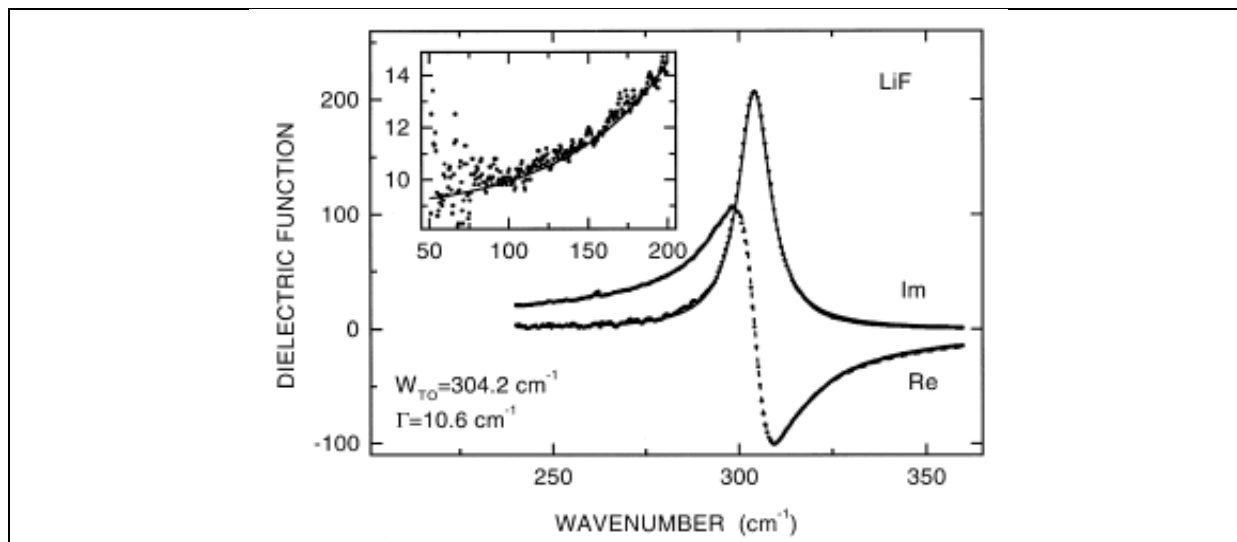


12. Transport na optických frekvencích II

Diskuse vybraných optických spekter: od krystalů k amorfním látkám

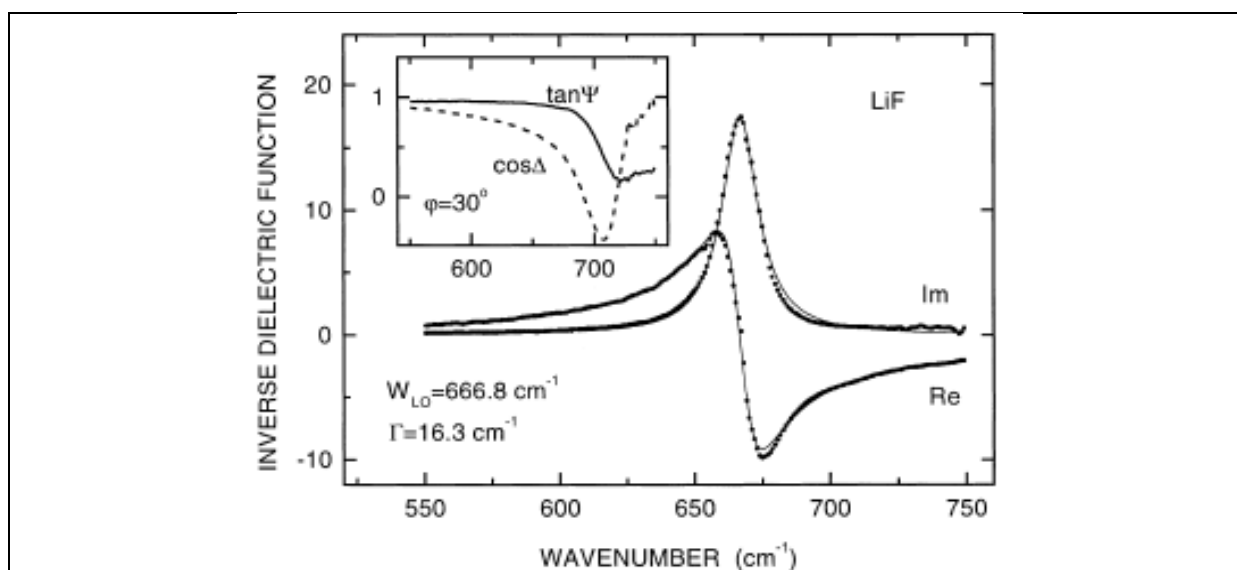
Mřížková absorpce v polárních krystalech - LiF



Obr. 1a. Elipsometrické spektrum LiF při pokojové teplotě – dielektrická funkce.

Lorentzovská rezonance na frekvenci TO fononu. Extrapolace reálné části do nulové frekvence dává vibrační příspěvek do statické permitivity.

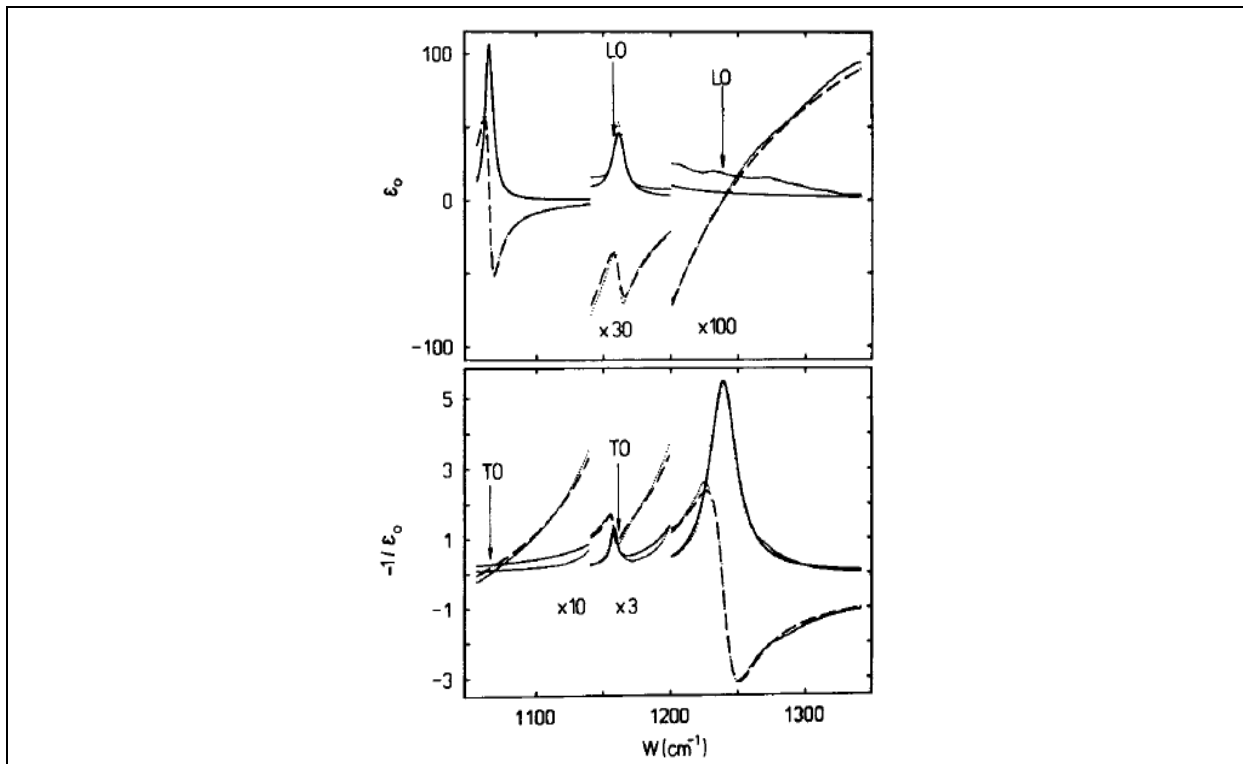
$-1/\epsilon$ umožňuje vidět rezonanci podélného pole na frekvenci LO fononu, má Lorentzovský profil s šířkou ovlivněnou vícefononovou absorpcí.



