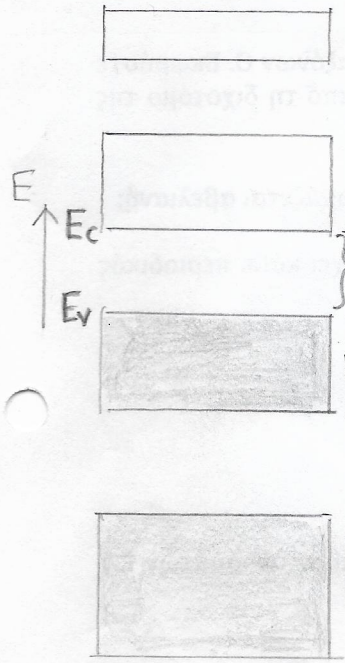
γενικό σχήμα

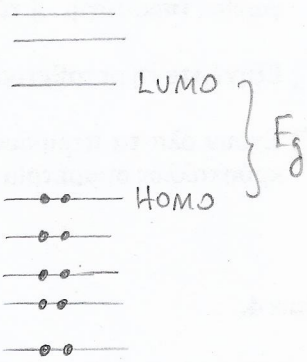
ΣΤΕΡΕΑ

συνεχές φάσμα, ζώνες
continuous spectrum, bands

ΑΤΟΜΑ, ΜΟΡΙΑ, ΚΕΝΤΡΑ ΧΡΩΜΑΤΟΣ,
ΚΒΑΝΤΙΚΕΣ ΤΕΛΕΙΕΣ (ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΑ)
("τεχνητά άτομα κ μόρια")

διακριτό φάσμα, στάθμες
discrete spectrum, levels





άδεια
ΖΩΝΗ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ
→ ο πυθμένας της ζώνης αγωγιμότητας
Eg (θεμελιώδες ενεργειακό χάσμα)
→ η κορυφή της ζώνης σθένους

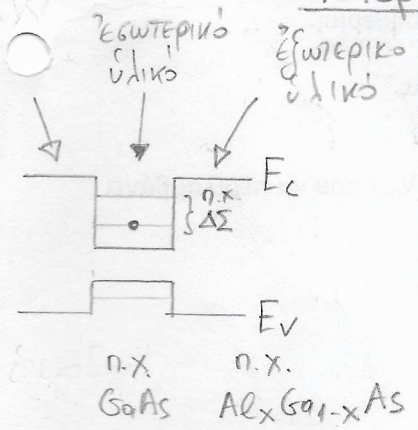
ΕΙΚΟΝΕΣ για T=0K

HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) Υψηλότερο Κατειλημμένο Μοριακό Τροχιακό

LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) Χαμηλότερο Μη Κατειλημμένο (άδειο) Μοριακό Τροχιακό.

$E_g = 0$ ΜΕΤΑΛΛΟ
E_g σχετικά μικρό ΗΜΙΑΓΩΓΟΣ
E_g σχετικά μεγάλο ΜΟΝΩΤΗΣ
} διότι ...

Ετεροδομές (heterostructures) μεταξύ συνεχούς και διακριτού φάσματος



ή χαμηλοδιάστατα συστήματα

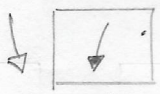
χονδρικώς υποζώνες subbands

μήκος εντοπισμού localization length 1nm-1000nm
10nm-100nm

ελευθερία σε 2Δ
εντοπισμός σε 1Δ

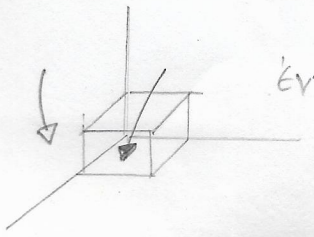
κβαντικό φρέαρ (quantum well)

εντοπισμός σε 2Δ
ελευθερία σε 1Δ



κβαντικό σύρμα
quantum wire

κβαντική τελεία (quantum dot) ή 3Δ φρέαρ δυναμικού
νανοσωματίδιο (nanoparticle)



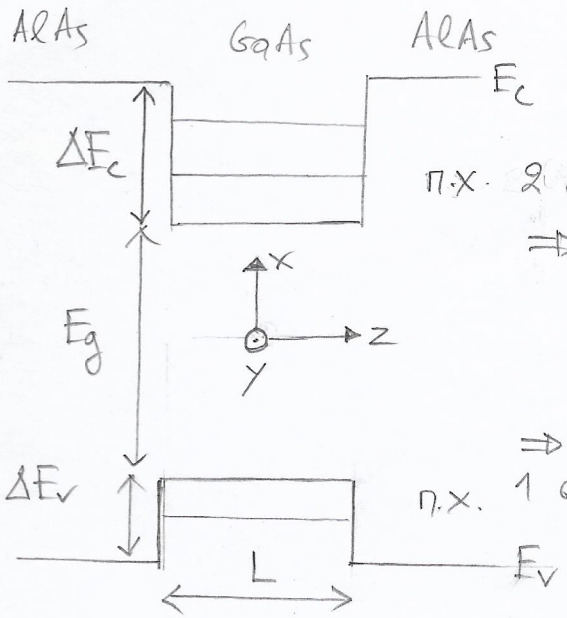
εντοπισμός σε 3Δ

DOS

Πηγάδι ☺

Πεπερασμένο Τετραγωνικό Φρέαρ

(αναλυτική λύση σε άλλο φυλλάδιο και σε βιβλία)
π.χ. Κβαντική Οπτική 2023
Quantum Optics ΚΑΛΙΤΣΟΣ



