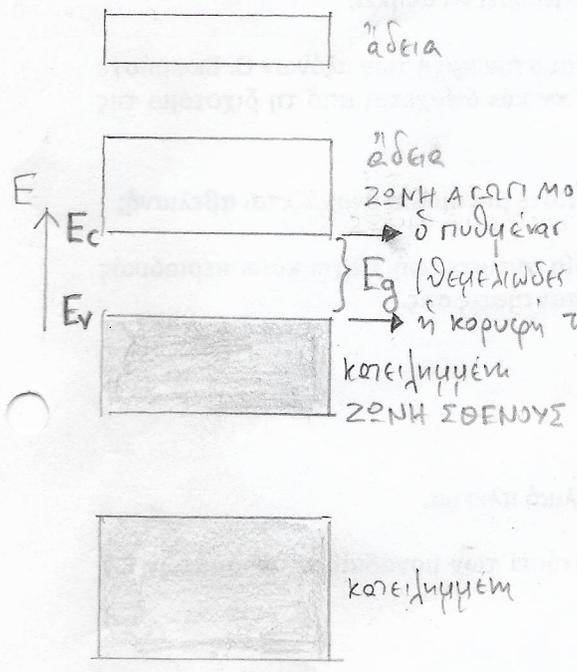


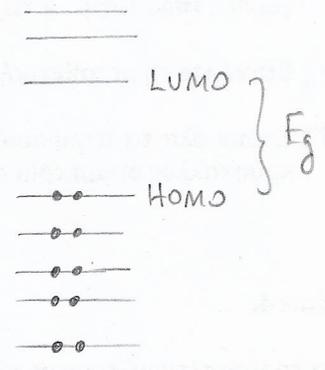
γενικό σχήμα

ΣΤΕΡΕΑ
 συνεχές φάσμα, ζώνες
 continuous spectrum, bands

ΑΤΟΜΑ, ΜΟΡΙΑ, ΚΕΝΤΡΑ ΧΡΩΜΑΤΟΣ,
ΚΒΑΝΤΙΚΕΣ ΤΕΛΕΙΕΣ (ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΑ)
 ("τεχνητά άτομα κ μόρια")
 διακριτό φάσμα, στάθμες
 discrete spectrum, levels



ΕΙΚΟΝΕΣ για $T=0K$

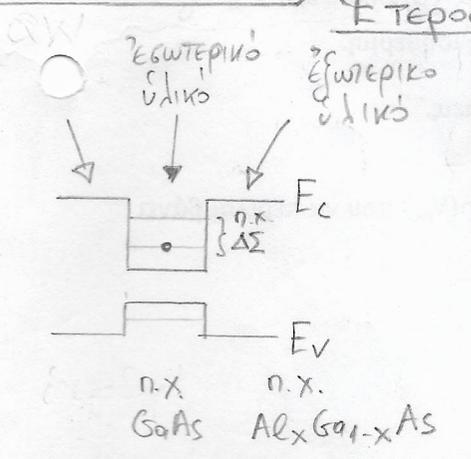


HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) Υψηλότερο Κατειλημμένο Μοριακό Τροχιακό

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

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

Ετεροδομές (heterostructures)



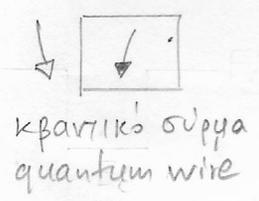
ή χαμηλοδιάστατα
 συστήματα
 μήκος έντοπισης $1nm - 1000nm$
 localization length $10nm - 100nm$

μεταξύ συνεχούς και
 διακριτού
 φάσματος
 υποζώνες
 subbands

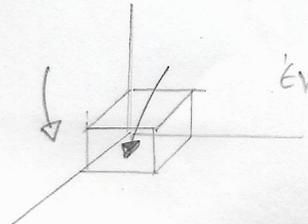
ελευθερία σε 2D
 έντοπιση σε 1D

κβαντικός φρέαρ (quantum well)

έντοπιση σε 2D
 ελευθερία σε 1D



κβαντική τελεία (quantum dot) ή
 νανωσωματίδιο (nanoparticle)



