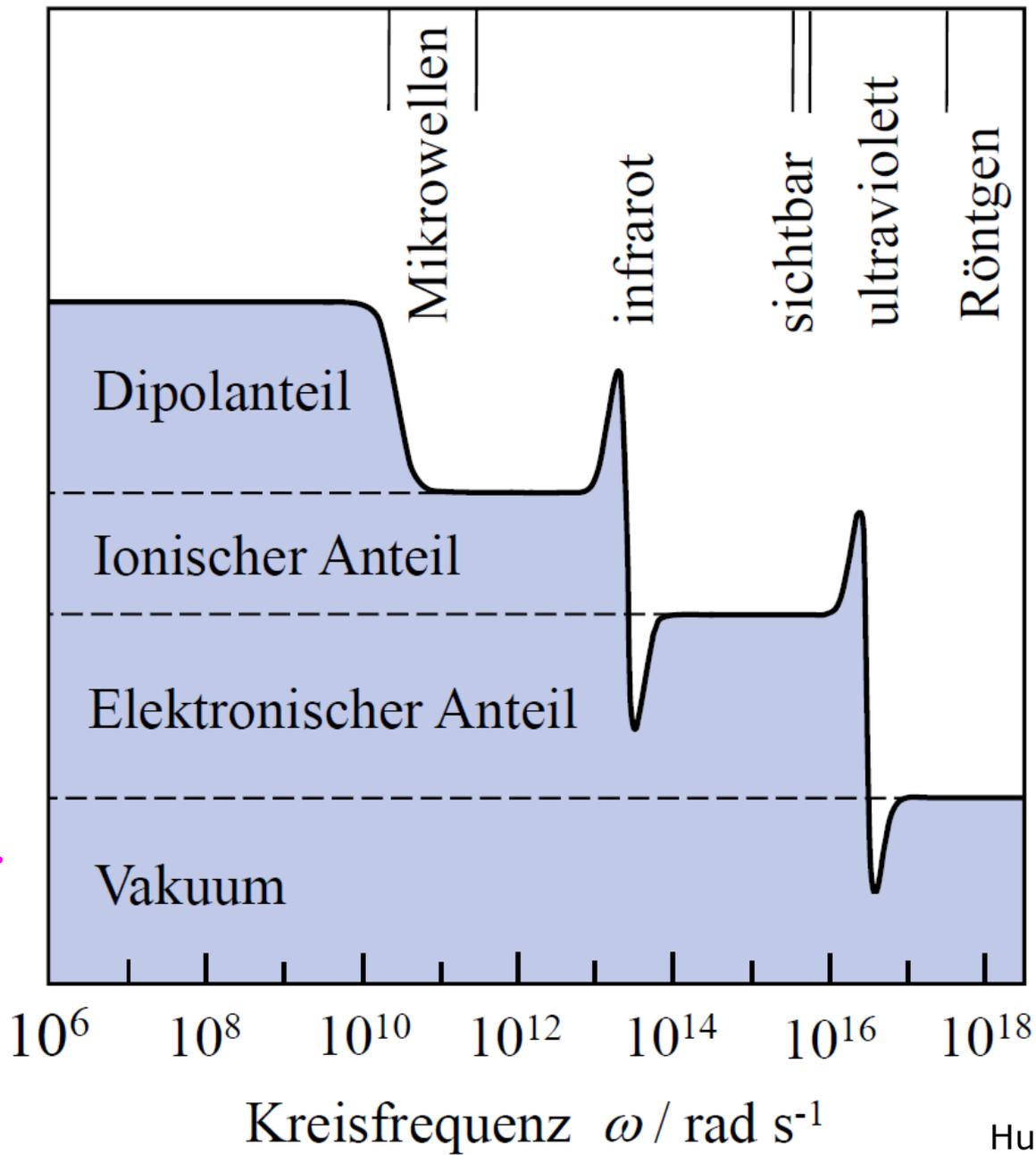


Realteil  $\epsilon'$  der dielektrischen Funktion



$\epsilon(\omega)$ : polarer Kristall

Übersicht

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

# Lorentz-Oszillatormodell (1907)

$$\vec{E}_{\text{lok}}(t) = \vec{E}_{\text{lok}}^0 e^{-i\omega t}$$

↗ Summe: ext. Feld und  $\vec{E}_{\text{Festkörper}}$

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} + m\omega_0^2 x = -e E_{\text{lok}}$$

$$x(t) = -\frac{e}{m} E_{\text{lok}}(t) \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

Dipolmoment  $p = -ex$

$$\text{Pol'barkeit } \alpha = \frac{p}{\epsilon_0 E_{\text{lok}}} \Rightarrow \alpha = \frac{e^2}{\epsilon_0 m} (\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)^{-1}$$

$$\chi = \frac{n a}{1 - \frac{n a}{3}}$$

$$n = \frac{N}{V}$$

\*) wird später  
begründet

$$\varepsilon = 1 + \chi = 1 + \frac{n a}{1 - \frac{n a}{3}} = 1 + \frac{1}{\frac{1}{n a} - \frac{1}{3}}$$

$$\Rightarrow \varepsilon = 1 + \frac{n e^2}{\varepsilon_0 m} \left( \omega_0^2 - \frac{n e^2}{3 \varepsilon_0 m} - \omega^2 - i \gamma \omega \right)^{-1}$$

$$= 1 + \frac{n e^2}{\varepsilon_0 m} \left( \overbrace{\omega_e^2} - \omega^2 - i \gamma \omega \right)^{-1}$$