π.χ. 2 στάθμες στο φρέαρ του άξονα z
⇒ 2 σπιν σε 3Δ

⇒ 1 σπιν σε 3Δ
π.χ. 1 στάθμη στο φρέαρ του άξονα z

Ένα κβαντικό φρέαρ εύρους L περιέχει n διέγερμενες ενεργειακές καταστάσεις (στάθμες)

$$n = 1 + \mathrm{Int}\left[\sqrt{\frac{2m^* U_b L^2}{\pi^2 \hbar^2}}\right] \geq 1$$

ακέραιο μέρους

$U_b \uparrow$ "βαθύτερο" ⇒ $n \uparrow$

$L \uparrow$ "εύρύτερο" ⇒ $n \uparrow$

• Ιδιοκαταστάσεις ηλεκτρονίων σε κβαντικό φρέαρ με σταθερή ενεργό μάζα
∃ σε NB 5 στο βιβλίο

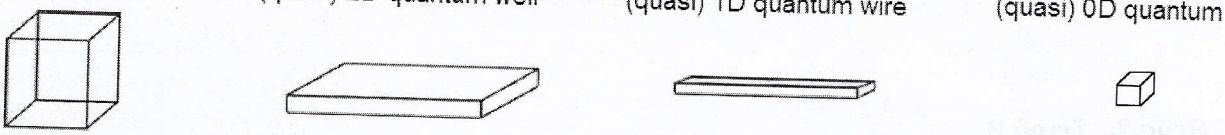
$$\varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \zeta_i(z) e^{ik_x x} e^{ik_y y}$$

* Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων

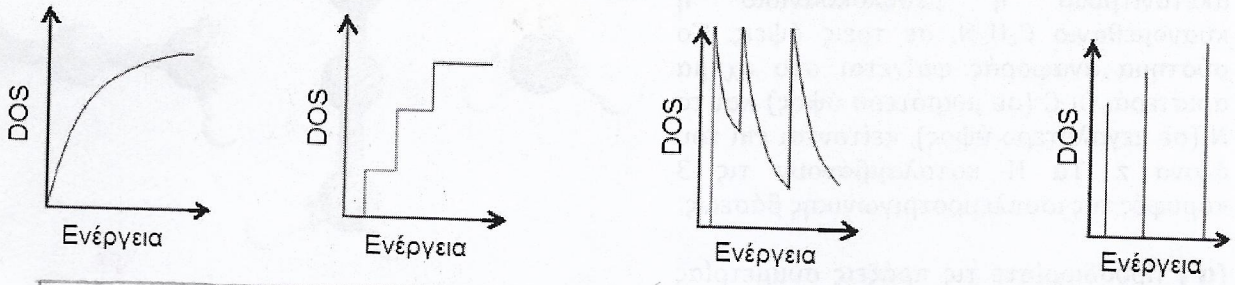
$$g(E) = \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} \sum_i \Theta(E - E_i)$$

DOS

3Δ όγκος 3D Bulk	(οιονεί) 2Δ κβαντικό φρέαρ (quasi) 2D quantum well	(οιονεί) 1Δ κβαντικό σύρμα (quasi) 1D quantum wire	(οιονεί) 0Δ κβαντική τελεία (quasi) 0D quantum dot



πυκνότητα καταστάσεων, density of states (DOS)



$$\boxed{g(E) = \frac{dN}{dE} \text{ ή } 2\sum_i \delta(E-E_i) = \frac{\text{στοιχειώδης αριθμός ιδιοκαταστάσεων}}{\text{στοιχειώδης περιοχή ενέργειας}}}$$

ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις

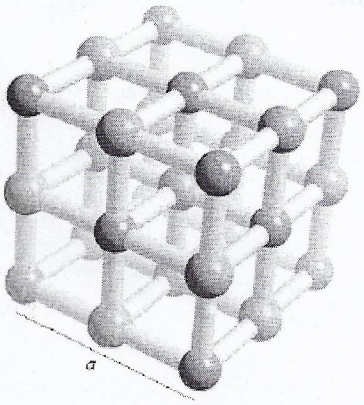
$\boxed{3\Delta}$ $$g(E) = \frac{V m^{*3/2}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}\,\Theta(E)$$

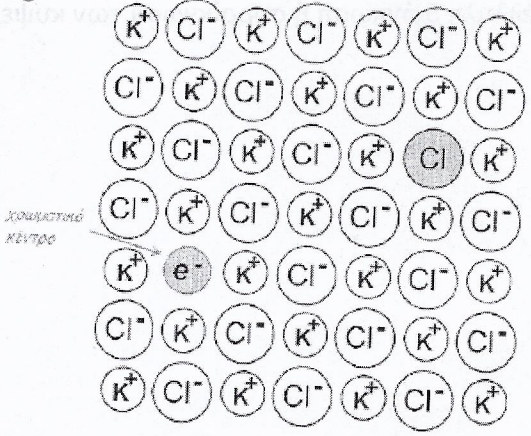
$\boxed{02\Delta}$ $$g(E) = \frac{m^* S}{\pi\hbar^2}\sum_i \Theta(E-E_i)$$

$\boxed{01\Delta}$ $$g(E) = \frac{L_x\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar}\sum_{i,j}\frac{1}{\sqrt{E-E_i-E_j}}\,\Theta(E-E_i-E_j)$$

$\boxed{0\emptyset\Delta}$ $$g(E) = 2\sum_i \delta(E-E_i)$$

spin → ενεργειακές ιδιοκαταστ.



