Physik der Kondensierten Materie 2

Rudolf Gross

SS 2021

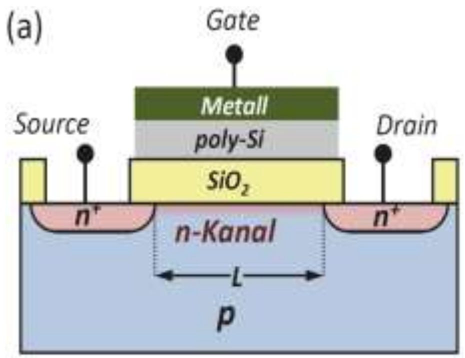
Teil 9

Vorlesungsstunde: 26.04.2021-1

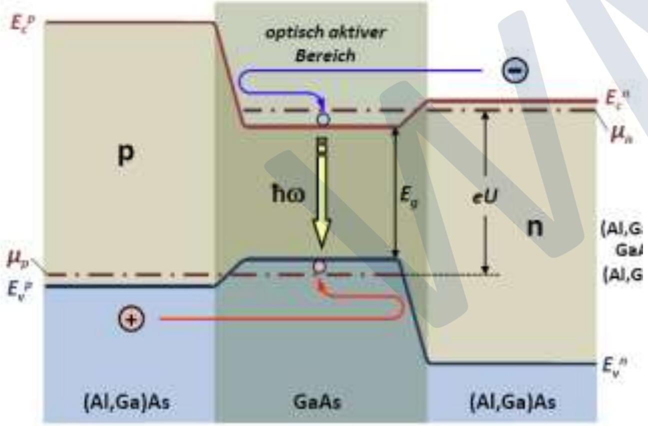
Zusammenfassung: Teil 8a, 20.04.2021/2

- ***Realisierung von 2DEGs durch Halbleiter-Heterostrukturen***
  - gute Gitteranpassung von verschiedenen Halbleitermaterialien erlaubt ***Heteroepitaxie***
  - unterschiedliche Elektronenaffinitäten χ und Energielücken E_g von HL
    → ***unterschiedliche Banddiskontinuitäten*** (normal, gestapelt, gebrochen)
  - ***Bandverbiegungen*** durch unterschiedliche Elektronenaffinitäten χ und Energielücken E_g
  - Beispiele: (i) ***isotypische HL-Heterostrukturen***, (ii) ***Kompositionsübergitter***, (iii) ***Dotierungsübergitter***

- ***MOSFET***
  - Realisierung von 2DEGs, Patentierung bereits 1926 und 1934
  - technisch relevant erst nach 1960 → Si/SiO_2 Systeme mit reproduzierbarer HL/Isolator-Grenzfläche
  - Realisierung von ***Inversionskanal*** an HL-Oberfläche über elektrischen Feldeffekt
  - Verkürzung der Kanallänge: Mooresches Gesetz
  - Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts (1980)



- ***Halbleiter-Laser***
  - Erzeugung von Laser-Licht durch LT-Rekombination in *pn*-artiger Struktur
  - z.B. ***Double Heterostructure Injection Laser*** (H. Kroemer)
  - wichtige Anwendungen: optische Kommunikation und Datenspeicher



Zusammenfassung: Teil 8b, 20.04.2021/2

- ***Leitwertquantisierung in 1D Elektronengas*** **(Wiederholung)**

$$I = \frac{e^2}{h} U \quad \text{mit} \quad R_K = \frac{1}{G_K} = \frac{h}{e^2} = 25\,812.807\,4555(59)\ \Omega$$

von Klitzing-Konstante

- ***Quanten-Hall-Effekt: 2DEG in Magnetfeld***

- entartete Landau-Niveaus (für eine Spin-Richtung)

$$p = \frac{L_y}{2\pi}\frac{m\omega_c}{\hbar} L_x = \hbar\omega_c D_{2D} = L_x L_y B \frac{e}{2\pi\hbar} = \frac{\Phi}{2\Phi_0} \qquad \left(\Phi_0 = \frac{h}{2e} = \text{Flussquant}\right)$$

$$D_{2D} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} L_x L_y$$

- Transport charakterisiert durch ***Tensoren der elektrischen Leitfähigkeit bzw. des spezifischen elektrischen Widerstands***

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2+\rho_{xy}^2} \\ \sigma_{yy} &= \sigma_{xx} \end{aligned}} \quad \boxed{\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{-\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2+\rho_{xy}^2} \\ \sigma_{yx} &= -\sigma_{xy} \end{aligned}} \Longleftrightarrow \boxed{\begin{aligned} \rho_{xx} &= \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2+\sigma_{xy}^2} \\ \rho_{yy} &= \rho_{xx} \end{aligned}} \quad \boxed{\begin{aligned} \rho_{xy} &= \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2+\sigma_{xy}^2} \\ \rho_{yx} &= -\rho_{xy}\,. \end{aligned}}$$

- Hall-Effekt: Kompensation von Lorentz-Kraft $(-e)v_x B_z$ und $(-e)E_y$: $\quad -ev_x B_z - eE_y = -ev_x B_z - eU_y/L_y = 0 \Rightarrow U_y = -v_x B_z L_y$
  Stromdichte J_x in Längsrichtung: $J_x = n_{2D} e\, v_x \quad \Rightarrow \quad \rho_{xy} = E_y/J_x = (U_y/L_y)/(n_{2D} e v_x) = -B_z / n_{2D} e = R_H B$ mit $R_H = -1/n_{2D} e$

- für sehr reine Proben: $\omega_c \tau \gg 1 \quad \Rightarrow \quad \sigma_{xx}, \sigma_{yy} \to 0$: $\quad \rho_{xy} = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \simeq -\frac{1}{\sigma_{xy}} \Rightarrow \boldsymbol{\sigma_{xy} \simeq -\frac{1}{\rho_{xy}} = \frac{n_{2D} e}{B}}$

- ***Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts:***

Klitzing, Dorda Pepper (1980) mit 2DEG in MOSFET

→ ρ_{xy} zeigt Plateaus an den Stellen, an denen $\sigma_{xx} \to 0$

→ Abstand der Plateaus: $R_K = \frac{h}{e^2} = 25\,812.807\,572(95)\ \Omega$

$$\rho_{xy} = -\frac{1}{\sigma_{xy}} = -\frac{B}{n_{2D} e} = R_H B$$

für n gefüllte Landau-Niveaus mit Entartung p

$$n_{2D} = \frac{N_e}{L_x L_y} = \frac{n \cdot p}{L_x L_y} = n \frac{eB}{2\pi\hbar} \Longrightarrow \boxed{\rho_{xy} = \frac{h}{e^2}\frac{1}{n}}$$

Kapitel 11

Dielektrische Eigenschaften

11 Dielektrische Eigenschaften

- **Frage: Wie verhalten sich FK bei Störung durch elektromagnetische Felder**

  – **Kapitel 9:** Bewegung einzelner Elektronen in Festkörper aufgrund von äußeren Kräften durch E- und B-Feld

