الجمهورية العربية السورية

وزارة التعليم العالي

جامعة البعث

كلية العلوم - قسم الفيزياء

تحديد الثوابت الضوئية لمادة صلبة باستخدام علاقات كرامرز – كرونيغ

رسالة لنيل درجة الماجستير في فيزياء المادة الكثيفة

إعداد

كنان انعام ناصر

إشراف

أ.د. رياض العبدالله

لجنة الحكم مؤلفة من السادة

/ رئيساً /	/ عضواً /	/ عضواً /
أ.د. شمس الدين علي	أ.د. نضال شمعون	أ.د. رياض العبدالله

ملخص البحث

في الفصل الأول بيَّنا أهمية علاقات كرامرز– كرونيغ بهدف تحديد الثوابت الضوئية للمواد الصلبة و ذلك من الناحيتين النظرية و العملية، إذ قمنا بتلخيص تطبيقات KKR في هذا الخصوص على النحو:

أولاً: تحديد الجزء الحقيقي لتابع ضوئي ما بدءاً من جزئه التخيلي و العكس بالعكس.

ثانياً: استخدام KKR كمعيار للتحقق من عدم خرق شرط السببية.

في الفصل الثاني بيَّنا كيف يربط تابع الاستجابة بين كلٍّ من الحقل المؤثر و الاستجابة، و ذلك من أجل أي وسط خطي متباين المناحي لا متجانس زمنياً و مكانياً، و من ثم انتقلنا إلى الحالة التي نحن بصدد دراستها و هي من أجل وسط خطي متماثل المناحي (ذو تناظر مكعبي) و متجانس زمنياً (لا متغير نتيجةً للانسحاب الزمني)، ثم تطرقنا للخصائص العامة لتوابع الاستجابة الضوئية التالية:

تابع العزل الكهربائي $\varepsilon(\omega)$، و الناقلية الضوئية $\sigma(\omega)$، و النفاذية المغناطسية $\mu(\omega)$، و الطواعية الكهربائية $\chi(\omega)$، و الطواعية المغناطيسية $\chi_m(\omega)$، و معامل الانعكاس $r(\omega)$. تبين أن جميعها ينبغي أن يحقق شرط السببية البدائية، في حين أن قرينة الانكسار العقدية $N(\omega)$ ليست تابع استجابة ضوئية،

و ينبغي أن تحقق شرط السببية النسبوية كونها ترتبط بانتشار الأمواج الكهرطيسية، كما أكدنا على أن جميع التوابع السابقة يحقق علاقات التناظر، و يأخذ قيمة حقيقية على المحور التخيلي. و كذلك درسنا سلوك التوابع الضوئية السابقة عندما $\omega \to 0$ و عندما $\omega \to \infty$ من أجل كلٍّ من العوازل و النواقل الكهربائية و توصلنا للنتائج الموضحة بالجدول (2.2).

في الفصل الثالث تطرقنا لنموذج لورنتز للعوازل الكهربائية و نموذج درود للمعادن، بهدف التحقق من صلاحية الخصائص العامة التي وردت في الفصل السابق، و اكتفينا بالطواعية الكهربائية $\chi(\omega)$ لكلا النموذجين، حيث برهنا على أن التابع $\chi(\omega)$ وفقاً لنموذج لورنتز هو سببي، وعممنا

هذه النتيجة على كلٍّ من $\sigma(\omega)$ و $\varepsilon(\omega)$ و $N(\omega)$، أما فيما يخص نموذج درود فقد بيَّنا أن التابع $\sigma(\omega)$ هو سببي، في حين أن كلاً من $\chi(\omega)$ و $\varepsilon(\omega)$ و $N(\omega)$ غير سببي، و من ثم تحققنا من أن $\chi(\omega)$ وفقاً لنموذج درود يحقق KKR الخاصة بالنواقل الكهربائية.

في الفصل الرابع بيَّنا الدور الذي يلعبه شرط السببية فيما يخص تحليلية التوابع الفيزيائية، و من ثم قمنا باستنتاج تحويلات هلبرت، و كذلك تطرقنا لنظرية تيتشمارش و برهنا على تكافؤ عباراتها الثلاث. استنتجنا علاقات كرامرز– كرونيغ عامة مؤكدين على أهمية تحقق علاقات التناظر، و تطرقنا لطريقة Hu لاستنتاج KKR، كما ناقشنا المعنى الفيزيائي لـ KKR. تحققنا من أن $\chi(\omega)$ من أجل العوازل الكهربائية هو تحويل سببي و قمنا بوضع KKR له و تأكدنا من أن نموذج لورنتز يحققها. و كذلك قمنا باستنتاج KKR لـ $\chi(\omega)$ خاصة بالنواقل الكهربائية، بعد أن بيَّنا أن $\chi(\omega)$ في هذه الحالة ليس تحويل سببي، كما برهنا على أن $\chi(\omega) - i\frac{\sigma_{DC}}{\omega}$ هو تحويل سببي من أجل النواقل الكهربائية و قمنا بوضع KKR له و من ثم برهنا على أن نموذج درود للمعادن يحققها. برهنا على أن كلاً من $\varepsilon(\omega) - 1$ من أجل العوازل الكهربائية و $\varepsilon(\omega) - 1 - i\frac{4\pi\sigma_{DC}}{\omega}$ من أجل النواقل الكهربائية هو تحويل سببي و قمنا بوضع KKR لكلٍّ منها، كما برهنا على أن KKR لقرينة الانكسار العقدية و كذلك KKR للناقلية الضوئية صالحة لكلٍّ من العوازل و النواقل الكهربائية.

