Rev. 128, 1562 (1962)



### **Mott-Wannier Exzitonen**

Absorption von Cu<sub>2</sub>O

Hunklinger Bild 13.24: Optische Absorption von Cu<sub>2</sub>O bei 77K als Funktion der eingestrahlten Photonenenergie. Der Fundamentalabsorption ist eine Reihe von Exzitonenlinien vorgelagert. Nach P.W. Baumeister, Phys. Rev. 121, 359 (1961).



**Bild 14.3:** Reflexionskoeffizient von Indiumantimonid mit einer Elektronenkonzentration von  $n = 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . (Nach J.N. Hodgson)



Reduktion von Strahlungswärmeverlusten in Fenstern, Lampen

Transparente Elektrode, zB LCD

Hunklinger Bild 13.28: Transmission (Tr) und Reflexion (R) zweier 0,3 mm dicken  $In_2O_3$ -Schichten (ITO) mit unterschiedlicher Sn-Dotierung. Pfeile kennzeichnen die Plasmawellenlängen. Wellen durch Dünn-schichtinterferenzen verursacht. Nach G. Frank et al., Phys. Bl. **34**, 106 (1978)



#### **Plasmon-Polaritonen**

Hunklinger Bild 13.25: Dispersion von Plasmon-Polaritonen im freien Elektronengas für  $\varepsilon_{00}$  = 1. Unterhalb der Plasmafrequenz liegt ein verbotener Frequenzbereich, in dem sich elektromagnetische Wellen nicht ausbreiten.

#### **Volumen- und Oberflächenplasmonen**



Hunklinger Bild 13.30: Energieverlust energiereicher Elektronen beim Durchgang durch dünne Aluminiumfolien. a) 20 keV-Elektronen.  $\omega_p = 15,3$  eV. Nach L. Marton et al., Phys. Rev. 126, 182 (1962) b) 2 keV-Elektronen. Nach C.J. Powell und J.B. Swan, Phys. Rev. 115, 869 (1959)



Hunklinger Bild 13.31: Links: Dispersion. Rechts Kretschmann-Geometrie zum Nachweis von Oberflächenplasmonen. Durch die Anregung von Oberflächenplasmonen (dicker Pfeil) wird dem einfallenden Licht sehr effektiv Energie entzogen. Nach V. Temnov und U. Woggon, Physik Journal 9, 45 (2010)

## Formation of a polaron



(a) A conduction electron is shown in a rigid lattice of an ionic crystal, KCl.

(Kittel Fig. 14.19)

The forces on the ions adjacent to the electron are shown.

(b) The electron is shown in an elastic or deformable lattice.

The electron plus the associated strain field is called a polaron.

The displacement of the ions increases the effective inertia and, hence, the effective mass of the electron;

in KCl the mass is increased by a factor of 2.5 with respect to the band theory mass in a rigid lattice.

In extreme situations, often with holes, the particle can become selftrapped (localized) in the lattice.

In covalent crystals polaron deformations are small because the forces on the atoms from the electron are weaker than in ionic crystals.



 $\epsilon_1$ 

 $k_{y}$ 

04

 $\epsilon_1$ 

(a)

(b) the electrons in initial orbitals 1 and 2 have no vacant final orbitals available that allow energy to be conserved in the collision. Orbitals such as 3 and 4 would conserve E and  $\mathbf{k}$ .

(c) We have denoted with x the wavevector of the center of mass of 1 and 2. All pairs of orbitals 3 and 4 conserve momentum and energy if they lie at opposite ends of a diameter of the small sphere. The small sphere was drawn from the center of mass to pass through 1 and 2. But not all pairs of points 3, 4 are allowed by the exclusion principle, for both 3, 4 must lie outside the Fermi sphere; the fraction allowed is  $=E_1/E_{\rm F}$ . (Kittel Fig. 14.18)



ц.	Chemisches Potential		the second
~			
0 -	Bereich normaler $Z_{-e\varphi(r)}$	Bereich erhöhter	$r \longrightarrow$

**Bild 14.9:** Im thermischen und im Diffusionsgleichgewicht ist das chemische Potential konstant. Damit es konstant bleibt, erhöhen wir dort, wo die potentielle Energie klein ist, die Elektronenkonzentration; dort, wo das Potential groß ist, erniedrigen wir sie.



Abb. 86. Einfluß einer Störung auf die FERMI-Verteilung



**Bild 14.10a:** Vergleich des abgeschirmten mit dem nicht abgeschirmten Potential einer positiven Einheitsladung. Die Abschirrmlänge  $k_s^{-1}$  wurde gleich Eins gesetzt. Für die statische Abschirmwechselwirkung wurde die Thomas-Fermi-Näherung benutzt, die für  $K \ll k_F$  gilt. Umfangreiche Rechnungen, in denen alle Wellenvektoren mitgenommen werden, führen zu räumlichen Oszillationen in  $2k_Fr$ , den so genannten Friedel-Oszillationen. Sie sind in QTS, Seite 114, dargestellt.

## Screening vs Electron density



# Cs auf Ag(111)



## Mott insulator

odd number of electrons per unit cell causes metallicity OK for s-like orbitals (e.g. noble metals) or p-like (e.g. Al) Picture breaks down for partially filled d or f shells

1937 band theory: TM oxides conduct; fact: insulators [1]

Mott & Peierls suggest e-e-interactions [2]

1949 model by Mott describing 3d electrons

Coulomb repulsion U competes with transfer integral t with neighbours Total energy gap: Egap = U - 2zt (z coordination number) Gap prevents conduction

If screening is efficient U is small.

Simple theory: Hubbard model

[1] J H de Boer, E J W Verwey, Proc. Phys. Soc. London 49, 59 (1937)
 [2] N F Mott, R Peierls, Proc. Phys. Soc. London 49, 72 (1937)
 [3] N F Mott, Proc. Phys. Soc. London A 62, 416 (1949)

HiTc materials



**Bild 14.10b:** Halblogarithmische Darstellung der beobachteten Leitfähigkeit  $\sigma(0)$  am "absoluten Nullpunkt" in Abhängigkeit von der Konzentration n der Phosphordonatoren in Silizium. (Nach T.F. Rosenbaum et al.)

### Kohn-Anomalie in der Phononendispersion





Walter Kohn (Wikipedia) PRL **2**, 393 (1959)





# **Peierls Transition**



linked: charge density wave 1-D: Fermi liquid theory breaks down; Luttinger liquid

## Peierls instability - Electron dispersion



Electrons with wavevectors near the Fermi surface have their energy lowered by a lattice deformation. (Kittel Fig. 14.20)