

INFLUENCIA DEL CAMPO LOCAL SOBRE LA RESONANCIA EN UN MEDIO DIELECTRICO

Adrián H. Buep y J. Ignacio Casaubon.

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires,
Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*

Se analiza el defasaje del movimiento de un electrón respecto al campo eléctrico macroscópico introduciendo un tratamiento donde el campo local es tenido en cuenta. Como resultado se obtienen dos defasajes, uno debido al campo local (que no se trata con rigor en los textos de física) y el otro debido a la fricción. Se estudiaron los defasajes para distintos casos variando el coeficiente de fricción.

I. INTRODUCCION

El uso de un tratamiento clásico para describir el comportamiento del medio a nivel atómico cuando se estudia la dispersión dieléctrica, permite deducir una expresión para la permitividad del medio como función de la frecuencia, que se conoce como ecuación de dispersión.

Si bien se está en el dominio de la mecánica cuántica, el tratamiento clásico provee un modelo conceptual sumamente útil para analizar fenómenos ópticos tales como reflexión, refracción, dispersión, etc.¹⁻⁴.

Sin embargo, no se ha encontrado en la literatura un estudio detallado tanto del comportamiento de la permitividad en la zona de frecuencias ópticas (índice de refracción) como de su variación con la frecuencia, cuando se tiene en cuenta la influencia del medio sobre una molécula en particular. En general, en los textos no se analiza en profundidad cómo se modifican las frecuencias de las bandas de absorción del material cuando el campo local es distinto al de Maxwell. Por lo tanto, en este trabajo estudiaremos por una parte el comportamiento de la permitividad teniendo en cuenta que sobre una determinada molécula del medio actúa un campo eléctrico local diferente al macroscópico (o de Maxwell) y por otra, el defasaje provocado en el movimiento del electrón respecto al campo macroscópico de dicha molécula, debido a la influencia del medio.

II. DISCUSION

Para simplificar, en el desarrollo que sigue consideraremos, como se hace habitualmente en los textos de física¹⁻⁴, que cada molécula del medio contiene un electrón activo que oscila con una única frecuencia natural ω_0 . Para este electrón la ecuación de movimiento puede escribirse como la de un oscilador

forzado clásico sometido a un campo eléctrico armónico de frecuencia angular ω . Si además se considera que sobre el electrón actúa una fuerza friccional proveniente de las interacciones mutuas (relacionadas íntimamente con la absorción de energía), la ecuación de movimiento queda dada por la expresión:

$$m \partial^2 r / t^2 + \gamma \partial r / \partial t + m \omega_0^2 r = q E_{loc} \quad (1)$$

donde r es el desplazamiento del electrón con respecto a su posición de equilibrio, q es su carga, m su masa, ω_0 la frecuencia natural, γ la constante de fricción y E_{loc} el campo local.

Esta ecuación es bien conocida y está resuelta en los libros, pero en general no se trata en profundidad el hecho de que sobre la molécula actúa un campo local distinto al de Maxwell como consecuencia de estar inmersa en un medio dieléctrico.

El campo local más simple que se puede usar en la ecuación⁽¹⁾, es el que surge de la teoría de Clausius-Mossotti-Debye-Lorentz⁵. De acuerdo con esta teoría, dicho campo y el macroscópico se relacionan de la siguiente manera:

$$E_{loc} = \frac{\epsilon^* + 2}{3} E_0 e^{j\omega t} \quad (2)$$

en donde $E_0 e^{j\omega t}$ es el campo macroscópico alterno y ϵ^* es la permitividad compleja ($\epsilon^* = \epsilon' - j \epsilon''$) que depende de la frecuencia ω .

La solución particular de la ecuación de movimiento⁽¹⁾, que describe el desplazamiento del electrón cuando se llega a un régimen estacionario, puede escribirse como:

$$r = q \frac{\epsilon^* + 2}{3} E_0 e^{j\omega t} / [m (\omega_0^2 - \omega^2) + j\omega\gamma] \quad (3)$$

o usando la relación $\varepsilon^* = \varepsilon' - j \varepsilon''$, r queda igual a:

$$r = \frac{q [(\varepsilon' + 2)^2 + \varepsilon''^2]^{1/2}}{3 [m^2(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma^2]^{1/2}} E_0 e^{j(\omega t - \varphi - \phi)} \quad (4)$$

donde las tangentes de los defasajes están dadas por:

$$\tan g \varphi = \varepsilon'' / (\varepsilon' + 2) \quad (5)$$

$$\tan g \phi = \omega \gamma / [m(\omega_0^2 - \omega^2)] \quad (6)$$

En estas dos últimas ecuaciones se observa que el desplazamiento r se ve afectado por los dos defasajes φ y ϕ respecto del campo macroscópico. El primero proviene del defasaje del campo local respecto al macroscópico (no mencionado en los textos) y el segundo se debe a la consideración de una fuerza friccional (fenómeno que sí está bien considerado en los textos¹⁻⁴).

