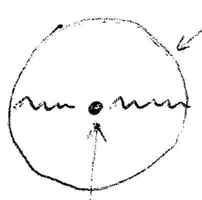
MODELY PRE DIELEKTR. FUNKCIU $\varepsilon_R(\omega)$

(A) Model polarizovateľných atómov



$$M_j(\ddot{x}_j + \Gamma_j \dot{x}_j + \omega_j^2 x_j) = q_j E e^{-i\omega t}$$

$$x_j = x_{j0} e^{-i\omega t}$$

$$x_{j0} = \frac{q_j E}{M_j} \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j \omega}$$

koncentrácia atómov typu j

$$\left.\begin{aligned} P_j &= \frac{n_j q_j^2}{M_j} \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j \omega} E e^{-i\omega t} \\ P &= \sum_j P_j \overset{!}{=} \varepsilon_0 \chi E e^{-i\omega t} \end{aligned}\right\} \text{ porovnaj:}$$

$$\boxed{\chi(\omega) = \sum_j \frac{\Omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega(\omega + i\Gamma_j)}}$$

$$\boxed{\Omega_j^2 = \frac{n_j q_j^2}{M_j \varepsilon_0}}$$

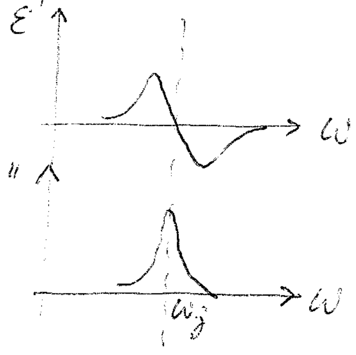
mód $j = 0$: $\omega_j = 0$ (voľné elektróny)

$$\Omega_0^2 = \frac{n e^2}{m \varepsilon_0} \equiv \omega_p^2$$

$$\varepsilon_R = 1 + \chi$$

$$\boxed{\varepsilon_R(\omega) = 1 - \underbrace{\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + \frac{i}{\tau})}}_{\text{voľné elektróny}} + \underbrace{\sum_{j \neq 0} \frac{\Omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega(\omega + i\Gamma_j)}}_{\text{polarizovateľné atómy}}}$$

Príspevok 1 módu:



$\hbar\omega_j \sim 1\,eV$

(typické energie)

$\omega \ll \omega_j$:

toto označ. použijeme neskôr

$$\boxed{\varepsilon_R(\omega = 0) = \varepsilon_\infty = 1 + \sum_j \frac{\Omega_j^2}{\omega_j^2}}$$

(B) Iónové kryštály

2 podmriežky s vektormi posunutia $\vec{u}_+$, $\vec{u}_-$

$$\boxed{\begin{aligned} M_+ \ddot{\vec{u}}_+ &= -K(\vec{u}_+ - \vec{u}_-) + q\vec{E}_{lok} \\ M_- \ddot{\vec{u}}_- &= -K(\vec{u}_- - \vec{u}_+) - q\vec{E}_{lok} \end{aligned}}$$

krátkodosahové sily (chem. väzba, ...)

ďalekodosahová elektrostatika

definujme $\vec{u} = \vec{u}_+ - \vec{u}_-$, $\frac{1}{M} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-}$

$$\rightarrow \boxed{\ddot{\vec{u}} = -\frac{K}{M}\vec{u} + \frac{q}{M}\vec{E}_{lok}}$$

$\vec{P} = nq\vec{u}$ $\rightarrow$ $\boxed{\ddot{\vec{P}} = -\omega_T^2 \vec{P} + \varepsilon_0 \Omega^2 \vec{E}_{lok}}$

n – konc. dipólov

$\omega_T = \sqrt{\frac{K}{M}} \sim 100$ meV

$\Omega^2 = \frac{nq^2}{M\varepsilon_0}$

na frekvencii ω:

$$\boxed{\vec{P} = \frac{\varepsilon_0 \Omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}\vec{E}_{lok}} \rightarrow \boxed{\varepsilon_R(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\Omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}}$$