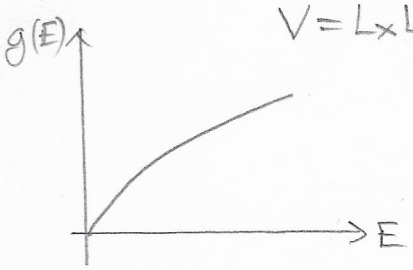


Σχήμα 2.7: (Αριστερά) Κρύσταλλος χλωριούχου καλίου (KCl). Η δομή μπορεί να περιγραφεί με ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα [fcc, face-centered cubic] με διατομική βάση (ζεύγος κατιόντος - ανιόντος), π.χ. σε κάθε πλεγματικό σημείο τοποθετείται (i) ένα κατιόν ακριβώς στο πλεγματικό σημείο και (ii) ένα ανιόν σε σημείο που απέχει απόσταση $(a/2)(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$, όπου a είναι η πλεγματική σταθερά. Για παράδειγμα στο πλεγματικό σημείο στην αρχή των αξόνων (στο 0) έχουμε ένα κατιόν και το αντίστοιχο ανιόν βρίσκεται στο κέντρο της συμβατικής κυβικής κυψελίδας. Κάθε π.χ. κενό ανιόντος χλωρίου έχει 6 κατιόντα καλίου ως πρώτους γείτονες. (Δεξιά) Επίπεδη αναπαράσταση. Χρωματικό κέντρο με παγιδευμένο ηλεκτρόνιο σε ένα κενό Cl^-. Το ηλεκτρόνιο έχει φύγει από ένα ανιόν Cl^- π.χ. λόγω ακτινοβολήσεως. Η κατανομή της κυματοσυναρτήσεως του ηλεκτρονίου καθορίζεται από τη μορφή του τριδιάστατου κβαντικού φρέατος που δημιουργείται στην άδεια θέση.

$\boxed{3\Delta}$ $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$

xyz κοινή περιοδικότητα

$V = L_x L_y L_z$



$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

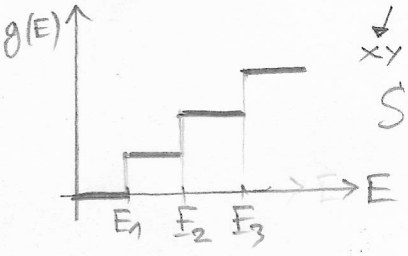
$$\Downarrow$$

$$g(E) = \frac{\overset{xyz}{V}\, m^{*3/2}\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3}\sqrt{E}\,\Theta(E)$$

$\boxed{02\Delta}$ $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \zeta_i(z) e^{ik_x x} e^{ik_y y}$

xy κοινή περιοδικότητα

$S = L_x L_y$



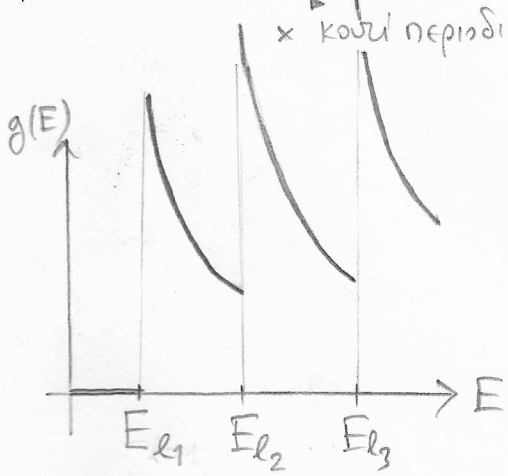
$$E_i(k_x, k_y) = E_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}$$

$$\Downarrow$$

$$g(E) = \frac{m^* \overset{xy}{S}}{\pi \hbar^2} \sum_{\underset{z}{i}} \Theta(E - E_i)$$

$\boxed{01\Delta}$ $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \underset{z}{\zeta_i(z)}\, \underset{y}{\varphi_j(y)}\, e^{ik_x x}$

x κοινή περιοδικότητα



ιδιαζουσα σημεία van Hove

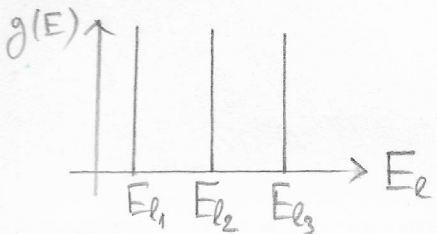
$$E_{\underset{z}{i},\underset{y}{j}}(k_x) = E_i + E_j + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}$$

$$\Downarrow$$

$$g(E) = \frac{\overset{x}{L_x}\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{i,j} \frac{\Theta(E - E_i - E_j)}{\sqrt{E - E_i - E_j}}$$

$$E_{ij} = E_i + E_j \overset{\text{op}}{=} E_\ell$$

$\boxed{00\Delta}$ $\psi(\vec{r}) = \zeta_i(z)\, \varphi_j(y)\, \omega_m(x)$



$$E_{\underset{z}{i},\underset{y}{j},\underset{x}{m}} = E_i + E_j + E_m \overset{\text{op}}{=} E_\ell$$

