

4. Optické vlastnosti prostředí

4.1. Polarizovatelnost prostředí

4.2. Lorentzův model

4.3. Drudeho model

4. Optické vlastnosti prostředí

Předpokládáme izotropní, absorbující prostředí. Smyslem této kapitoly je spojit dosavadní představu spojitého prostředí s jeho mikroskopickou strukturou. Omezíme se na pevné látky. Přesný popis mikroskopického prostředí a jeho optického chování patří do kvantové fyziky, která je v tomto směru velmi úspěšná. Zde se pokusíme o popis pomocí klasické fyziky, který v mnoha ohledech je užitečný, někdy dokonce postačující a kupodivu v řadě případů se docela dobře blíží kvantovému popisu.

4.1. Polarizovatelnost prostředí

Jako vhodný model pevné látky zvolíme soubor molekul ve stálých rovnovážných polohách. Molekula může mít svůj vlastní dipólový moment

$$\mathbf{p}_i = q\mathbf{r} \quad (4.1.1)$$

Kde q celkový náboj a \mathbf{r} je výchylka těžišť kladných a záporných nábojů. Dále pro jednoduchost budeme předpokládat molekuly s nulovým vlastním dipólovým momentem. Podobně má každá molekula indukovaný dipólový moment vlivem elektrického pole \mathbf{E}

$$\mathbf{p} = q\mathbf{r} = \varepsilon_0 \alpha \mathcal{E} \quad (4.1.2)$$

kde α je polarizovatelnost molekuly a \mathbf{E} v místě molekuly, tzv. lokální pole.

Pozn.: Elektrické pole se skládá z vnějšího pole a pole od sousedních molekul \mathbf{E}_m . Výpočet tohoto pole \mathbf{E}_m není snadný a to zvláště v případě molekul s vlastním dipólovým momentem a složitou strukturou pevné látky. V našem případě, často oprávněně, toto pole zanedbáme.

Navíc i kvantový model pracuje s představou delokalizovaných částic (např. elektronů) v celém objemu krystalu a pak pojem lokálního pole ztrácí význam.

Polarizace prostředí je definována jako

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{p}_i \quad (4.1.3)$$

a pro látku složenou ze stejných molekul

$$\mathbf{P} = n_0 \mathbf{p} \quad (4.1.4)$$

kde V je objem a n_0 koncentrace molekul. Po dosazení z (4.1.2) dostaneme

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 n_0 \alpha \mathcal{E} = \varepsilon_0 \chi \mathcal{E} \quad (4.1.5)$$

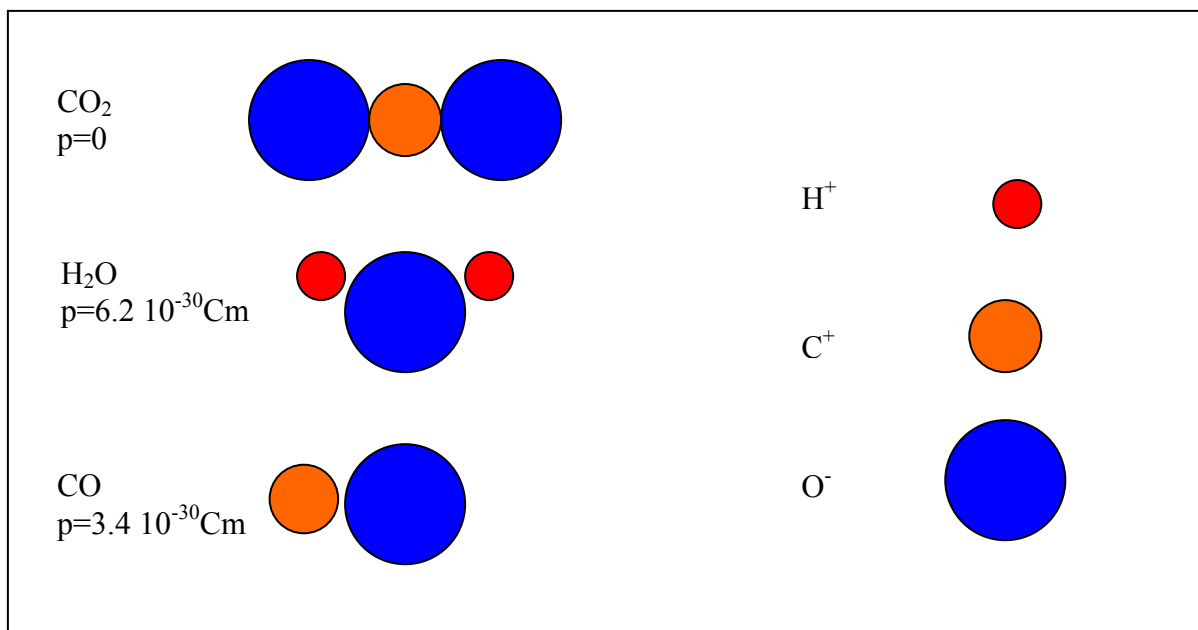
kde $\chi = n_0 \alpha$ je susceptibilita.

