Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta za *matematiko in fiziko*

Oddelek za fiziko

naloga pri predmetu Kondenzirana snov – vaje, prvi letnik II. bolonjske stopnje

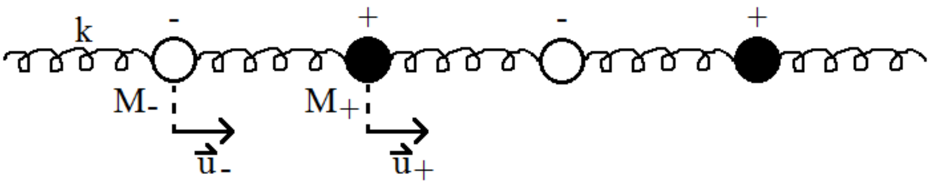
Disperzijska relacija za polaritone

Avtorica: Nina Lopič
Mentor: doc. dr. Tomaž Rejec
Ljubljana, maj 2012

Iščemo disperzijsko relacijo $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(\mathbf{k})$ za izolatorje, točneje za dvoatomni ionski kristal.

Najprej poiščemo odvisnost dielektričnosti od frekvence $\epsilon(\omega)$. To zvezo smo izpeljali na predavanjih pri prof. dr. Petru Prelovšku. Tu jo izpeljemo po [1].

Gledamo 1D model (Slika 1), kjer imajo negativni ioni maso M_- in pozitivni M_+, koeficient vzmeti je k, $\mathbf{u}_-$ je odmik negativnega iona in $\mathbf{u}_+$ je odmik pozitivnega.



Slika 1: 1D model dvoatomnega ionskega kristala.

Po Newtonu velja:

$$M_-\ddot{\mathbf{u}}_- = -k(\mathbf{u}_- - \mathbf{u}_+) - e\mathbf{E}_{\mathbf{loc}} \tag{1}$$

in

$$M_+\ddot{\mathbf{u}}_+ = -k(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + e\mathbf{E}_{\mathbf{loc}}\,, \tag{2}$$

pri čemer je e naboj, $\mathbf{E}_{\mathbf{loc}}$ pa lokalno električno polje okoli iona.

Naredimo nekaj substitucij:

$$\begin{gathered} \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_- = \mathbf{u}\,, \\ \frac{1}{M} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-}\,, \\ \frac{k}{M} = \overline{\omega}^2\,, \end{gathered} \tag{3}$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u_0} e^{-i\omega t} \,,$$

$$\mathbf{E_{loc}} = \mathbf{E_0} e^{-i\omega t} \,.$$

Od enačbe (2) odštejemo enačbo (1), uporabimo substitucije (3) in dobimo:

$$\mathbf{u_0} = \frac{e\mathbf{E_0}/M}{\overline{\omega}^2 - \omega^2} \,, \tag{4}$$

pri čemer je ω frekvenca nihanja.

Ob upoštevanju enačbe (4) je polarizabilnost ionskih nihanj α_n takšna:

$$\alpha_n = \frac{p_0}{E_0} = \frac{eu_0}{E_0} = \frac{e^2}{M(\overline{\omega}^2 - \omega^2)} \,, \tag{5}$$

pri čemer je p_0 magnetni dipolni moment.

Polarizabilnost pozitivnih, negativnih ionov in polarizabilnost ionskih nihanj je:

$$\alpha(\omega) = \alpha^+ + \alpha^- + \frac{e^2}{M(\overline{\omega}^2 - \omega^2)} \,. \tag{6}$$

Spomnimo se Clausius-Mossottijeve zveze, ki povezuje dielektričnost ϵ in polarizabilnost:

$$\frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2} = \frac{4\pi\alpha(\omega)}{3V} \,, \tag{7}$$

pri čemer je V volumen primitivne celice v mirovanju.