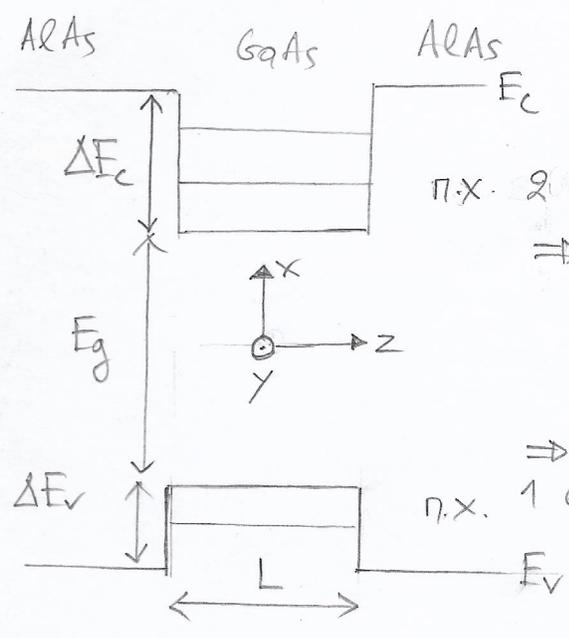
3D φρέαρ δυναμικός

DOS

Πηγάδι ☺

Πεπερασμένο Τετραγωνικό Φρέαρ

(αναφορική λύση σε άλλο φύλλο και σε βιβλίο)
 π.χ. Κβαντική Όπτική 2023
 Quantum Optics ΚΑΜΙΝΟΣ



π.χ. 2 στάθμες στο φρέαρ τού άξονα z
 ⇒ 2 διαστάσεις σε 3Δ

⇒ 1 διαστάση σε 3Δ
 π.χ. 1 στάθμη στο φρέαρ τού άξονα z

Ένα κβαντικό φρέαρ εύρους L περιέχει η δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις (στάθμες)

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

ἀκέραιο κέρους

$U_b \uparrow$ ⇒ $n \uparrow$
 "βαρύτερο"

$L \uparrow$ ⇒ $n \uparrow$
 "ευρύτερο"

- Ή ιδιοκαταστάσεις ηλεκτρονίων σε κβαντικό φρέαρ τα σταθερά ενεργειακά
 Ξ σε NB & στο βιβλίο

$$\Psi_{i, k_x, k_y}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \psi_i(z) e^{i k_x x} e^{i k_y y}$$

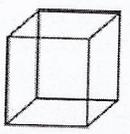
* Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων

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

• $E = E_c$ (στην E_c & 3- ή 2- ή 1- διαστάσεις φρέαρ)

DOS

3Δ όγκος
3D Bulk



(οιονεί) 2Δ κβαντικό φρέαρ
(quasi) 2D quantum well



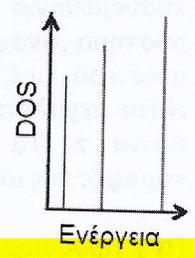
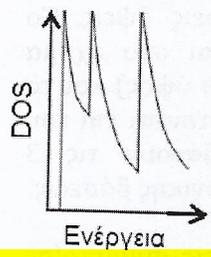
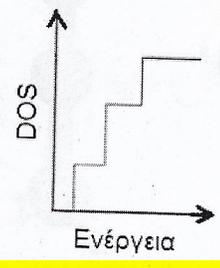
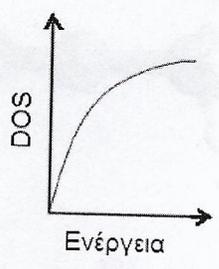
(οιονεί) 1Δ κβαντικό σύρμα
(quasi) 1D quantum wire



(οιονεί) 0Δ κβαντική τελεία
(quasi) 0D quantum dot



Πυκνότητα καταστάσεων, density of states (DOS)



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

3Δ

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

02Δ

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

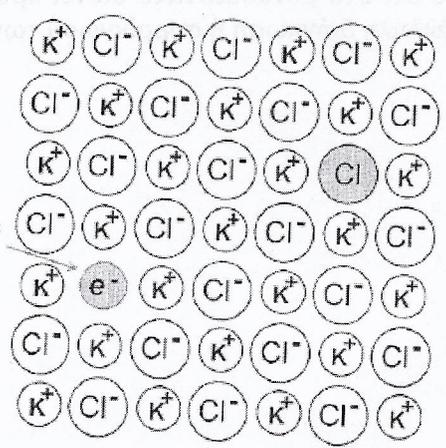
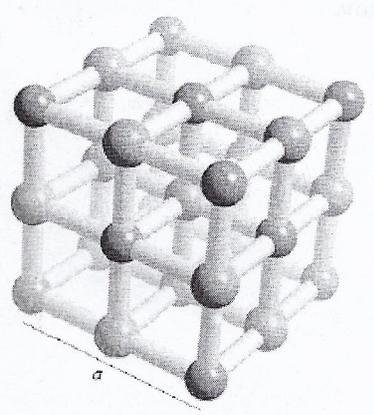
01Δ

$$g(E) = \frac{L_x \sqrt{2m^*}}{\pi \hbar} \sum_{ij} \frac{1}{\sqrt{E - E_i - E_j}} \Theta(E - E_i - E_j)$$

