Fény - anyag kölcsönhatás

$\boxed{H = H_0 + H_{int}}$ ← fény - anyag kh., H_{int} perturbáció, azaz lineáris optika

↑ a vizsgált rendszer

1 db e^- sugárzási térben:

$$H_{int} = -\frac{e}{2m}(\underline{p}\underline{A} + \underline{A}\underline{p}) + \frac{e^2 \underline{A}^2}{2m} + e\Phi$$ ← spin nélküli töltött rész mozgása EM térben

$$-\frac{e}{m}\underline{S}\underline{B}$$ ← Zeeman-tag

$$-\frac{e}{4m^2c^2}\underline{S}[\underline{E}\times\underline{p} - \underline{p}\times\underline{E} - 2(\underline{E}+\underline{E}^n)\times\underline{A}]$$ ← spin - pálya kh.

$$-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\underline{E}$$ ← Darwin-tag

relativisztikus korrekciók

$\underline{A}, \Phi, \underline{E}, \underline{B}$ - sugárzási tér

$\underline{E}^n$ - statikus elektromos tér (atom, kristály, ...)

Közelítések:

- $\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\underline{E} \approx 0$, azaz a sugárzást keltő töltések távol vannak
- hosszúhullámú közelítés ($\lambda \gg a$, $\delta_{skin} \gg l$)

$\Longrightarrow$ sugárzási tér sorfejtése

$\Longrightarrow$ relativisztikus tagoknál sugárzás térben homogén tér

Fény–anyag kh.

Közelítések (folyt.): ○ EM sugárzásban csak 1. rendű tagokat hagyjuk meg

Tfh. $\underline{E}(\underline{r})$, $\underline{B}(\underline{r})$ sorfejthető ($\lambda \gg a$):

$$\left.\begin{aligned} E_\alpha(\underline{r}) &= E_\alpha + \partial_\beta E_\alpha r_\beta + \dots \\ B_\alpha(\underline{r}) &= B_\alpha + \partial_\beta B_\alpha r_\beta + \dots \end{aligned}\right\}$$

$$\boxed{\begin{aligned} E_\alpha(\underline{r}) &= -\partial_\alpha \Phi(\underline{r}) - \partial_t A_\alpha(\underline{r}) \\ B_\alpha(\underline{r}) &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\partial_\beta A_\gamma(\underline{r}) \end{aligned}}$$

Trükkös mértékválasztás:

$$\left.\begin{aligned} \Phi(\underline{r}) &= \Phi - E_\alpha r_\alpha - \frac{1}{2}\partial_\beta E_\alpha r_\alpha r_\beta + \dots \\ A_\alpha(\underline{r}) &= \frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\beta r_\gamma + \frac{1}{3}\varepsilon_{\alpha\gamma\delta}\partial_\beta B_\gamma r_\beta r_\delta + \dots \end{aligned}\right\}$$

(homogén térre triviális, statikus esetben is megszokott, hogy $\Phi = \Phi(\underline{E})$ és $\underline{A} = \underline{A}(\underline{B})$)

Multipól forma:

$$\Longrightarrow \quad H_{int} = \boxed{-\mu_\alpha E_\alpha - m_\alpha B_\alpha - \frac{1}{3}\Theta_{\alpha\beta}\partial_\alpha E_\beta} - \frac{e}{2m^2c^2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} E_\alpha p_\beta S_\gamma - \frac{e^2}{4m^2c^2} B_\alpha \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \cdot$$

$$\cdot\, r_\beta \varepsilon_{\gamma\delta\kappa} S_\delta E_\kappa^n$$

$$\mu_\alpha = e r_\alpha$$

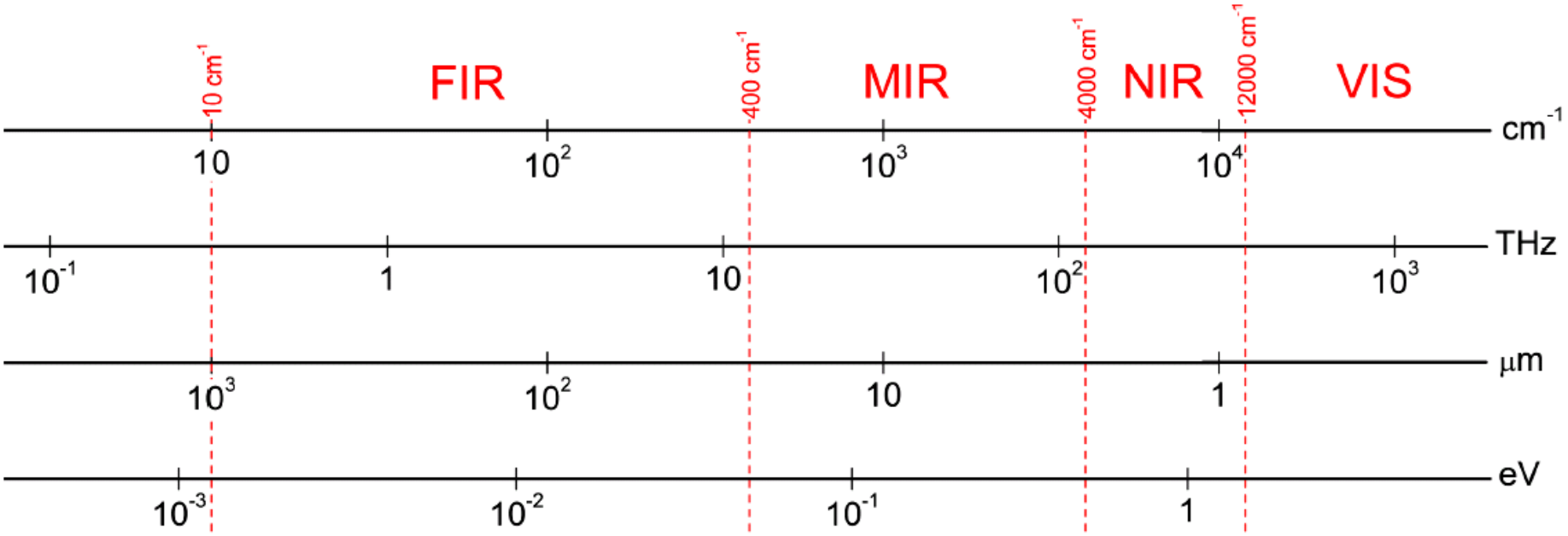
$$m_\alpha = \frac{e}{2m}(L_\alpha + 2S_\alpha)$$

$$\Theta_{\alpha\beta} = \frac{e}{2}(3 r_\alpha r_\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta})$$

Zeemanhoz korrekció $E_\alpha \overset{\text{Lorentz-tr.}}{\Longleftrightarrow} B_\alpha$ miatt

megj.: $\underline{l}\,\underline{s}$ okozta tagoktól H_{int}-ben általában eltekintünk, $\underline{l}\,\underline{s}$-t a mátrixelemek számolásánál használt sajátállapotoknál (H_0) vesszük figyelembe

Elektromágneses spektrum



Fény-anyag kh.

$$H_{int} \approx -m_\alpha B_\alpha - \mu_\alpha E_\alpha - \frac{1}{3}\Theta_{\alpha\beta}\partial_\alpha E_\beta$$

mikrohullám	infravörös	látható	UV	X-ray
~10-100 cm^{-1}	~12000 cm^{-1}	~30000 cm^{-1}		$1/\lambda$
~1-10 meV	~1.5 eV	~4 eV		$\hbar\omega$

Optikai válaszfv-ek lineáris válasz közelítésben:

$$H_{int} := B f_\omega e^{-i\omega t} \xRightarrow{\boxed{\text{Kubo-formula}}} \langle \delta A(\omega)\rangle = \chi_{AB} f_\omega, \text{ahol}$$

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty \langle [A(t), B(0)]\rangle_0 e^{i\omega t} dt$$

EM sugárzás esetén A és B szerepét μ_α, m_α és $\Theta_{\alpha\beta}$-operátorok játszhatják

Pl.: a teljes elektromos pol. változás

$$\langle \delta\mu_\alpha(\omega)\rangle = \chi^\omega_{\mu_\alpha\mu_\beta} E^\omega_\beta + \chi^\omega_{\mu_\alpha\Theta_{\beta\gamma}}\partial_\beta E^\omega_\gamma + \chi^\omega_{\mu_\alpha m_\beta} B^\omega_\beta + \dots$$

a teljes mágneses dip. mom. változás:

$$\langle \delta m_\alpha(\omega)\rangle = \chi^\omega_{m_\alpha m_\beta} B^\omega_\beta + \chi^\omega_{m_\alpha\mu_\beta} E^\omega_\beta + \dots$$