ε_∞ rôzne od 1 kvôli elektrónovým polarizač. procesom

možno písať:

$$\boxed{\varepsilon_R(\omega) = \frac{\varepsilon_s \omega_T^2 - \varepsilon_\infty \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}}$$

- longitudinálny mód:

$\varepsilon_R(\omega_L) = 0 \rightarrow \boxed{\omega_L^2 = \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_\infty}\omega_T^2}$ (Lyddane, Sachs, Teller)

keďže $\varepsilon_s = \varepsilon_\infty + \frac{\Omega^2}{\omega_T^2} \rightarrow \varepsilon_s > \varepsilon_\infty \rightarrow \boxed{\omega_L > \omega_T}$

- transverzálne módy : $\omega = \dfrac{cq}{\sqrt{\varepsilon_R(\omega)}}$

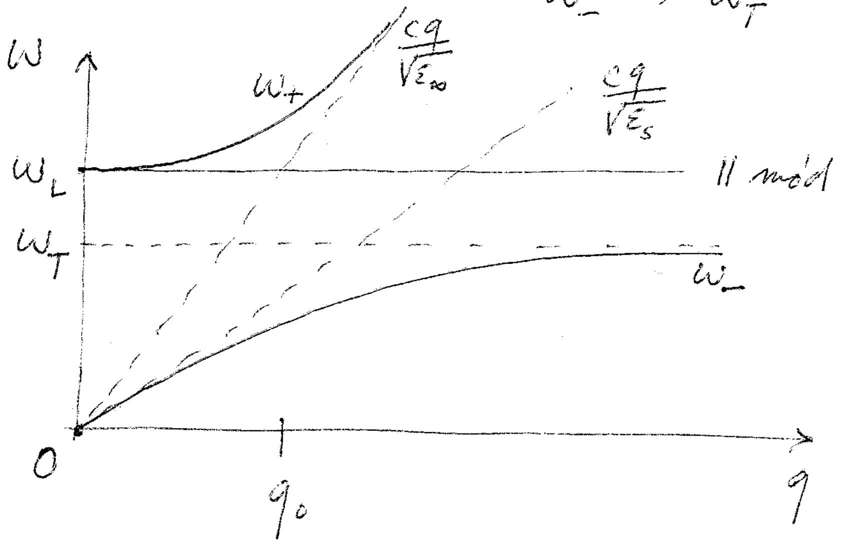
$$\boxed{c^2 q^2 = \varepsilon_\infty \omega^2 \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}}$$

Riešenia : $q \to 0$: $\omega_+ \to \omega_L$

$\omega_- \to \dfrac{cq}{\sqrt{\varepsilon_s}}$

$q \to \infty$: $\omega_+ \to \dfrac{cq}{\sqrt{\varepsilon_\infty}}$

$\omega_- \to \omega_T$



odhad q_0 : $cq_0 \sim 50\ meV$ (fonónová energia)