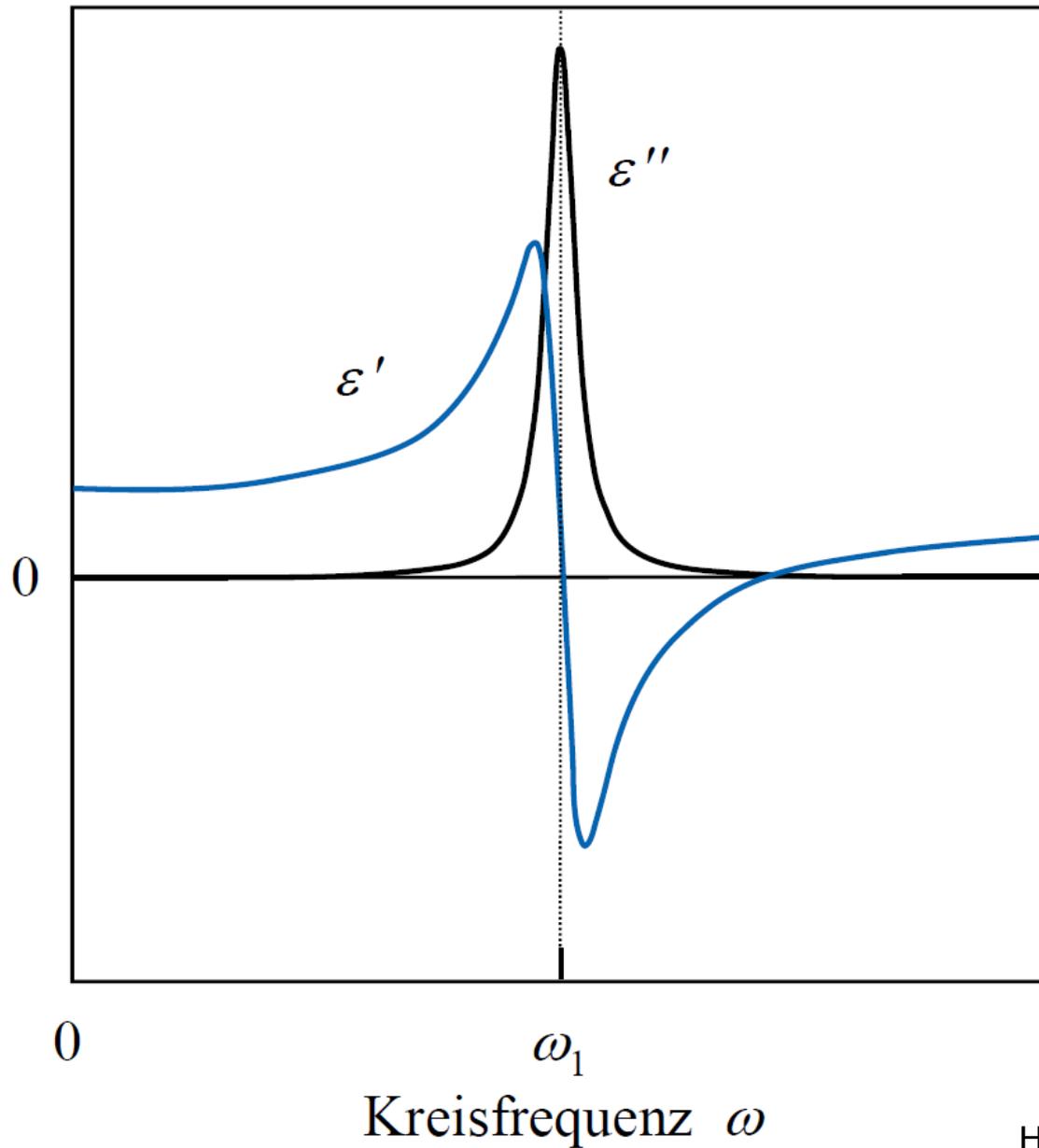
lokales Feld verschiebt Resonanz

Zerlegen in Real- & Imaginärteil:

$$\text{Re: } \epsilon_1 = \epsilon' = 1 + \frac{ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega_e^2 - \omega^2}{(\omega_e^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}$$

$$\text{Im: } \epsilon_2 = \epsilon'' = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{\gamma \omega}{(\omega_e^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}$$

Dielektrische Funktion  $\epsilon'$ ,  $\epsilon''$



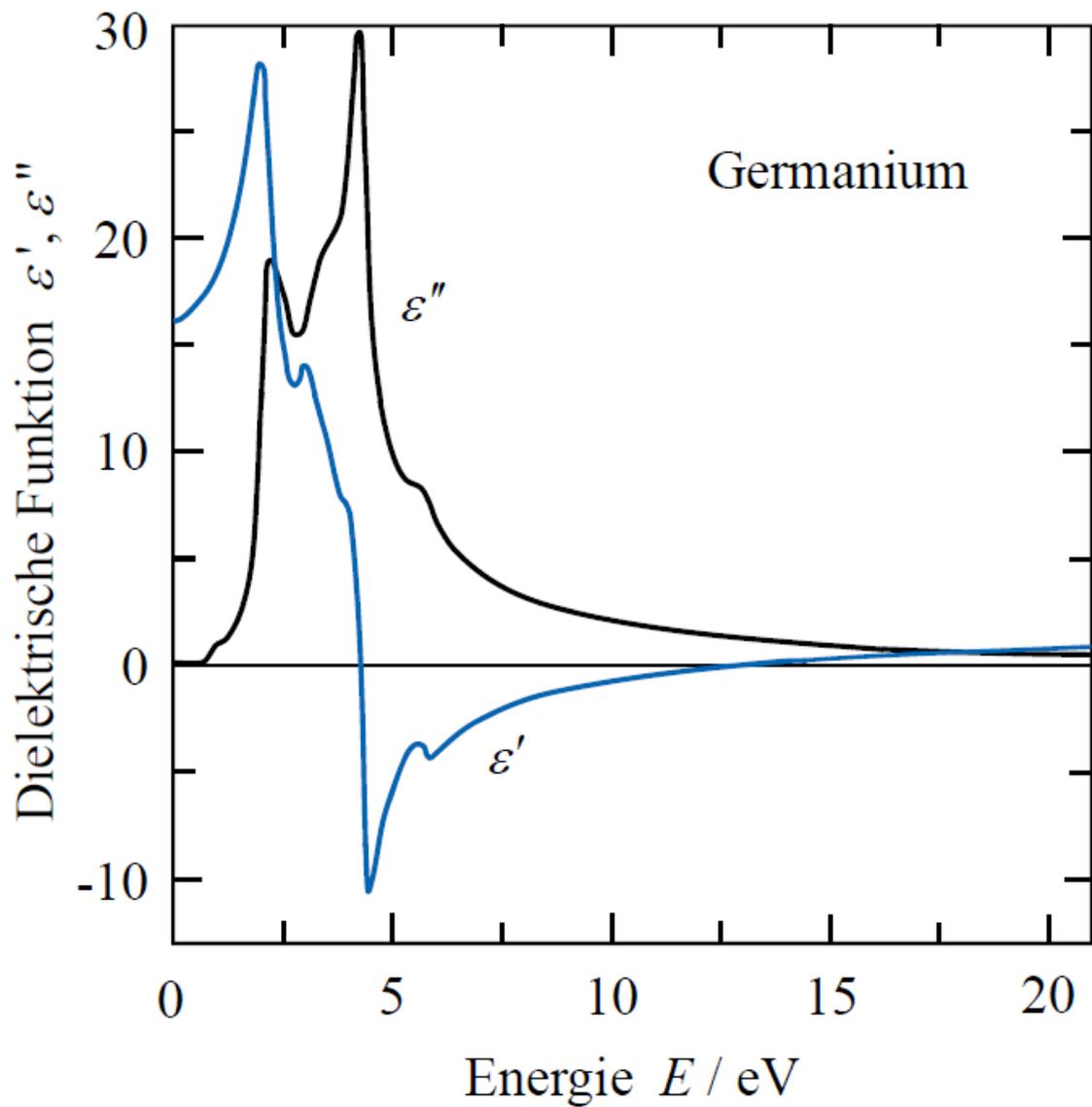
**$\epsilon(\omega)$ : polarer Kristall**