00Δ

$$g(E) = 2 \sum_i \delta(E - E_i)$$

↓ spin i → ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις



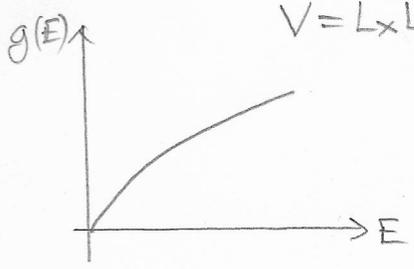
Σχήμα 2.7: (Αριστερά) Κρύσταλλος χλωριούχου καλίου (KCl). Η δομή μπορεί να περιγραφεί με ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα [fcc, face-centered cubic] με διατομική βάση (ζεύγος κατιόντος - ανιόντος), π.χ. σε κάθε πλεγματικό σημείο τοποθετείται (i) ένα κατιόν ακριβώς στο πλεγματικό σημείο και (ii) ένα ανιόν 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.

3Δ

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

↓ xyz κοινή περιόδικότητα
 $V = L_x L_y L_z$

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



↓

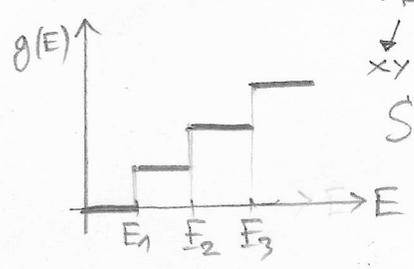
$$g(E) = \frac{V m^{*3/2} \sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \Theta(E)$$

02Δ

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

↓ xy κοινή περιόδικότητα
 $S = L_x L_y$

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



↓

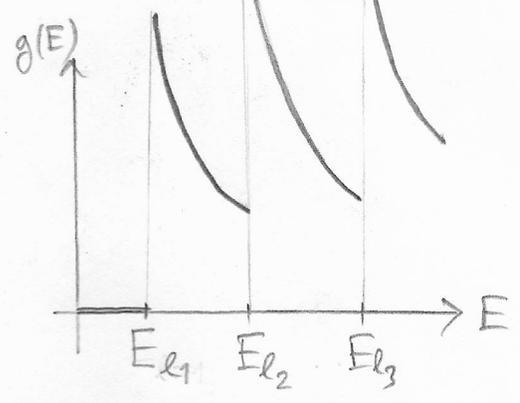
$$g(E) = \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} \sum_i \Theta(E - E_i)$$

01Δ

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} J_i(z) \varphi_j(y) e^{ik_x x}$$

↓ x κοινή περιόδικότητα

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



↓

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

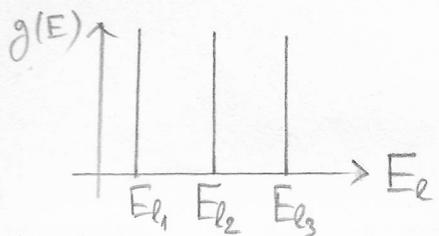
$$E_{ij} = E_i + E_j \stackrel{\infty}{=} E_e$$