Pak pro elektrickou indukci dostaneme

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (4.1.6)$$

A po dosazení z (4.1.5) a pro $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathcal{E}$

$$\varepsilon = 1 + \chi \quad (4.1.7)$$



Obr. 4.1.1 Schematická představa stavby molekul s různou symetrií.

4.2. Lorentzův model

V tomto případě si představujeme atom jako klasický oscilátor, kde elektron kmitá kolem relativně nepohyblivého jádra. Přitažlivá síla je úměrná výchylce a tlumení rychlosti elektronu. Tato síla je určena vnějším elektrickým a magnetickým polem. K této představě je dobré si uvědomit, že hmotnost jader je mnohem větší než hmotnost elektronu a tedy odezva na vnější periodické pole je mnohem pomalejší pro jádra ($\omega \approx 10^{10}$ Hz) než pro elektrony ($\omega = 10^{15}$ Hz).

Pohybová rovnice elektronu v obvyklém tvaru (A) je:

$$m\ddot{\mathbf{r}} + m\Gamma\dot{\mathbf{r}} + m\omega_0^2\mathbf{r} = \mathbf{F}_{\text{ext}} \quad (4.2.1)$$

kde

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = -e\mathbf{E} - e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4.2.2)$$

Magnetická složka je mnohem menší než elektrická, pak

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} \approx -e\mathbf{E} = -e\mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} \quad (4.2.3)$$

Vnější síla je určena pouze elektrickou složkou dopadající vlny o frekvenci ω . Řešení pohybové rovnice předpokládáme ve tvaru:

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t} \quad (4.2.4)$$

Po dosazení do (4.2.1) dostaneme

$$\mathbf{r} = -\frac{e}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} \quad (4.2.5)$$

a ze vztahu (4.1.2)

$$\alpha = \frac{e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (4.2.6)$$

nebo

$$\chi = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (4.2.7)$$

respektive

$$\varepsilon = 1 + \chi = 1 + \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (4.2.8)$$

