Relacje Kramersa-Kroniga

Relacje Kramersa-Kroniga

- Relacje Kramersa-Kroniga wiążą ze sobą część rzeczywistą i urojoną każdej funkcji, która jest analityczna w górnej półpłaszczyźnie zmiennej zespolonej.
- Pozwalają na otrzymanie części rzeczywistej z urojonej i odwrotnie.
- Przenikalność elektryczna opisuje właściwości elektryczne materiału (wzajemny wpływ pola elektrycznego i materiału nieprzewodzącego):

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi + i\frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega}$$

gdzie część rzeczywista związana jest z energią zmagazynowaną w materiale, a część urojona określa dyssypację (stratę) energii w strukturze.

- Podatność elektryczna $\chi(\omega)$ opisuje łatwość polaryzacji materiału nieprzewodzącego na skutek pola elektrycznego.

Relacje Kramersa-Kroniga

- Założenie: intensywność fali elektromagnetycznej jest wystarczająco słaba, żeby wywołana polaryzacja liniowo zależała od pola elektrycznego.
- Wówczas przenikalność $\varepsilon(\omega)$ oraz podatność $\chi(\omega)$ elektryczna opisują liniowe odpowiedzi ośrodka na zewnętrzne pole.
- Przenikalność elektryczną można przedstawić w postaci:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \int_0^\infty f(\tau) e^{i\omega\tau} \mathrm{d}\tau$$

- A po rozszerzeniu na płaszczyznę zespoloną:

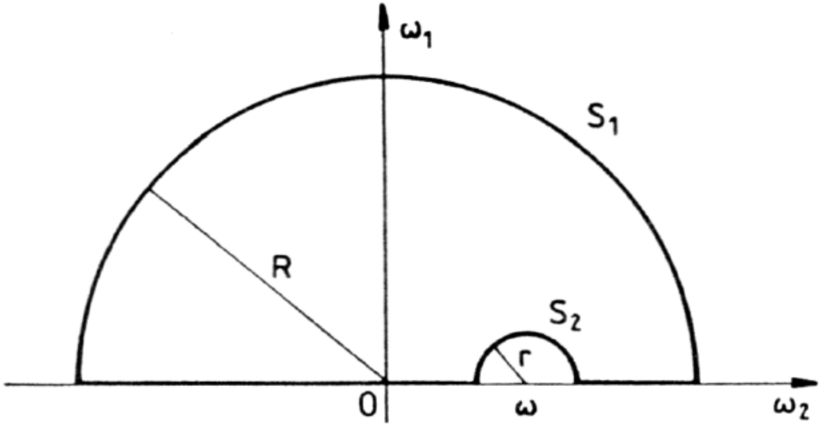
$$\varepsilon(\omega') = 1 + \int_0^\infty f(\tau) e^{i\omega_1\tau} e^{-\omega_2\tau} \mathrm{d}\tau$$

gdzie $\omega' = \omega_2 + i\omega_1$

- Ponieważ odpowiedź na dane pole (np. polaryzacja) nie może go wyprzedzić, funkcja $f(\tau)$ dąży do zera dla $\tau \to \infty$.

Relacje Kramersa-Kroniga

- Dodatkowo do zera dąży różnica $f(\tau)-\frac{\sigma}{\varepsilon_0}$ i dla $\omega_1>0$ funkcja podcałkowa jest zawsze ograniczona, a przenikalność elektryczna $\varepsilon(\omega')$ jest analityczna w górnej półpłaszczyźnie zmiennej ω' (równoważne przyczynowości zdarzeń).

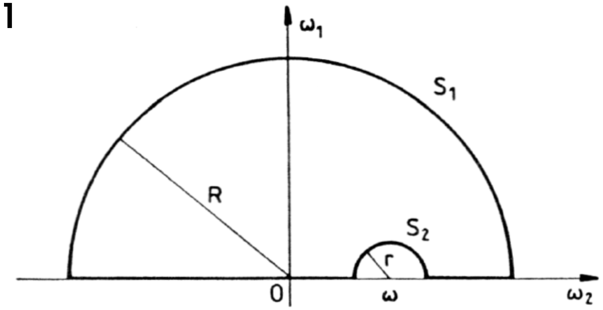


- Rozważmy całkę po konturze (dla dowolnego konturu z tw. o residuach):

$$\oint \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\mathrm{d}\omega' = 0$$