$$\Downarrow \quad g(E) = 2\sum_{i,j,m} \delta(E - E_i - E_j - E_m)$$

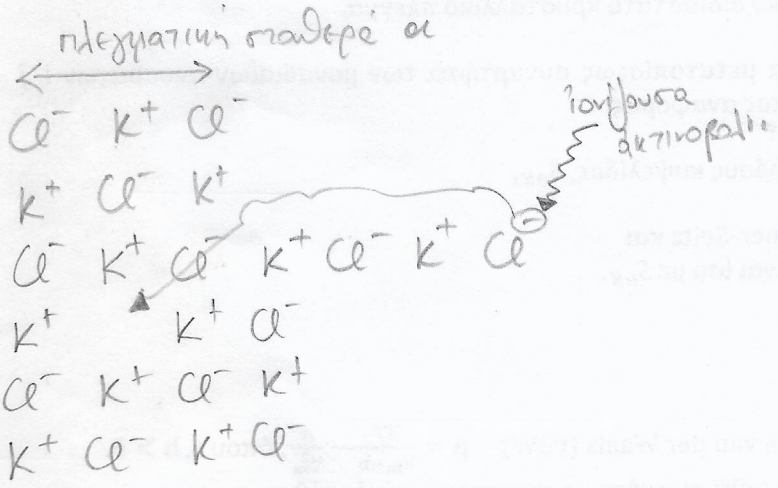
ΚΕΝΤΡΟ ΧΡΩΜΑΤΟΣ (color center):

Ατέλεια της κρυσταλλικής δομής, σχετιζόμενη με την παγίδευση ενός ηλεκτρονίου, απορροφούσα περίπου στην περιοχή του ορατού φάσματος.

π.χ. σε ιοντικούς κρυστάλλους αλογονιδίων αλκαλίων όπως KCl, NaCl, ...

ιονίζουσα ακτινοβολία "ελευθερώνει" ηλεκτρόνιο από κάποιο ανιόν π.χ. από κάποιο Cl^-.

Το "ελεύθερο" ηλεκτρόνιο παγιδεύεται σε μια θέση όπου λείπει ανιόν.

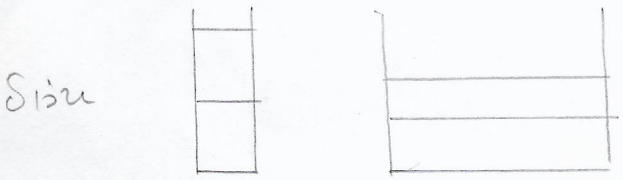


Δυναμική ενέργεια ηλεκτρονίου στην κενή θέση $\sim 6\,\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} < 0$

$r \sim \frac{a}{2}$

F-centers (Farbe = χρώμα, γερμανικά)

- Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του κενού



όσο ευρύτερο είναι το φρέαρ τόσο λιγότερο απέχουν οι στάθμες...

ΣΤΕΡΕΟ = ΠΛΕΓΜΑ + ΒΑΣΗ

ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΣ = κρυσταλλικό πλέγμα + βάση

περιοδικότητα

$\vec{r} = \sum_i n_i \vec{a}_i$ πλεγμ. σημεία

$\{n_i\} \in \mathbb{Z}$ $\{\vec{a}_i\}$ ΘΑΜ

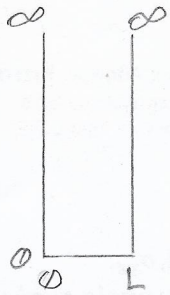
κάθε απόκλιση από την περιοδικότητα ονομάζεται ατέλεια (defect)

ατέλειες:

- προσμίξεις (impurities)
- κενές θέσεις (voids)
- επιπλέον άτομα σε θέσεις μη προβλεπόμενες από την περιοδικότητα (interstitials)

Οι ιδιότητες του υλικού εξαρτώνται από τον φιλοξενούντα κρύσταλλο (host crystal) και τις ατέλειες (defects).

Άδρή προσέγγιση: άπειρό βάθος φρέαρ



$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{αλλού} \end{cases}$$

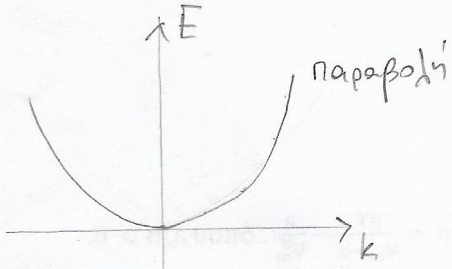
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

εντός κρυστάλλου $\quad E_n = \dfrac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* L^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \quad m^* =$ ενεργός μάζα effective mass

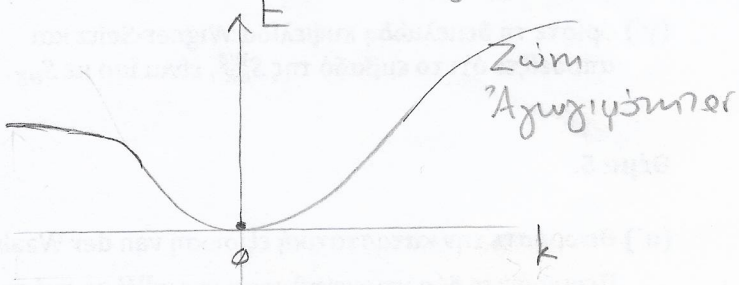
---

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$ ελεύθερο ηλεκτρόνιο

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$ ηλεκτρόνιο εντός κρυστάλλου, κοντά στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας



ελεύθερο ηλεκτρόνιο



ηλεκτρόνιο εντός κρυστάλλου

$$E(k) = E(0) + E'(0)\frac{k}{1!} + E''(0)\frac{k^2}{2!} + \ldots$$

στη θέση όπου έχουμε ελάχιστο, $E'(0) = 0$ κ $E''(0) > 0$, δηλαδή, εκλέγοντας τους άξονες έτσι ώστε $E(0) = 0$ και αγνοώντας όρους άνω της δευτέρας τάξεως $\Rightarrow$

$$E(k) \simeq \frac{E''(0)}{2} k^2$$

ονομάζουμε $\quad \dfrac{\hbar^2}{2m^*} = \dfrac{E''(0)}{2} \Rightarrow \boxed{m^* = \dfrac{\hbar^2}{E''(0)}}$

ΑΣΚΗΣΗ Δίνεται η $E(k)$, να βρεθεί η ενεργός μάζα...