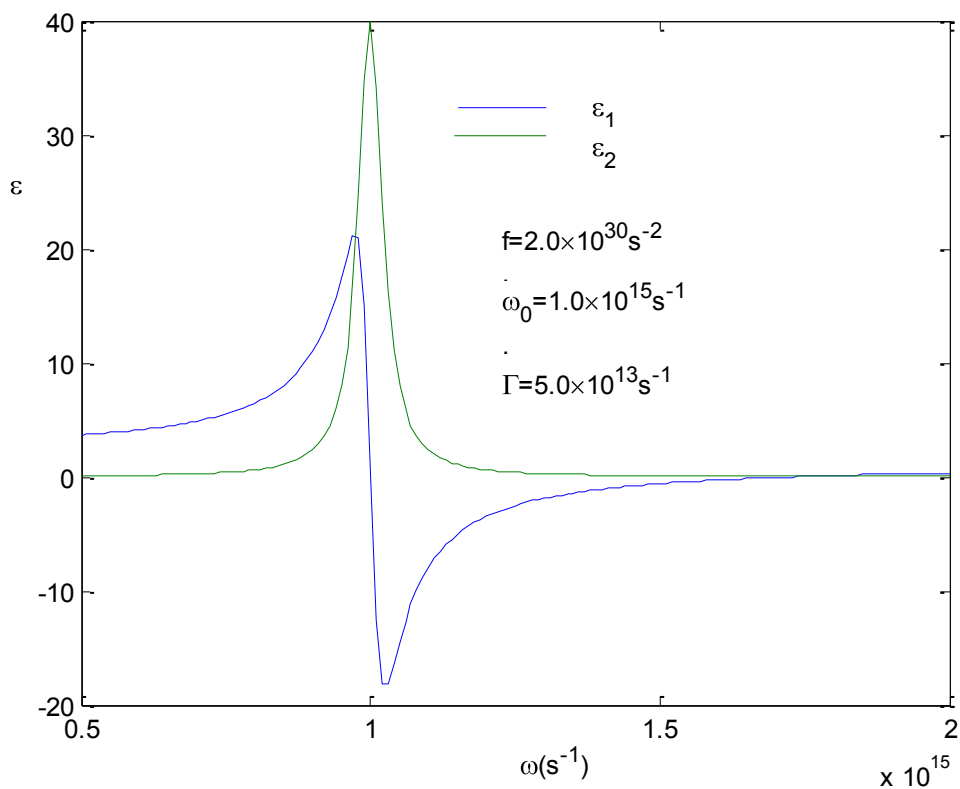
a po jednoduché úpravě

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 1 + f \frac{\omega_0 - \omega}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega^2 \Gamma^2} + f \frac{\omega^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega^2 \Gamma^2} \quad (4.2.9)$$

kde jsme označili tzv. sílu oscilátoru

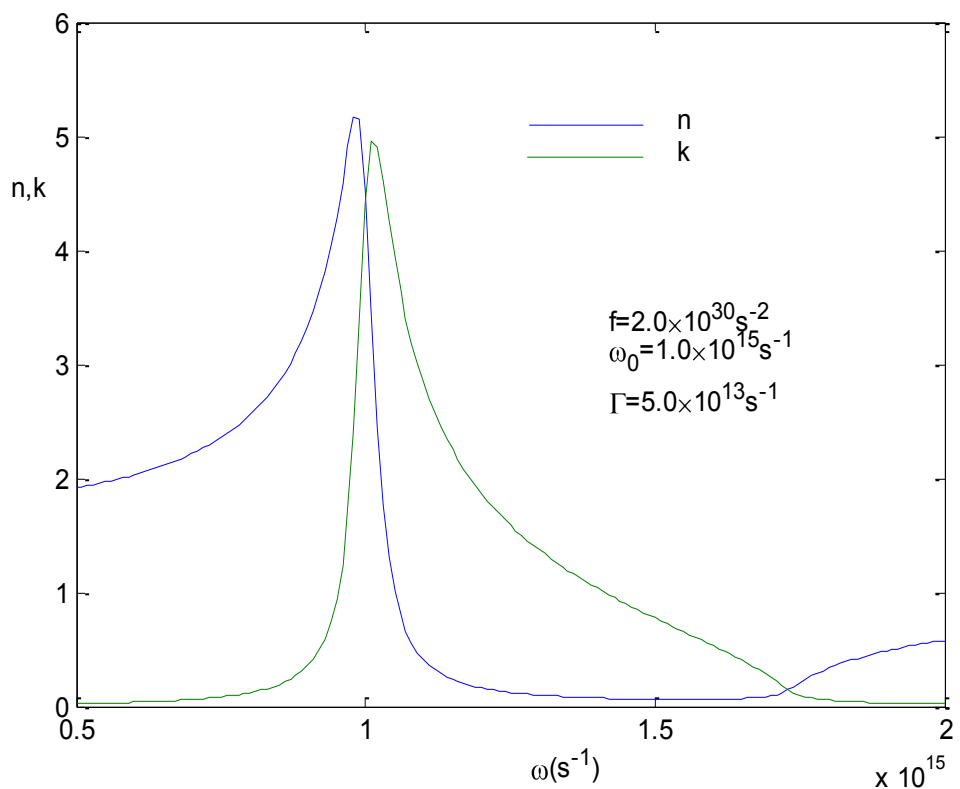
$$f = \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m} \quad (4.2.10)$$

Pak je možné přejít jednoduše k funkcím n a k , respektive vypočítat odrazivost R .