  – **Kapitel 11:** Reaktion des Festkörpers *insgesamt* auf Störung durch E- und B-Felder

  ➢ *insgesamt* bedeutet: wir betrachten FK als Kontinuum und beschreiben seine Antwort auf eine Störung durch eine Materialkonstante $\chi(\omega, q)$ ➔ ***verallgemeinerte Suszeptibilität***

  ➢ wir beschränken uns meistens auf den Fall der ***linearen Antwort (linear response)*** bei kleinen Störungen

  – **Beschreibung der Wechselwirkung eines Festkörpers mit einem elektromagnetischen Feld:**

  ➢ **mikroskopisch:** z.B. Absorption von einzelnem Photon, Erzeugung von FK-Anregungen (Phononen, e-h-Paare)

  ➢ **makroskopisch:** basierend auf Maxwell-Gleichungen, FK-Reaktion steckt in makroskopischer Materialkonstante (elektrische oder magnetische Suszeptibilität)

  Frage: ***Wie hängt makroskopische Materialkonstante mit den mikroskopischen FK-Eigenschaften zusammen?***

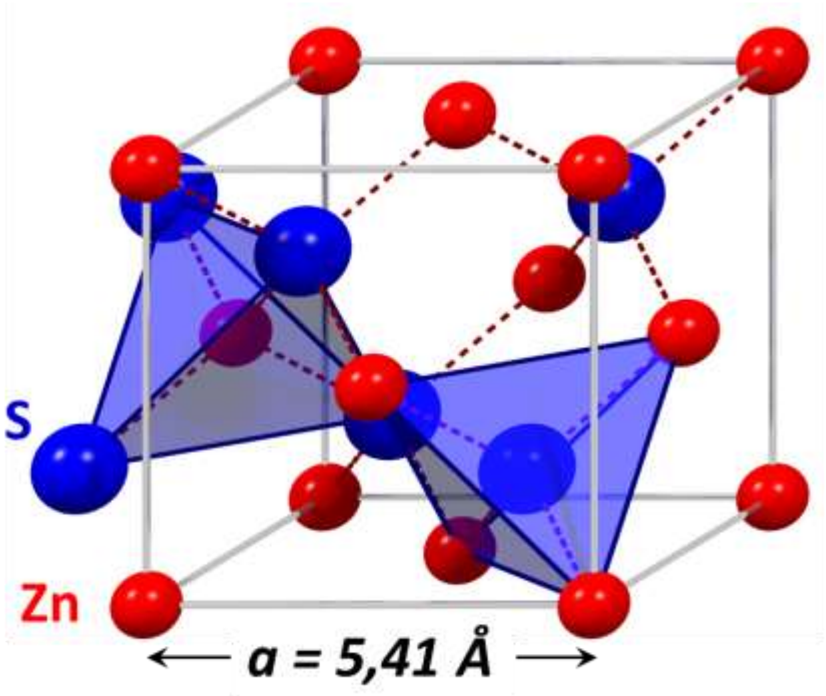
  – **Wovon hängt die Reaktion des Festkörpers auf das elektromagnetische Feld ab?**

  ➢ Beweglichkeit der Ladungen → große Unterschiede zwischen Metallen und Isolatoren

  ➢ Frequenz und Wellenvektor → $\chi = \chi(\omega, q)$: ***charakteristische Längen- und Zeitskalen***

11 Dielektrische Eigenschaften

- Kontinuumsbeschreibung von Festkörpern



Zinkblende

typische Längenskala von physikalischen Prozessen ≫ Atomabstand

Wellenlänge ≫ 1 Ångström

- **Kontinuumsbeschreibung von Festkörpern**

  - **elastische Wellen:** $\lambda = \frac{v_s}{f}$ Schallgeschwindigkeit $v_s \simeq 1\,000$ m/s

    $\lambda \simeq 1$ m @ $f = 1$ kHz

    $\lambda \simeq 1$ mm @ $f = 1$ MHz

    $\lambda \simeq 1$ µm @ $f = 1$ GHz

  - **elektromagnetische Wellen:** $\lambda = \frac{\bar{c}}{f}$ Lichtgeschwindigkeit $\bar{c} = c/n \simeq 10^8$ m/s

    $\lambda \simeq 100$ km @ $f = 1$ kHz

    $\lambda \simeq 100$ m @ $f = 1$ MHz

    $\lambda \simeq 100$ mm @ $f = 1$ GHz

    $\lambda \simeq 100$ µm @ $f = 1$ THz

    $\lambda \simeq 100$ nm @ $f = 1$ PHz

- **Lineare Antwort eines Festkörpers auf äußere Störungen**

Antwort	Störung	verallg. Suszeptibilität
Volumenausdehnung $\Delta V/V$	Druck $p = F/A$	Kompressibilität κ: $\boldsymbol{\Delta V/V = -\,\kappa\, p}$
Elektrische Stromdichte $\vec{J}_q$	elektrisches Feld $\vec{E}$	elektrische Leitfähigkeit σ: $\boldsymbol{\vec{J}_q = \sigma\,\vec{E}}$
Wärmestromdichte $\vec{J}_h$	T-Gradient $\vec{\nabla}T$	Wärmeleitfähigkeit κ_h: $\boldsymbol{\vec{J}_h = -\kappa_h\,\vec{\nabla}T}$
Polarisation $\vec{P}$	elektrisches Feld $\vec{E}$	elektrische Suszeptibilität χ_{el}: $\boldsymbol{\vec{P} = \chi_{\mathrm{el}}\ \epsilon_0\vec{E}}$
Magnetisierung $\vec{M}$	magnetisches Feld $\vec{H}$	magn. Suszeptibilität χ_{mag}: $\boldsymbol{\mu_0\vec{M} = \chi_{\mathrm{mag}}\ \mu_0\vec{H}}$

verallgemeinerte Suszeptibilität = Kontinuumseigenschaft

- Beschreibung der Reaktion eines Festkörpers auf E-Feld im Rahmen der Kontinuumstheorie

11.1.1 Elektrische Suszeptibilität und dielektrische Funktion

I. Isolator in E-Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{q},\omega)\exp\left(i\left[\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t\right]\right)$ (nur gebundene Elektronen)

– E-Feld verschiebt den positiven und negativen Ladungsschwerpunkt der Atome gegeneinander

- elektrisches Dipolmoment des i-ten Atoms: $\mathbf{p}_{\mathrm{el},i} = q_i\,\mathbf{r}_i$ (q_i = Ladung, $\mathbf{r}_i$ = Verschiebung)
- gesamtes Dipolmoment $\mathbf{p}_{\mathrm{el}} = \sum_i q_i\,\mathbf{r}_i$ $[p_{\mathrm{el}}] = \text{Ladung}\cdot\text{Länge} = \text{As m} = \text{C m}$
- ***elektrische Polarisation*** $\mathbf{P} = \mathbf{p}_{\mathrm{el}}/V$ $[P] = \frac{\text{Ladung}}{\text{Fläche}} = \frac{\text{As}}{\text{m}^2}$