Άρα, η απόσταση μεταξύ διαδοχικών σταθμών είναι

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}(2n+1), \quad n = 1, 2, 3, \ldots \quad (*)$$

- αντιστρόφως ανάλογη του L^2 ... στα πλατιά φρέατα οι σταθμοί πλησιάζουν
- ανάλογη του $(2n+1)$ ... οι υψηλότερες απέχουν περισσότερο

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & 0 < x < L \\ 0, & \text{αλλού} \end{cases}$$

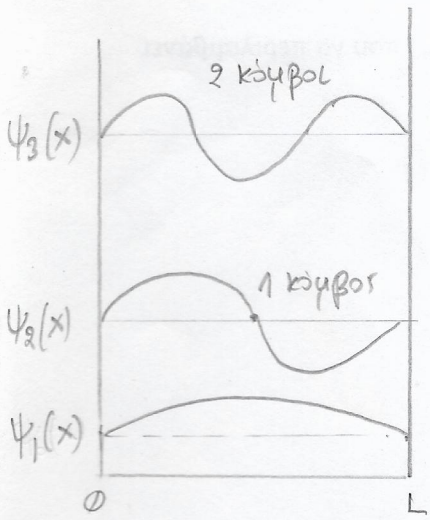
δεν διαπερνά τα ∞ φράγματα ...

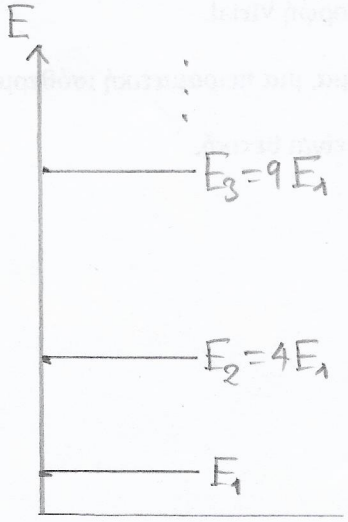
$$P_n(x) = \begin{cases} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & 0 < x < L \\ 0, & \text{αλλού} \end{cases}$$

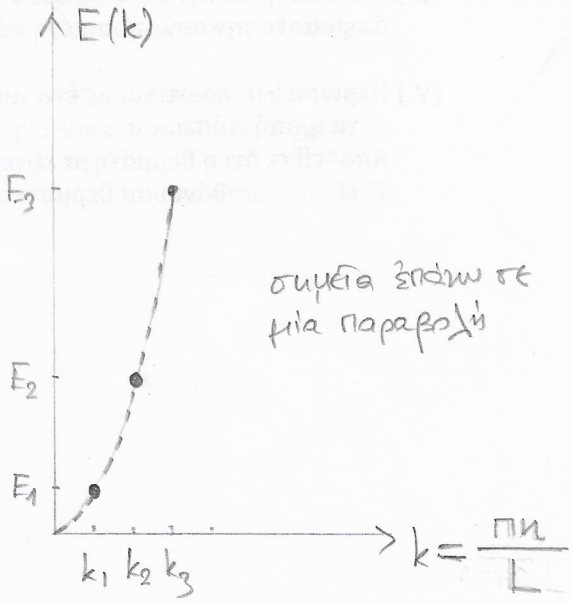
Στα κέντρα χρώματος, ο χρωματισμός οφείλεται στην <u>απορρόφηση</u> (absorption) ενός φωτονίου από το παγιδευμένο ηλεκτρόνιο και στην συνακόλουθη <u>διέγερσή</u> του (excitation) από τη <u>θεμελιώδη κατάσταση</u> (ground state) $n=1$ σε μία <u>διεγερμένη κατάσταση</u> (excited state) $n \neq 1$. Εξίσωση (*)

$L \uparrow \Rightarrow E_{n+1} - E_n \downarrow \Rightarrow$ μετατόπιση προς ερυθρό (red shift)

$L \downarrow \Rightarrow E_{n+1} - E_n \uparrow \Rightarrow$ μετατόπιση προς μπλε (blue shift)







σημεία πάνω σε μία παραβολή

κόμβων $= n - 1$

node = κόμβος

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* L^2} := \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

3Δ άπειρόβαθο φρέαρ

$$V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \right\} \psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})$$

Δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής $\psi(\vec{r}) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$

μέθοδος χωρισμένων μεταβλητών

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2X}{dx^2}\cdot YZ - \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2Y}{dy^2}\cdot XZ - \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2Z}{dz^2}\cdot XY$$

$$+ V_1(x)XYZ + V_2(y)XYZ + V_3(z)XYZ = E\,XYZ$$

διαιρούμε με XYZ $\rightarrow$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2X}{dx^2}\frac{1}{X} + V_1(x)}_{f_1(x)} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2Y}{dy^2}\frac{1}{Y} + V_2(y)}_{f_2(y)} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2Z}{dz^2}\frac{1}{Z} + V_3(z)}_{f_3(z)} \underbrace{= E}_{\text{σταθερά}}$$

$$\Rightarrow E = E_1 + E_2 + E_3$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2X}{dx^2}\frac{1}{X} + V_1(x) = E_1$$ 1Δ άπειρόβαθο φρέαρ