ιδιοτροπία σφαιρική van Hove

00Δ

$$\psi(\vec{r}) = J_i(z) \varphi_j(y) \omega_m(x)$$

$$E_{i,j,m} = E_i + E_j + E_m \stackrel{\infty}{=} E_e$$



↓

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

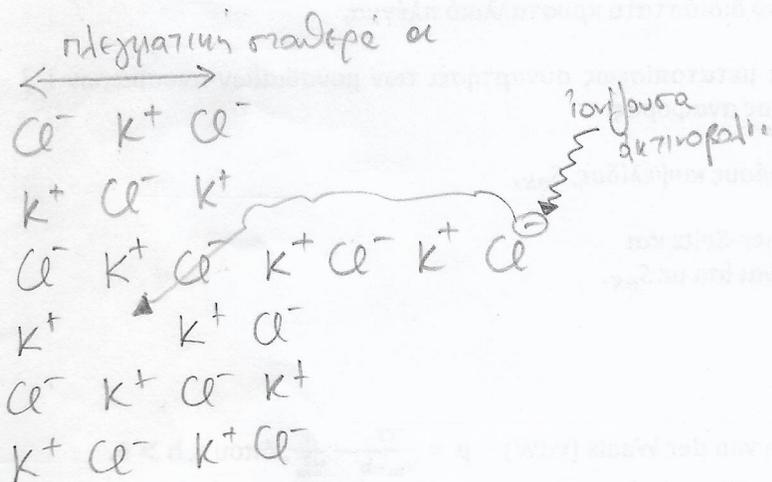
ΚΕΝΤΡΟ ΧΡΩΜΑΤΟΣ (color center):

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

π.χ. σε ιοντικούς κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων όπως KCl , $NaCl$, ...

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

το "ελεύθερο" ηλεκτρόνιο παγιδεύεται μέσα μια δέση όπου λείπει ανιόν.



Δυναμική ενέργεια ηλεκτρονίου στην κενή θέση $\sim 6 \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 a} < 0$

F-centers (Farbe = χρώμα, γερμανισμός)

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

• Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του κενού



όσο ευρύτερο είναι το φάσμα τόσο λιγότερο ανέχων οι σταθμες...

ΣΤΕΡΕΟ = ΠΛΕΓΜΑ + ΒΑΣΗ (5)

ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΣ = κρυσταλλικό πλέγμα + βάση

περιοδικότητα

$$\vec{r} = \sum_i n_i \vec{a}_i \quad \text{πλεγματικές}$$

$$\{n_i\} \in \mathbb{Z} \quad \{\vec{a}_i\} \text{ OAM}$$

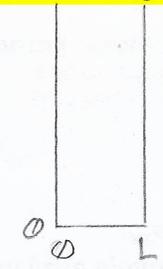
κάθε απόκλιση από την περιοδικότητα ονομάζεται ατέλεια (defect)

ατέλειες:

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

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

Άδρή προσέγγιση απείρως βαθύ φρέαρ



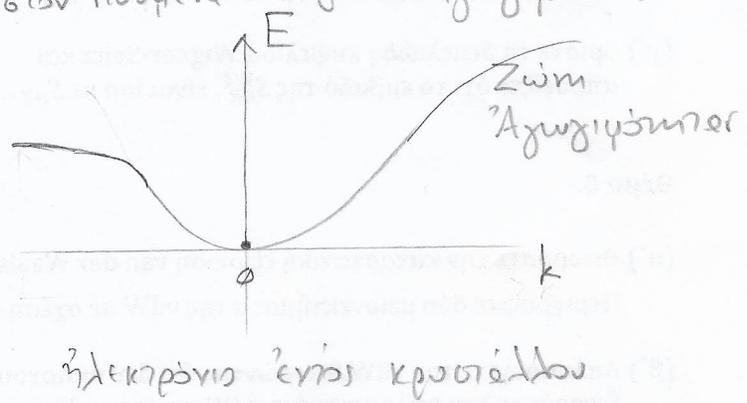
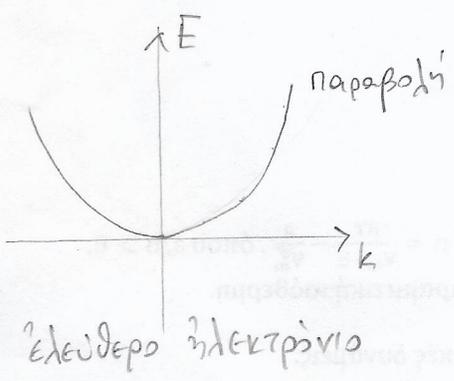
$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{άλλως} \end{cases}$$

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

έντος κρυστάλλου $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^*L^2}, \quad n=1,2,3,\dots$ $m^* = \text{ ενεργός μάζα effective mass}$

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

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



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

στη θέση όπου έχουμε ελάχιστο, $E'(0) = 0$ & $E''(0) > 0$, οπότε, εκλέγοντας τους άξονες έτσι ώστε $E(0) = 0$ και αγνοώντας όρους ανώτερης τάξης έχουμε \Rightarrow