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

Im Allgem. viele Resonanzen

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{ne^2}{m\epsilon_0} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega}$$

$f_k$ : Oszillatorstärke



## $\epsilon$ 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).

# Lokales Feld - Clausius-Mossotti-Beziehung

---

$$\vec{p} = \epsilon_0 \alpha \vec{E} \quad ; \quad \alpha \text{ für 1 Molekül}$$

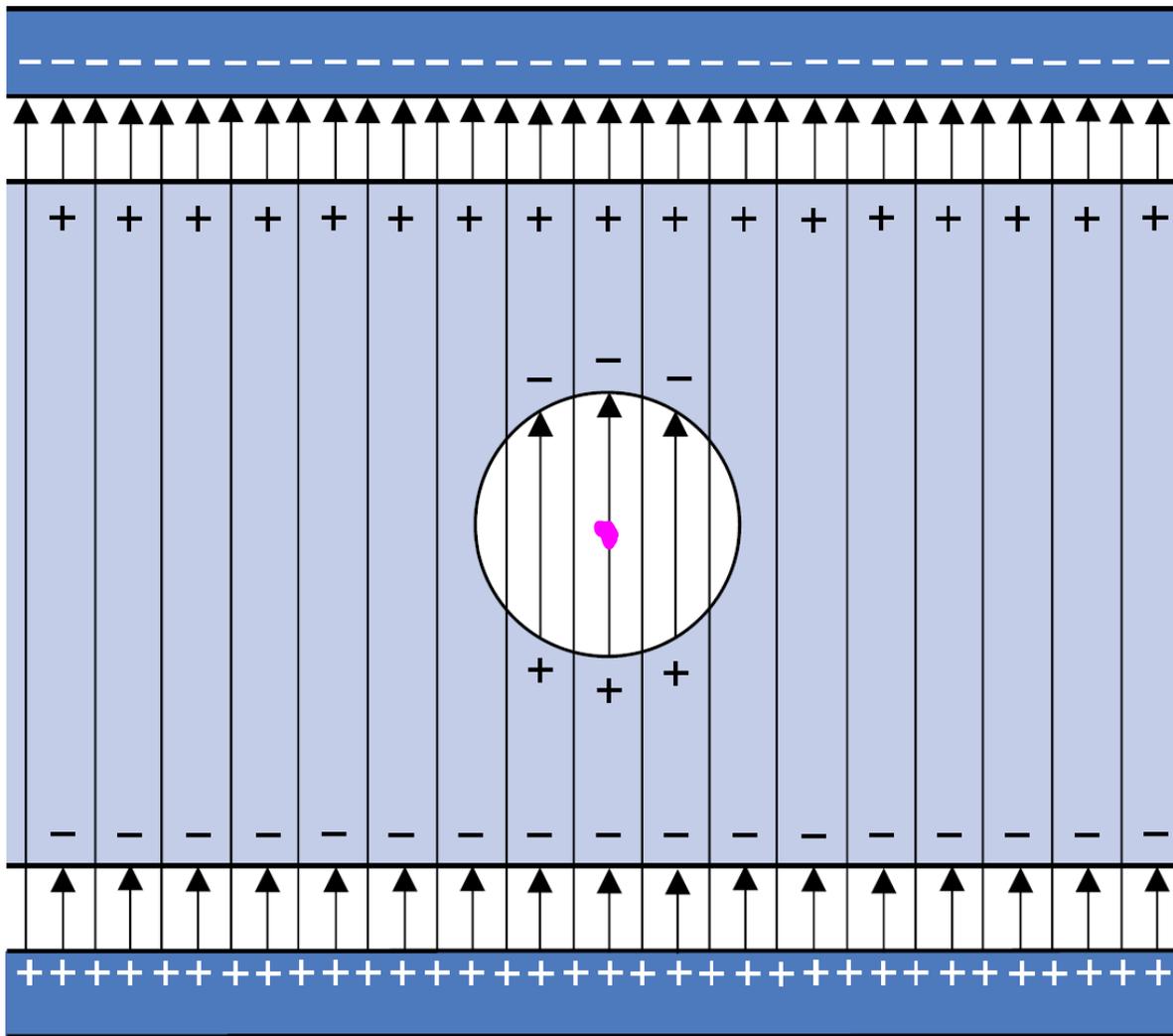
(nur induzierte Dipole)