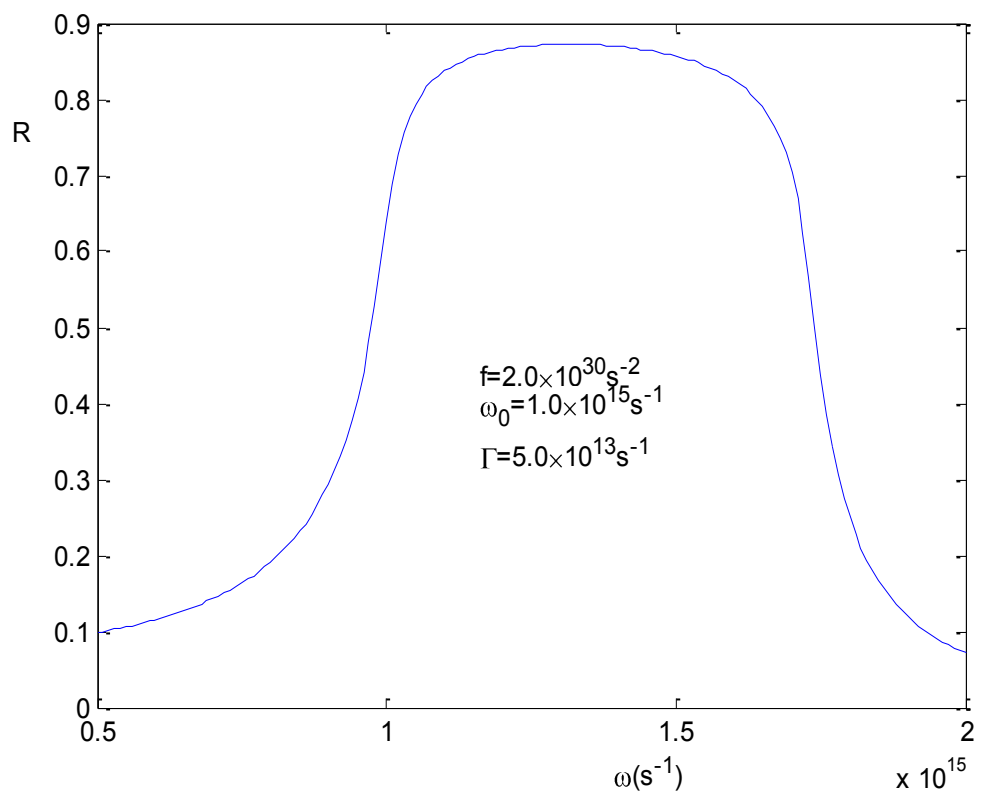


Obr. 4.2.1 Závislost permitivity na frekvenci pro zvolené parametry

$$f = 2.10^{30} \text{ s}^{-2}, \omega_0 = 1.10^{15} \text{ s}^{-1}, \Gamma = 5.10^{13} \text{ s}^{-1}$$



Obr. 4.2.2 Závislost optických konstant na frekvenci (parametry jako v obr.4.2.1).



Obr. 4.2.3 Závislost odrazivosti na frekvenci (parametry jako v obr.4.2.1).

Vztahy pro optické konstanty splňují dokonale KK vztahy a jsou dobrou ilustrací jejich vzájemné závislosti. Je zřejmé, že poloha maxima funkce ϵ_2 určuje vlastní frekvenci ω_0 , šířka této funkce určuje parametr Γ a f velikost.

Prakticky se postupuje tak, že naměřené hodnoty porovnáme s modelem a určíme vlastní frekvenci oscilátoru ω_0 , tlumení Γ , případně f . V reálném případě se jedná obvykle o více druhů molekul a tedy o superpozici podobných křivek s různými parametry.

Pozn.: v kvantově mechanickém popisu odpovídá vlastní frekvence ω_0 energii přechodu $h\nu_0$ a tlumení Γ době trvání excitovaných stavů $\tau = \Gamma^{-1}$.