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

βρούμε $\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{E''(0)}{2} \Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{E''(0)}$

$$k = \frac{mv}{\hbar}$$

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

Άρα, η απόσταση μεταξύ διαδοχικών σταθμών είναι

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

- αντίστροφα ανάλογη με L^2 ... στα πλατιά φρέατα οι στάθμες ψ πλησιάζουν
- ανάλογη με $(2n+1)$... οι υψηλότερες απέχουν περισσότερο

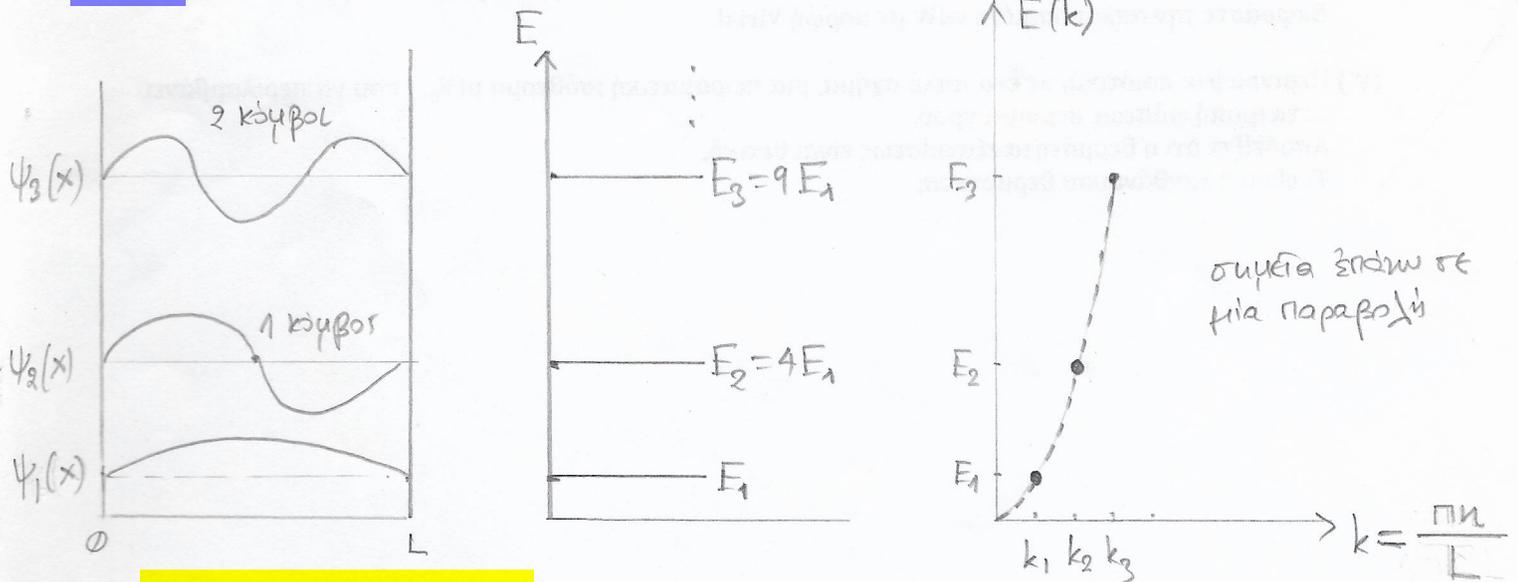
$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & 0 < x < L \\ 0, & \text{άλλος} \end{cases}$$

δεν διαφέρει τα ∞ φρέατα ...

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

Στα κέντρα χρώματος, ο χρωματισμός οφείλεται στην απορρόφηση (absorption) ενός φωτονίου από το παγιδευμένο ηλεκτρόνιο και στην επαικόμενη διεγερση (excitation) από τη δεγμενική κατάσταση (ground state) σε μια διεγερμένη κατάσταση (excited state). Εξίσωση $n=1$

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



κόμβων = $n-1$
mode = κόμβος

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* L^2} := \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$n=1, 2, 3, \dots$

3Δ άπειροβαθό φρέορ

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

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

Δοκιμάζουμε χωριστές γάρφες $\psi(\vec{r}) = X(x) Y(y) Z(z)$

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

μέθοδος
χωρισμένων
μεταβλητών

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

Διαφοδεύε με XYZ \rightarrow

$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 X}{dx^2} \frac{1}{X}$	$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 Y}{dy^2} \frac{1}{Y}$	$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 Z}{dz^2} \frac{1}{Z}$	$= E$
$+ V_1(x)$	$+ V_2(y)$	$+ V_3(z)$	
$\underbrace{\hspace{10em}}_{f_1(x)}$	$\underbrace{\hspace{10em}}_{f_2(y)}$	$\underbrace{\hspace{10em}}_{f_3(z)}$	