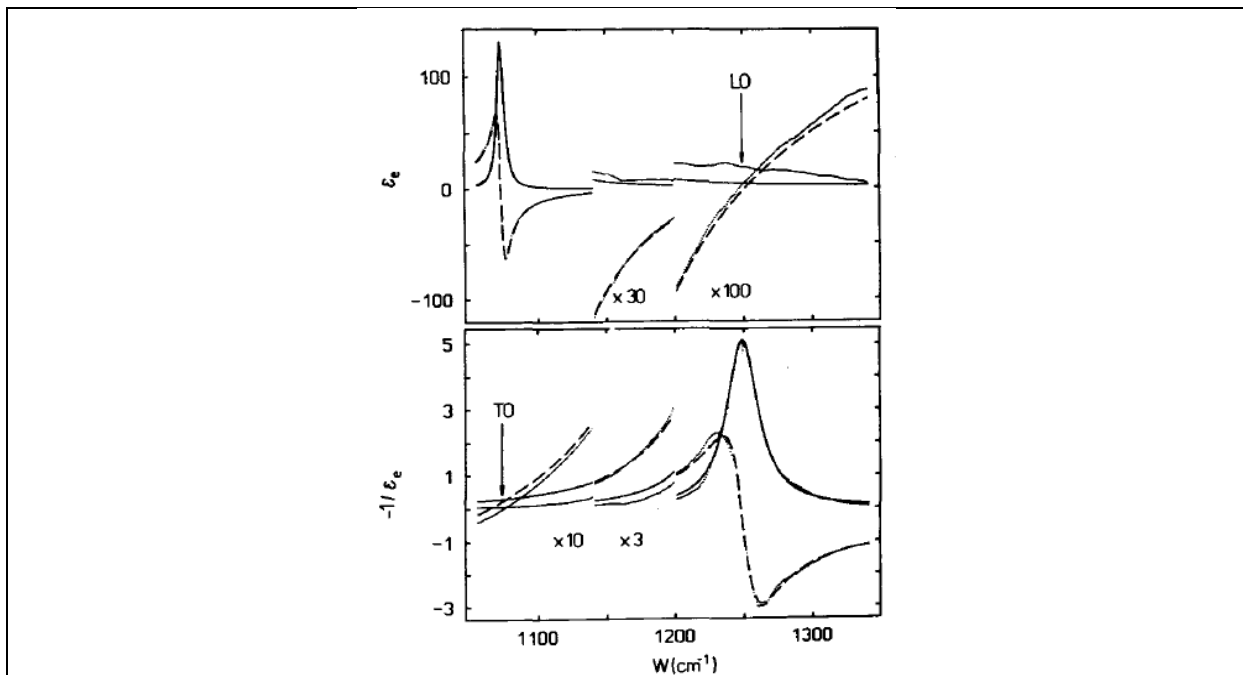
Obr. 1b. Elipsometrické spektrum LiF při pokojové teplotě – negativně vzatá převrácená hodnota dielektrická funkce.

Vibrace ve složitější krystalové struktuře – α -SiO₂

Jednoosá anizotropie, velký počet mřížových módů v Γ
(navíc: chirální struktura – optická aktivita)



Obr. 2a. Odezva α -SiO₂, ordinarius.



Obr. 2b. Odezva α -SiO₂, extraordinarius.

Síly, polohy a šířky identifikovaných Lorentzových profilů.
Střídání TO a LO módů.

Šířky LO vibrací ovlivněny vícefononovou absorpcí.

l	F_l (10^5 cm^{-2})	W_l (cm^{-1})	Γ_l (cm^{-1})
Ordinary ray (E-modes)			
TO ₁	1.78 ± 0.01	449.5 ± 0.2	4.0 ± 0.1
LO ₁	0.144 ± 0.001	508.1 ± 0.1	3.8 ± 0.1
TO ₂	0.12 ± 0.02	695.0 ± 0.2	8.2 ± 2.0
LO ₂	0.0074 ± 0.0002	697.5 ± 1.0	5.9 ± 1.0
TO ₃	0.79 ± 0.02	795.2 ± 0.2	7.9 ± 0.5
LO ₃	0.056 ± 0.002	808.8 ± 0.3	7.1 ± 0.3
TO ₄	7.95 ± 0.03	1065.0 ± 0.2	7.0 ± 0.2
LO ₄	1.64 ± 0.01	1238.7 ± 0.3	24.1 ± 0.5
TO ₅	0.18 ± 0.04	1161 ± 1	12 ± 4
LO ₅	0.018 ± 0.002	1157.5 ± 1.0	4.8 ± 1.0
Extraordinary ray (A ₂ modes)			
TO ₁	1.88 ± 0.02	494.5 ± 0.2	5.6 ± 0.1
LO ₁	0.157 ± 0.002	552.2 ± 0.1	5.0 ± 0.2
TO ₂	0.74 ± 0.02	775.7 ± 0.2	6.5 ± 0.3
LO ₂	0.063 ± 0.002	789.2 ± 0.3	6.9 ± 0.3
TO ₃	8.68 ± 0.03	1073.4 ± 0.2	6.1 ± 0.1
LO ₃	1.76 ± 0.01	1248.5 ± 0.3	27.6 ± 0.5

Tabulka 1. Vibrační módy α -SiO₂.