Szokásos jelölések:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} \triangleq \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\chi_{\mu_\alpha\mu_\beta}$$

$$\mu_{\alpha\beta} \triangleq \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\chi_{m_\alpha m_\beta}$$

$$\chi^{me}_{\alpha\beta} \triangleq \chi_{m_\alpha\mu_\beta} \text{ és } \chi^{em}_{\alpha\beta} = \chi_{\mu_\alpha m_\beta}$$

Fény-anyag kölcsönhatás

$$\chi_{A_i B_j}(z=\omega+i\delta) = -\frac{1}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}\,\frac{\langle n|B_j|m\rangle\langle m|A_i|n\rangle}{z-\omega_{mn}}$$

Kubo-formula Fourier-térben

a nem perturbált, egyensúlyi rendszer $\{E_n\}$ sp. és $\{|n\rangle\}$ állapotait próbáljuk ezen keresztül szérni

Független elemek száma $\chi_{A_i B_j}$-ben $\Longleftrightarrow$ Szimmetriák $\Longleftrightarrow$ Neumann-elv

$\forall g\in G \quad \chi_{A_i B_j} = g\{\chi_{A_i B_j}\}$

Térbeli szimmetriák: $G \subset SO(3)$

$\chi_{A_i B_j}$: így transzformálódik, mint $A_i B_j$ szorzat

- axiál és polár vektorok és tenzorok
- O_h esetén: $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon\delta_{\alpha\beta}$, $\mu_{\alpha\beta} = \mu\delta_{\alpha\beta}$, $\chi^{me}_{\alpha\beta} = \chi^{em}_{\alpha\beta} = 0$
- ha van inverzió $\chi^{me}_{\alpha\beta} = \chi^{em}_{\alpha\beta} = 0$

Időtükrözés:

$$\left(\chi_{A_i B_j}(z)\right)^T = -\frac{1}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}\,\frac{\langle n|\epsilon_A A_i|m\rangle\langle m|\epsilon_B B_j|n\rangle}{z-\omega_{mn}} = \epsilon_A\epsilon_B\chi_{B_j A_i}(z)$$

$(A_i)^T = \epsilon_A A_i$, ahol $\epsilon_A = \pm 1$ polár/axiál vektorokra

$$\left[\chi_{A_i B_j}(\underline{M})\right]^T = \chi_{A_i B_j}(-\underline{M})$$

Fény-anyag kh.

$\Longrightarrow \left[\chi_{A_iA_j}\right]^T = \chi_{A_jA_i} \Leftrightarrow \chi_{A_iA_j}(\underline{M}) = \chi_{A_jA_i}(-\underline{M})$, azaz a mátrix szimmetrikus része időtükrözésre invariáns $\Leftrightarrow$ $\underline{M}$-ben páros;

az antiszimm. rész időtükrözésre előjelet vált $\Leftrightarrow$ $\underline{M}$-ben páratlan

<u>példák</u>: – ε_{ij}, μ_{ij} alakja $G = O_h$ és mágneses tér bekapcs. $\Rightarrow$ MCD

– ε_{ij}, μ_{ij} tetragonális esetben $\Rightarrow$ LD

$\Longrightarrow$ $\boxed{\text{axiálterzorokra } \epsilon_A = -\epsilon_B}$, azaz $\left[\chi_{A_iB_j}\right]^T = -\chi_{B_jA_i}$

- $\left[\chi^{me}_{ij}\right]^T = -\chi^{em}_{ji} \Leftrightarrow \chi^{me}_{ij}(\underline{M}) = -\chi^{em}_{ji}(-\underline{M})$

– χ^{me}_{ij} és χ^{em}_{ij} időtükrözésre invariáns része a diagonális elemeknek $\Longrightarrow$ NCD

– χ^{me}_{ij} és χ^{em}_{ij} nem diag. elemek időtükrözésre előjelet váltó része $\Longrightarrow$ irányfüggő dikroizmus

Maxwell egyenletek anyagban

$$\begin{cases} \nabla \underline{B} = 0 \\ \nabla \times \underline{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \underline{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial \underline{D}}{\partial t} \\ \nabla \underline{D} = 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{Fourier tér}} \begin{aligned} & \underline{q}\, \underline{B}_{q,\omega} = 0 \\ & \underline{q} \times \underline{E}_{q,\omega} = \frac{\omega}{c} \underline{B}_{q,\omega} \\ & \underline{q} \times \underline{H}_{q,\omega} = -\frac{\omega}{c} \underline{D}_{q,\omega} \\ & \underline{q}\, \underline{D}_{q,\omega} = 0 \end{aligned}$$

monokromatikus síkhullámnál ez a 2 egyenlet mindent tud

$(\quad)\cdot q$

A fény anyag kh. (lineáris válasz):

$$\underline{D}_{q,\omega} = \underline{\underline{\varepsilon}}_{q,\omega} \underline{E}_{q,\omega} + 4\pi \underline{\underline{\chi}}^{em}_{q,\omega} \underline{H}_{q,\omega}$$

$$\underline{B}_{q,\omega} = \underline{\underline{\mu}}_{q,\omega} \underline{H}_{q,\omega} + 4\pi \underline{\underline{\chi}}^{me}_{q,\omega} \underline{E}_{q,\omega}$$

$$\Longrightarrow \begin{aligned} & \underline{q} \times \underline{E}_{q,\omega} = \frac{\omega}{c}\left(\underline{\underline{\mu}}_{\omega} \underline{H}_{q,\omega} + 4\pi \underline{\underline{\chi}}^{me}_{\omega} \underline{E}_{q,\omega}\right) \\ & \underline{q} \times \underline{H}_{q,\omega} = -\frac{\omega}{c}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{\omega} \underline{E}_{q,\omega} + 4\pi \underline{\underline{\chi}}^{em}_{\omega} \underline{H}_{q,\omega}\right) \end{aligned}$$

adott q esetén lineáris egyenletrendszer, q valós, $\underline{E}_{q,\omega}$, $\underline{B}_{q,\omega} \in \mathbb{C}^3$

- Egyszerű optika: $\boxed{\underline{\underline{\mu}}_{\omega} = \mathbb{1} \quad \text{és} \quad \underline{\underline{\chi}}^{me}_{\omega} = \underline{\underline{\chi}}^{em}_{\omega} = 0}$

$$\underline{q} \times (\underline{q} \times \underline{E}_{q,\omega}) + \frac{\omega^2}{c^2} \underline{\underline{\varepsilon}}_{\omega} \underline{E}_{q,\omega} = 0 \quad \leftarrow \text{hullámegyenlet}$$

tisztán transzv. mo.

- $\left(\frac{\omega^2}{c^2}\underline{\underline{\varepsilon}}_{\omega} - |q|^2\right)\underline{E}_{q,\omega} = 0$
- 2 megoldás $\tilde{n}_{\omega} = \frac{c|q|}{\omega}$
- q és $-q$-ra $\tilde{n}_{\omega}$ ugyanaz

tisztán long. mo.

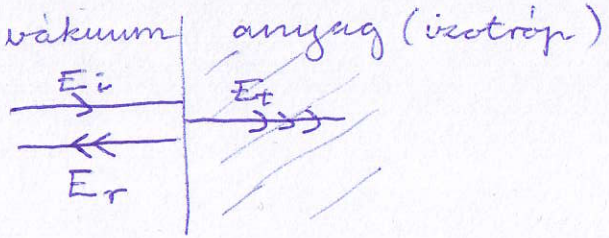
- $\underline{\underline{\varepsilon}}_{\omega} \underline{E}_{q,\omega} = 0$
- $\underline{q} \times \underline{E}_{q,\omega} = \frac{\omega}{c} \underline{B}_{q,\omega}$ miatt nem csatolódik $\underline{B}$-tér
- $\boxed{\text{plazmonok}}$

Maxwell egyenletek anyagban

- Mágneses rezonancia: $\underline{\underline{\varepsilon}}_\omega \approx$ const. és $\underline{\underline{\chi}}^{me}_\omega = \underline{\underline{\chi}}^{em}_\omega = 0$
- Bonyolult élet: $\underline{\underline{\chi}}^{me}_\omega$ és $\underline{\underline{\chi}}^{em}_\omega \neq 0$, adott polarizáció esetén q-ra és $-q$-ra n_ω különbözhet

  irányfüggő anizotrópia

Válaszfüggvények mérése



$$r = \frac{E_r}{E_i} = \frac{1-\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}}{1+\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}}$$

$$t = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2}{\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}+1}$$

DE, komplex válaszfv-t általában nehéz mérni, a fény frekije túl nagy $\Rightarrow$ ampl. + fázis helyett intenzitás időátlagát mérjük

pl.: $R = |r|^2$ - et

- Kramers-Kronig tr.:

$$r = \sqrt{R}\, e^{i\phi}$$

$$\phi(\omega) = -\frac{\omega}{\pi}\int_0^\infty \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega'^2-\omega^2}\, d\omega'$$

- v. ellipszometria, időfelbontás spektr.