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2Y}{dy^2}\frac{1}{Y} + V_2(y) = E_2$$ 1Δ άπειρόβαθο φρέαρ

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2Z}{dz^2}\frac{1}{Z} + V_3(z) = E_3$$ 1Δ άπειρόβαθο φρέαρ

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*}\left(\frac{n_1^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2}{L_y^2} + \frac{n_3^2}{L_z^2}\right)$$ και για $L_x = L_y = L_z = L$

$$\boxed{E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)}$$

$$E_{\Theta\Sigma} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}\cdot 3$$

$$E_{1\Delta\Sigma} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}\cdot 6$$

$$E_{1\Delta\Sigma} - E_{\Theta\Sigma} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}$$

άρα η ενέργεια του απορροφουμένου φωτονίου, ώστε το ηλεκτρόνιο να ανέβει από τη ΘΣ στην 1η ΔΣ, θα είναι

$$h\nu = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}$$

για $L = \frac{a}{2}$ $\quad h\nu = \frac{6\hbar^2\pi^2}{m^*a^2}$ $\quad$ π.χ. NaCl, $a = 0.565\,nm$ $\quad h\nu \approx 12.498\ eV$

για $L = a$ $\quad h\nu = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2m^*a^2}$ $\quad m^* \approx 1.13 m_e$ $\quad h\nu \approx 3.1245\ eV$

$h\nu_{\pi\varepsilon\iota\rho} \simeq 2.7\ eV$

$$\frac{3.1245 - 2.7}{2.7} \simeq 0.1572 \simeq 0.16$$ 16% απόκλιση

$h\nu_{\pi\varepsilon\iota\rho} = 2.7\ eV \rightsquigarrow \lambda \approx 460\ nm$ μπλε-γαλάζιο

Όλα αυτά είναι πολύ προσεγγιστικά, δηλοϊκά

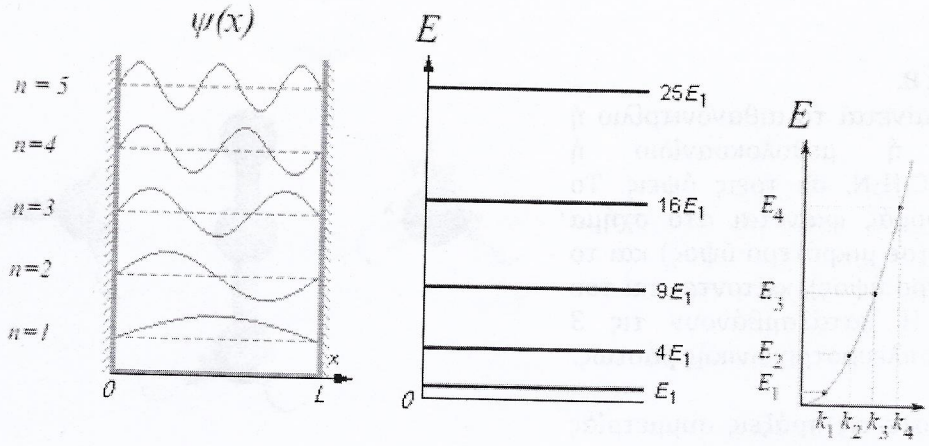
Όμως, το βασικό ποιοτικό συμπέρασμα είναι

$$h\nu \propto \frac{1}{a^2} \qquad \nu = \frac{c}{\lambda} \qquad \lambda \propto a^2$$

ή σχέση

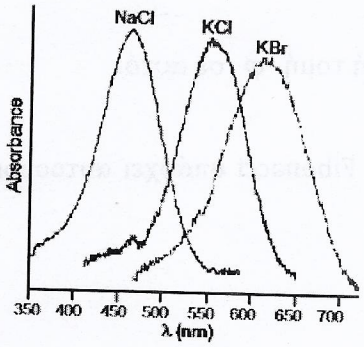
$$h\nu = \frac{0.97}{(a\ \text{σε nm})^{1.772}}\ eV \qquad \lambda \propto (a\ \text{σε nm})^{1.772}$$

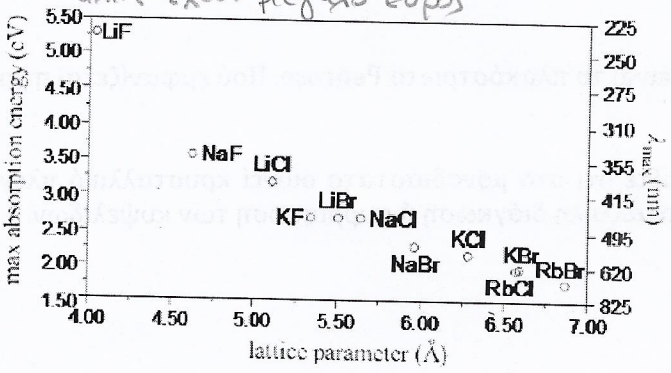
μπορεί να ταιριάξει ικανοποιητικά όλα τα πειραματικά δεδομένα των ατομικών ατκαλίων!



Σχήμα 2.8: Ιδιοσυναρτήσεις, ιδιοενέργειες και ενεργειακή διασπορά ($k_n = n\pi/L, n = 1, 2, 3, \ldots$) του σωματιδίου στο απλοϊκό πρότυπο απειρόβαθου φρέατος. Στην εικόνα της ενεργειακής διασποράς η γκρίζα συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει ένα σωματίδιο που κινείται ελεύθερα μέσα στον κρύσταλλο. Στο δεσμευμένο σωματίδιο, όμως, επιτρέπονται μόνο συγκεκριμένες ενέργειες (διακριτές ενεργειακές καταστάσεις).