Las ecuaciones (4) y (5) pueden quedar expresadas en función de ω si ε' y ε'' se escriben en función de esa variable. Esto se logra ligando la ecuación fundamental:

$$P = [(\varepsilon^* - 1) / 4\pi] E_0 e^{j\omega t} \quad (7)$$

con la definición de la polarización eléctrica P :

$$P = Nqr \quad (8)$$

en donde qr es el momento dipolar inducido y N el número de moléculas por cm^3 .

De esta manera las permitividades $\varepsilon'(\omega)$ y $\varepsilon''(\omega)$ quedan expresadas como:

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + 4\pi Nq^2 [m(\omega_0^2 - \omega^2) - 4\pi Nq^2 / 3] / \{ [m(\omega_0^2 - \omega^2) - 4\pi Nq^2 / 3]^2 + \omega^2 \gamma^2 \} \quad (9)$$

$$\varepsilon''(\omega) = 4\pi Nq^2 \omega \gamma / \{ [m(\omega_0^2 - \omega^2) - 4\pi Nq^2 / 3]^2 + \omega^2 \gamma^2 \} \quad (10)$$

En estas ecuaciones observamos que la única diferencia entre este tratamiento y el que considera al campo local igual al macroscópico⁶ es que aquí aparece el factor $4\pi Nq^2/3$ en las expresiones de ε' y ε'' . Este factor provoca un corrimiento de la frecuencia natural ε_0 hacia una frecuencia $\omega_0 = [\omega_0^2 - 4\pi Nq^2 / (3m)]^{1/2}$.

Por lo tanto $\varepsilon'(\omega)$ muestra que existe una absorción del medio que se produce en una frecuencia menor que ω_0 . Este factor provoca también un corrimiento en el máximo de $\varepsilon''(\omega)$, que se encuentra aproximadamente en ω_2 si se cumple que $2m^2\omega_0^2 \gg \gamma^2$. En caso contrario, la posición del máximo depende del valor de γ . Si este valor tiende a cero, el pico de $\varepsilon''(\omega)$ se hace más alto y más estrecho tendiendo a una delta de Dirac. Por el contrario, si se hace aumentar el valor de γ , el pico de $\varepsilon''(\omega)$ se hace más bajo y más ancho. En las figs 1 y 2 se muestran por separado los comportamientos de $\varepsilon(\omega)$ y $\varepsilon''(\omega)$ calculados con los valores dados en la tabla 1 para los casos en que el campo local es igual que en el macroscópico o igual al dado en la ecuación (2).

q(esu)	m(q)	$\omega_0(\text{s}^{-1})$	N(cm^{-3})	$\gamma(\text{g s}^{-1})$
4.8×10^{-10}	9.1×10^{-28}	10^{16}	3×10^{22}	4.55×10^{-12}
4.8×10^{-10}	9.1×10^{-28}	10^{16}	3×10^{22}	2.22×10^{-12}
4.8×10^{-10}	9.1×10^{-28}	10^{16}	3×10^{22}	4.55×10^{-13}

Tabla 1: Parámetros utilizados en los cálculos de la resonancia.

Por último, en las Figs. 3, 4 y 5 se muestra el comportamiento de cada uno de los defasajes en función de la frecuencia para distintos valores de γ . Allí puede observarse que el defasaje total $\varphi + \phi$ toma el valor $\pi/2$ en ω_0 independientemente del valor de γ , dado que puede escribirse como:

$$\varphi(\omega_0) + \phi(\omega_0) = \arctg 4\pi Nq^2 / [3\omega_0 \gamma] + \arctg 3\omega_0 \gamma / [4\pi Nq^2] = \pi / 2 \quad (11)$$

De las figuras también puede concluirse que a medida que γ disminuye el defasaje φ se hace más importante, mientras que el defasaje ϕ tiende a un escalón (línea vertical en las figuras que corresponde a un brusco cambio de fase en π) y de acuerdo con la ecuación (6) siempre toma el valor $\pi/2$ en ω_0 .

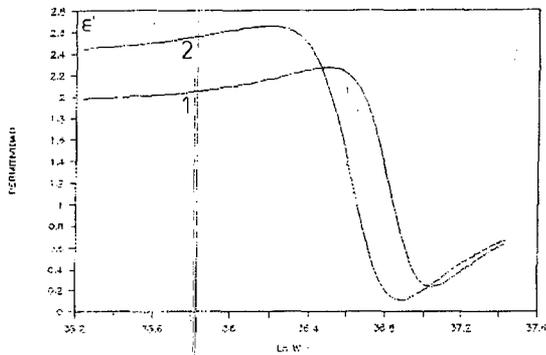


Fig. 1: Permitividad real (ϵ') en función de la frecuencia; 1: campo local igual al de Maxwell, 2: campo local igual al dado en la ecuación(2); $\gamma = 4.55 \times 10^{-12} \text{ g s}^{-1}$.