Abszorpció:

$$\tilde{n}_\omega = n_\omega + i k_\omega$$

$$\underline{E} = \underline{E}_0\, e^{i(qr-\omega t)} = \underline{E}_0\, e^{-\frac{\omega}{c} k n_q r}\, e^{i(\frac{\omega}{c} n n_q r - \omega t)}$$

$$I = \overline{\underline{E}^* \underline{E}} = I_0\, e^{-\frac{2k\omega}{c} n_q r} = I_0\, e^{-\kappa n_q r}$$

abszorpciós eh.

- itt is ugyanígy Kramers-Kronig kell

$$R,\ \alpha \xrightarrow{K.K.} \tilde{\varepsilon},\ \tilde{\mu},\ \tilde{\chi} \xrightarrow{?} \{\varepsilon_n\},\ \{|n\rangle\}$$

Hidrogénszerű atom optikai átmenetei

H-atom Dirac egyenletből:

$$H_0 = \frac{1}{2m}(\underline{p} - e\underline{A})^2 + e\phi + \xi(r)\,\underline{l}\,\underline{s} + \frac{e}{m}\underline{s}\,\underline{B} + \dots$$

H-atom e^--ja spin nélkül (azaz $\underline{l}\,\underline{s}$-t elhagyva és $\underline{B}=0$):

$$H_0' = \frac{\underline{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi r} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right] + \frac{\hbar^2 \underline{l}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi r}, \qquad [l_i, l_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} l_k, \quad [l_i, \underline{l}^2] = 0$$

Mivel gömbi koordinátákban $\underline{l} = \underline{l}(\theta, \varphi) \Longrightarrow [\underline{l}, H_0'] = [\underline{l}^2, H_0'] = 0$

$$\Longrightarrow \boxed{|nlm_l\rangle = R_{nl}(r)\, Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)}, \text{ ahol } \underline{l}^2 Y_l^{m_l} = l(l+1)\hbar^2 Y_l^{m_l}$$

$$l_z Y_l^{m_l} = m_l \hbar Y_l^{m_l}$$

$$E_{nlm_l} = \boxed{E_n = -\frac{13.6\,eV}{n^2}} \qquad n = 1 \underset{10.2eV}{\smile} 2 \underset{1.9eV}{\smile} 3 \underset{0.65eV}{\smile} 4$$

H-szerű atom több e^--nal ($\underline{l}\,\underline{s}$ nélkül és $\underline{B}=0$):

$$H_0' = \sum_i \frac{\underline{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi r_i} + \sum_{i\neq j}\frac{e^2}{4\pi r_{ij}} \approx \sum_i \frac{\underline{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi r_i} + \left\langle \sum_{i\neq j}\frac{e^2}{4\pi r_{ij}} \right\rangle$$

$$\Longrightarrow |nlm_l\rangle = R_{nl}'(r_i)\, Y_l^{m_l}(\theta_i, \varphi_i) \leftarrow \text{antiszimm. szorzat}$$

gömbszimmetrizált átlag

! $\boxed{E_{nlm_l} = E_{nl}}$! s, p, d, f pályák deg. megszűnik a Coulomb-kh. miatt!

pl.: Na $\begin{matrix} 3p \\ 3s \end{matrix}$ $\updownarrow \Delta_{3s-3p} = 2.1\,eV$ (D-vonalak); Rb: $\Delta_{5s-5p} = 1.6\,eV$

H-szerű atom optikai átmenetei

H-atom e^--ja $\underline{l}\,\underline{s}$-sel ($\underline{B}=0$):

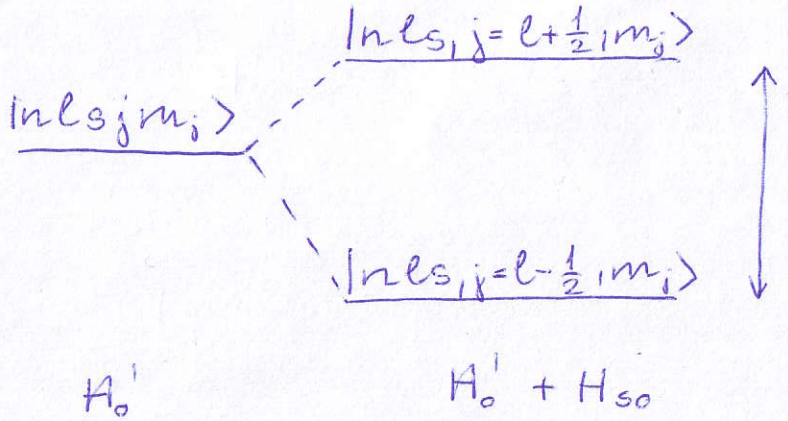
- $[\underline{l}\,\underline{s}, H_0'] = 0 \implies |n\,l\,s\,j\,m_j\rangle$ közös sajátfv.
- DE!!! $[H_{so}, H_0'] \neq 0$, ahol $H_{so} = \xi(r)\,\underline{l}\,\underline{s}$, hiszen $H_0' = H_0'\left(\frac{\partial}{\partial r}, r, \underline{l}^2\right)$

$\implies$ azaz H_{so}-nak $|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle$ nem sajátállapota

$$\langle n'l's'j'm_j'|\,\xi(r)\,\frac{\underline{j}^2-\underline{l}^2-\underline{s}^2}{2}\,|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle = \hbar^2\langle n'l'|\xi(r)|n\,l\rangle \cdot$$

$$\cdot\,\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{2}\,\delta_{l,l'}\delta_{s,s'}\delta_{j,j'}\delta_{m_j,m_j'}$$

$\implies$ csak $|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle$ és $|n'l\,s\,j\,m_j\rangle$ keveredhetnek, de ezek energiában általában távol, mégis ≈ sajátállapotok $H_0' + H_{so}$-ra



$\frac{2l+1}{2}\,\xi$, ahol $\xi = \langle n\,l|\xi(r)|n\,l\rangle$ és

$$\xi(r) = \frac{1}{4\pi}\,\frac{Z e^2}{2m^2c^2r^3}$$

$\boxed{\xi \approx 1-100\,meV}$

Megj.: Optika külső e^--okat teszteli; több külső e^- esetén $\underline{L} = \sum_i \underline{l}_i$ és $\underline{S} = \sum_i \underline{s}_i$-vel ugyanaz minden, ha a konfiguráció keveredésétől eltekintünk

H-szerű atom optikai átmenetei

Kiválasztási szabályok:

- ED $\propto \langle f | \underline{E}\,\underline{r} | i \rangle$ $\boxed{\text{paritásváltó}}$
- MD, EQ paritástartó
- Hidrogénatom $[i, H_0] = 0 \implies i\,|n l m_l\rangle = (-1)^l\,|n l m_l\rangle$

$$\implies \boxed{\text{ED}}: \quad s \to p,\ p \to d,\ d \to f, \ldots$$
$$\text{MD}: \quad s \to s,\ p \to p,\ d \to d$$

- ha H_{SO} kicsi $\implies |\Psi\rangle = |r\rangle \otimes |s\rangle \implies \langle \Psi_f | \underline{E}\,\underline{r} | \Psi_i \rangle = \langle r_f | \underline{E}\,\underline{r} | r_i \rangle \boxed{\delta_{s_f, s_i}}$

azaz csak a pályamomentum változhat

- H-szerű atom: $\langle \Psi_f | \underline{E}\,\underline{r} | \Psi_i \rangle = \langle R'_{nl}(r)\, Y_l^{m_l} | r\, Y_1^{m_{foton}} | R'_{n'l'}\, Y_{l'}^{m_{l'}} \rangle \cdot \delta_{s,s'} =$

$$= \underbrace{\langle Y_l^{m_l} | Y_1^{m_{foton}} | Y_{l'}^{m_{l'}} \rangle}_{\text{ez adja a kiválasztási szabályt}} \cdot \delta_{s,s'} \cdot \langle R'_{nl}(r) | r | R'_{n'l'}(r) \rangle$$