$\to q_0 \sim 300\ cm^{-1}$

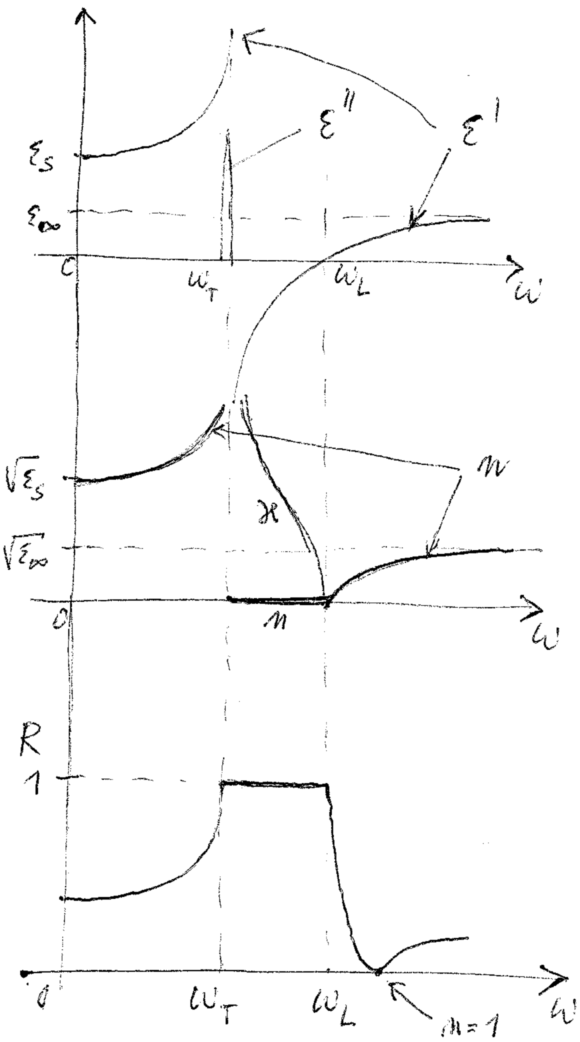
$\boxed{\text{vlna polarizácie + fotón = polaritón}}$

model :
$$\varepsilon_R'(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$$

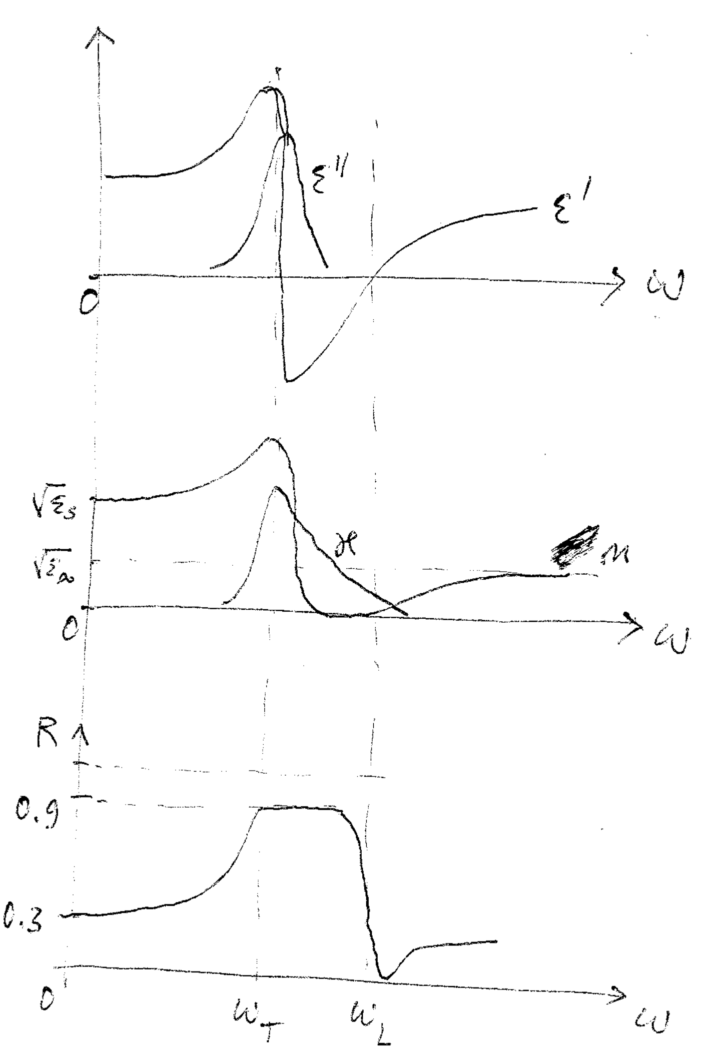
$$\varepsilon_R''(\omega) = \frac{\pi}{2} \varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T} \left[\delta(\omega - \omega_T) - \delta(\omega + \omega_T)\right]$$

$$\tilde{n}(\omega) = \sqrt{\varepsilon_R(\omega)} = n + i\kappa$$

TEÓRIA



EXPERIMENT (CdS – viď Kittel)



$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + \varkappa^2}{(n+1)^2 + \varkappa^2}$$