„Oblast průhlednosti“ mezi mřížovými vibracemi (IR) a elektronovou absorpcí (UV) – α -SiO₂

Zanedbatelná absorpce – permitivita a index lomu jsou reálné, vodivost je ryze imaginární

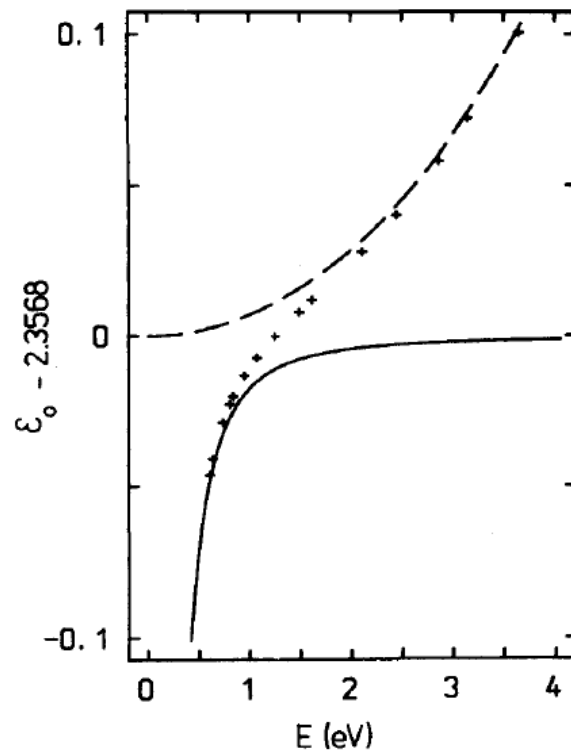
Disperzi lze popsat velmi přesně (s chybou $\sim 10^{-5}$) rozvojem v sudých mocninách energie fotonu, se dvěma „fononovými“ ($j = -1, -2$) a čtyřmi „elektronovými“ ($j = 0, \dots, 3$) členy:

$$\varepsilon(E) \approx \sum_j a_{2j} E^{2j}.$$

	a_{-4} (10^{-4} eV^4)	a_{-2} (10^{-2} eV^2)		
Ordinary	-1.8 ± 0.3	-1.73 ± 0.01		
Extraordinary	-1.4 ± 0.4	-1.83 ± 0.01		

a_0	a_2 (10^{-3} eV^{-2})	a_4 (10^{-5} eV^{-4})	a_6 (10^{-7} eV^{-6})
2.3568 ± 0.0001	6.95 ± 0.02	4.6 ± 0.1	4.3 ± 0.2
2.3841 ± 0.0001	7.19 ± 0.02	5.0 ± 0.1	4.5 ± 0.2

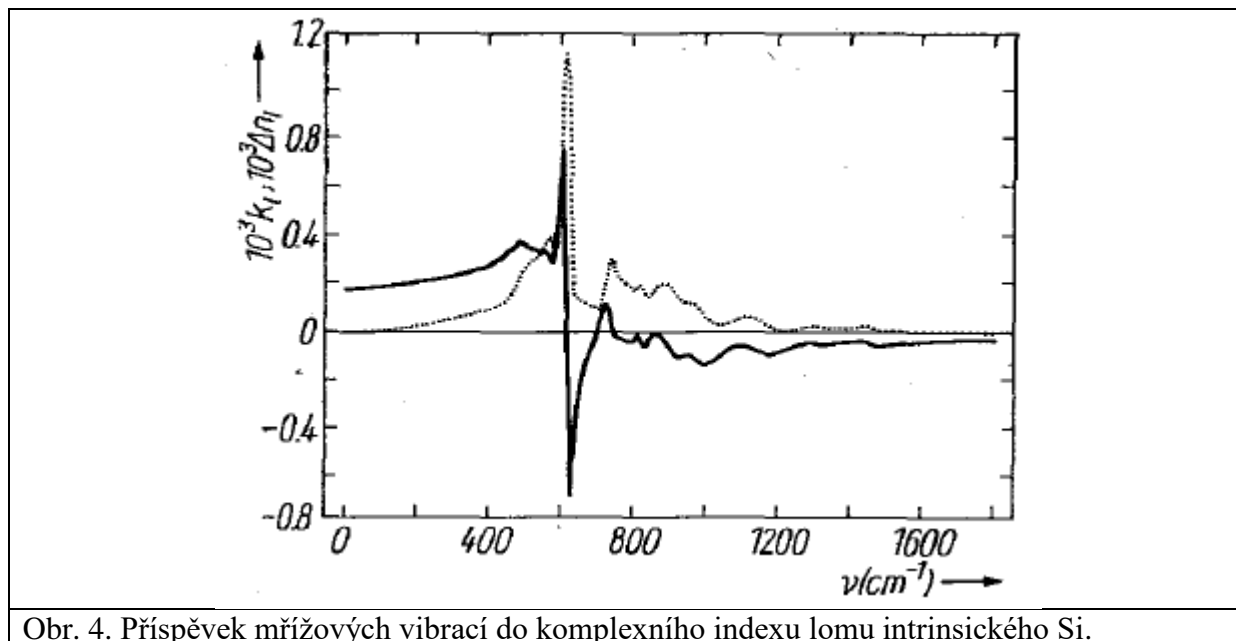
Proč je vhodné brát pouze sudé mocniny energie fotonu?



Obr. 3. Příspěvky vibrací (plná čára) a elektronů (čárkovaná čára) do disperze odezvy α -SiO₂ v propustné oblasti, ordinární směr. Symbols – naměřená data (minimální deviace na hranolu).

Vícefononová odezva nepolárních krystalů: intrinsický Si

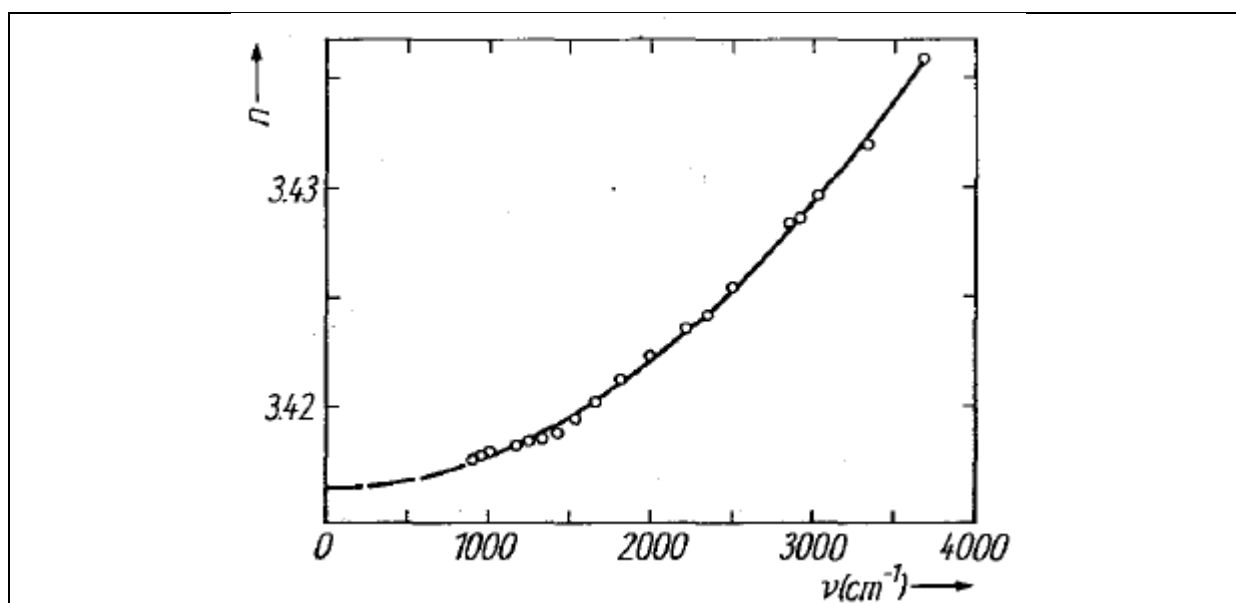
Slabá absorpce v IR, deska nelegovaného Si tloušťky 1 mm propouští světlo i na vlnótu maximálního útlumu (dvoufononový pás u 605 cm^{-1}). Spektrální změny indexu lomu způsobené vícefononovou absorpcí jsou velmi malé (≤ 0.0008).