$\Leftarrow$

I. $m_l = m_{l'} + m_{foton}$

II. $l + l' + 1$ páros (paritás)

III. $|l - l'| \leq 1 \leq |l + l'|$

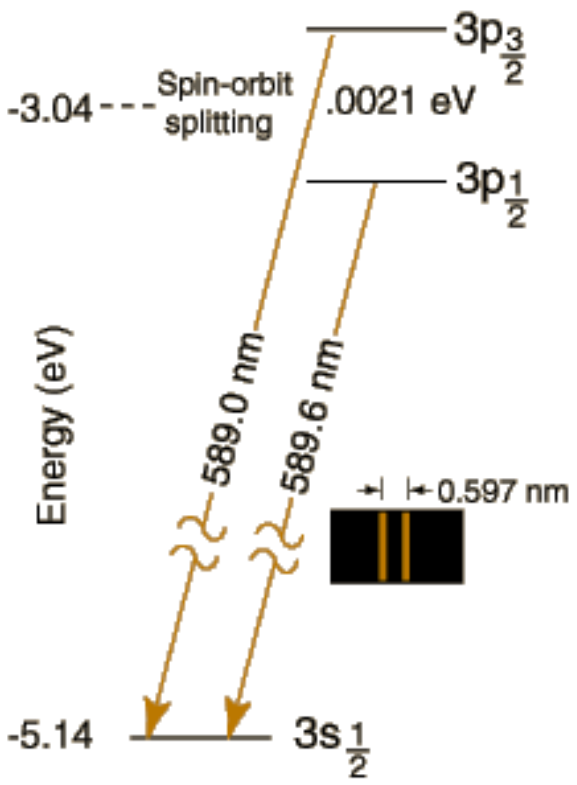
$\boxed{l - l' = \pm 1}$

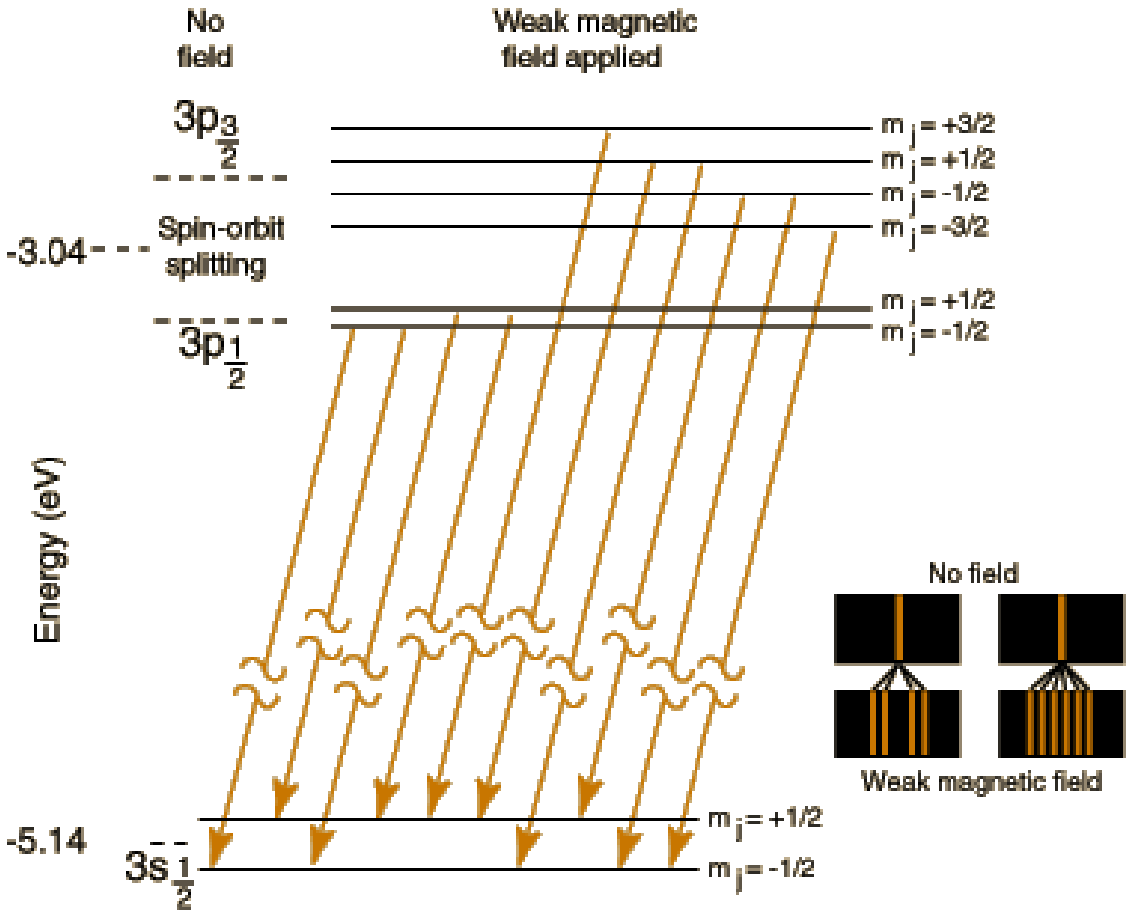
$\not\Leftarrow$ MD: $l - l' = 0$

hiszen $\langle Y_l^{m_l} | \underline{l}^2 | Y_{l'}^{m_{l'}} \rangle = l'(l'+1) \cdot \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$

gerjesztés: $l^{+/-}$ v. $s^{+/-}$

Atomi átmenetek – a nátrium D-vonalai





Atomok → molekulák → kristályok gerjesztései

atom

- paritássértő e^- átmenetek $s \mapsto p$, $p \mapsto d$, ...
- külső e^--okra
- ha $\underline{l}\,\underline{s}$ kicsi, spin tiltott

molekula

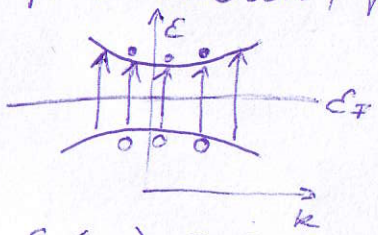
- paritás-tiszta állapotok nem lesznek, ha a molekulára $[i, H_0'] \neq 0$
- felső betöltött és alsó betöltetlen molekula-pályák között
- spin tiltottság érvényben

— o —

- gyengén kötődő komplexekben egy-ion paritástartó átmenet enyhén diszpál megengedetté lesz az inverzió hiánya miatt

kristály

- vertikális átmenetek ($|q| \ll \frac{2\pi}{a}$) sávok között
- tiszta s v. p v. d sávok esetén is tiltott átmenet csak magas szimm.-ú pontokban, pl. Γ pont



$$\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega) \propto \sum_{k,n,n'} f_{k,n,n'}\,\delta(\hbar\omega - \varepsilon_{n'k} + \varepsilon_{nk})$$

$$= \sum_{n,n'} f_{n,n'}(\omega)\,\rho_{n,n'}(\hbar\omega),$$

ahol $\rho_{n,n'}(\hbar\omega) = \int_{S_\omega} \frac{dS}{|\nabla_k(\varepsilon_{n'k} - \varepsilon_{nk})|}$