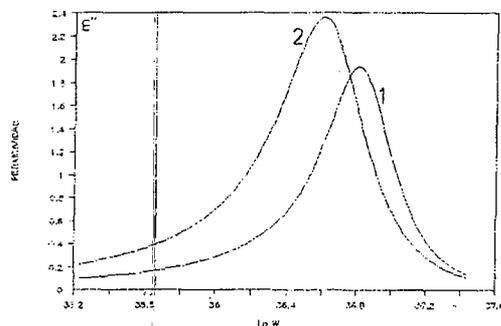


Fig. 2: Permitividad imaginaria (ϵ'') en función de la frecuencia; 1: campo local igual al de Maxwell, 2: campo local igual al dado en la ecuación (2); $\gamma = 4.55 \times 10^{-12} \text{ g s}^{-1}$.

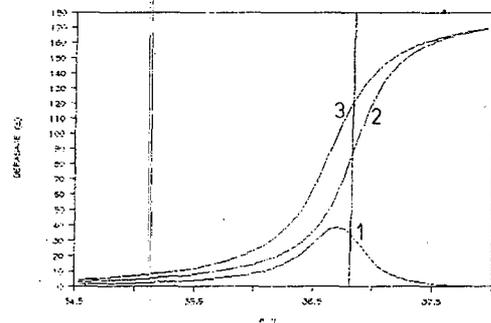


Fig. 3: Defasajes en función de la frecuencia; 1: φ , 2: ϕ , 3: $\varphi + \phi$; $\gamma = 4.55 \times 10^{-12} \text{ g s}^{-1}$.

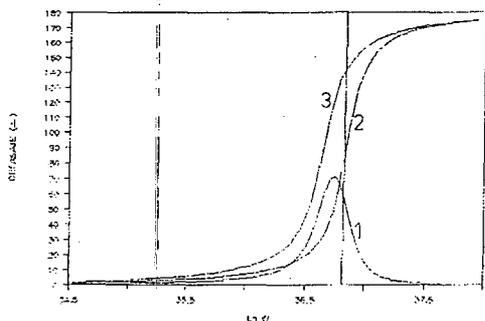


Fig. 4: Defasajes en función de la frecuencia; 1: φ , 2: ϕ , 3: $\varphi + \phi$; $\gamma = 2.22 \times 10^{-12} \text{ g s}^{-1}$.

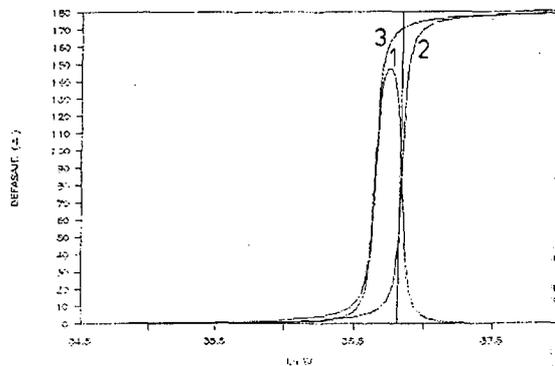


Fig. 5: defasajes en función de la frecuencia; 1: φ , 2: ϕ , 3: $\varphi + \phi$; $\gamma = 4.55 \times 10^{-13} \text{ g s}^{-1}$.

III. CONCLUSIONES

- 1) Existen dos defasajes del desplazamiento del electrón respecto del campo macroscópico. Uno debido a la fricción y el otro al campo local.
- 2) De las ecuaciones de ϵ' y $\epsilon''(\omega)$ se concluye que la resonancia y por lo tanto la absorción del medio se corre hacia valores de frecuencias menores que la frecuencia natural ω_0 .
- 3) El defasaje que proviene de la fricción toma el valor $\pi/2$ en la frecuencia ω_0 , en tanto que el defasaje total $\varphi + \phi$ toma el valor $\pi/2$ en exactamente la frecuencia ω_0 cualquiera sea el valor de γ .

CEILAP
CITEFA · CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA

REFERENCIAS

- 1- F.A.Jenkins and H.E.White, *Fundamentals of Optics*, Mc.Graw-Hill (1957), pp 472-477.
- 2- B.Rossi, *Fundamentos de la Optica*, Ed.Reverté (1978), pp 339-346.
- 3- H.D.Young, *Optica y Física Moderna*, Mc.Graw - Hill (1971), pp 87-91.
- 4- E.Hecht y A.Zajac, *Optica*, Fondo Educativo Interamericano (1977) pp 41-45.
- 5- P.Debye, *Polar Molecules*, Ed. Dover (1929).
- 6- J.I.Casabon, V.Naumenko and M.Barón, *J.Mol. Liquids* (en prensa).