Obr. 4. Příspěvek mřížových vibrací do komplexního indexu lomu intrinsického Si.

Mřížové vibrace mají zanedbatelný vliv na index lomu v propustné oblasti (pod gapem), rozhodují mezipásové přechody elektronů. Do vlnótu 4000 cm^{-1} je vhodná polynomiální parametrizace

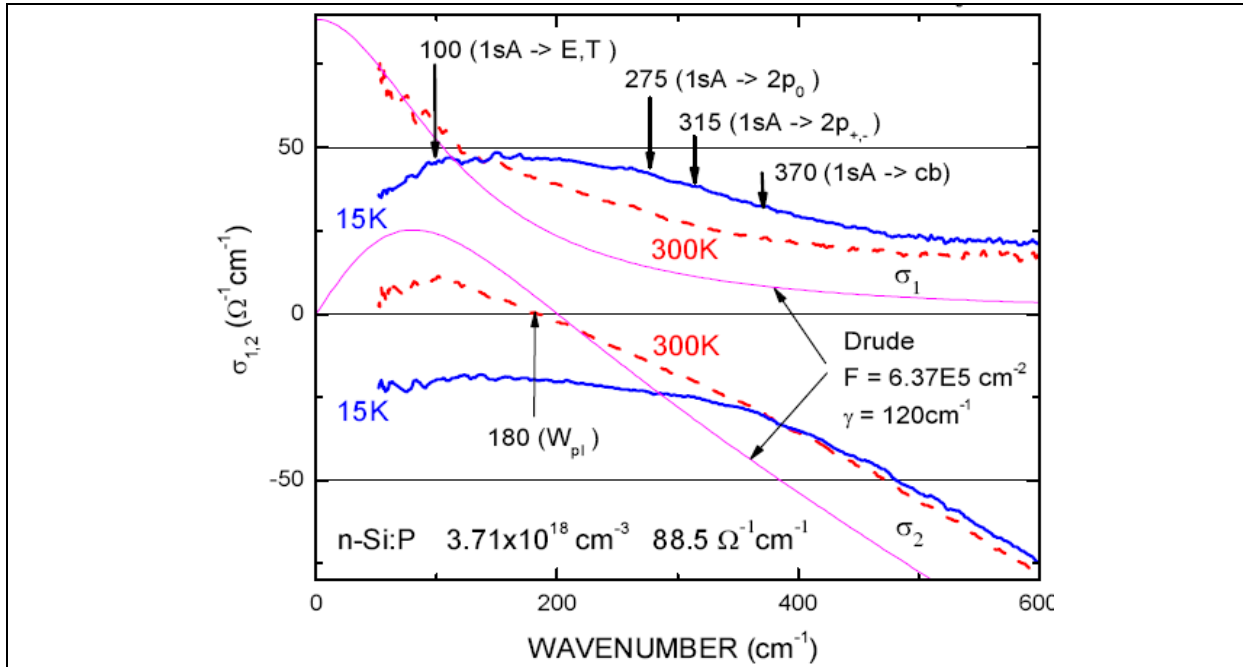
$$n_i(\nu) = 3.41626 + 1.443 \times 10^{-9} \nu^2$$



Obr. 5. Index lomu intrinsického Si v IR. Symbols – naměřená data (minimální deviace na hranolu), plná čára – hořejší polynomiální parametrizace.

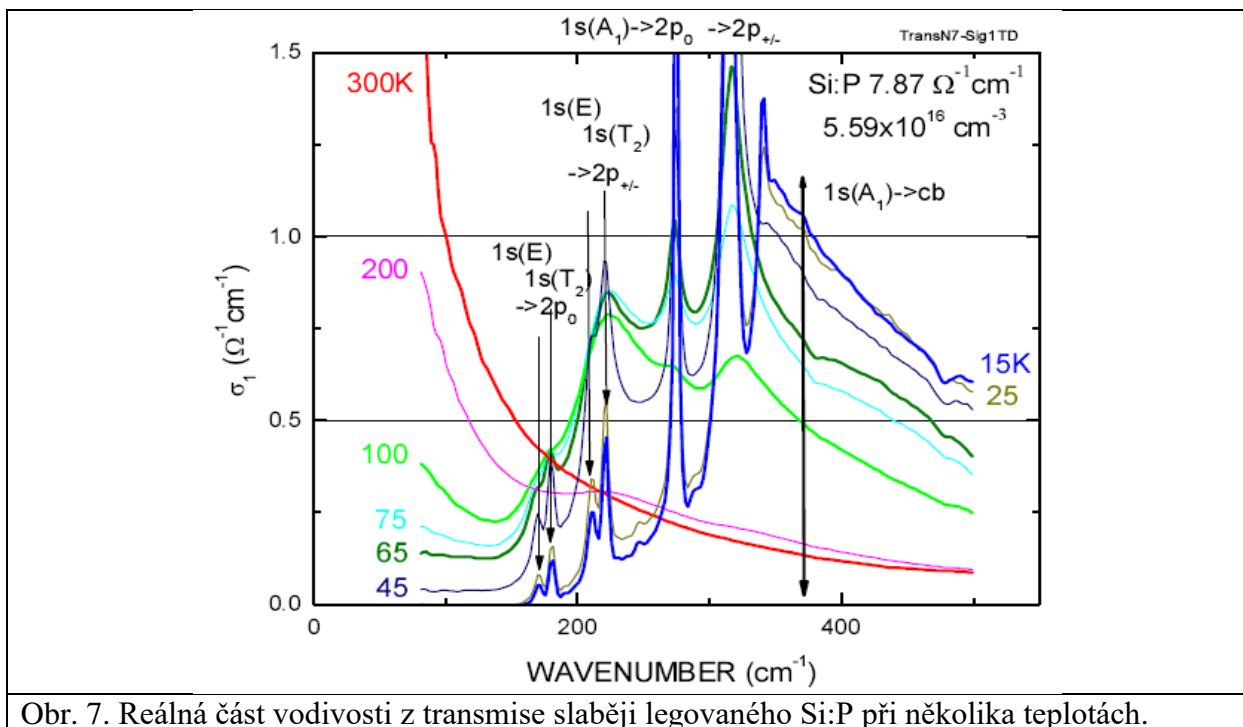
Donorové stavy a volné elektrony v polovodiči n—typu: Si:P

Úroveň dopingu velmi blízko k přechodu izolátor—kov. Odezva se výrazně odlišuje od Drudeho modelu i při pokojové teplotě. Mohl by v ní být reziduum příspěvku absorpčních linií izolovaných donorů pro slabší doping?