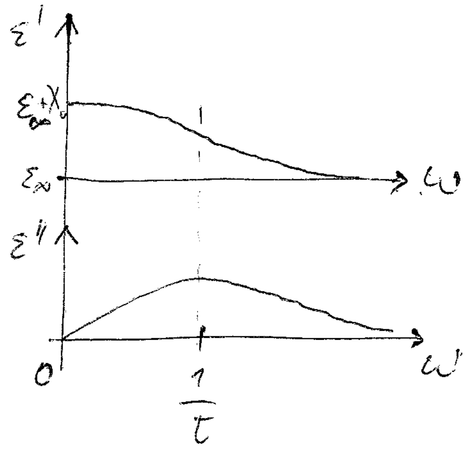
(C) Orientačný mechanizmus : element. dipóly existujú už pri $\vec{E} = 0$

predpoklad 1: $\vec{P}_0(t) = \varepsilon_0 \chi_0 \vec{E}(t)$ je rovnovážna polarizácia príslušná k poľu $\vec{E}(t)$

predpoklad 2: $\dot{\vec{P}} = -\frac{1}{\tau}(\vec{P} - \vec{P}_0)$ dynamika je dominovaná relaxačnými procesmi

$$\longrightarrow \quad \vec{P}(t) = \frac{\vec{P}_0(t)}{1 - i\omega\tau}$$

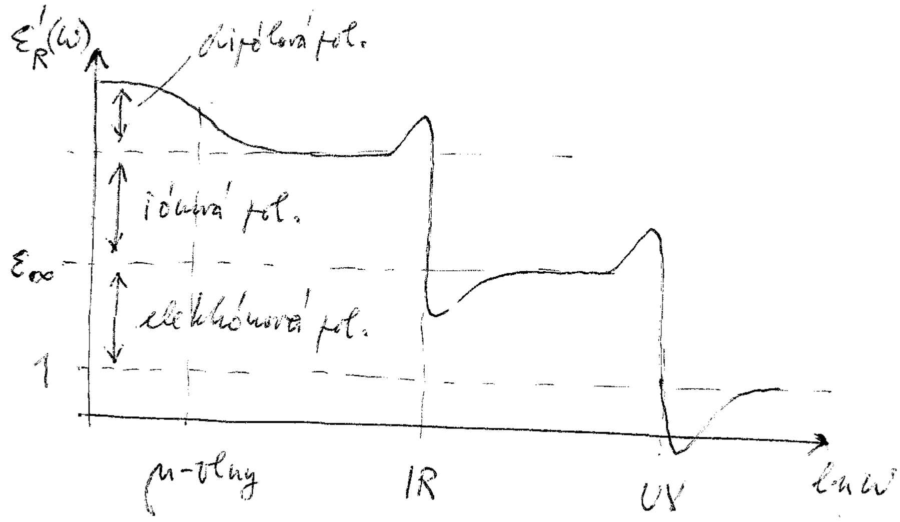
$$\boxed{\varepsilon_R(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\chi_0}{1 - i\omega\tau}}$$



$$\varepsilon_R' = \varepsilon_\infty + \frac{\chi_0}{1 + \omega^2\tau^2}$$

$$\varepsilon_R'' = \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}\chi_0$$

D) Zhrnutie

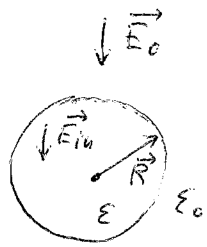


E) Formula Clausius - Mossotti

otázka: ak poznáme polarizovateľnosť χ_0 izolovaného objektu, aká bude polarizovateľnosť χ súboru objektov? (iba polia budú navzájom pôsobiť!)