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

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

1Δ άπειροβαθό φρέορ

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

1Δ άπειροβαθό φρέορ

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

1Δ άπειροβαθό φρέορ

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

και για $L_x = L_y = L_z = L$

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

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

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

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

Άρα, η ενέργεια του απορροφούμενου φωτονίου, ώστε το ηλεκτρόνιο να ανέβει από τη $\theta\sigma$ στην $1\Delta\sigma$, θα είναι

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

για $L = \frac{a}{2}$

$$h\nu = \frac{6\hbar^2 \pi^2}{m^* a^2}$$

π.χ. NaCl
 $a = 0.565 \text{ nm}$

$$h\nu \approx 12.498 \text{ eV}$$

για $L = a$

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

$m^* \approx 1.13 m_e$

$$h\nu \approx 3.1245 \text{ eV}$$

$$h\nu_{\text{πειρ}} \approx 2.7 \text{ eV}$$

$$\frac{3.1245 - 2.7}{2.7} \approx 0.1572 \approx 0.16$$

16% απόκλιση

$$h\nu_{\text{πειρ}} = 2.7 \text{ eV} \rightsquigarrow \lambda \approx 460 \text{ nm} \text{ υπεριώδες}$$

Όλα αυτά είναι πολύ προσεγγιστικά, δηλαδή

Όμως, το βασικό ποιοτικό συμπέρασμα είναι

$h\nu \propto \frac{1}{a^2}$

$v = \frac{c}{\lambda}$

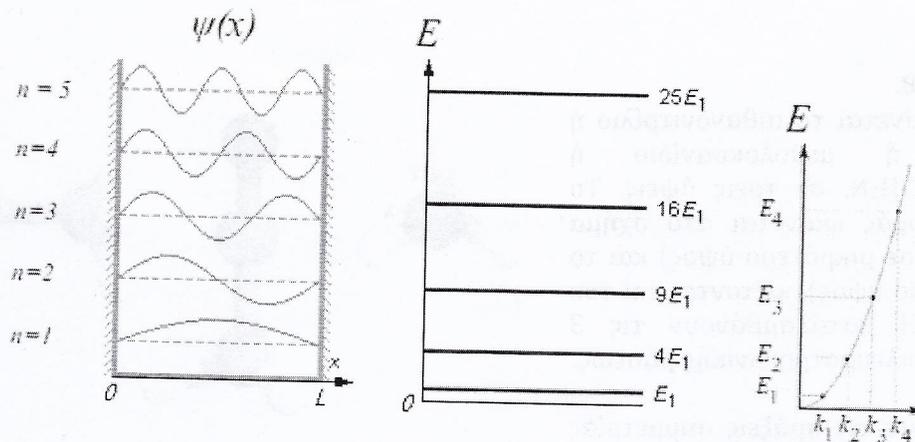
$\lambda \propto a^2$

ή σχέση

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

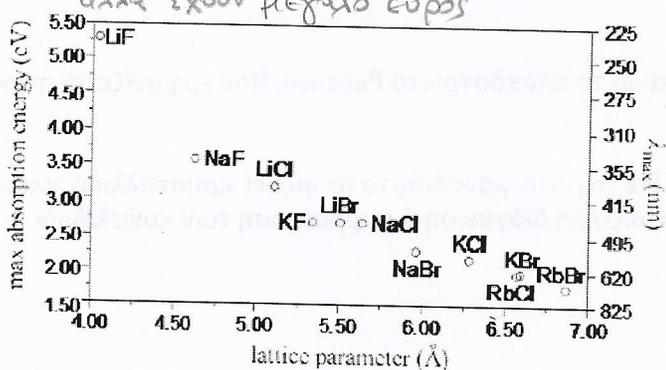
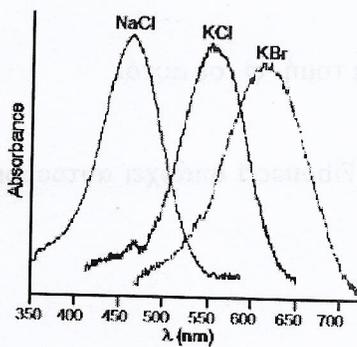
$\lambda \propto (a \text{ σε nm})^{1.772}$

μπορεί να ταιριάζει ικανοποιητικά
όλα τα πειραματικά δεδομένα των αλογονούχων άλκαλιων!