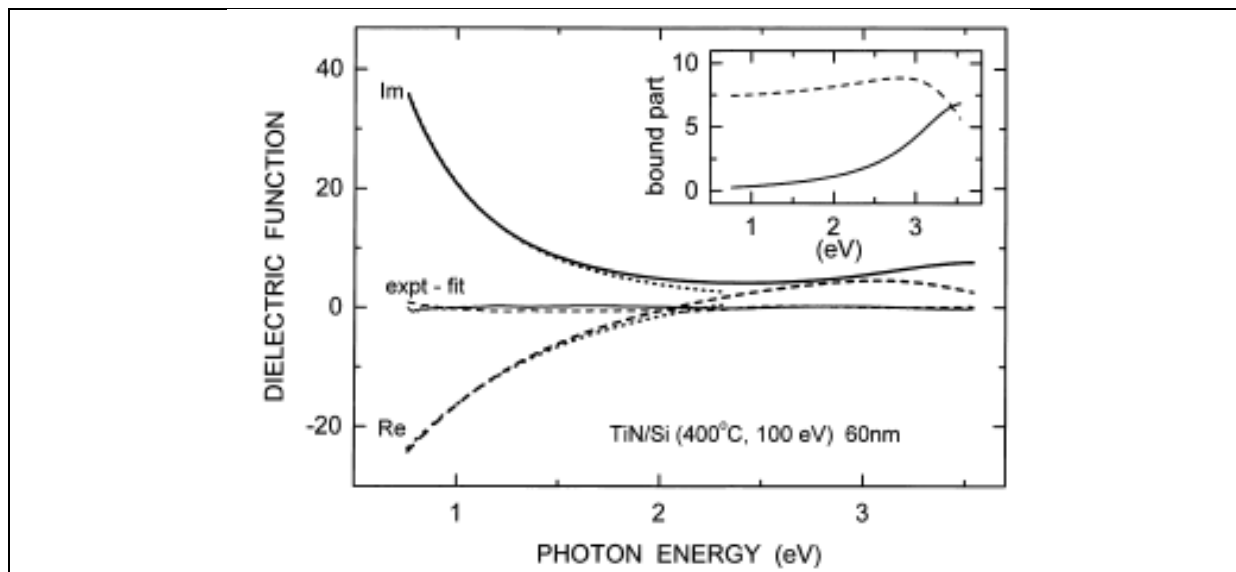
Obr. 6. Elipsometrická spektra (z polarizované amplitudové odrazivosti při šikmém dopadu světla) komplexní vodivosti Si:P při dvou teplotách.

Při menší úrovni dopingu pozorujeme „vymrzání“ donorových stavů při snižování teploty.



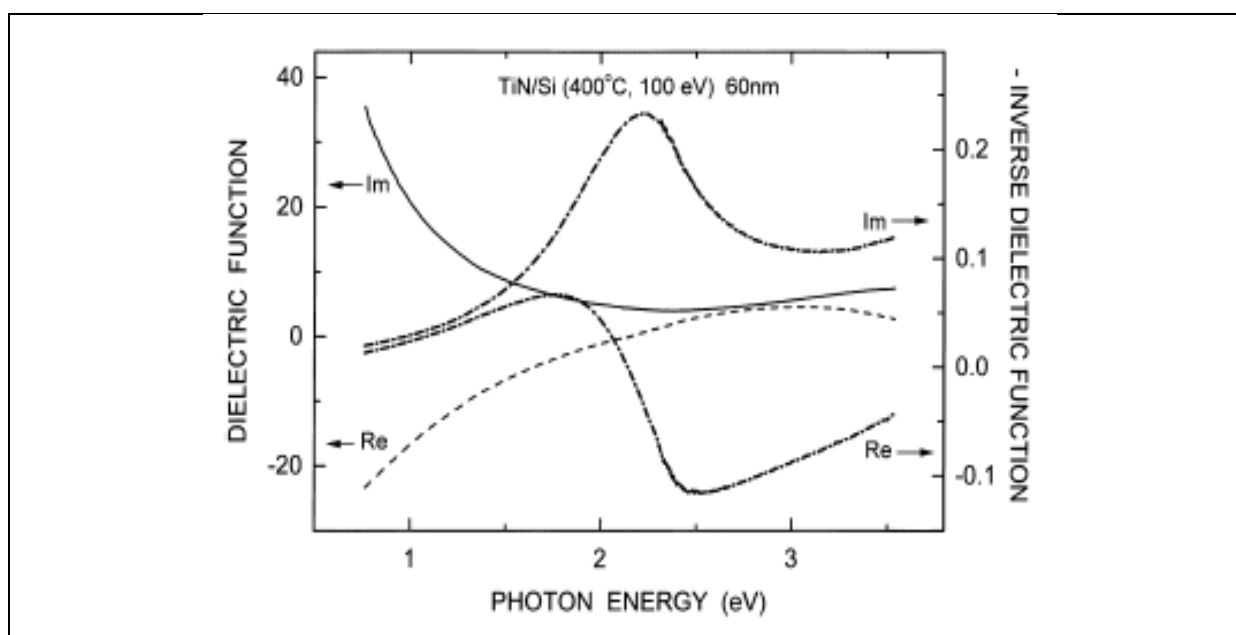
Obr. 7. Reálná část vodivosti z transmise slaběji legovaného Si:P při několika teplotách.