- makroskopická elektrodynamika

uvažujme guľovú vzorku (permitivita ε) vo vonk. poli $\vec{E}_0$



rovnice poľa:

$$\nabla \times \vec{E} = 0$$
$$\nabla \cdot \vec{E} = 0$$

hranič. podm.:

$$E_{t1} = E_{t2}$$
$$\varepsilon E_{n1} = \varepsilon E_{n2}$$

Riešenie: 1) vnútri $\vec{E}_{in} = K \vec{E}_0$

2) vonku $\vec{E}_{out} = \vec{E}_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{3\vec{r}(\vec{d}\cdot\vec{r}) - r^2\vec{d}}{r^5}$

pole dipólu $\vec{d} = \frac{4}{3}\pi R^3 \vec{P}$

Platí:

$$\varepsilon_0 \vec{E}_{out}\cdot\vec{r}\Big|_R = \varepsilon_0\left(\vec{E}_0 + \frac{2\vec{P}}{3\varepsilon_0}\right)\cdot\vec{R} \overset{!}{=} K\vec{E}_0\cdot\vec{R}\,\varepsilon$$

$$\vec{E}_{out}\times\vec{r}\Big|_R = \left(\vec{E}_0 - \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}\right)\times\vec{R} \overset{!}{=} K\vec{E}_0\times\vec{R}$$

$$\longrightarrow \boxed{K = \frac{3\varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0}}$$

$$\boxed{\vec{E}_0 = \vec{E}_{in} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}} \quad (1) \qquad \longleftarrow \qquad \boxed{\vec{P} = 3\varepsilon_0 \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0}\vec{E}_0}$$

Teda vnútri vzorky existuje makroskopicky homogénne pole $\vec{E}_{in}$ a makroskopicky homogénne pole $\vec{P}$. → Stačí študovať okolie v ľubovoľnom bode a všetky ostatné sú rovnaké!

Nech kryštál = sada polarizovateľných objektov v bodoch kubickej mriežky → dipóly $\vec{p}_i$

Študujme polarizovateľný objekt v strede makroskopickej gule. Ten žije v lokálnom poli

$$\vec{E}_{lok} = \vec{E}_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \underbrace{\sum_{R\neq 0}}_{\text{suma cez ostatné dipóly. všetky majú } \vec{p}} \frac{3\vec{R}(\vec{p}\cdot\vec{R}) - R^2\vec{p}}{R^5}$$

Suma vypadne. Naozaj, napr. x-ová komponenta:

$$\sum_R \frac{3x(xp_x + yp_y + zp_z) - (x^2+y^2+z^2)p_x}{(x^2+y^2+z^2)^{5/2}} = (*)$$

Sumy $\sum_R \frac{xy}{R^5}$, $\sum_R \frac{xz}{R^5}$ vypadnú, lebo ku každému bodu (x,y,z) existuje $(-x,y,z)$

Preto $(*) = \sum_R \frac{2x^2-y^2-z^2}{R^5} p_x = 0$, lebo $\sum_R \frac{x^2}{R^5} = \sum_R \frac{y^2}{R^5} = \sum_R \frac{z^2}{R^5}$

Preto $$\boxed{\vec{E}_{lok} = \vec{E}_0 = \vec{E}_{in} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}} \quad (2)$$ (viď (1) zo str. 5)

Mikroskopická polarizovateľnosť:

$\vec{p} = \varepsilon_0 \alpha \vec{E}_{lok}$ ⟶ $\vec{P} = n\vec{p}$ $\quad n$ = koncentrácia

$$\boxed{\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_0 \vec{E}_{lok}} \quad (3) \qquad \chi_0 = n\alpha$$

Z rovnice (?,3) máme:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_0 \left(\vec{E}_{in} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0} \right) \longrightarrow \boxed{\vec{P} = \varepsilon_0 \frac{\chi_0}{1 - \frac{\chi_0}{3}} \vec{E}_{in}}$$

Alebo $\boxed{\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E}_{in}}$ kde $\boxed{\chi = \dfrac{\chi_0}{1 - \frac{1}{3}\chi_0}}$ Clausius-Mossotti

χ_0 = odozva na lokálne pole

χ = odozva na výsledné makroskopické pole

Alternatívna forma: $\boxed{\dfrac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} = \dfrac{\chi_0}{3}}$