$$\vec{P} = n \vec{p} = n \epsilon_0 \alpha \vec{E}_{\text{lok}}$$

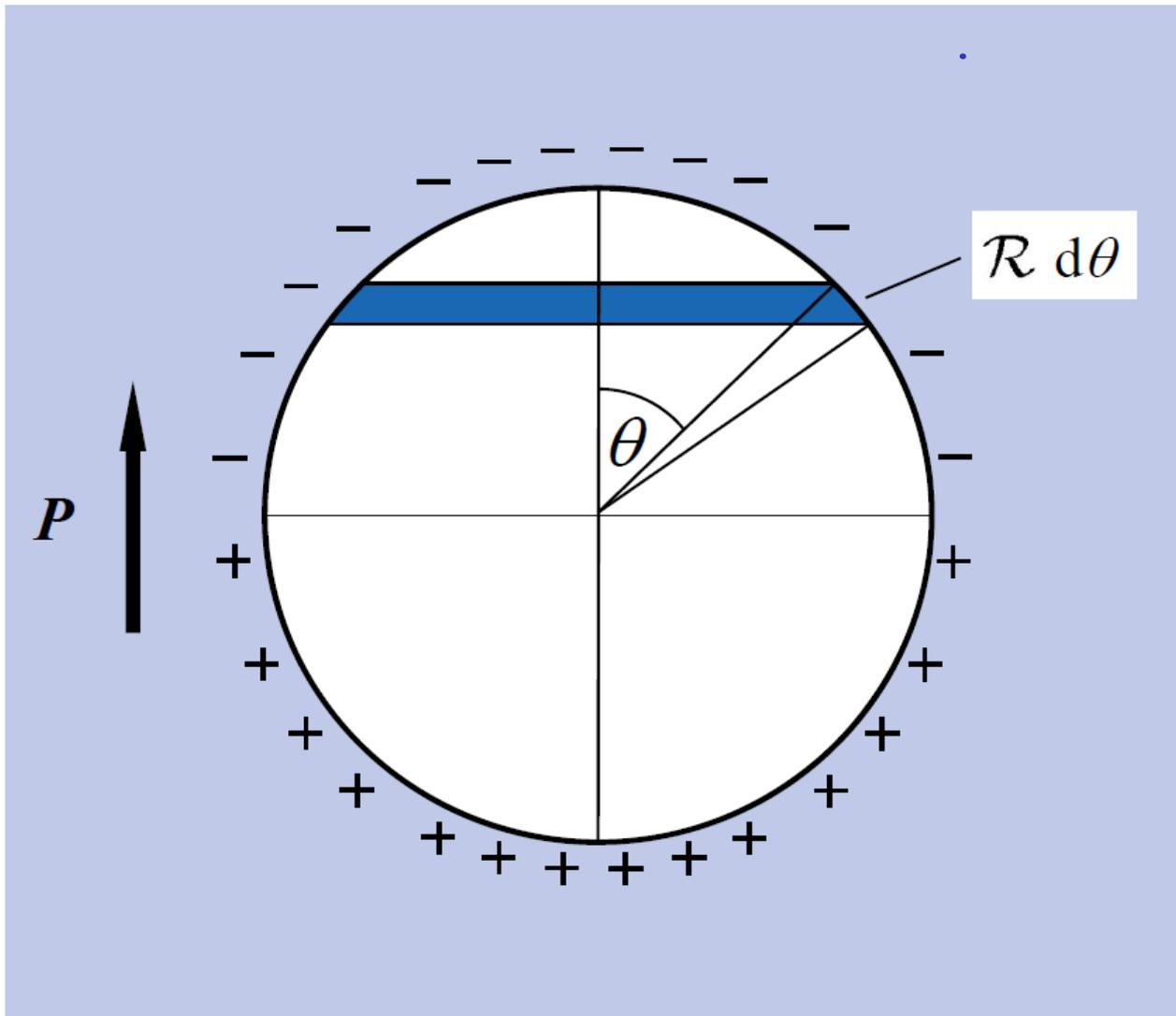
$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E} \quad (\vec{E} = \vec{E}_{\text{auß. Feld}})$$

$$\chi \vec{E} = n \alpha \vec{E}_{\text{lok}}$$





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  $dq$ .

Loch: Ann. homogener Polarisierung

Flächenladungsdichte, bezogen

auf Richtung von  $P$

$$\sigma_{\text{eff}} = -P \cos \vartheta$$

Auf Ringfläche sitzt

$$dq = -P \cos \vartheta \cdot 2\pi (R \sin \vartheta) R d\vartheta$$

Beitrag des Rings zum E-Feld:

$$dE_{\parallel} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R^2} dq \cos \vartheta$$

$$\Rightarrow E_{\parallel} = \frac{1}{2\epsilon_0} P \int_0^{\pi} \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \frac{1}{3} \frac{P}{\epsilon_0}$$

Nachbar atome:

kub. Kristalle: Dipolmomente heben  
sich auf

z-Komponente von  $\vec{E}_k$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_m p_m \frac{3z_m^2 - r_m^2}{r_m^5}$$

↑  
Nachbarn

kubisch:  $\sum_m x_m^2 = \sum_m y_m^2 = \sum_m z_m^2$

$\Rightarrow$  Zähler oben  $= 0$

Endergebnis:  $\Gamma_{\text{Kugel}} = \Gamma_a + \Gamma_b + \frac{1}{3} \frac{1}{5} \frac{1}{6}$

(um formunabh. Ergebnisse zu haben)

Ca L Platte:  $\Gamma_{\text{Kugel}} = \Gamma_a - \frac{1}{2} \frac{1}{3} \frac{1}{6}$

|| Platte:  $\Gamma_{\text{Kugel}} = \Gamma_b + \frac{1}{2} \frac{1}{3} \frac{1}{6}$

Kugel:  $\Gamma_{\text{Kugel}} = \Gamma_a$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D} &= n \epsilon_0 \alpha \mathcal{E}_{\text{loc}} \\
 \mathcal{E}_{\text{loc}} &= \mathcal{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathcal{P}
 \end{aligned}
 \Rightarrow \mathcal{D} = \epsilon_0 \left( 1 + \frac{n\alpha}{3} \right) \mathcal{E}$$

$$\epsilon = 1 + \chi \Rightarrow \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3} n\alpha$$