Překryv odezvy volných elektronů a mezipásových přechodů ve vodičích: TiN



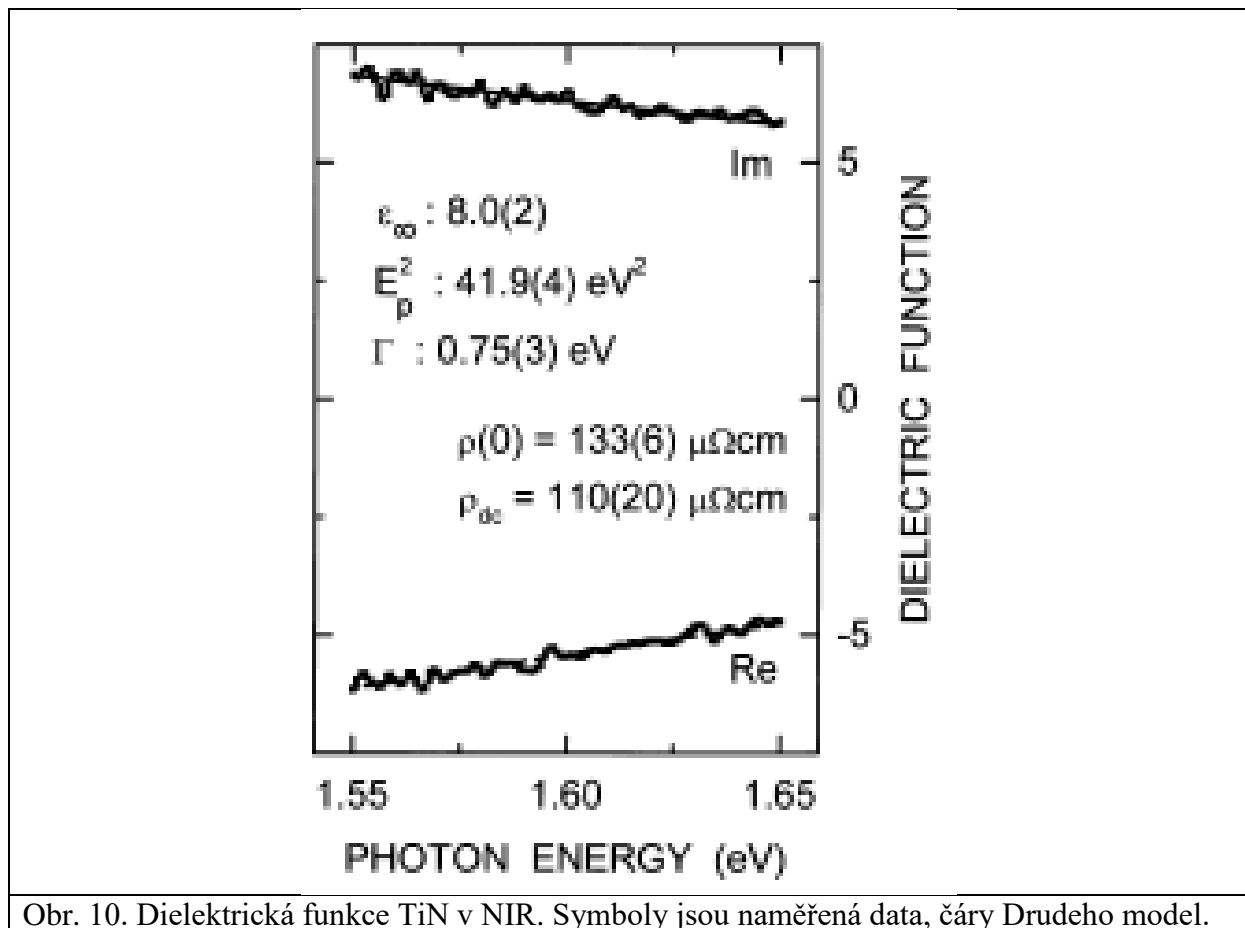
Obr. 8. Dielektrická funkce vrstvy TiN na Si z elipsometrických měření, proložená součtem Drudeho a Lorentzova modelu pro volné a vázané elektrony.

Spektrum $-1/\varepsilon$ ukazuje plasmonovou rezonanci elektronů v okolí 2.2 eV, v dobré shodě se spektry EELS.



Obr. 9. Dielektrická funkce TiN a její záporně vzatá převrácená hodnota.

Volné elektrony kvantitativně:



Obr. 10. Dielektrická funkce TiN v NIR. Symboly jsou naměřená data, čáry Drudeho model.

Extrapolace Drudeho modelu do nulové frekvence dává stejnosměrný specifický odpor

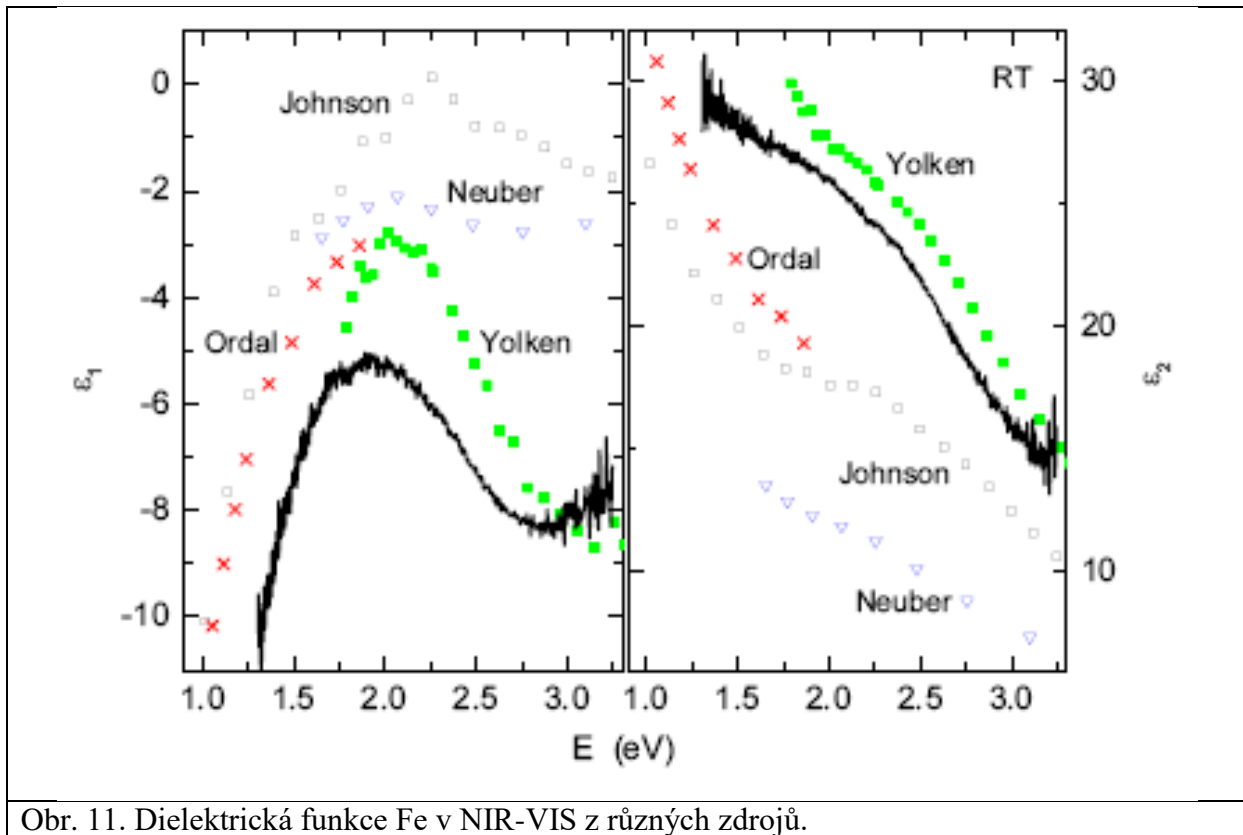
$$\rho(0) = 0.007435 \frac{\Gamma}{E_p^2}$$

v $1/\Omega\text{cm}$, vezmeme-li Γ a E_p v eV.