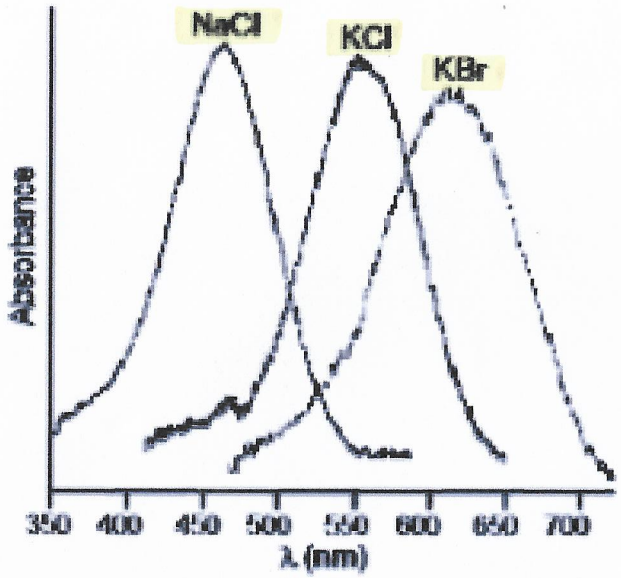
ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ (1) $\lambda \propto a^2$ (2) Τα φάσματα δεν είναι συναρτήσεις δ αλλά έχουν μεγάλο εύρος

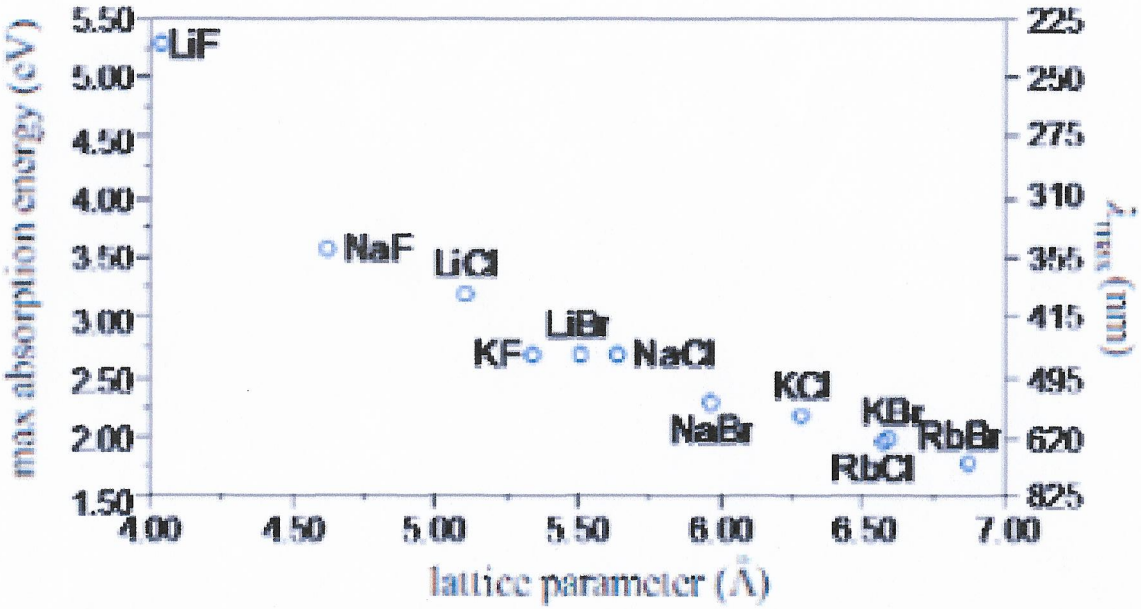




Σχήμα 2.9: (Αριστερά) Φάσματα απορροφήσεως χρωματικών κέντρων, που ελήφθησαν στον αέρα, σε 298 K, στο υπεριώδες - ορατό, από κρυστάλλους NaCl, KCl, KBr, που ακτινοβολήθηκαν με πηνίο Tesla [23]. Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του χώρου που αφήνει η ατέλεια, άρα από την πλεγματική παράμετρο ή πλεγματική σταθερά, a. Η κορυφή του φάσματος απορροφήσεως είναι έτσι μετατοπισμένη επειδή $a_{NaCl} < a_{KCl} < a_{KBr}$. (Δεξιά) Εξάρτηση της κορυφής το φάσματος απορροφήσεως από την a σε κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων [23]. Αύξηση της a δημιουργεί μεγαλύτερα κενά όταν λείπει κάποιο ιόν, επομένως ευρύτερο φρέαρ δυναμικής ενέργειας και άρα μικραίνει η ενεργειακή απόσταση θεμελιώδους - 1ης διεγερμένης στάθμης και επομένως μικραίνει η ενέργεια (αυξάνεται το μήκος κύματος) του φωτονίου που αντιστοιχεί στη μετάβαση.