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

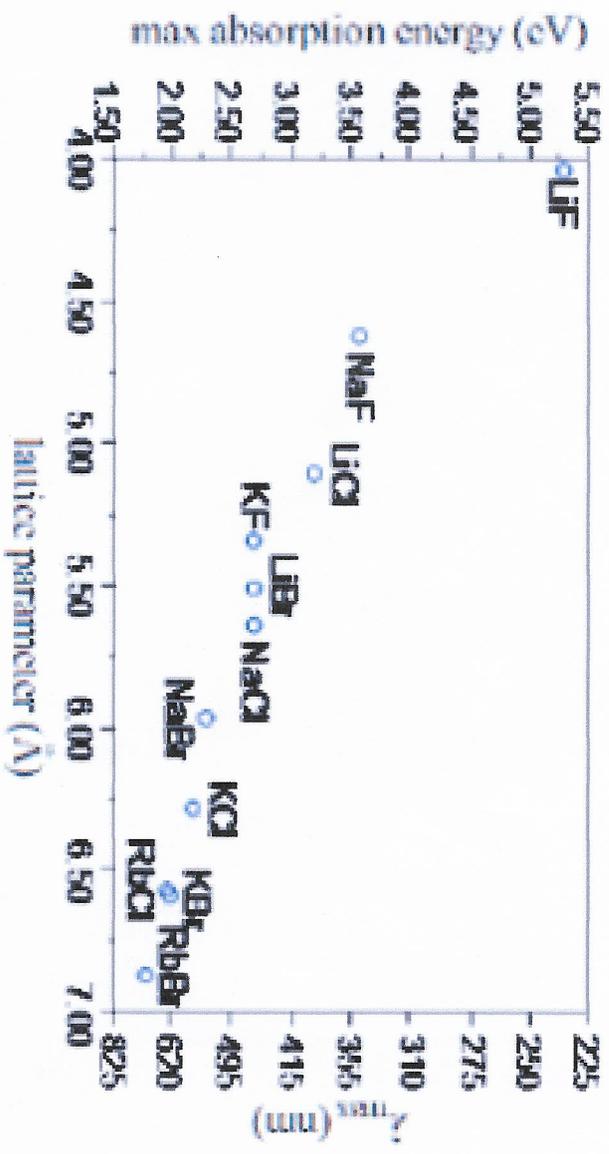
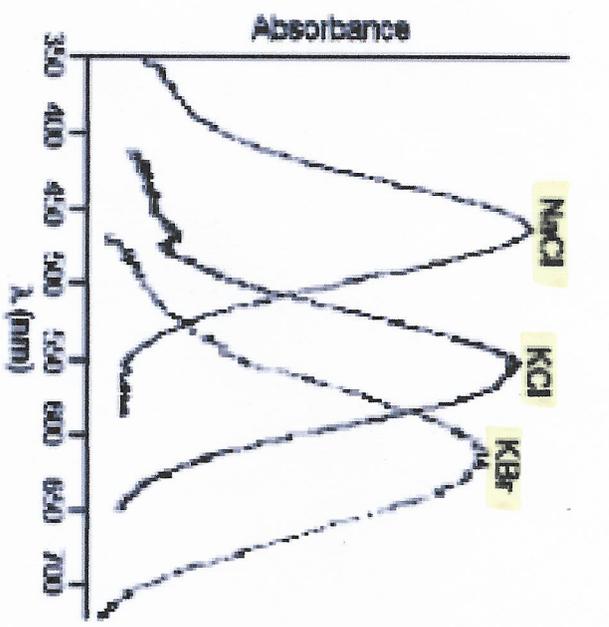
ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ ① $\lambda \propto a^2$ ② τα φάσματα δεν είναι συναρτήσεις δ αλλά έχουν μεγάλο εύρος



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 σε ελαστικές δ , αλλά έχουν μεγάλο ϵ πος



Σχήμα 2.9: (Αριστερά) Φάσματα απορροφάσεως χρωματικών κέντρων, που ελήφθησαν στον αέρα, σε 298 Κ, στο υπεριώδες - ορατό, από κρυστάλλους NaCl, KCl, KBr, που ακτινοβολήθηκαν με τηρήτο Tesla [23]. Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του χώρου που αφήνει η στέλεια, άρα από την τελεγματική παράμετρο ή τελεγματική σταθερά, α. Η κορυφή του φάσματος απορροφάσεως είναι έτσι μετατοπισμένη επειδή $a_{NaCl} < a_{KCl} < a_{KBr}$. (Δεξιά) Εξάρτηση της κορυφής το φάσματος απορροφάσεως από την α σε κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων [23]. Αύξηση της α δημιουργεί μεγαλύτερα κενά όταν λείπει κάποιο ιόν, επομένως ευρύτερο φάσμα 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 γραμμικά δέλτα, αλλά έχουν μεγάλο εύρος.