Dobrá shoda extrapolace a přímo měřené rezistivity.

Odezva volných elektronů a mezipásových přechodů v kovech: Fe

Pro kovy je typický značný nesoulad odezvoových funkcí z různých zdrojů (odlišnosti mezi vzorky, kvalita povrchů, velká odrazivost v IR, ...).



Obr. 11. Dielektrická funkce Fe v NIR-VIS z různých zdrojů.

Pro Fe je charakteristický malý příspěvek volných elektronů do imaginární části dielektrické funkce v NIR-VIS, zatímco v reálné části je to příspěvek významný (velká spektrální váha volných elektronů spolu s malým tlumením).

Amorfní látky (skla)

Ztráta translační symetrie (LRO) při zachování podobného uspořádání na blízko (SRO)

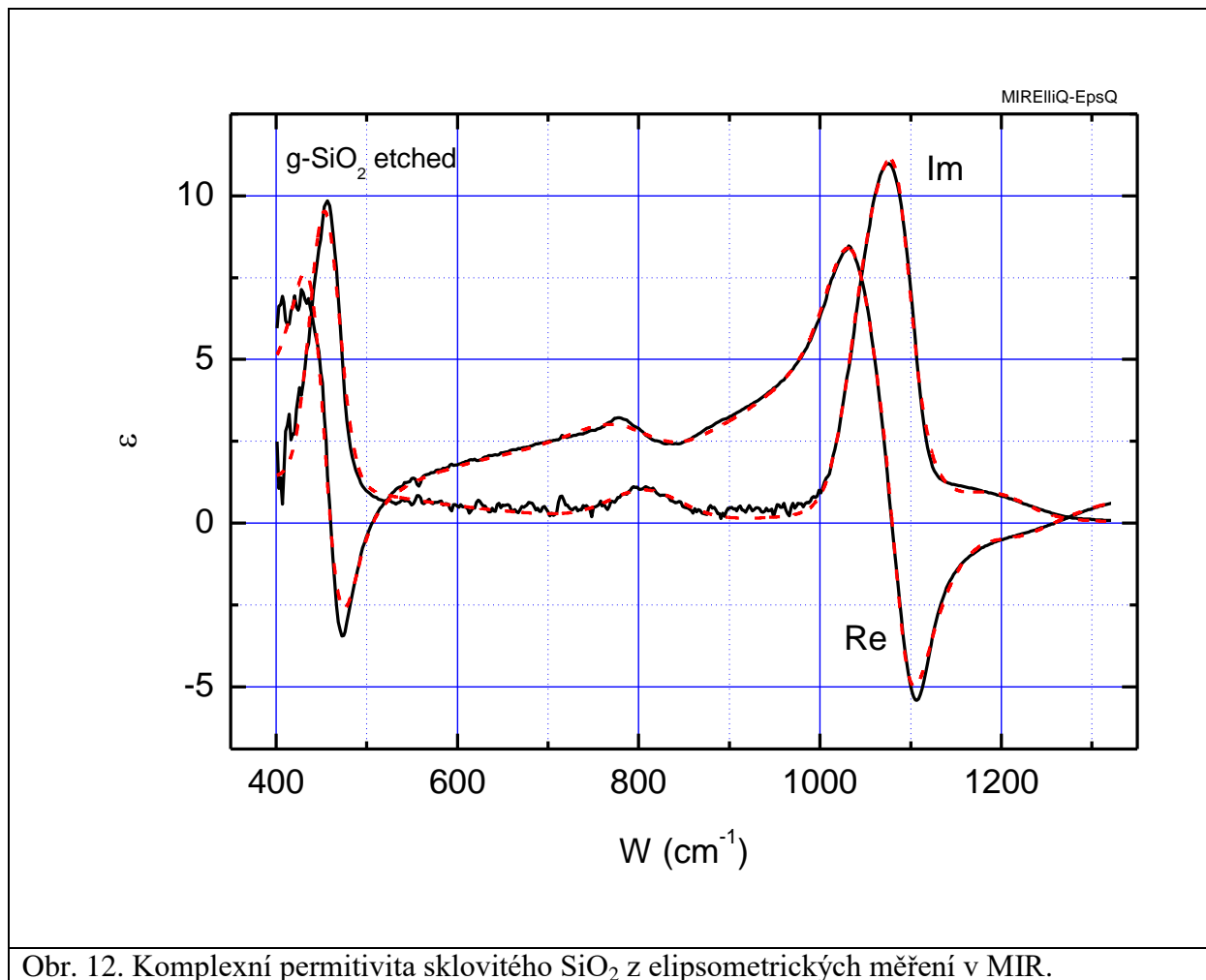
→

ostřejší struktury ve vibračních a elektronových příspěvcích jsou „rozmazány“.

Průhledná oblast mezi nízko- a vysokoenergiiovými excitacemi je obvykle zachována.

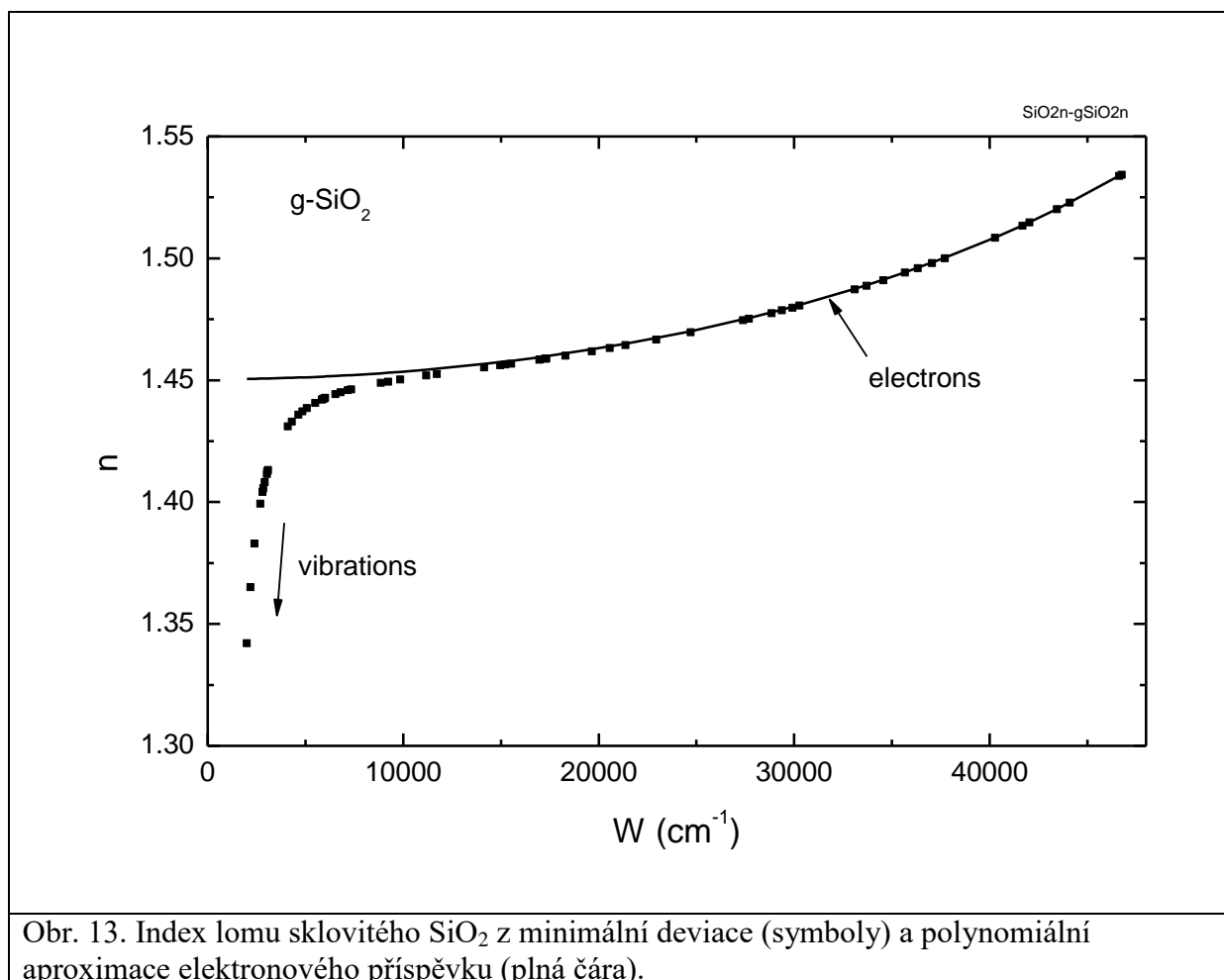
Tlumení může být extrémně malé (optická vlákna).