4.3. Drudeho model

Je speciálním případem obecnějšího Lorenzova modelu případ, kdy látka obsahuje velké množství volných respektive slabě vázaných elektronů. To odpovídá skutečnosti $\omega_0 \rightarrow 0$, pak pohybová rovnice má tvar

$$m\ddot{\mathbf{r}} + n\Gamma\dot{\mathbf{r}} = -nE_0e^{i\omega t} \quad (4.3.1)$$

a pro permitivitu dostaneme

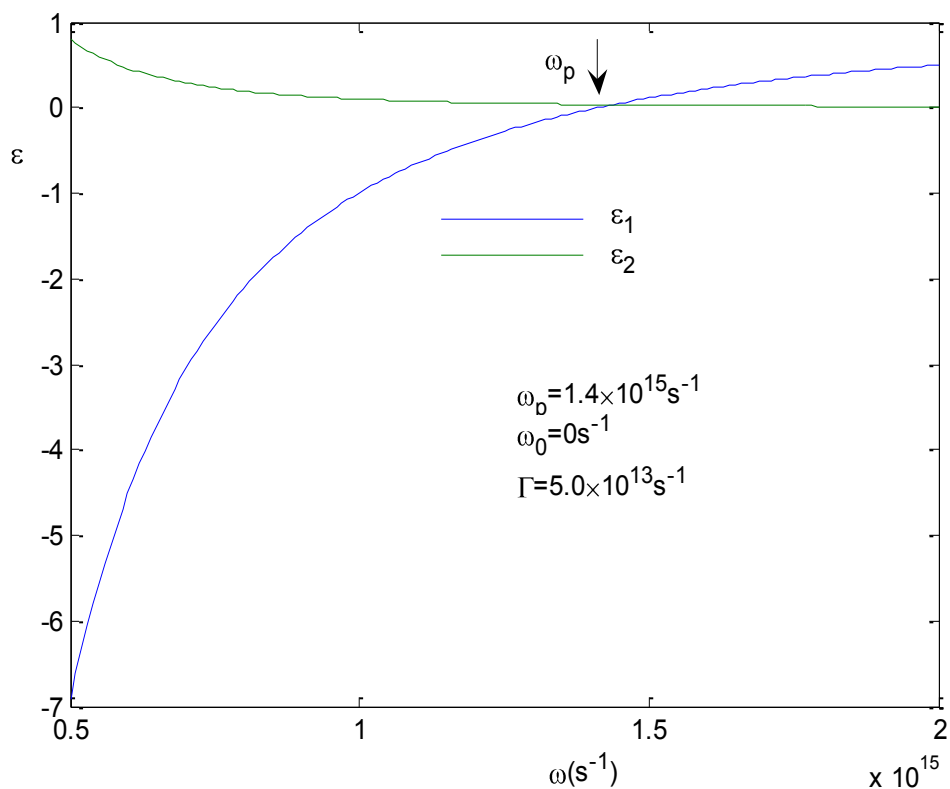
$$\epsilon = 1 - \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega(\omega - \Gamma)} \quad (4.3.2)$$