Relacje Kramersa-Kroniga

- Wartość całki wynosi zero, gdyż zgodnie z podstawowym twierdzeniem Cauchy'ego, całka po drodze zamkniętej z funkcji analitycznej (brak osobliwości) jest równa zero.
- Oznaczmy funkcję podcałkową jako $\rho(\omega')$.
- Całkę możemy zapisać jako sumę całek po poszczególnych częściach konturu S:



$$\oint_S \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' = \int_{S_1} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' + \int_{S_2} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' + \int_{-R}^{\omega-r} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' + \int_{\omega+r}^{R} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega'$$

- Dla $R \to \infty$ oraz $r \to 0$:

$$\int_{S_1} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' \to 0$$

$$\int_{S_2} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' \to -\pi i(\varepsilon(\omega)-1)$$

$$\int_{-R}^{\omega-r} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' + \int_{\omega+r}^{R} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega' = ⨍_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega')\mathrm{d}\omega'$$

Relacje Kramersa-Kroniga

- Otrzymujemy więc:

$$\varepsilon(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi i} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon(\omega') - 1}{\omega' - \omega}\, \mathrm{d}\omega'$$

- Natępnie porównujemy odpowiednio części rzeczywiste i urojone obu stron:

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_2(\omega')}{\omega' - \omega}\, \mathrm{d}\omega'$$

← relacje KK (matem.)

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega' - \omega}\, \mathrm{d}\omega'$$

- Korzystając z zależności:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi + i\frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$$

wiemy, że $\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_1(-\omega)$ oraz $\varepsilon_2(\omega) = -\varepsilon_2(-\omega)$

Relacje Kramersa-Kroniga

- Ostatecznie zależności mają postać:

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \, \mathrm{d}\omega'$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} \, \mathrm{d}\omega'$$

- Relacje (związki dyspersyjne) łączące część rzeczywistą i urojoną przenikalności elektrycznej noszą nazwę relacji Kramersa-Kroniga.
- Dodatkowo w szczególnym przypadku:

$$\varepsilon_1(0) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_2(\omega')}{\omega'} \, \mathrm{d}\omega'$$

gdzie $\varepsilon_1(0)$ jest stałą elektryczną materiału.

Relacje Kramersa-Kroniga

- Z drugiej strony:

$$\int_0^\infty \omega\varepsilon_2(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{\pi N e^2}{2\varepsilon_0 m}$$

- gdzie N jest koncentracją elektronów, e jego ładunkiem a m masą.
- W analogiczny sposób relacje Kramersa-Kroniga łączą ze sobą część rzeczywistą i urojoną zespolonego współczynnika załamania:

$$N = n + i\kappa$$

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\omega'\kappa(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}\,\mathrm{d}\omega'$$

$$\kappa(\omega) = \frac{2\omega}{\pi}\int_0^\infty \frac{n(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2}\,\mathrm{d}\omega'$$

Relacje Kramersa-Kroniga

- Można również pokazać, że:

$$n(0) = 1 + \frac{2}{\pi^2}\int_0^\infty \alpha(\lambda)\mathrm{d}\lambda$$

czyli, że niskoczęstotliwościowy współczynnik załamania jest określony przez pole powierzchni pod krzywą współczynnika absorpcji.

- Ekstrapolacja relacji Kramersa-Kroniga pozwala wyznaczyć przenikalność elektryczną lub stałe optyczne, mając do dyspozycji wyniki pomiarów współczynnika odbicia w ograniczonym zakresie spektralnym.
- $n(\omega)$ oraz $\chi(\omega)$ mogą być wyznaczone z widma odbicia (łatwiejszy pomiar), wykorzystując zespoloną postać współczynnika odbicia:

$$\mathbf{r}(\omega) = \frac{n + i\kappa - 1}{n + i\kappa + 1} = \sqrt{R}e^{i\varphi}$$

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

$$N = n + i\kappa$$

$$n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_1$$

$$2n\kappa = \frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega} = \varepsilon_2$$

Relacje Kramersa-Kroniga

- Ponieważ pomiar odbicia jest bardzo trudny dla całego zakresu częstotliwości (od zera do nieskończoności), potrzebna jest ekstrapolacja niskich oraz wysokich częstotliwości.
- W przypadku małych częstotliwości i niedomieszkowanego półprzewodnika, współczynnik odbicia przyjmuje się jako stały.
- Dla bardzo dużych częstotliwości, półprzewodnik może być przybliżony gazem swobodnych elektronów, dla których przenikalność elektryczna wyrażona jest przez:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2$$

gdzie ω_p jest częstością plazmy i zależy jedynie od gęstości elektronów walencyjnych (pozostałe elektrony są związane na tyle silnie, że ich wkład do przenikalności elektrycznej może być zwykle zaniedbany).