– Beschreibung der Polarisation P als lineare Antwort auf E-Feld im Rahmen der Kontinuumstheorie:

$$P_i(\mathbf{r}',t') = \epsilon_0 \sum_j \int \underbrace{\chi_{ij}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t')}_{\text{Tensor der dielektrischen Suszeptibilität}} E_j(\mathbf{r},t)\;\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}t$$

(Faltungsintegral)

i-te Komponente von P

j-te Komponente von E

Tensor der
dielektrischen Suszeptibilität

$\chi_{ij}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t') \to \chi_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')$ falls Raum und Zeit homogen sind

11.1.1 Dielektrische Funktion

- **Darstellung der dielektrischen Funktion/Suszeptibilität im (q, ω)-Raum**

$(\mathbf{r}, t)$-Raum

$$P_i(\mathbf{r}', t') = \epsilon_0 \sum_j \int \chi_{ij}(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')\, E_j(\mathbf{r}, t)\ \ \mathrm{d}^3 r\, \mathrm{d}t$$

FT

Faltungssatz: die Fourier-Transformierte der Faltung zweier Funktionen ist gleich dem Produkt der FT der beiden Funktionen

$(\mathbf{q}, \boldsymbol{\omega})$-Raum

$$P_i(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_0 \sum_j \chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega)\, E_j(\mathbf{q}, \omega)$$

- **Beiträge höherer Ordnung (nichtlineare Antwort)**

$$P_i = \epsilon_0 \sum_j \chi_{ij}^{(1)} E_j + \underbrace{\epsilon_0 \sum_{jk} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k}_{\text{Pockels-Effekt}} + \underbrace{\epsilon_0 \sum_{jk\ell} \chi_{ijk\ell}^{(3)} E_j E_k E_\ell}_{\text{Kerr-Effekt}}$$

11.1.1 Dielektrische Funktion

- **Dielektrische Verschiebung** (es gilt: $\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \mathbf{P}(\mathbf{r},t) = \epsilon_0 \left[\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \chi(\mathbf{r},t)\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\right] = \epsilon_0 \left[\mathbf{1} + \chi(\mathbf{r},t)\right]\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$)

$$D_i(\mathbf{q},\omega) = \epsilon_0 \sum_j \epsilon_{ij}(\mathbf{q},\omega)\, E_j(\mathbf{q},\omega)$$

- **Dielektrische Funktion**

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{q},\omega) = 1 + \chi_{ij}(\mathbf{q},\omega)$$

- **allgemeine Eigenschaften der dielektrische Funktion (ohne Beweis)**
  - $\epsilon(-\mathbf{q},-\omega) = \epsilon^\star(\mathbf{q},\omega)$ (da $\epsilon(\mathbf{r},t)$ eine reelle Funktion von $\mathbf{r},t$ sein muss)
  - $\epsilon_{ij}(\mathbf{q},\omega) = \epsilon_{ji}(-\mathbf{q},\omega)$ (folgt aus Onsager-Beziehungen, die aus Zeitumkehrsym. der mikr. Prozesse resultieren)

- **rein lokale und instantane Antwort**
  - dieelektrische Funktion $\epsilon(\mathbf{r},t)$ ist proportional zu δ-Funktion in Ort und Zeit
    ➔ $\epsilon(\mathbf{q},\omega) = const.$ (*keine Dispersion, keine Frequenzabhängigkeit*)
    ➔ endliche q- und ω-Abhängigkeit der dielektrischen Funktion spiegelt nichtlokale und zeitverzögerte Antwort des FK wider

- **Näherung für nicht allzu hohe Frequenzen bis in den optischen Bereich**
  - $\epsilon(\mathbf{q},\omega) \simeq \epsilon(\mathbf{q}=0,\omega) = \epsilon(\omega)$, da Wellenlänge $\lambda \gg a$ bzw. $q \ll \pi/a \simeq 0$

11.1.1 Dielektrische Funktion

II. Elektrischer Leiter in E-Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{q},\omega)\exp\left(i\left[\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t\right]\right)$ (gebundene und freie Elektronen)

– Maxwell-Gleichungen plus Ohmsches Gesetz: E-Feld erzeugt zusätzlich elektrische Stromdichte $\mathbf{J}_q$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \qquad \mathbf{J}_q = \boldsymbol{\sigma}\,\mathbf{E}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_q + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

– Übergang zu Fourier-Komponenten

$$\nabla \times \mathbf{H} = \sigma(\omega)\,\mathbf{E}(\omega) - i\omega\epsilon_0\epsilon(\omega)\mathbf{E}(\omega)$$

– Einführung von **verallgemeinerter Leitfähigkeit $\tilde{\sigma}(\omega) = \sigma(\omega) - i\omega\epsilon_0\epsilon(\omega)$** (berücksichtigt Response von gebundenen Elektronen)

$$\nabla \times \mathbf{H} = \tilde{\sigma}(\omega)\,\mathbf{E}(\omega)$$

($\tilde{\sigma}$ ist komplexe Größe)

– Einführung von **verallgemeinerter Dielektrizitätskonstante $\tilde{\epsilon}\,(\omega) = \epsilon(\omega) + i\sigma/\epsilon_0\omega$** (berücksichtigt Response von freien Elektronen)

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon_0\tilde{\epsilon}\,(\omega)\,\mathbf{E}(\omega)$$

($\tilde{\epsilon}$ ist komplexe Größe)

- **dielektrische Phänomene**: Bewegung von gebundenen Ladungen
- **Leitfähigkeitsphänomene**: Bewegung von freien Ladungen

- **Kramers-Kronig-Relationen (sind nur im Bereich der linearen Antwort gültig)**
  - Kramers-Kronig-Relationen basieren auf Kausalitätsprinzip

$$\epsilon_r(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \wp \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_i(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}\, d\omega'$$

$$\epsilon_i(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \wp \int_0^\infty \frac{\epsilon_r(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}\, d\omega'$$

$\wp$ = Hauptwert des Integrals

  - Kramers-Kronig-Relationen stellen Beziehung zwischen Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion her
    ➔ wichtig für Experiment: ein Teil kann durch Messung des anderen Teils berechnet werden

11.1.3 Absorption, Transmission und Reflexion

- **Zusammenhang zwischen der dielektrischen Funktion und den optischen Materialeigenschaften**

  – wir betrachten ungeladenen Festkörper: $\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{D} = \rho = 0$ ($\mu = 1$, unmagnetisches Medium)

  – Wellengleichung: $$\nabla^2\mathbf{E} = \mu_0\epsilon_0\tilde{\epsilon}\,\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{1}{v_{\mathrm{ph}}^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2}$$ mit $$v_{\mathrm{ph}} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0\tilde{\epsilon}}} = \frac{c}{\sqrt{\tilde{\epsilon}}} = \frac{c}{\tilde{n}}$$

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\,\kappa(\omega) = \sqrt{\tilde{\epsilon}}$$

Brechungsindex (n) *Extinktionskoeffizient* (κ)