في الفصل الخامس بيَّنا أهمية معرفة طور معامل الانعكاس في حالة الورود الناظمي و ذلك لتحديد الثوابت الضوئية، و كذلك قمنا بالبرهان على أن $r(\omega)$ هو تحويل سببي من أجل العوازل و النواقل الكهربائية، و قمنا بوضع علاقات كرامرز– كرونيغ لـ $r(\omega)$ تعتبر حالة خاصة من العلاقات العامة التي استنتجها كلٌّ من Smith & Manogue للتابع $[r(\omega)]^m$ حيث m عدد صحيح موجب، و التي تبيَّن أن لها أهمية كبيرة في التحقق من صلاحية القياسات الطيفية التي تتم بمطيافية Time domain THz. قمنا بمناقشة مسألة استرداد طور تابع الاستجابة $G(\omega)$ بدءاً من طويلته، و بيَّنا متى ينبغي استخدام جداء بلاشكه $B(\omega)$ لتصحيح الطور المحسوب بـ KKR، موضحين كيف تخلص Toll من مشكلة التباعد اللوغارثمي عندما $|\omega| \to \infty$، و من ثم تحققنا من عدم وجود أصفار ضمن النصف العلوي من المستوي العقدي لمعامل الانعكاس في حالة الورود الناظمي، مستبعدين بالتالي الحاجة لاستخدام جداء بلاشكه، و من ثم استنتجنا علاقات كرامرز–

كرونيغ التي تربط بين طور و طويلة معامل الانعكاس في حالة الورود الناظمي و ذلك بعدة طرق مختلفة.

في الفصل السادس بيَّنا أهمية استخدام KKR من الناحية العملية لتحديد الثوابت الضوئية، و اتخذنا من مسألة استرداد طور معامل الانعكاس في حالة الورود الناظمي كمثال تطبيقي، حيث قمنا بوضع خوارزمية حل KKR عددياً، تتضمن كيفية التخلص من القيمة الأساسية لكوشي، و كيفية استكمال طيف الانعكاسية نحو الترددات المرتفعة، و من ثم قمنا بتطبيقها على طيف انعكاسية صنعي لمادة عازلة افتراضية و ذلك ضمن المجال $eV(30-0)$ و بخطوة مقدارها $eV\ (0.01)$، حيث تمت نمذجته وفقاً لنموذج لورنتز للهزازات المتعددة باستخدام 32 بارامتر، تم اختيارها بحرص شديد كي تكون الأطياف الصنعية تحاكي الواقع أكثر ما يمكن. ناقشنا كيفية التوصل لأفضل النتائج المحسوبة بـ KKR لكلٍّ من طور معامل الانعكاس و قرينة الانكسار العقدية و ذلك مقارنةً مع نظيراتها الناتجة عن النموذج.

في الفصل السابع قمنا بتطبيق الخوارزمية الموضحة في الفصل السادس على طيف الانعكاسية لمعدن الألمنيوم و المقاس ضمن المجال $eV(30-0.04)$، و ذلك بهدف تحديد الثوابت الضوئية (قرينة الانكسار العقدية و تابع العزل الكهربائي و تابعي الفقد الطاقي الحجمي و السطحي) لمعدن الألمنيوم ضمن المجال المعني، و ناقشنا ما يترتب عليها من نتائج. استخدمنا قواعد الجمع sum rules لتحديد العدد الفعال من الكترونات معدن الألمنيوم المساهِمة بالخصائص الضوئية ضمن المجال المدروس.