nebo

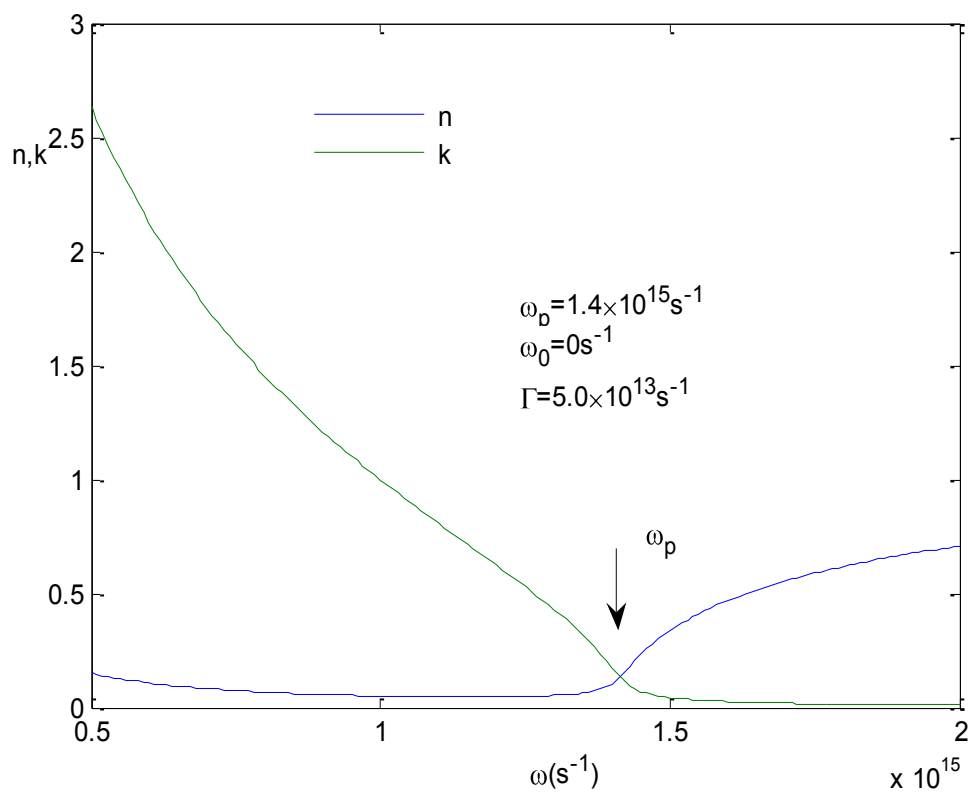
$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = 1 - \omega_p^2 \frac{1}{\omega(\omega + \Gamma)} + i\omega_p^2 \frac{\Gamma}{\omega(\omega + \Gamma)} \quad (4.3.2)$$

kde místo f jsme použili označení ω_p , ω_p je tzv. plazmová frekvence (kolektivní kmity volných elektronů)

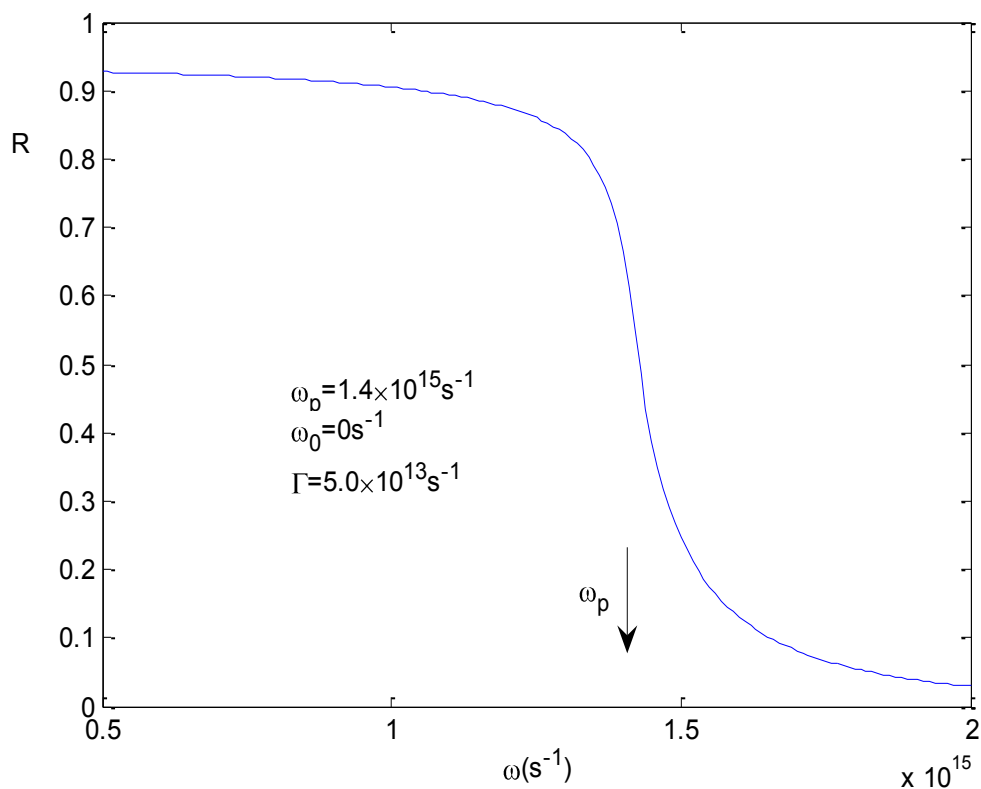
$$\omega_p = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 m} \quad (4.3.3)$$



Obr. 4.3.1 Závislost permitivity na frekvenci (Drudeho model) pro uvedené parametry.