Η διεύρυνση διακρίνεται σε:
(broadening)

ομογενή διεύρυνση
homogeneous broadening

ανομογενή διεύρυνση
inhomogeneous broadening

Το αίτιο που προκαλεί τη διεύρυνση είναι ίδιο για κάθε απορροφητική-έκπομπή

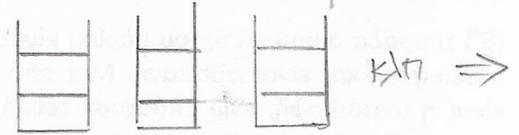
Το αίτιο που προκαλεί τη διεύρυνση είναι διαφορετικό για κάθε απορροφητική-έκπομπή

π.χ. ο χρόνος ζωής της άνω στάθμης
 $\tau \cdot \Delta E \propto h$ στάθμη τροχιακού γειγδίου
ή αβεβαιότητα στην ενέργεια

π.χ. σε στερεό
→ έχουμε μια συλλογή απορροφητικών-έκπομπών
→ το περιβάλλον κάθε απορροφητικής-έκπομπής

$$dW_{εκπ}^{αυθ} = A_{21} dt$$
$$1 = A_{21} \tau$$
$$\tau = \frac{1}{A_{21}}$$

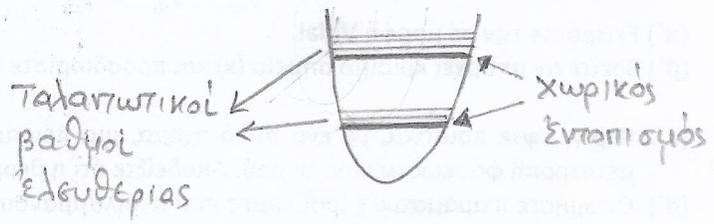
είναι διαφορετικό, δηλαδή τα κванτικά φρέατα δεν είναι ταυτόσημα...



π.χ. σε αραίο αέριο ίδιων ατόμων (χωρίς μεταξύ τους ηλεκτρικά)

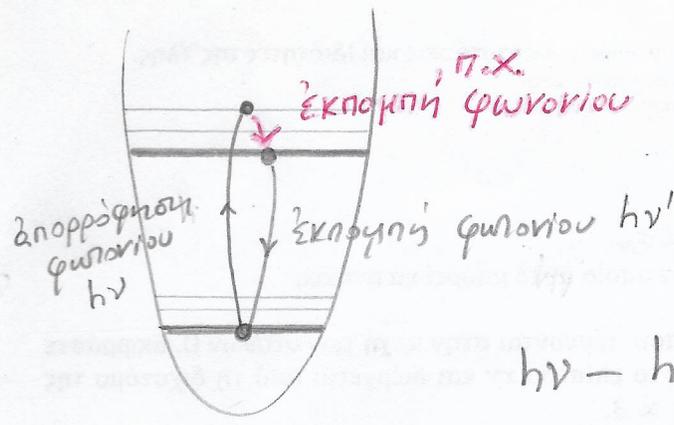
εύρεα φάσματα απορροφήσεως-έκπομπής
ή δομικοί vibrational
π.χ. ταλαντωτικοί βαθμοί ελευθερίας

Ακόμα και περιστροφικοί (rotational) βαθμοί ελευθερίας



ακόμα, επειδή τα κέντρα χρώματος βρίσκονται έτος κάποιου στερεού, υπάρχει πάντοτε όλο το υπόβαθρό του.

Σε άδρες γραμμές...
UV > visible > IR > THz
electronic > vibrational > rotational
UVvis near IR THz



thermalization θερμοποίηση
 ένα ή περισσότερα φωτόνια

$$h\nu - h\nu' = \text{μετατόνιση Stokes (shift)} > 0$$

$$h\nu - h\nu' = \text{μετατόνιση anti-stokes} < 0$$