n' : üres

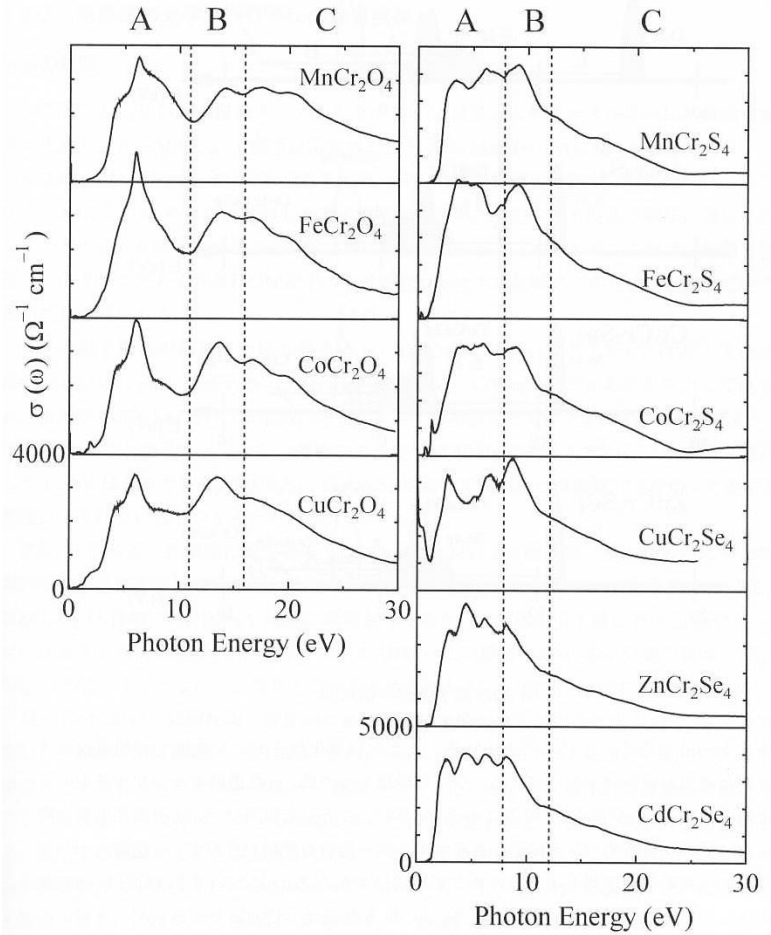
n : betöltött

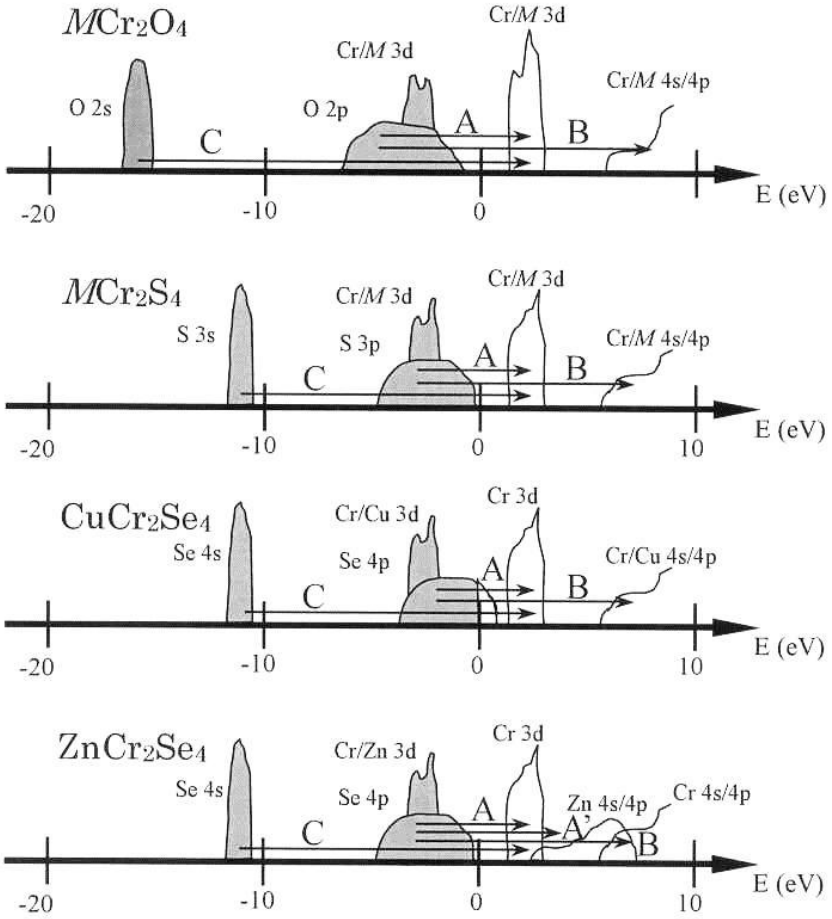
ρ : csatolt állapotsűrűség

— o —

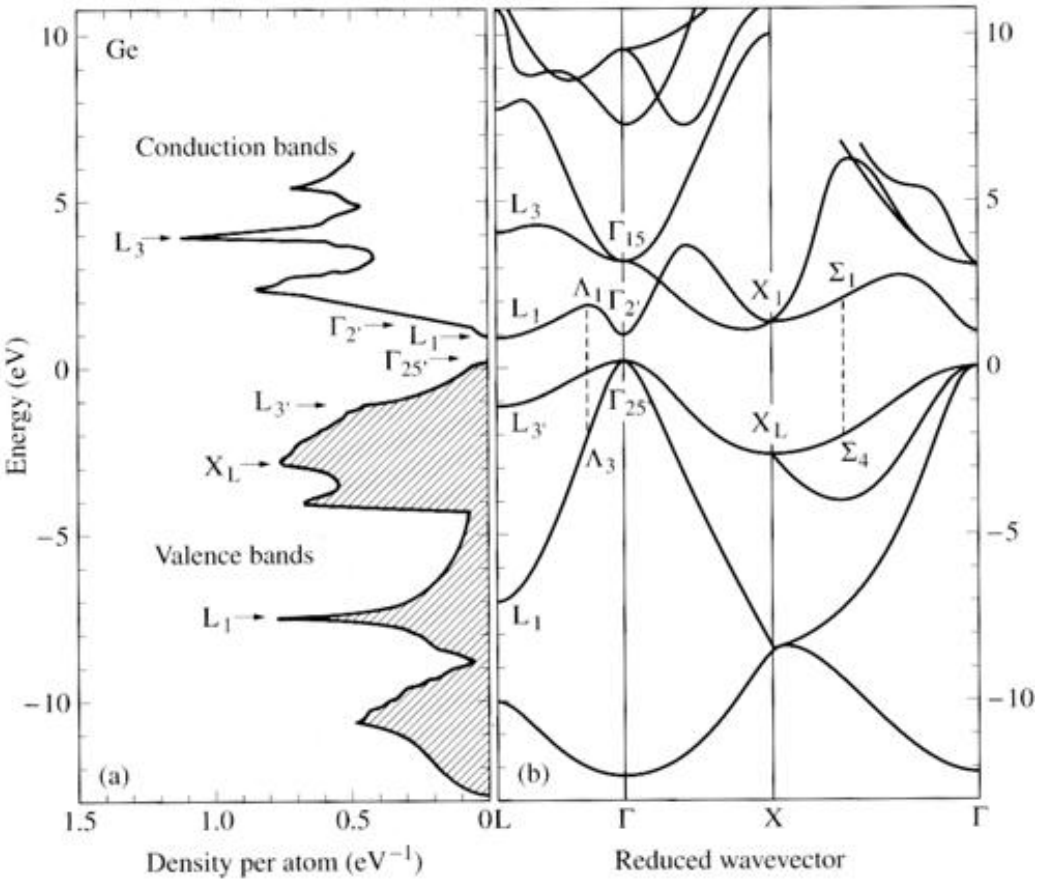
- enyhén diszpál megengedett kristálytér átmenetek ($d \mapsto d$, $f \mapsto f$)

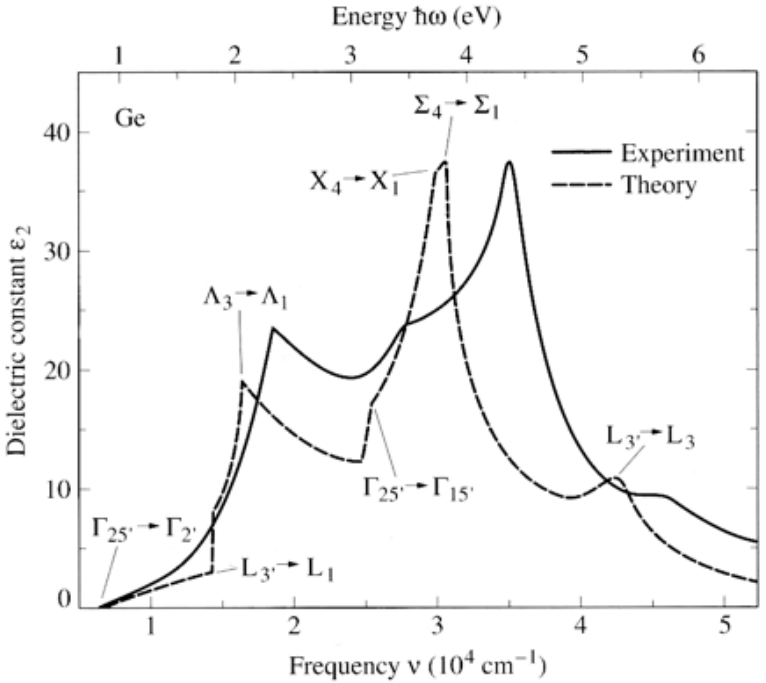
Sáv-sáv átmenetek





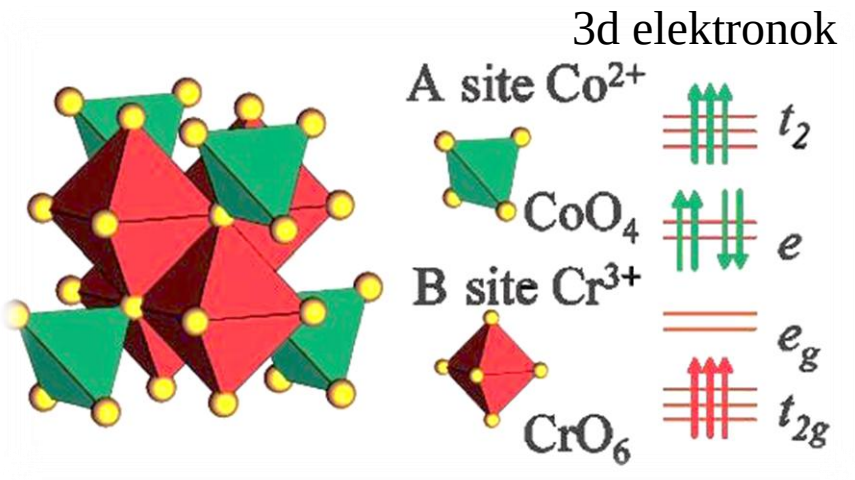
Germánium sávszerkezete és abszorpciós spektruma