Vibrační spektra sklovitého SiO_2 ukazují široké (přibližně Gaussovské) pásy v okolí frekvencí fononů v krystalickém SiO_2 .



Obr. 12. Komplexní permitivita sklovitého SiO_2 z elipsometrických měření v MIR.

V propustné oblasti umíme oddělit příspěvky vibrací a elektronů k disperzi indexu lomu (podobně jako v krystalech).



Obr. 13. Index lomu sklovitého SiO₂ z minimální deviace (symbols) a polynomiální aproximace elektronového příspěvku (plná čára).

Optická skla

Dobře definované vlastnosti v propustné oblasti – index lomu a jeho disperze (hodnota disperzní síly nebo Abbeho čísla).

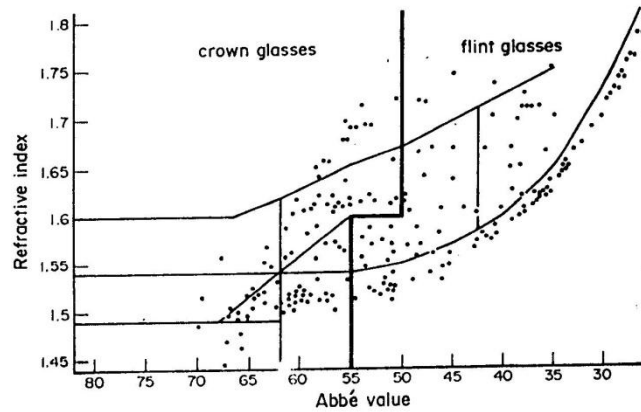


Figure 1
Refractive index against Abbe value diagram

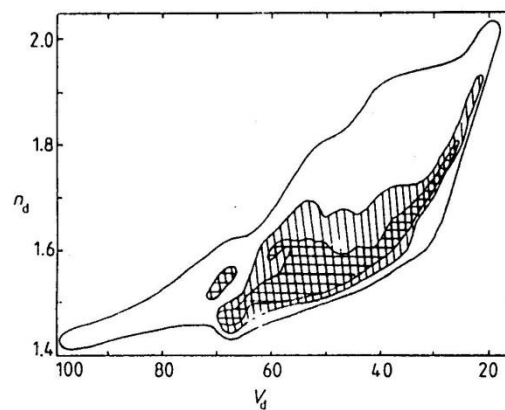





Figure 3.2 Reciprocal dispersive power $(n_d - 1)/(n_f - n_c)$ plotted against n_d for commercial optical glasses (Gliemeroth 1982). 1881 , 1939 , 1981 .

Obr. 14. Parametry optických skel.

Zmenšení vibračních frekvencí v těžkých (fluoridových) sklech vede v principu ke snížení minimálního útlumu, který závisí na Rayleighově rozptylu na nehomogenitách indexu lomu a nástupu vibrační absorpce.

Zatím překryto přítomností nečistot a defektů.

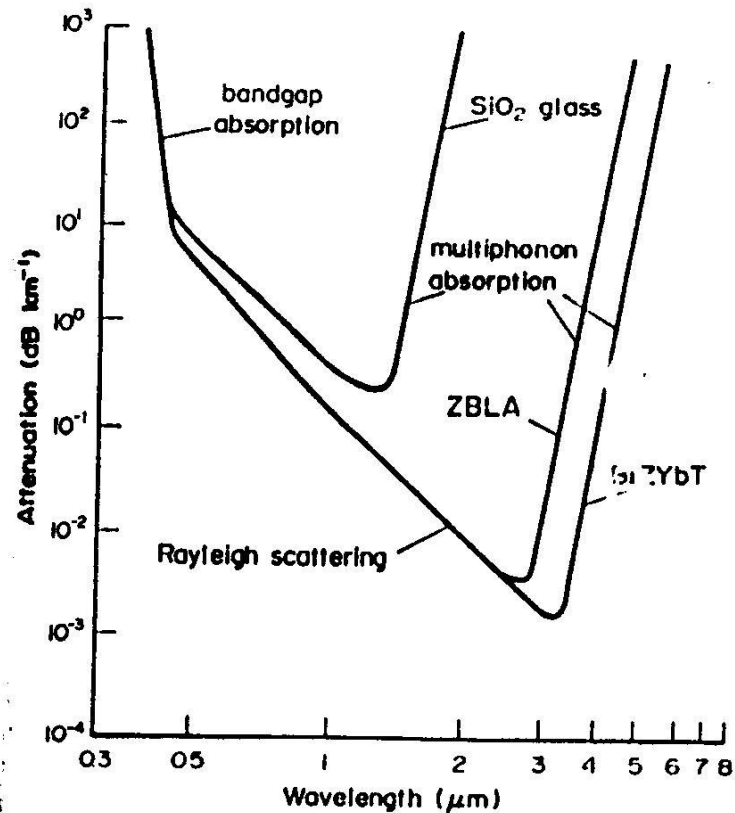


Figure 6
 Ultratransparency region (very low absorption) for
 fluoride and SiO₂ glasses

Obr. 15. Útlum ve sklech: SiO₂ a těžká fluoridová skla.