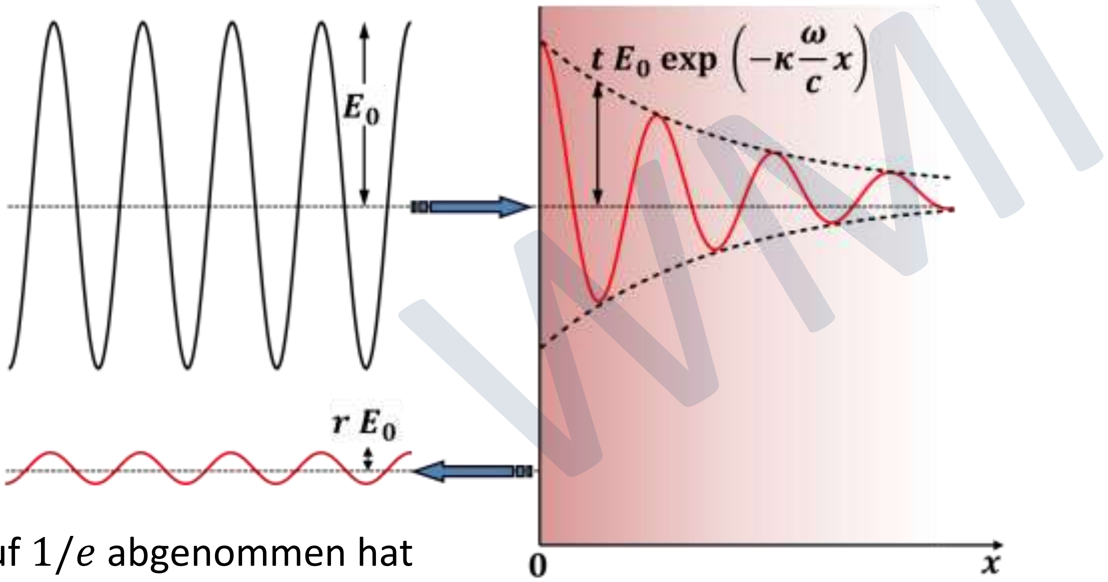
($\tilde{\epsilon} = \epsilon_r + i\epsilon_i$, komplexe dielektrische Funktion
$\tilde{n} = n + i\,\kappa$, komplexer Brechungsindex)

$$n^2 - \kappa^2 = \epsilon_r, \qquad 2n\kappa = \epsilon_i$$

  – mit Dispersionsrelation $\omega = \left(\frac{c}{\tilde{n}}\right)\tilde{k}$ folgt:

$$\tilde{k} = k_r + ik_i = \tilde{n}\frac{\omega}{c} = n\frac{\omega}{c} + i\,\kappa\frac{\omega}{c}$$

$$E = E_0 \exp\left[i\left(n\frac{\omega}{c}x - \omega t\right)\right]\exp\left(-\kappa\frac{\omega}{c}\,x\right)$$



$(2\pi\kappa)^{-1}$ gibt an, nach wievielen Welllenlängen das E-Feld auf $1/e$ abgenommen hat

11.1.3 Absorption, Transmission und Reflexion

- **Absorptionskoeffizient K: Gibt Abschwächung der Intensität nach Durchlaufen der Materialdicke 1 an**

  – absorbierte Leistung: $P_{\text{dis}} = \Re e\,(\mathbf{J}\cdot\mathbf{E})$

$$\mathbf{J}(\omega) = [\sigma(\omega) - i\omega\epsilon_0\epsilon(\omega)]\,\mathbf{E}(\omega) = -i\omega\epsilon_0\left(\frac{i\sigma}{\omega\epsilon_0} + \epsilon\right)\mathbf{E}(\omega) = -i\omega\epsilon_0\tilde{\epsilon}\,\mathbf{E}(\omega)$$

$$P_{\text{dis}} = \Re e\,(-i\omega\epsilon_0\tilde{\epsilon}(\omega)\,\mathbf{E}^2) = 2\kappa(\omega)n(\omega)\,\omega\epsilon_0 E_0^2\exp\left(-2\kappa(\omega)\frac{\omega}{c}\,x\right)$$

$$E = E_0\exp\left[i\left(n\frac{\omega}{c}x - \omega t\right)\right]\exp\left(-\kappa\frac{\omega}{c}\,x\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{K(\omega) = 2\kappa(\omega)\frac{\omega}{c} = \frac{4\pi\kappa(\omega)}{n\lambda} = \frac{2\kappa k}{n} = \frac{\epsilon_i(\omega)\omega}{nc}}$$

Absorptionskoeffizient

K^{-1} gibt an, nach welcher Länge die Intensität auf $1/e$ abgenommen hat

  – Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sind durch Fresnelsche Formeln gegeben:

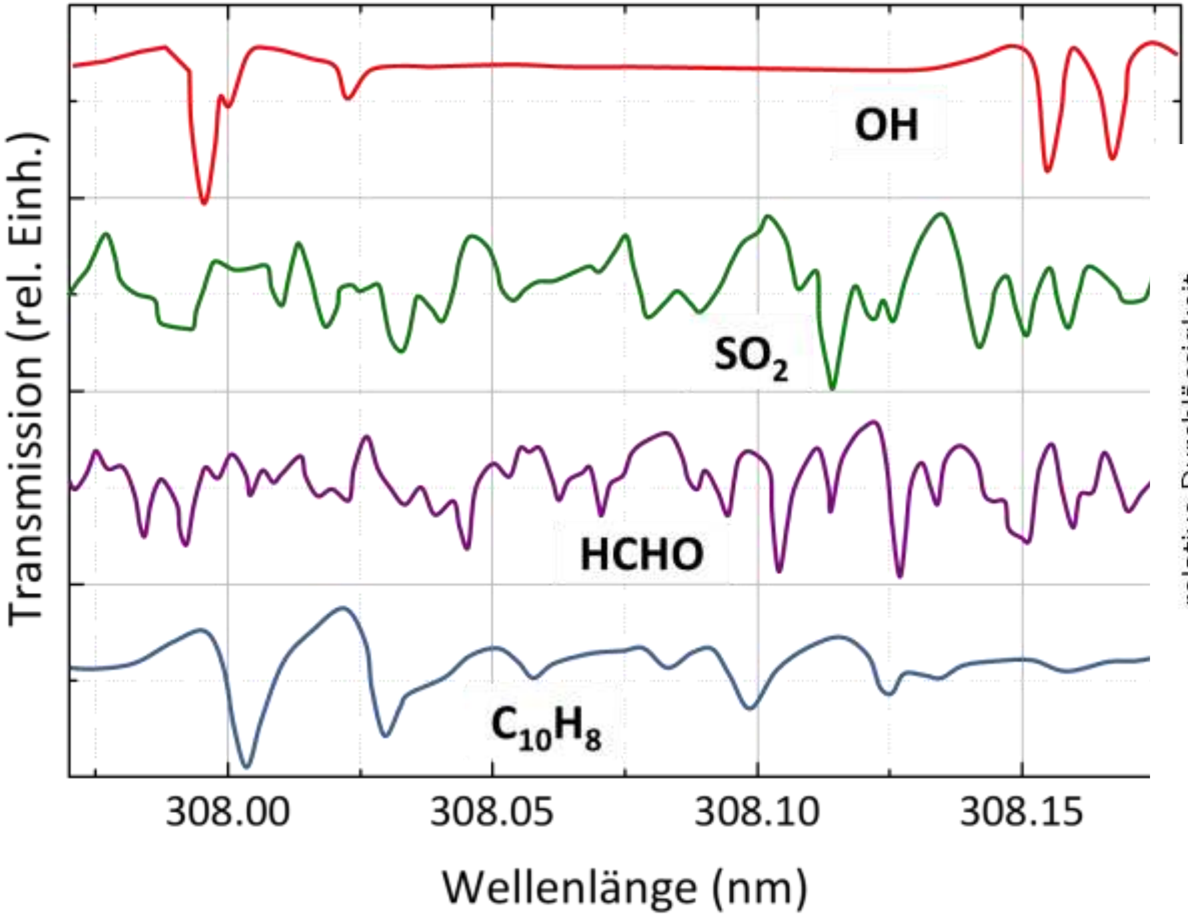
$$r = \frac{\tilde{n}-1}{\tilde{n}+1} \qquad |t|^2 = 1 - |r|^2$$