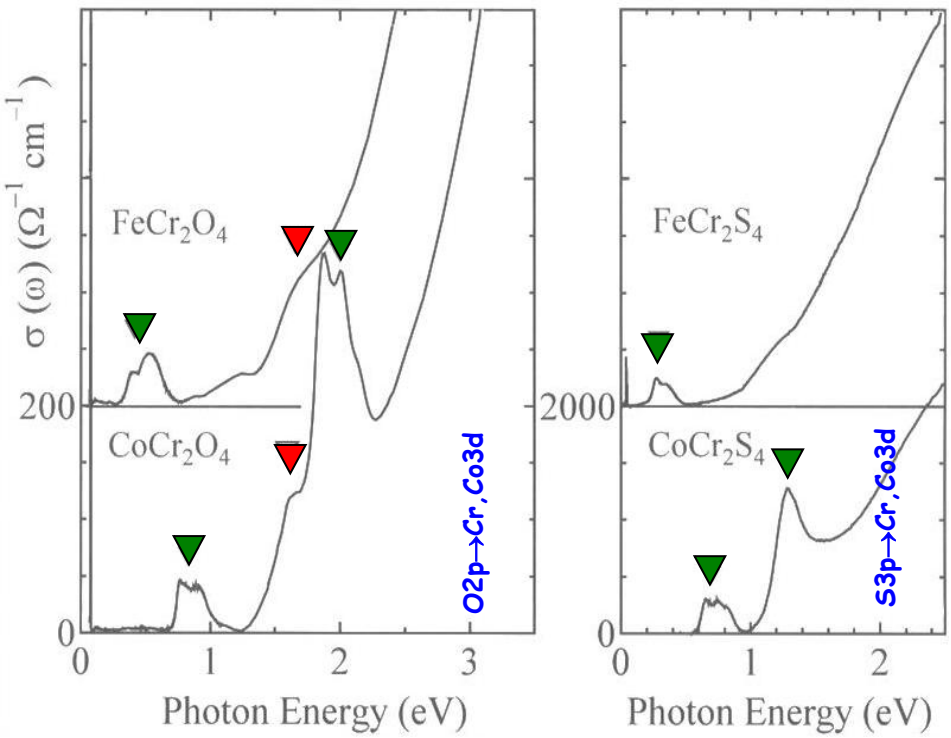




Inverziósértés miatt megengedett kristálytér átmenetek

ACr_2O_4 spinels





Atomok → molekulák → kristályok gerjesztései

atom

molekula

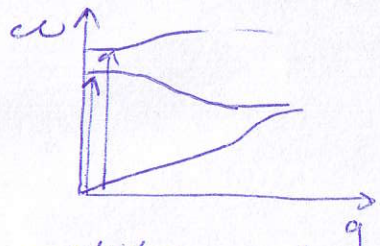
- $\boxed{\text{vibrációs módusok}}$
  (~ e^--ok adiabatikusan lekövetik a magok mozgását)
- 3N−6 db $\omega(|q|\to 0)\neq 0$ módus
  - IR
  - Raman
  - csönd
- Born–Oppenheimer közelítésen túl: $\boxed{\text{elektron-vibrációs csatolás}}$
  - erős, ha $\Delta_{HOMO-LUMO} \sim \hbar\omega_{vibr.}$
  - pl. dimer $1e^-$-nal:

$$\frac{|1\rangle-|2\rangle}{\sqrt{2}} \Longrightarrow \frac{|1\rangle+|2\rangle}{\sqrt{2}}$$

ez keverés e^--vibr. gerjesztés lesz

kristály

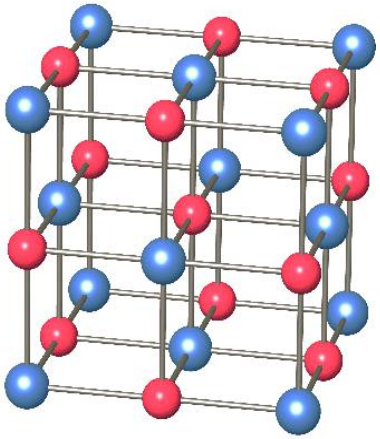
- $\boxed{\text{fononok}}$
- 3N−3 db $\omega(|q|\to 0)\neq 0$
  - IR
  - Raman
  - csönd



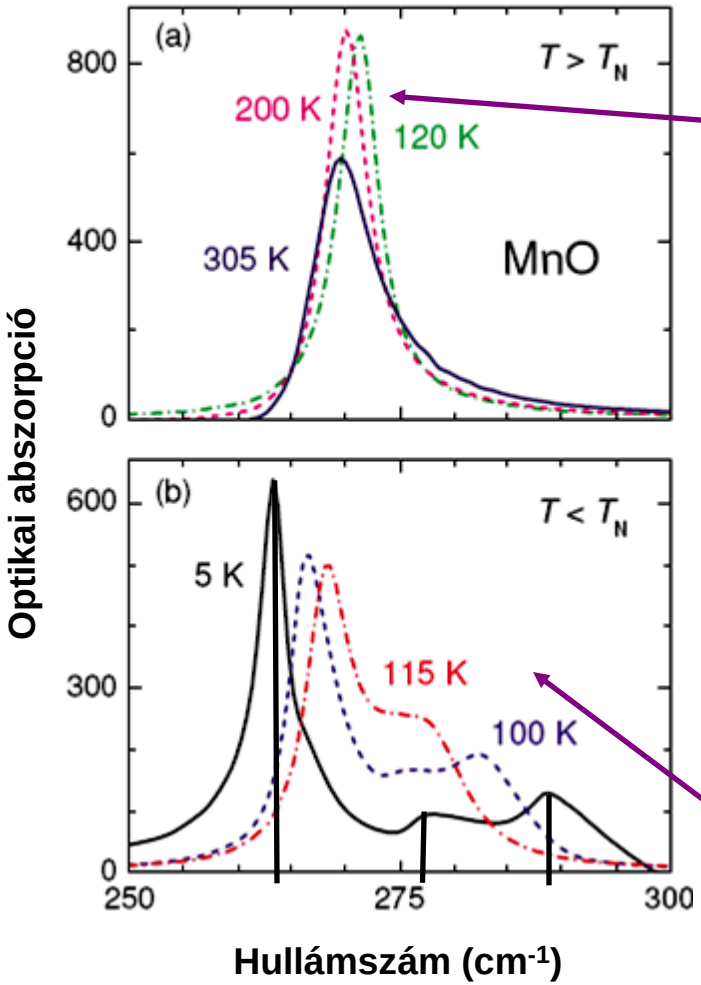
optika csak $|q|=0$-nál

- $\boxed{e^- \text{-fonon csatolás:}}$
  - szupravezetés
  - Jahn–Teller eff.
  - e^--vibr.
  - polaron
  - fémek árnyékolás a fononokra
  - Fano jelalak a fononrezonanciára

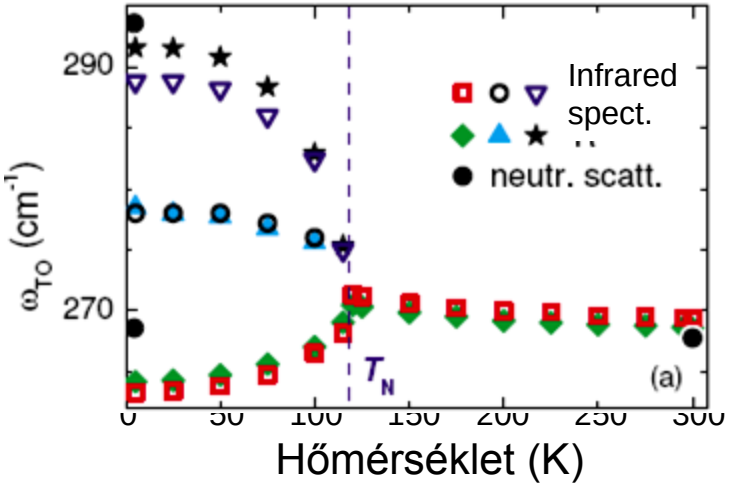
Optikai fononmódusok



MnO: -FCC rács 2 atomos bázissal, NaCl struktúra,
-Antiferromágneses rendeződés T_N=118K-en (Nobel-díj, neutron szórás),
-Kristályrács szimmetriája csökken a mágneses rendeződés miatt.