Summary

In Chapter 1, we discuss the importance of KKR in determining the optical constants of solids from theoretical and experimental aspects; we summarize the applications of KKR into two categories:

- Determining the real part of an optical function from its imaginary part and vice versa
- Utilizing KKR as a criterion to verify that there is no violation of a causality condition

In Chapter 2, we discuss how the response function connects between response and effect for spatially and temporally inhomogeneous, anisotropic, linear medium. We focus on the case we intend to study, which is for temporally homogeneous, isotropic, linear medium. We also discuss the general properties of the following optical response functions: dielectric function $\varepsilon(\omega)$, optical conductivity $\sigma(\omega)$, magnetic permeability $\mu(\omega)$, electric susceptibility $\chi(\omega)$, magnetic susceptibility $\chi_m(\omega)$, and reflectivity coefficient $r(\omega)$. All of the preceding response functions hold primitive causality condition, whereas the complex refractive index $N(\omega)$ is not an optical response function, and should hold relativistic causality condition since it relates to the propagation of electromagnetic waves. We emphasize that all the preceding functions hold the symmetry relations, and they are real-valued functions on the imaginary axes. We also study the asymptotic behaviour of the preceding functions when $\omega \to 0$ and $\omega \to \infty$ for each of dielectrics and conductors, and we summarize the results in table (2.2).

In Chapter 3, we discuss Lorentz model for dielectrics and Drude model for metals. Depending on $\chi(\omega)$ of both models, we verify the validity of the general properties discussed in the preceding chapter. In addition, we prove that Lorentz model is causal for $\chi(\omega)$, $N(\omega)$, $\varepsilon(\omega)$, and $\sigma(\omega)$, whereas Drude model is causal just for $\sigma(\omega)$, but non-causal for $\chi(\omega)$, $N(\omega)$, and $\varepsilon(\omega)$.We also verify that $\chi(\omega)$, according to Drude model, satisfies KKR for conductors.

In chapter 4, we discuss the role the causality condition plays with respect to analyticity of physical functions. We derive Hilbert transforms and we discuss Titchmarsh's theorem with proving the equivalency of its three statements. Depending on symmetry relations, we derive general Kramers-Kronig Relations (KKR) from Hilbert transforms, and we also obtain KKR by Hu's method. In addition, we discuss the physical meaning of KKR. We prove that $\chi(\omega)$ for dielectrics is a causal transform; then we verify that Lorentz model holds KKR. We derive KKR for conductors, after proving that $\chi(\omega)$ in this specific case is not a causal transform. Moreover, we prove that the function $\chi(\omega) - i\frac{\sigma_{DC}}{\omega}$ is a causal transform for conductors, and Drude model holds KKR for $\chi(\omega) - i\frac{\sigma_{DC}}{\omega}$. We prove that $\varepsilon(\omega) - 1$ and $\varepsilon(\omega) - 1 - i\frac{4\pi\sigma_{DC}}{\omega}$ are causal transforms for dielectrics and conductors respectively. We also demonstrate that KKR, for both complex refractive index and optical conductivity are valid for dielectrics and conductors.

In Chapter 5, we discuss the importance of calculating the phase of reflectivity coefficient, at normal incidence, in determining the optical constants. Moreover, we prove that $r(\omega)$ is a causal transform for both dielectrics and conductors. We derive KKR for $r(\omega)$ which are considered a special case of Smith & Manogue relations for $[r(\omega)]^m$, where m is a positive integer. These relations are very important in testing the validity of THz reflection spectra, which are measured by Time Domain THz Spectroscopy. We also discuss the phase retrieval problem, explaining when Blaschke product should be used to correct the phase calculated by KKR, and how Toll avoids the logarithmic divergence problem when $|\omega| \to \infty$. In addition, we verify that the reflectivity coefficient, at normal incidence, has no zeros in the upper half of complex plane; therefore, it does not require the use of Blaschke product. Finally, using different methods, we derive KKR connecting the phase and modulus of reflectivity coefficient at normal incidence.

In chapter 6, we illustrate the importance of utilizing KKR in determining the optical constants experimentally, and we write an algorithm to solve KKR numerically. This algorithm is applied to the phase retrieval problem of reflectivity coefficient at normal incidence; it includes how the Cauchy principle value is avoided, and the extrapolation of the reflectance spectrum toward high frequencies. Moreover, we apply the algorithm using synthesized reflectance spectrum of dielectric material, over energy range

$(0-30)eV$ at $(0.01)eV$ intervals. The synthesized reflectance spectrum is calculated by multiple oscillators Lorentz model, where we use 32 parameters, which are chosen very carefully, to make the spectrum more realistic. In addition, we discuss how, through using KKR, we can obtain the best results of both the phase of reflectivity coefficient and complex refractive index, in comparison to those calculated by the model.

In chapter 7, we apply the algorithm described in the previous chapter using reflectance spectrum of metallic aluminum measured over the energy range $(0.04-30)eV$.This enables us to determine the optical constants of metallic aluminum (complex refractive index, dielectric function, bulk and surface energy loss functions) in the considered energy range. In addition, we use the sum rules to determine the effective number of electrons of aluminum atom contributing to optical properties over the studied energy range.