(1) $\lambda \propto a^2$ (2) Τα φάσματα δεν είναι συναρτήσεις δ, αλλά έχουν μεγάλο εύρος





Σχήμα 2.9: (Αριστερά) Φάσματα απορροφήσεως χρωματικών κέντρων, που ελήφθησαν στον αέρα, σε 298 K, στο υπεριώδες - ορατό, από κρυστάλλους NaCl, KCl, KBr, που ακτινοβολήθηκαν με πηνίο Tesla [23]. Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του χώρου που αφήνει η ατέλεια, άρα από την πλεγματική παράμετρο ή πλεγματική σταθερά, a. Η κορυφή του φάσματος απορροφήσεως είναι έτσι μετατοπισμένη επειδή $a_{NaCl} < a_{KCl} < a_{KBr}$. (Δεξιά) Εξάρτηση της κορυφής το φάσματος απορροφήσεως από την a σε κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων [23]. Αύξηση της a δημιουργεί μεγαλύτερα κενά όταν λείπει κάποιο ιόν, επομένως ευρύτερο φρέαρ δυναμικής ενέργειας και άρα μικραίνει η ενεργειακή απόσταση θεμελιώδους - 1ης διεγερμένης στάθμης και επομένως μικραίνει η ενέργεια (αυξάνεται το μήκος κύματος) του φωτονίου που αντιστοιχεί στη μετάβαση.

Τα φάσματα, όμως, δεν είναι συναρτήσεις δέλτα, αλλά έχουν μεγάλο εύρος.

Η διεύρυνση διακρίνεται σε:
(broadening)

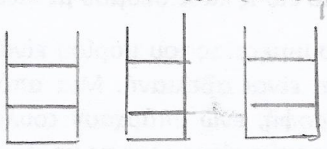
ομογενή διεύρυνση	ανομογενή διεύρυνση
homogeneous broadening	inhomogeneous broadening
Το αίτιο που προκαλεί τη διεύρυνση είναι ίδιο για κάθε απορροφητή-εκπομπό	Το αίτιο που προκαλεί τη διεύρυνση είναι διαφορετικό για κάθε απορροφητή-εκπομπό
π.χ. ο χρόνος ζωής της άνω στάθμης $\tau \cdot \Delta E \propto h$ → η αβεβαιότητα στην ενέργεια; στάθμη τρεμοπαίζουσα ζει λίγο	π.χ. σε στερεό → έχουμε μια συλλογή απορροφητών-εκπομπών → το περιβάλλον κάθε απορροφητή-εκπομπού είναι διαφορετικό, δηλαδή τα κβαντικά φρέατα δεν είναι ταυτόσημα...

$$dW^{\text{αυθ}}_{\text{εκπ}} = A_{21}\, dt$$

$$1 = A_{21}\, \tau$$

$$\tau = \frac{1}{A_{21}}$$

π.χ. σε αραιό αέριο ίδιων ατόμων (χωρίς μεταξύ τους αλληλεπίδραση)



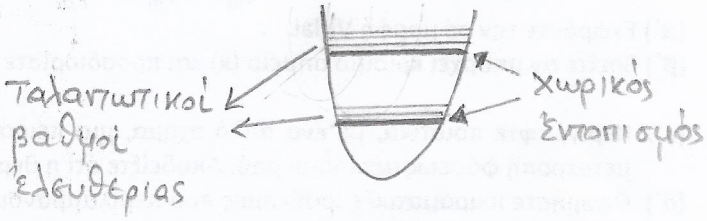
κλπ ⇒

ευρέα φάσματα απορρόφησης-εκπομπής

ή δονητικοί vibrational

π.χ. ταλαντωτικοί βαθμοί ελευθερίας

ΑΚΟΜΑ ∃ και περιστροφικοί (rotational) βαθμοί ελευθερίας



Ακόμα, επειδή τα κέντρα χρώματος βρίσκονται εντός κάποιου στερεού, υπάρχει πάντοτε όλο το υπόβαθρό του.

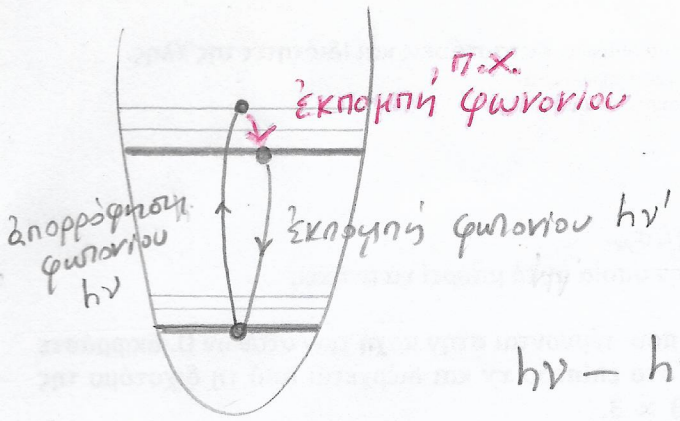
Σε άλλες γραμμές...

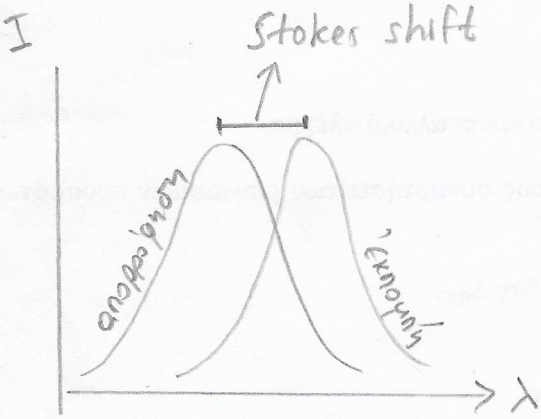
UV > visible > IR > THz

electronic > vibrational > rotational

UVvis near IR THz

thermalization θερμοποίηση



$h\nu - h\nu' =$ μετατόπιση Stokes (shift) > 0

$h\nu - h\nu' =$ μετατόπιση anti-Stokes < 0