Hőmérséklet csökkentésével:
Optikai fonon keményedik és keskenyedik, mivel a rácsállandó csökken, anharmonicitás csökken



2 atomos bázis: 3 akusztikus + 3 optikai módus
$T>T_N$ 3× degeneráció, köbös fázis
$T<T_N$ nincs degeneráció, ortorombos fázis

Physical Review B 77, 024421 (2008)

Elektron-fonon / elektron-vibrációs csatolás

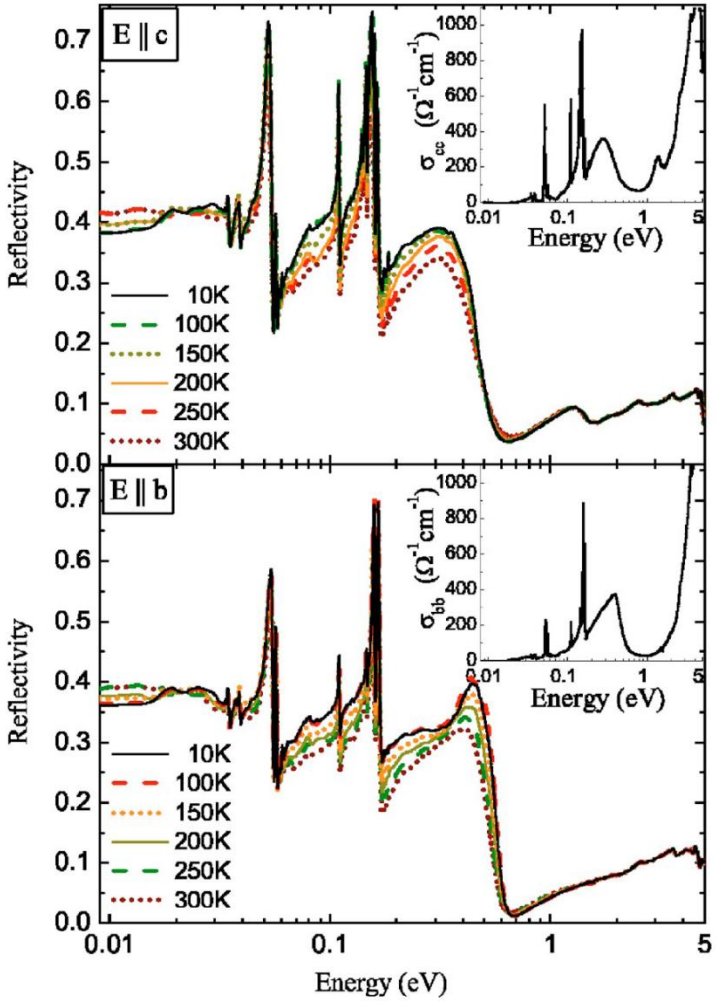


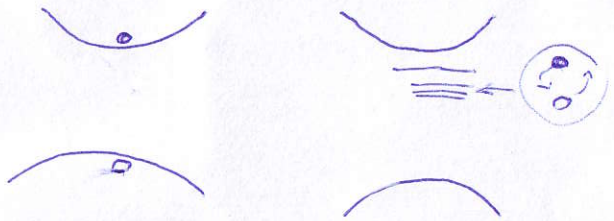
FIG. 2. (Color online) Polarized reflectivity spectra of κ-$(ET)_2Cu_2(CN)_3$ measured at various temperatures for $E \| c$ and $E \| b$ (upper and lower panel, respectively). The insets show the corresponding conductivity spectra at low temperature.

Atomok → molekulák → kristályok gerjesztései

atom, molekula, kristály

kollektív gerjesztések

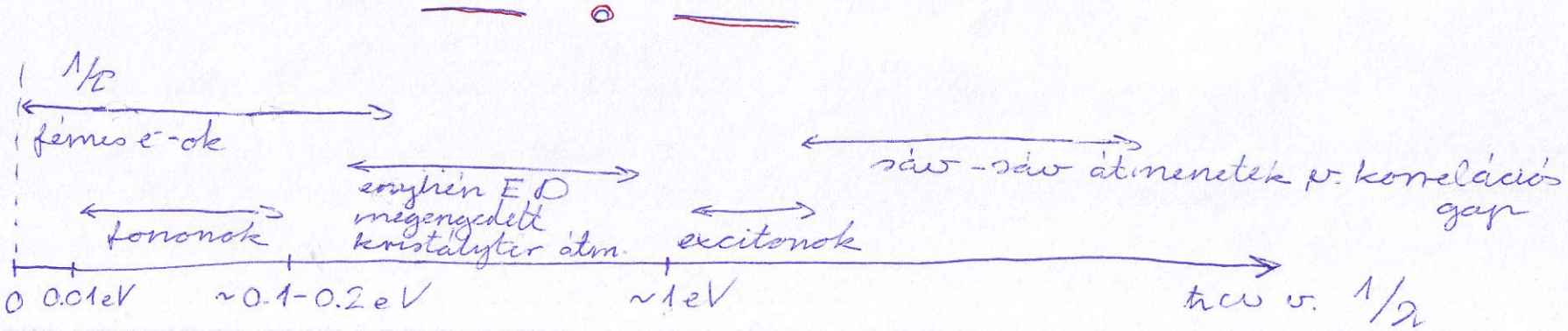
- fémes e^--ok, Drude vezetés, ideálisan $\sigma(\omega) = \sigma_0 \delta(\omega)$
- excitonok (végállapot kh., nem a szabad kezdő- és végállapot közötti ED mátrixelem (egyrészecske kép dól)



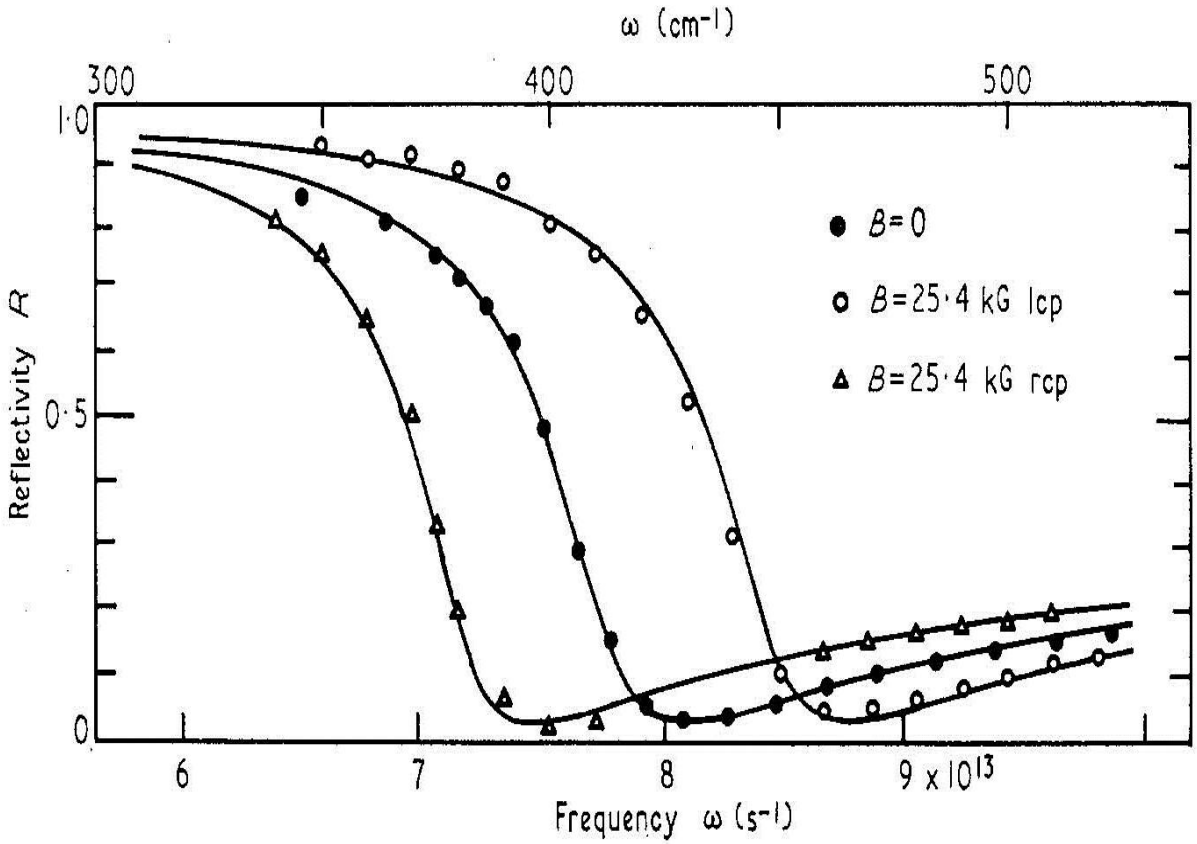
e^- - h^+ H-atom

- plazmonok

Kristály:



Drude vezetés fémekben
(v. tiszta, enyhén adalékolt félvezetőkben)

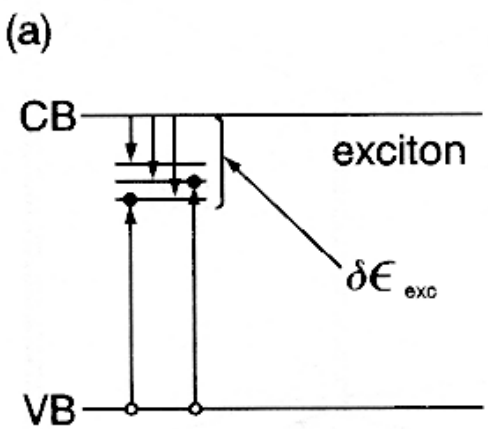


Magnetoplasma reflection in the Faraday geometry for n-type InSb (after Palik *et al.* 1962).