Clausius-Mossotti

# Jonenpolarisation

Photon:  $k \approx 0 \rightarrow$  Schwingung der  $\pm$ -Untergitter

$u_i$  = Auslenkungen der Untergitter

$$M_1 \ddot{u}_1 + 2C u_1 - 2C u_2 = q E_{lok}$$

$$M_2 \ddot{u}_2 + 2C u_2 - 2C u_1 = -q E_{lok}$$

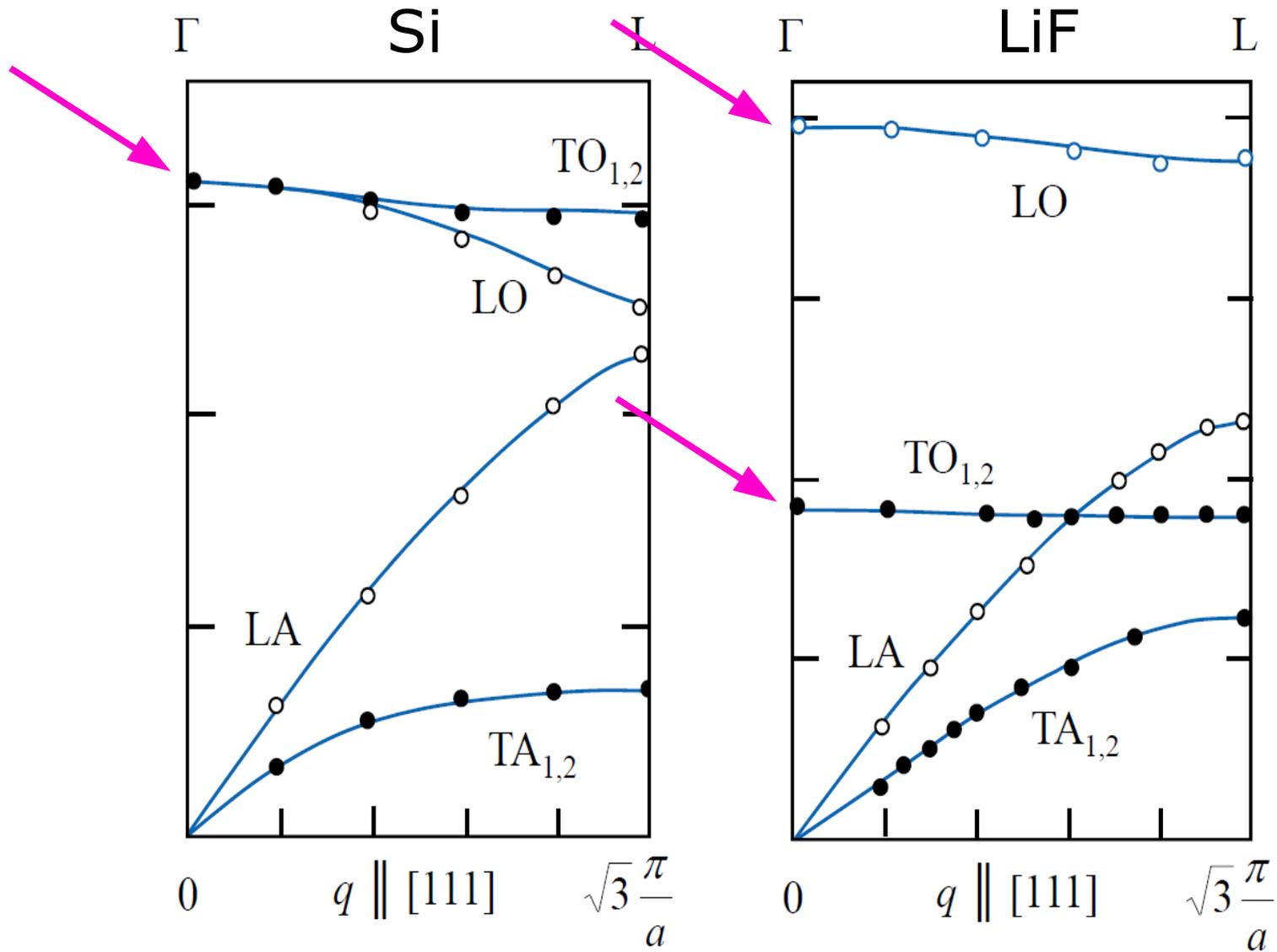
Differenz,  $u = u_1 - u_2$ ,  $\mu$  = reduzierte Masse

$$\Rightarrow \mu \ddot{u} + \mu \omega_0^2 u = q E_{lok}; \quad \omega_0^2 = \frac{2C}{\mu}$$

ergänze Dämpfungsterm  $i\gamma\omega$

⇒ gleiche Bewegungsgl. wie oben

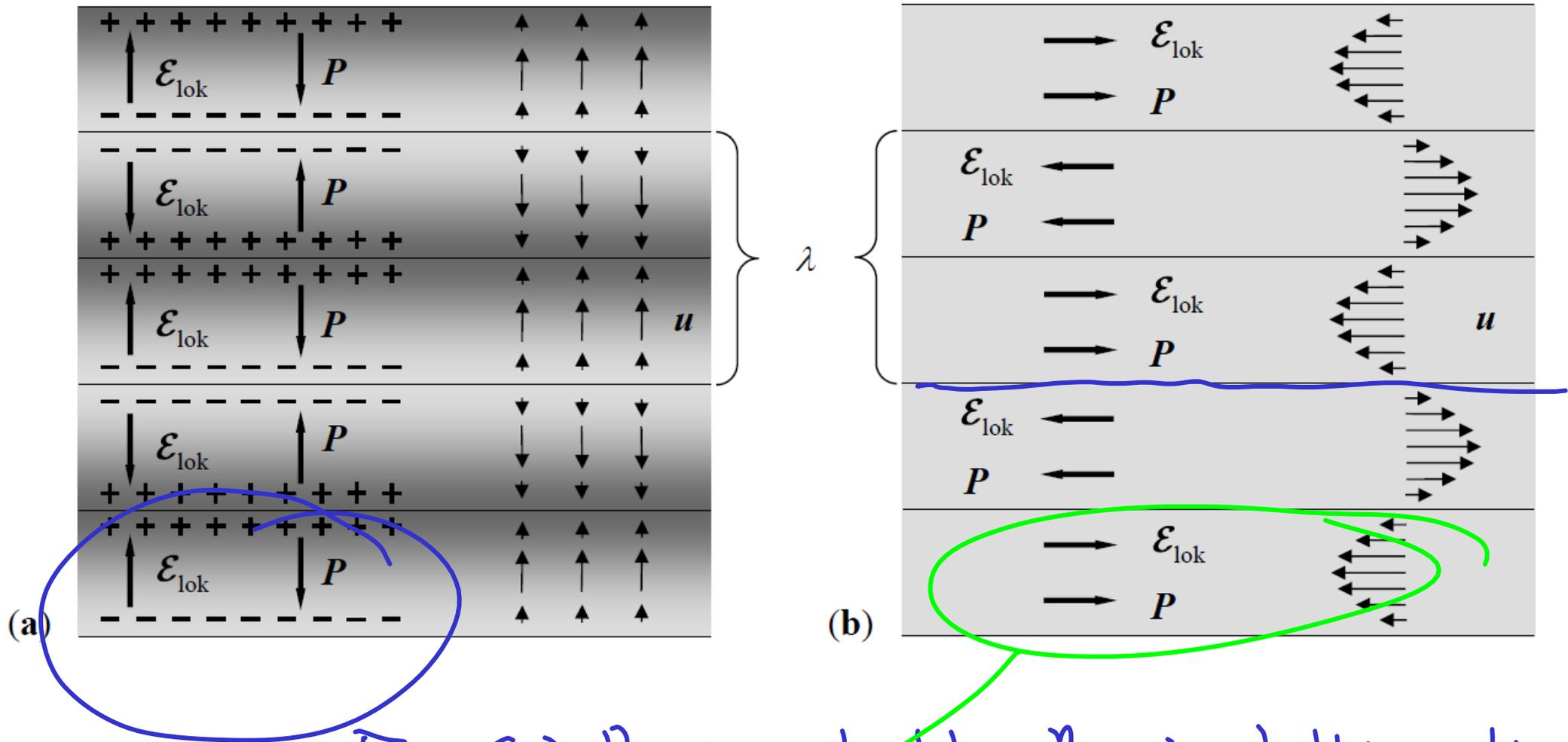
$$u(t) = \frac{F}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - j\gamma\omega} \underline{\underline{e^{j\omega t}}}$$