(Reflexionsamplituden für senkrechten Lichteinfall)

$$\boxed{R = |r|^2 = \left|\frac{\tilde{n}-1}{\tilde{n}+1}\right|^2 = \frac{(n-1)^2+\kappa^2}{(n+1)^2+\kappa^2}\,, \qquad T = 1 - R = \frac{4n}{(n+1)^2+\kappa^2}}$$

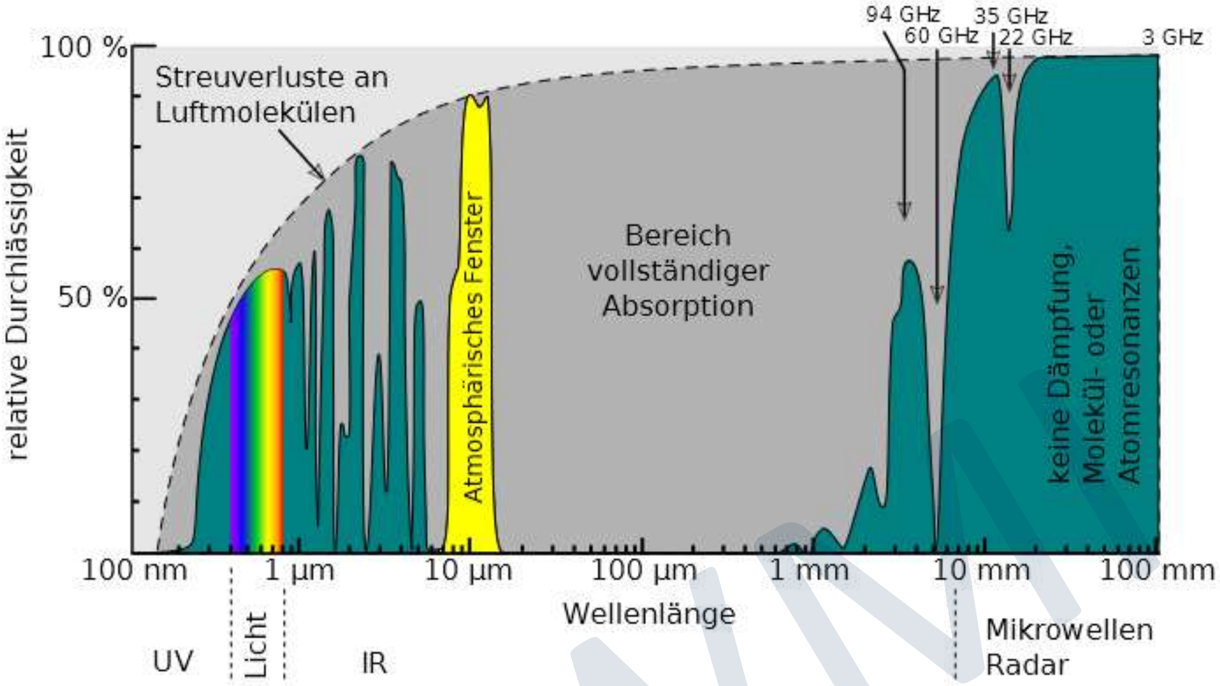
Reflexions- und Transmissionskoeffizient

- **Transmissionsspektren zur Analyse von Spurengasen in Atmosphäre**



Transmissionsspektren von OH-Radikalen, dem Spurengas SO_2, Formaldehyd (HCHO) und Naphthalin ($C_{10}H_8$) im UV-Bereich um 308 nm (Quelle: Forschungszentrum Jülich)

Durchlässigkeit der Atmosphäre



Quelle: Herbertweidner (2008)
https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=10348609

- **Wie sieht der Zusammenhang zwischen dem von außen wirkenden Feld E_{mak} und dem lokal am Ort eines Atoms wirkenden Feld E_{lok} aus?**

makroskopisches Feld ⇔ mikroskopisches Feld

- betrachten wir nur ein einzelnes Atom, so sind beide Felder gleich: $\mathbf{E}_{\mathrm{mak}} = \mathbf{E}_{\mathrm{lok}}$
- im Festkörper ist die Situation komplizierter:

$$E_{z,\mathrm{lok}} = E_{z,\mathrm{mak}} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_i p_{i,\mathrm{el}} \frac{3z_i^2 - r_i^2}{r_i^5}$$

von außen wirkendes makroskopisches Feld

Summe aller atomaren Dipolfelder

Annahme:
alle Dipolmomente haben Betrag $p_{i,\mathrm{el}}$ und zeigen in z-Richtung

- Welchen Wert ergibt die Summe im Zentrum einer Kugel aus gleichen Dipolen $p_{i,\mathrm{el}} = p_{\mathrm{el}}$?

$$E_{z,\mathrm{dip}} = \frac{p_{\mathrm{el}}}{4\pi\epsilon_0}\sum_i \frac{3z_i^2 - r_i^2}{r_i^5} = \frac{p_{\mathrm{el}}}{4\pi\epsilon_0}\sum_i \frac{2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2}{r_i^5} = 0$$

da $\sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \frac{1}{3}\sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} =$

➔ *für einen kugelförmigen FK entspricht das lokale Feld im Zentrum der Kugel dem makroskopischen Feld*

➔ diese einfache Situation liegt aber im Experiment leider nur selten vor !