Excitonok

Cu_2O: direkt sáv-sáv átmenet tiltott a szimmetria miatt, de “p” típusú (l=1) exciton állapotokba való gerjesztés megengedett.

P.W. Baumeister, PR **121**, 359 (1957)



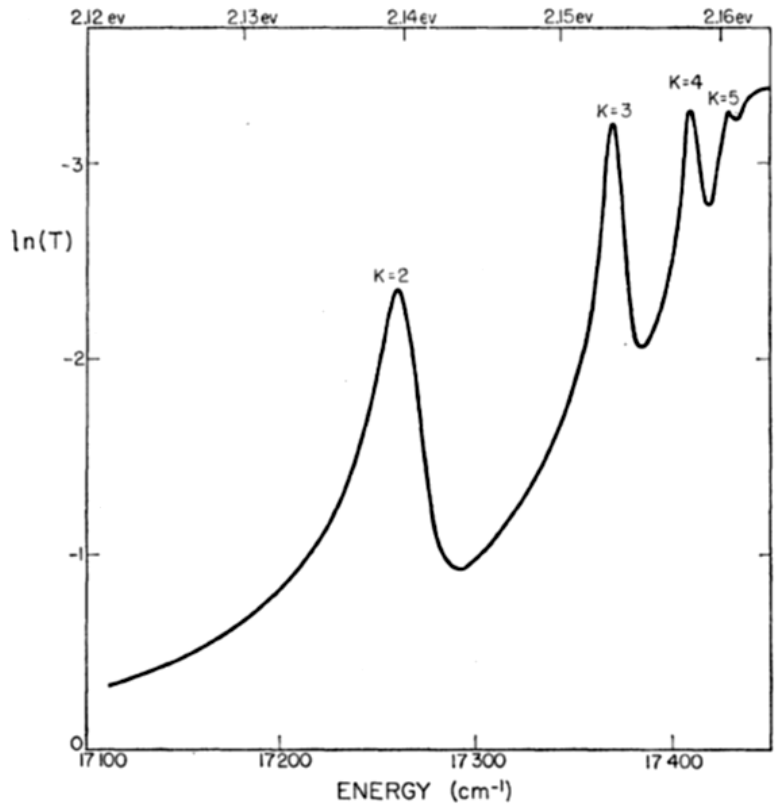
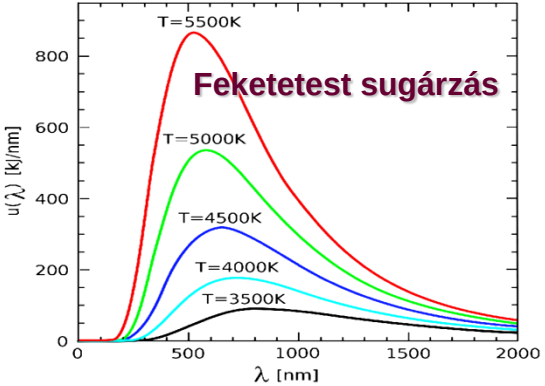
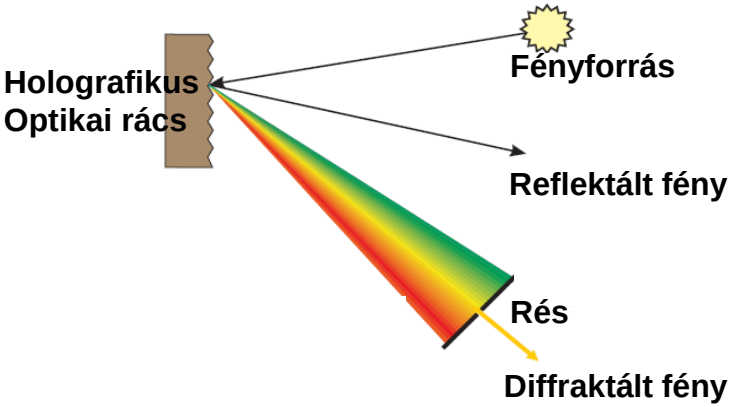


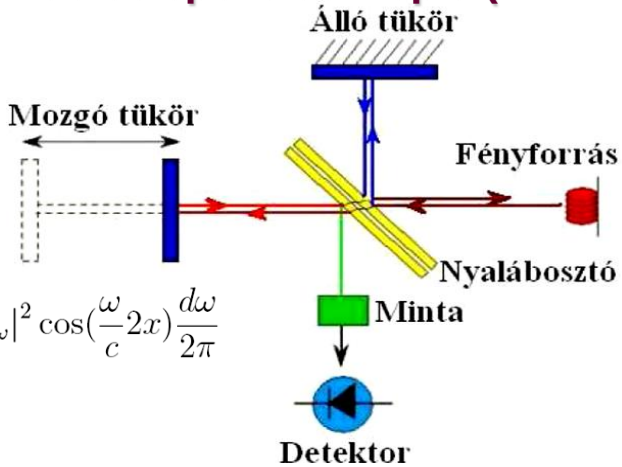
FIG. 6. The logarithm of the transmission as a function of photon energy of a Cu_2O sample at 77°K, showing the details of the yellow series of exciton lines.



Diszperziós spektroszkópia (UV-NIR)

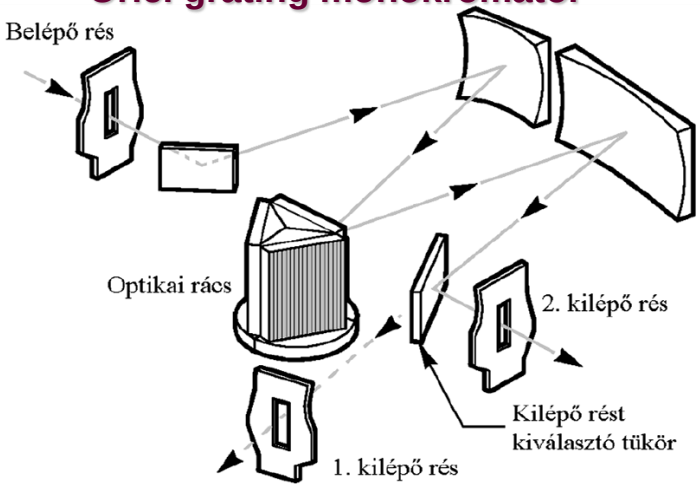
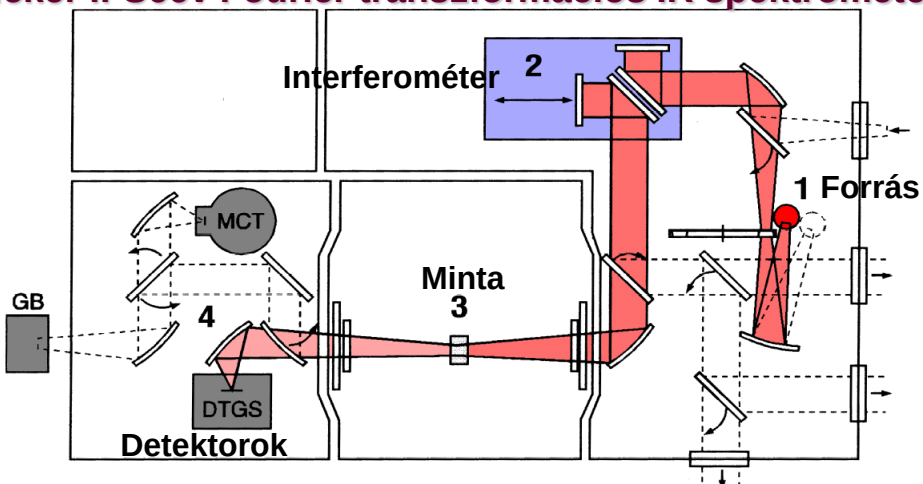


Fourier transzformációs spektroszkópia (NIR-FIR)



$$I_D(x) \simeq \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_o}{\mu_o}}\frac{1}{2}\int |E_\omega|^2 \cos(\frac{\omega}{c}2x)\frac{d\omega}{2\pi}$$

Oriel grating monokromátor



Brucker IFS66v Fourier transzformációs IR spektrométer