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)



$\mathcal{E}_{\text{lok}} \leftrightarrow P \approx \text{erhöhte Rückstellkraft}$

Hunklinger Bild 13.6: Zur Herleitung des lokalen Feldes bei optischen Gitterschwingungen in Ionenkristallen. Die Knotenebenen (durchgezogene Linien) sind bei langwelligigen 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.

$\Rightarrow \omega_{\text{LO}} \text{ steigt}$

$\omega_{\text{TO}} \text{ niedriger}$

LO-Phonon:

(23)  
↓

$\vec{u} \parallel \vec{k} \Rightarrow \vec{E}_{10k} \perp \vec{p} \perp \text{zu}$

Knotebenen  $\Rightarrow f=1 \Rightarrow E_{10k} = E_0 + E_c = -\frac{p_c}{3} + \frac{p_c}{3}$

$$= \frac{2}{3} \frac{p_c}{3}$$

TO-Phonon:

$E_{10k}, \vec{p} \parallel \text{Knotebenen} \Rightarrow f=0$

$$E_{10k} = E_t = \frac{p_t}{3}$$

resultierende Phononenfrequenzen:

$$\omega_{\pm}^2 = \omega_0^2 \pm \frac{2nq^2}{3\mu\epsilon_0} \frac{1}{1 - \frac{2}{3}nq}$$

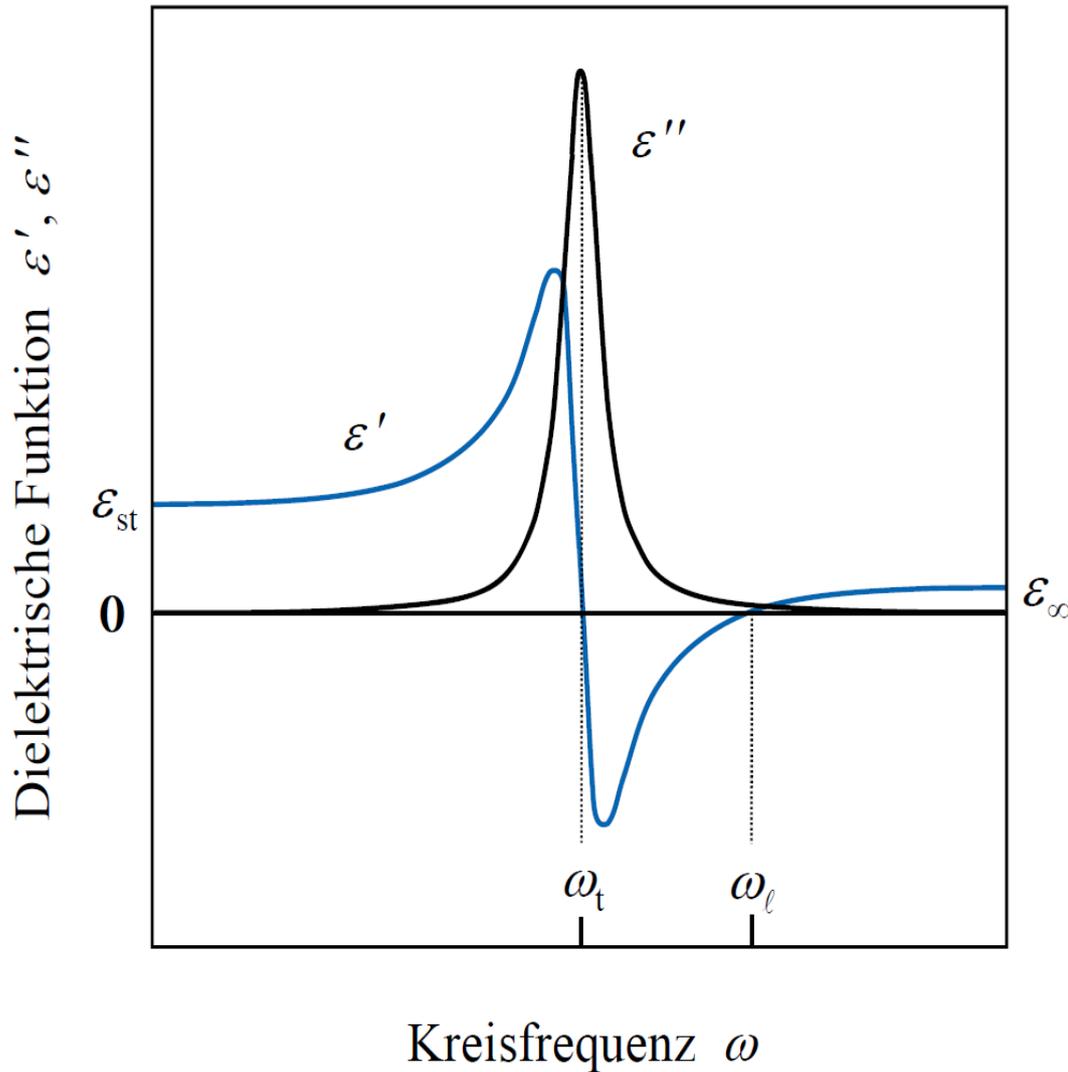
$\omega_+ > \omega_+$

Gitterverzerrung  $\rightarrow$  Polarisation in  
Ionenkristallen verknüpft

def.  $\epsilon_{\infty} = \epsilon(\omega \gg \omega_t)$

$$\epsilon_{\text{stat}} = \epsilon(\omega \ll \omega_t)$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\omega_t^2 (\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_{\infty})}{\omega_t^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (78)$$