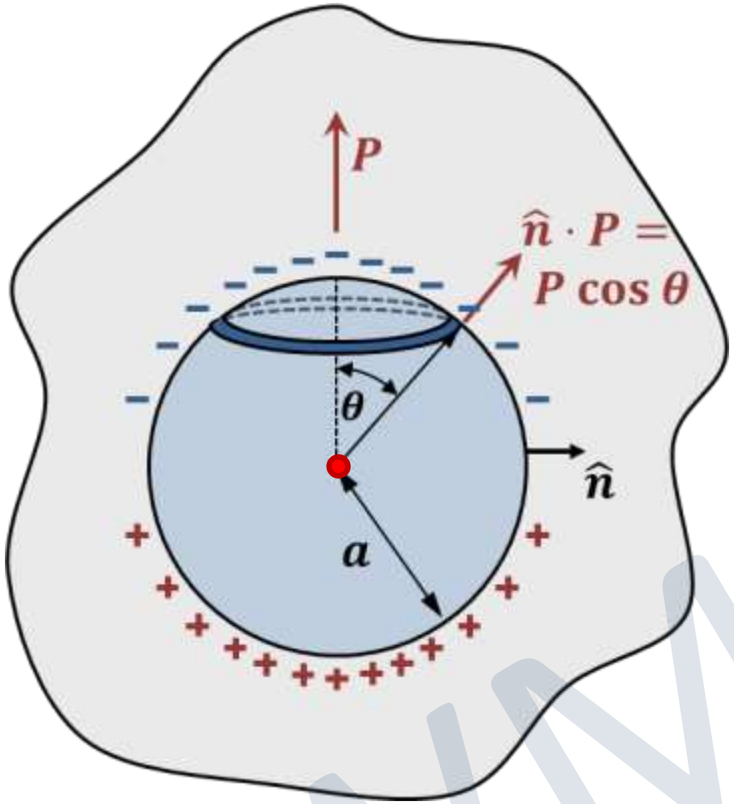
11.1.4 Lokales elektrisches Feld

- **Trick: Wir betrachten einen beliebig geformten FK und schneiden um das betrachtete Atom eine kleine Kugel heraus**

  – Beitrag der Dipolfelder aller Atome innerhalb dieser Kugel ist am Ort des Atoms Null

  – Größe der Hohlkugel:
    - Radius $a \gg$ Gitterkonstante $(\sim \text{Å})$
    - Radius $a \ll \lambda$ des E-Feldes ($\lambda \sim 500$ nm für sichtbares Licht)

  – Kugel um Atom liefert keinen Beitrag, was trägt der Rest bei?
    - $a \gg$ Gitterkonstante → es kann eine kontinuierlich Verteilung der Dipole auf der Innenseite der Hohlkugel angenommen werden
    - Beschreibung mit kontinuierlicher Polarisation P bzw. Oberflächenladung ρ_P



$$\rho_\mathrm{P} = -P_\perp = -\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P} = -P\cos\theta$$

Allgemeines Theorem der Elektrodynamik: elektrische Feld eines homogen polarisierten Festkörpers entspricht dem Vakuumfeld einer effektiven Flächenladungsdichte ρ_P auf seiner Oberfläche

11.1.4 Lokales elektrisches Feld

- **Welches Feld erzeugt Oberflächenladung ρ_P im Zentrum der Kugel?**

  – Ladung dq von ringförmigem Oberflächenelement

$$dq = -P\cos\theta \cdot 2\pi a \sin\theta \cdot a d\theta$$

  – Beitrag zu E-Feld (***Lorentz-Feld***) im Zentrum der fiktiven Kugel

$$dE_{\mathrm{L},z} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{dq}{a^3}\,\hat{\mathbf{z}} \cdot a\,\hat{\mathbf{n}}$$

$$dE_{\mathrm{L},z} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{dq}{a^2}\cos\theta = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{\cos\theta}{a^2} \cdot P\cos\theta \cdot 2\pi a\sin\theta \cdot a d\theta$$

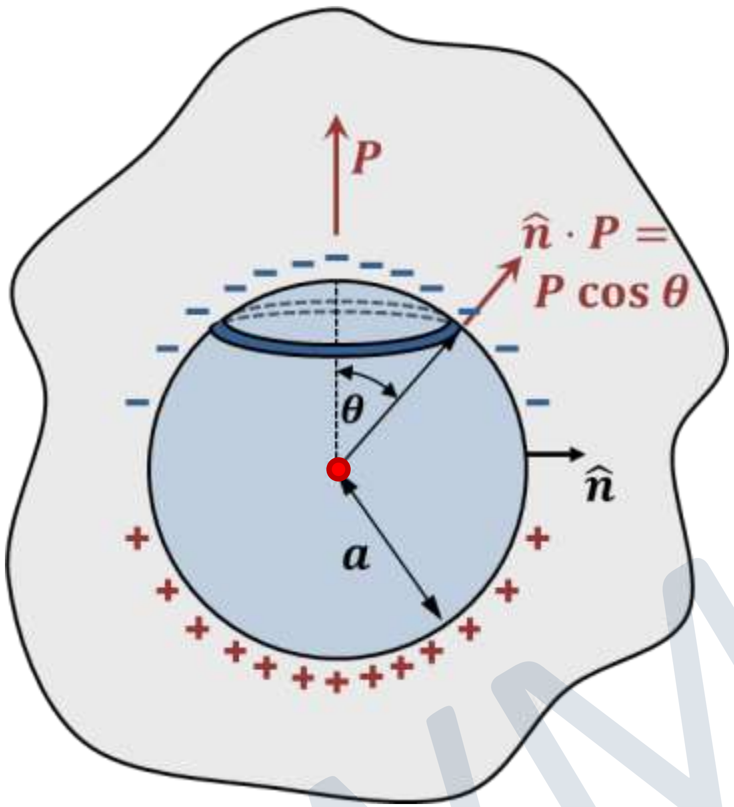
  – Winkelintegration ergibt ***Lorentz-Feld***

$$E_{\mathrm{L},z} = \frac{P}{2\epsilon_0}\int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta \, d\theta = \frac{1}{3\epsilon_0}P$$