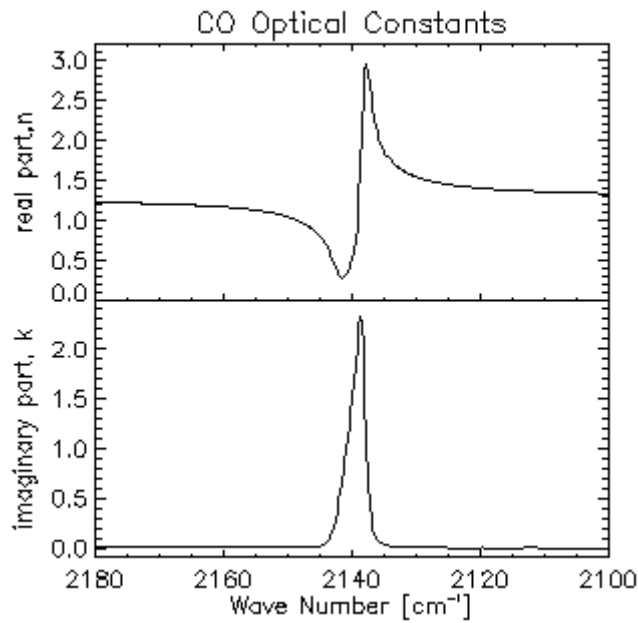
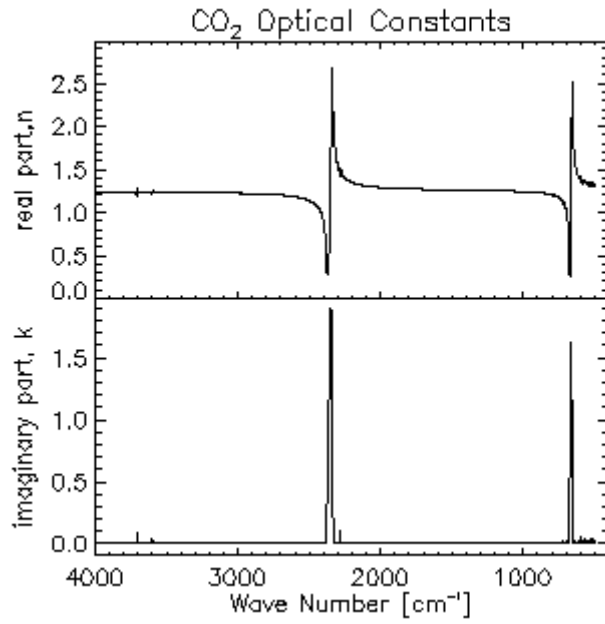


Obr. 4.3.2 Závislost optických konstant na frekvenci (Drudeho model) pro uvedené parametry.



Obr. 4.3.3 Závislost odrazivosti na frekvenci (Drudeho model) pro uvedené parametry.

Tento model je v dobré shodě s chováním optických vlastností kovů. Typický je monotónní pokles ε_2 k nule pro vysoké frekvence a chování ε_1 od záporných hodnot k číslu 1. Zajímavá je závislost n a k , plazmová frekvence je poblíž $n=k$ nebo $\varepsilon_1 = 0$. Odrazivost je vysoká pro nízké frekvence a prudce klesá v okolí ω_p pro vysoké frekvence. Vztahy pro permitivitu rovněž splňují KK relace.



<http://web.ct.astro.it/weblab/optical/cosmall.gif>

IR Optical Constants of solid CO and CO₂ (resolution=2 cm⁻¹)

G.A. Baratta and M.E. Palumbo, JOSA A, 15, 3076-3085, 1998