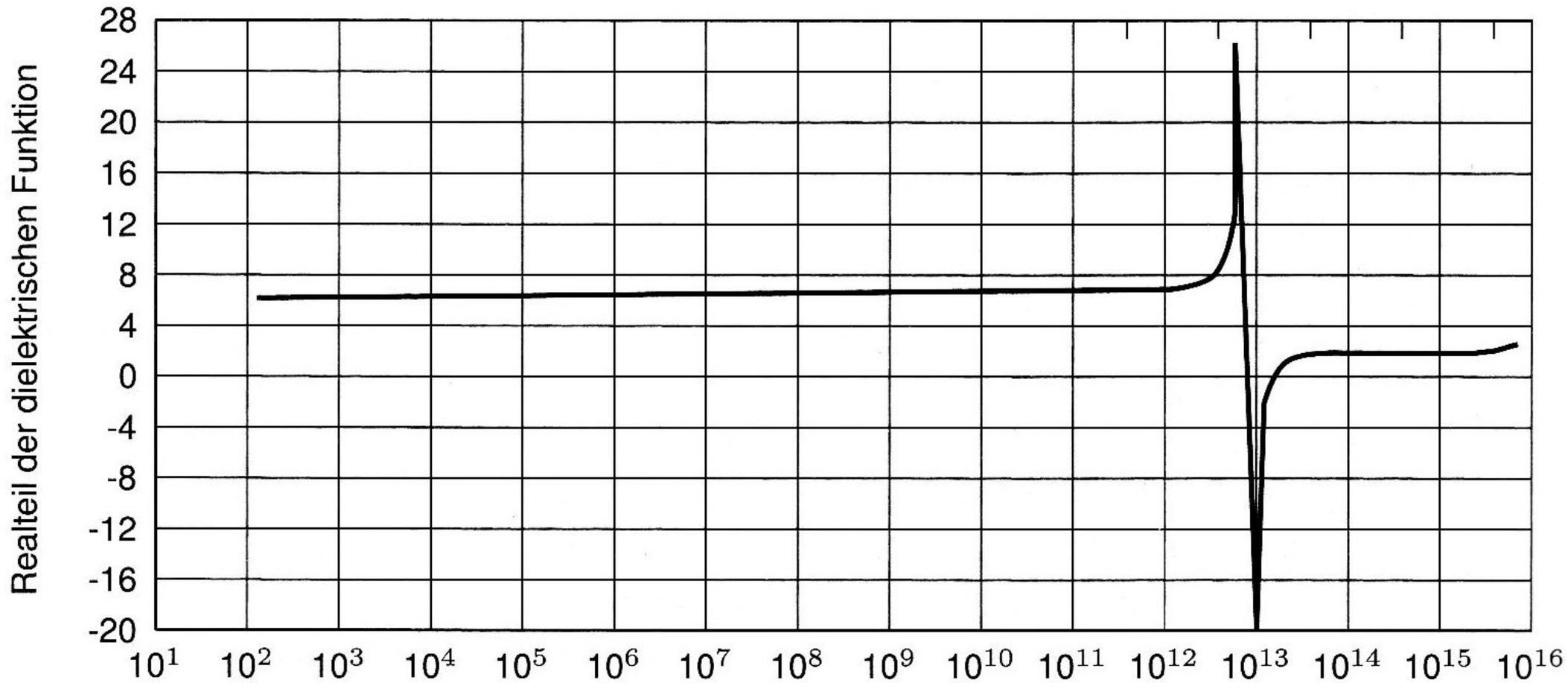


Hunklinger Bild 13.7: Frequenzgang von  $\epsilon$  eines Ionenkristalls aufgrund der optischen Phononen. Real- (blau) und Imaginärteil (schwarz). Nullstellen von  $\epsilon'$  liegen bei  $\omega_l$  und in der Nähe von  $\omega_t$ . Im Band von  $\omega_t \dots \omega_l$  werden Wellen an der Oberfläche reflektiert.

Tabelle 13.2:  $\epsilon_{st}$  und  $\epsilon_{\infty}$  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	KCl	KBr	CsCl	GaAs	CdS	ZnSe	PbS
$\epsilon_{st}$	11,95	5,9	7,28	4,85	4,52	6,68	12,83	8,42	8,33	190
$\epsilon_\infty$	2,79	2,40	3,15	2,22	2,43	2,69	10,90	5,27	5,90	18,50
$\omega_t/10^{13}$ Hz	4,16	3,35	2,34	2,67	2,15	2,02	5,14	4,60	3,90	1,26
$\omega_l/10^{13}$ Hz	8,19	5,10	3,43	4,07	3,18	3,16	5,58	5,80	4,63	4,03

## Re( $\epsilon$ ) von SrF<sub>2</sub>



**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)

# Phonon-Polariton

EM-Welle & TO Phonon koppeln

⇒ Änderung des Phononenspektrums

EM-Welle mit  $\Delta \epsilon = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} - 1 = 0$