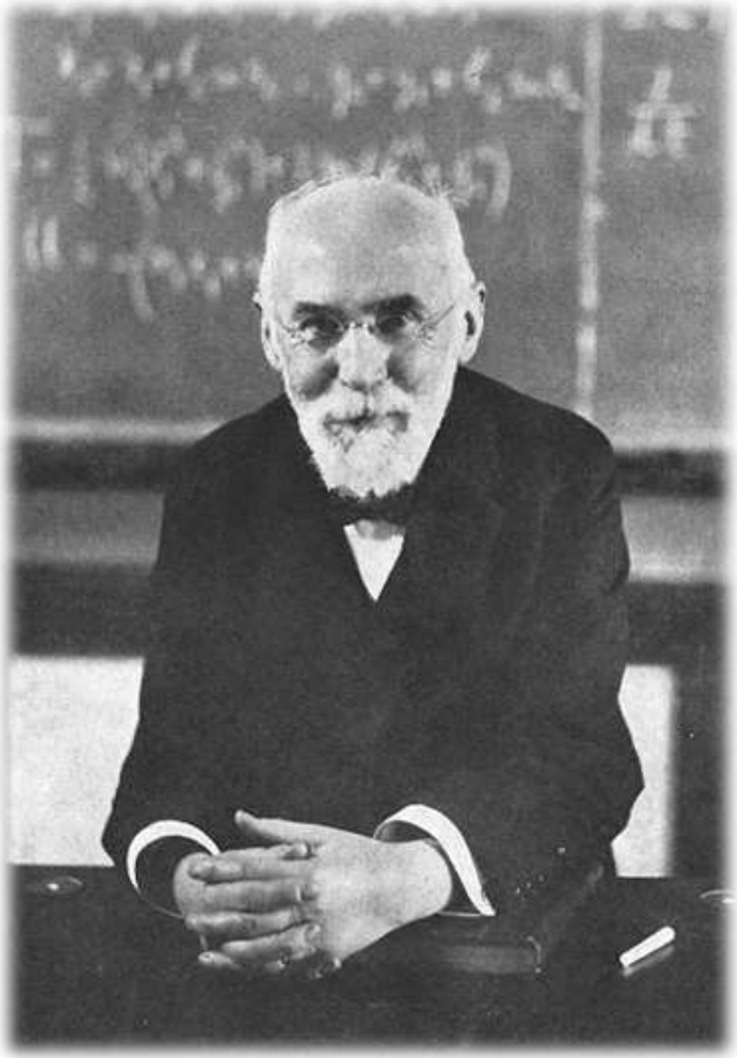
  – Lokales Feld = makroskopisches Feld + Lorentz-Feld

$$\mathbf{E}_\mathrm{lok} = \mathbf{E}_\mathrm{mak} + \mathbf{E}_\mathrm{L} = \mathbf{E}_\mathrm{mak} + \frac{1}{3\epsilon_0}\mathbf{P}$$

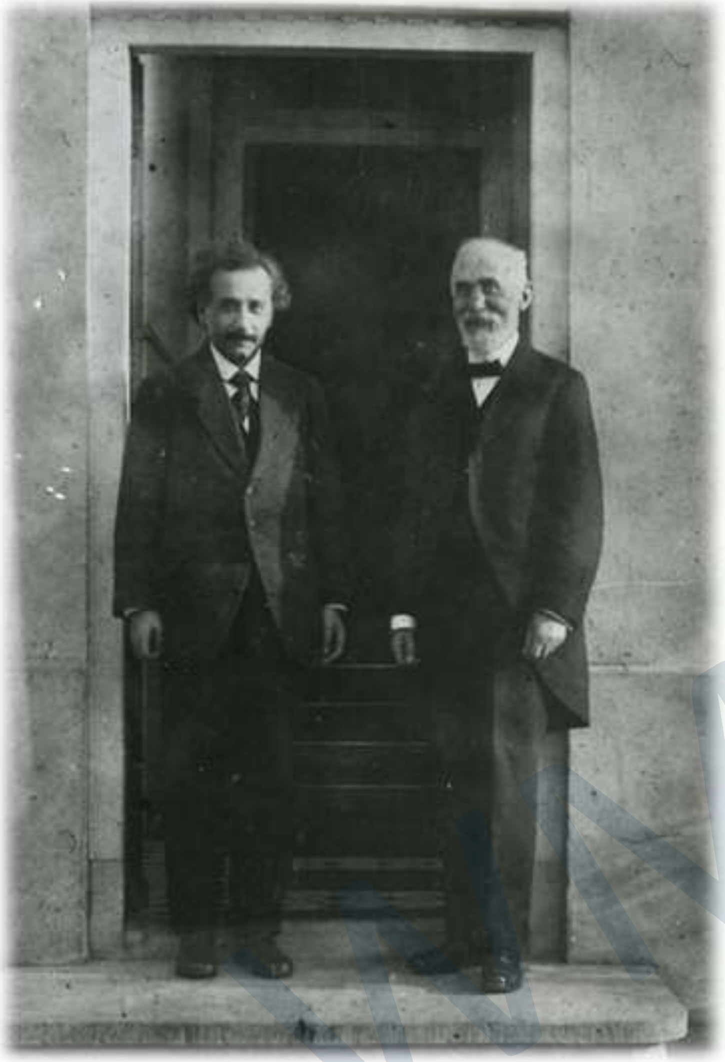
Lorentz-Beziehung



11.1.4 Lokales elektrisches Feld



Hendrik Antoon Lorentz
(18 July 1853 – 4 February 1928)



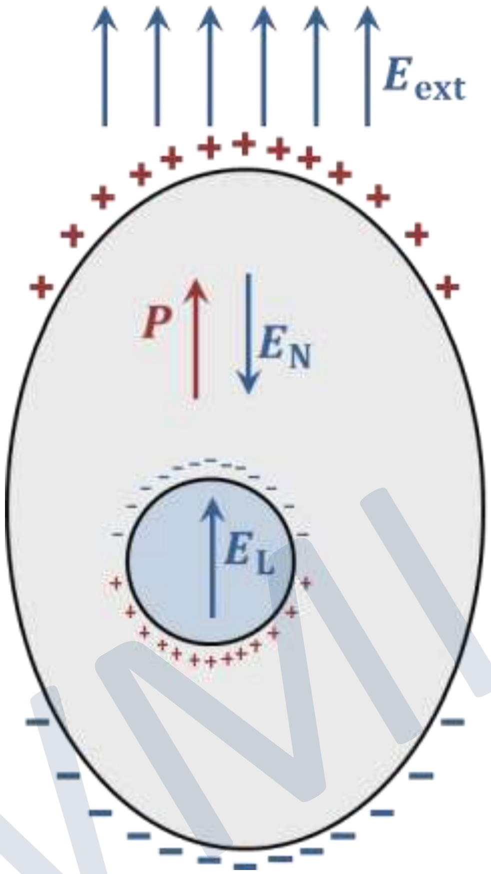
Nobelpreis für Physik 1902: Hendrik Antoon **Lorentz** und Pieter **Zeeman**
"in recognition of the extraordinary service they rendered by their researches into the influence of magnetism upon radiation phenomena"

11.1.4 Lokales elektrisches Feld

- Woraus setzt sich das von außen wirkende makroskopische Feld zusammen?

makroskopisches Feld $\mathbf{E}_{\text{mak}}$ = externes Feld $\mathbf{E}_{\text{ext}}$ + Depolarisationsfeld $\mathbf{E}_N$

erzeugt durch externe Ladungen — erzeugt durch Oberflächenladungen



– ***Depolarisationsfeld*** oder ***Entelektrisierungfeld*** $\mathbf{E}_N$:
  - wird durch Oberflächenladungsdichte $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P}$ erzeugt
  - für homogen polarisierte Proben kann Depolarisationsfaktor N verwendet werden

$$\mathbf{E}_N = -\frac{1}{\epsilon_0} N\, \mathbf{P}$$

$N = 1$, dünne Scheibe senkrecht zu $\mathbf{P}$
$N = 0$, dünne Scheibe parallel zu $\mathbf{P}$
$N = 1/3$, Kugel