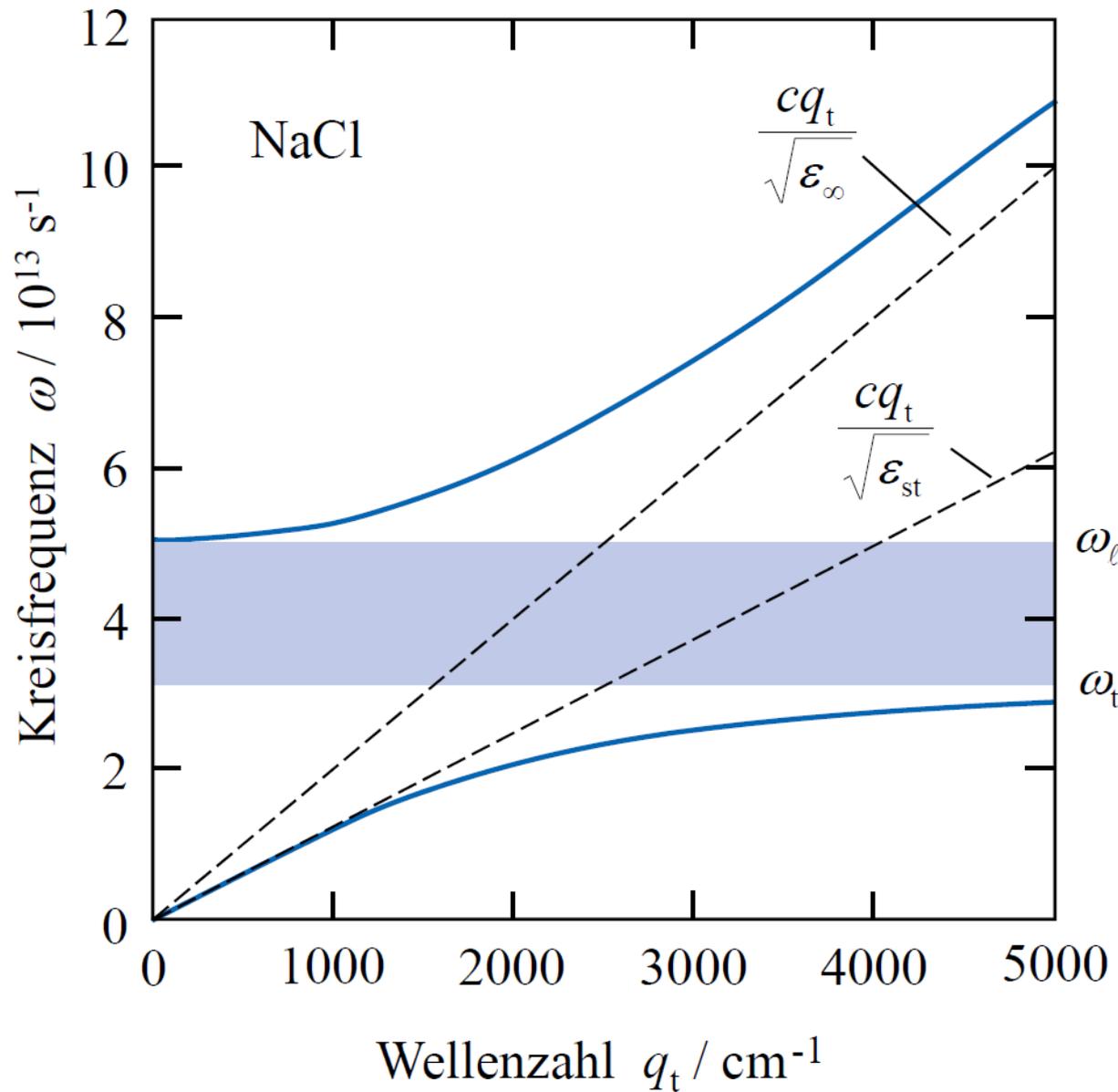
$$E = E_0 \exp(-i(\omega t - q_x x))$$

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\epsilon(\omega)} q_x^2$$

↖ (78)

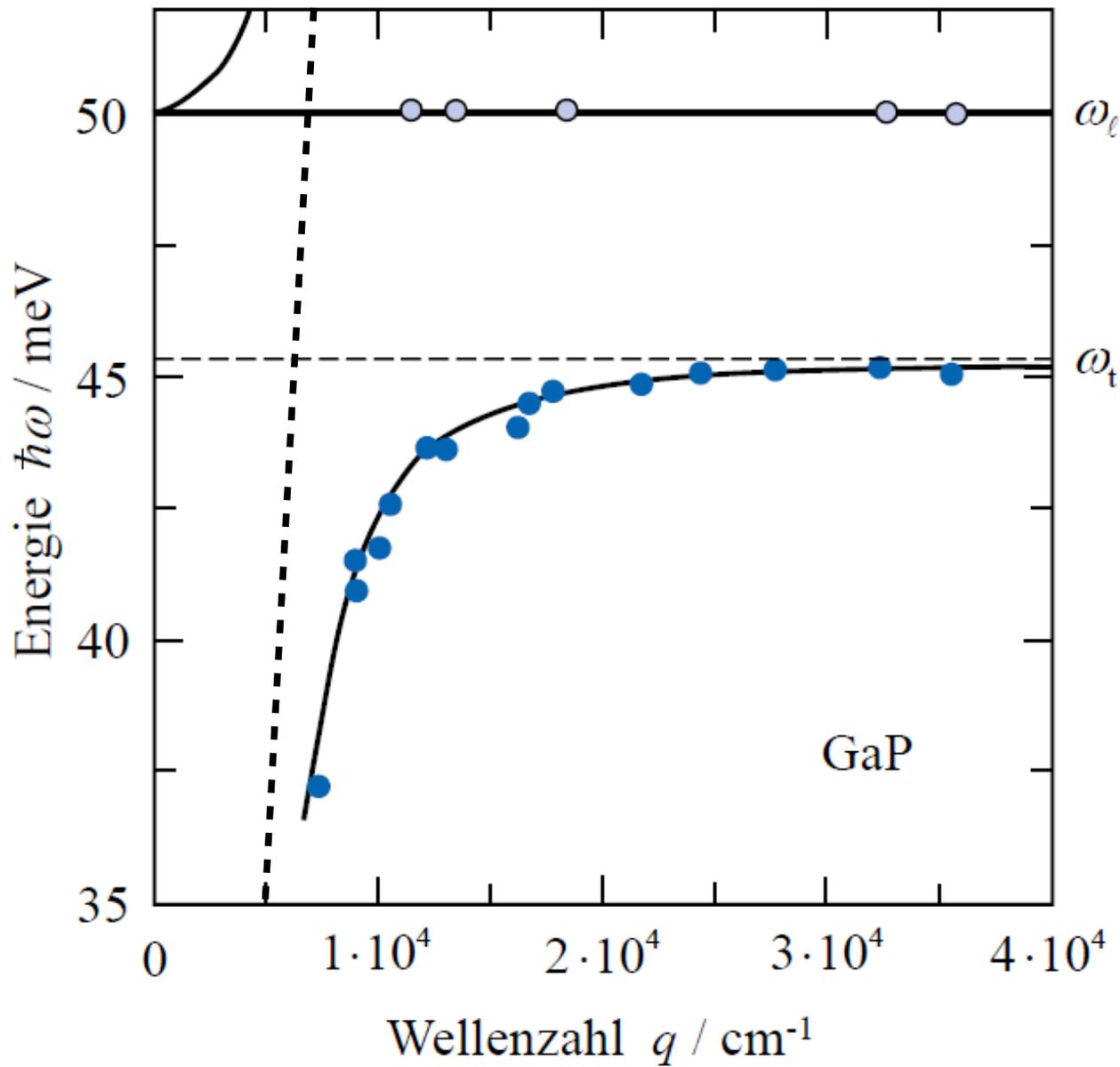
Phonon

## 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,  $\epsilon_{st} = 5,9$ ,  $\epsilon_{\infty} = 2,25$ . 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)