– ***lokales Feld***:

$$\mathbf{E}_{\text{lok}} = \mathbf{E}_{\text{mak}} + \mathbf{E}_{\text{L}} = \mathbf{E}_{\text{ext}} + \mathbf{E}_N + \mathbf{E}_{\text{L}} = \mathbf{E}_{\text{ext}} - \frac{1}{\epsilon_0} N\, \mathbf{P} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}$$

- ***Dielektrische Eigenschaften***
  - Beschreibung der Reaktion von Festkörper auf von außen wirkendes E-Feld (nur lineare Antwort)
    - (i) mikroskopisch: WW einzelner Photonen mit Festkörperanregungen, z.B. Absorption von Photon
    - (ii) makroskopisch: Maxwell-Gleichungen plus Materialparameter $\epsilon(\mathbf{q},\omega)$ bzw. $\chi(\mathbf{q},\omega)$, $\sigma(\mathbf{q},\omega)$
    - ➔ Zusammenhang zwischen mikroskopischer und makroskopischer Beschreibung
  - Photonen haben kleinen Wellenvektor ➔ oft nur Grenzfall $q \to 0$ relevant

- ***makroskopische E-Dynamik***
  - Reaktion von Isolator auf E-Feld ist ***Polarisation***:

Tensor der el. Suszeptibilität

$$P_i(\mathbf{r}',t') = \epsilon_0 \sum_j \int \chi_{ij}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t')\, E_j(\mathbf{r},t)\; \mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}t$$

  - ***elektrisches Dipolmoment***: $\mathbf{p}_{\mathrm{el}} = \sum_i q_i\,\mathbf{r}_i$

    SI-Einheit: C·m = Ladung·Verschiebung

    CGS-Einheit: 1 Debye = 3.3×10^{-30} C·m = $0.21\, e \cdot \text{Å}$

  - ***Polarisation*** $\mathbf{P} = \frac{\mathbf{p}_{\mathrm{el}}}{V}$

    SI-Einheit: C/m² = Ladung/Fläche

  - Darstellung im Frequenzraum (mit Faltungssatz):

$$P_i(\mathbf{q},\omega) = \epsilon_0 \sum_j \chi_{ij}(\mathbf{q},\omega)\, E_j(\mathbf{q},\omega)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P}$$

$$D_i(\mathbf{q},\omega) = \epsilon_0 \sum_j \epsilon_{ij}(\mathbf{q},\omega)\, E_j(\mathbf{q},\omega)$$

dielektrische Verschiebung

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{q},\omega) = 1 + \chi_{ij}(\mathbf{q},\omega)$$

Dielektrizitätstensor

  - **Metall**: Beiträge von gebundenen und frei beweglichen Elektronen
    - ➔ Berücksichtigung in verallgemeinerter dielektrischer Funktion bzw. verallgemeinerten Leitfähigkeit

$$\tilde{\epsilon}\,(\omega) = \epsilon(\omega) + i\sigma/\epsilon_0\omega$$

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \sigma(\omega) - i\omega\epsilon_0\epsilon(\omega)$$

Zusammenfassung: Teil 9b, 26.04.2021/1

- **optische Größen**: $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\,\kappa(\omega) = \sqrt{\tilde{\epsilon}}$

Brechungsindex — *Extinktionskoeffizient*

$$n^2 - \kappa^2 = \epsilon_r, \qquad 2n\kappa = \epsilon_i$$

Absorptions-, Reflexions- und Transmissionskoeffizient:

$$K(\omega) = 2\kappa(\omega)\frac{\omega}{c} = \frac{4\pi\kappa(\omega)}{n\lambda} = \frac{2\kappa k}{n} = \frac{\epsilon_i(\omega)\omega}{n}$$

K^{-1}: Länge, auf der die Intensität auf $1/e$ abnimmt

$$R = \left|\frac{\tilde{n}-1}{\tilde{n}+1}\right|^2 = \frac{(n-1)^2+\kappa^2}{(n+1)^2+\kappa^2}, \qquad T = 1 - R = \frac{4n}{(n+1)^2+\kappa^2}$$

Bruchteil der bei senkrechter Inzidenz reflektierten Intensität

- ***lokales elektrisches Feld***

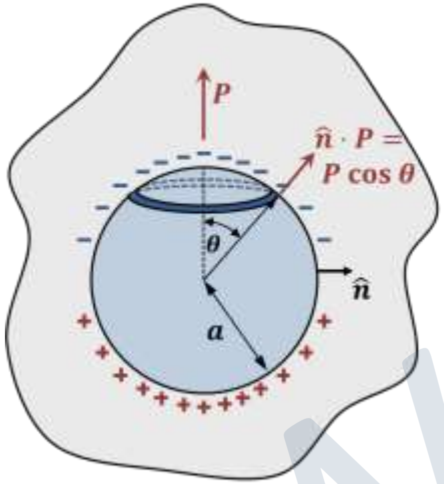
$$E_{z,\mathrm{lok}} = E_{z,\mathrm{mak}} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_i p_{i,\mathrm{el}}\frac{3z_i^2 - r_i^2}{r_i^5}$$

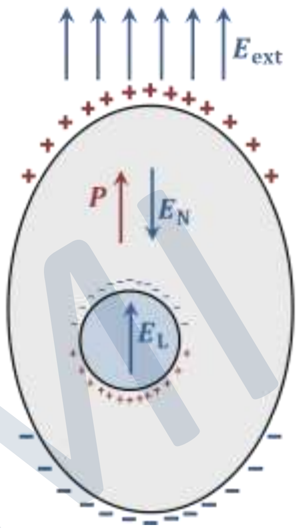
von außen wirkendes makroskopisches Feld — Summe aller atomaren Dipolfelder

- Mittelung der Dipolfelder innerhalb einer Kugel verschwindet im Zentrum der Kugel

➔ $\mathbf{E}_{\mathrm{lok}} = \mathbf{E}_{\mathrm{mak}} + \dfrac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} = \mathbf{E}_{\mathrm{mak}} + \mathbf{E}_{\mathrm{L}}$

Lorentz-Beziehung, Lorentz-Feld $\mathbf{E}_{\mathrm{L}} = \mathbf{P}/3\epsilon_0$





- **Depolarisationsfeld**: $\mathbf{E}_{\mathrm{N}} = -\dfrac{1}{\epsilon_0} N\,\mathbf{P}$ Depolarisationsfaktor $N = 1$ bzw. 0 für dünne Scheibe ⊥ bzw. ∥ zu E_{ext}

$$\mathbf{E}_{\mathrm{lok}} = \mathbf{E}_{\mathrm{mak}} + \mathbf{E}_{\mathrm{L}} = \mathbf{E}_{\mathrm{ext}} + \mathbf{E}_N + \mathbf{E}_{\mathrm{L}} = \mathbf{E}_{\mathrm{ext}} - \frac{1}{\epsilon_0}N\,\mathbf{P} + \frac{1}{3\epsilon_0}\mathbf{P}$$