Če enačbo (6) vstavimo v (7), dobimo:

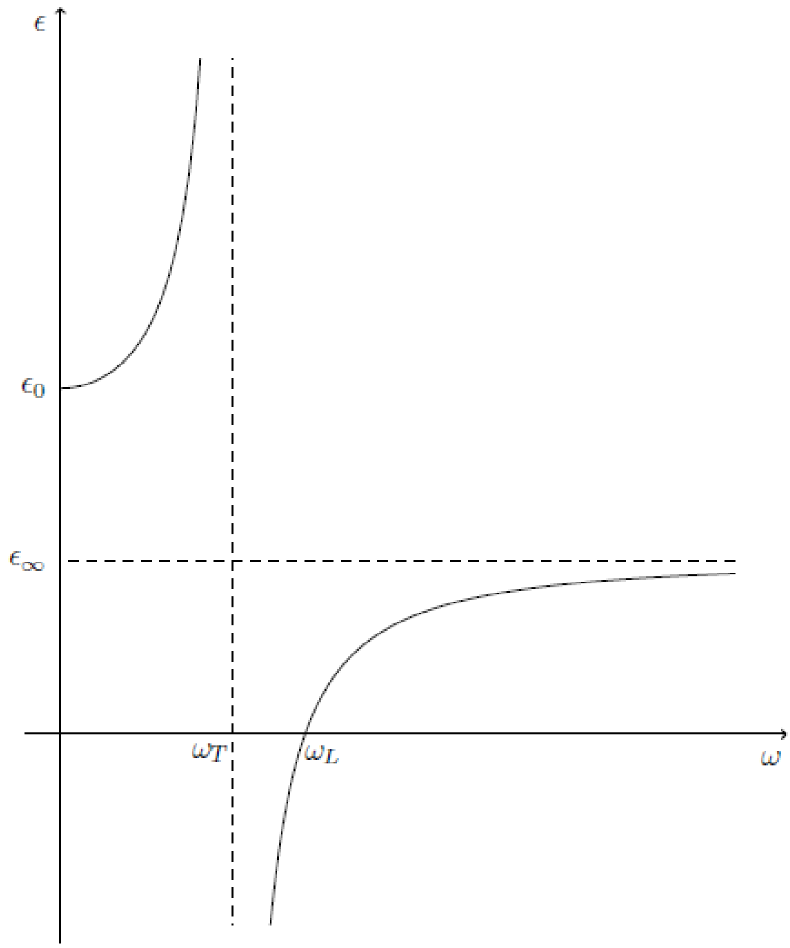
$$\begin{gathered} \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_\infty - \epsilon_0}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2} - 1} \,, \\ \omega_T^2 = \overline{\omega}^2 \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2} \right) , \\ \epsilon_0 > \epsilon_\infty \,, \end{gathered} \tag{8}$$

pri čemer je ϵ_0 dielektričnost pri zelo nizkih frekvencah, ϵ_∞ pa pri zelo visokih frekvencah.

Poglejmo limite enačbe (8):

$$\begin{gathered} \lim_{\omega \to \infty} \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \,, \\ \lim_{\omega \to 0} \epsilon(\omega) = \epsilon_0 \,. \end{gathered} \tag{9}$$

Pri funkciji $\epsilon(\omega)$ hitro vidimo pol pri ω_T. Za ničlo pa velja $\omega_L^2 = \omega_T^2 \epsilon_0 / \epsilon_\infty$. Funkcijo $\epsilon(\omega)$ še narišemo:



Slika 2: Odvisnost dielektričnosti od frekvence. ω_T in ω_L sta transverzalna in longitudinalna frekvenca.

Zanima nas, kako je dielektričnost ϵ povezana z valovnim vektorjem $\mathbf{k}$. Odvisnost dobimo iz Maxwellovih enačb, pri čemer upoštevamo, da imamo izolator:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \end{aligned} \tag{10}$$

Upoštevamo še:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mu\mu_0 \mathbf{H} \quad , \quad \mu = 1, \\ \mathbf{D} &= \epsilon(\omega)\epsilon_0 \mathbf{E}. \end{aligned} \tag{11}$$

Iz enačb (10) in (11) izpeljemo valovno enačbo (znebimo se magnetnih delov):

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad \text{in} \quad \mathbf{B} = \mu\mu_0 \mathbf{H}$$

$$\Rightarrow \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \tag{12}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla \times \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\right),$$

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}), \tag{13}$$

$$\nabla\left(\frac{\rho}{\epsilon_0}\right) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\left(\mu_0 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\right),$$

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}.$$

Valovno enačbo (13) rešujemo z nastavkoma:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E_0} e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)} \quad \text{in} \quad \mathbf{D} = \mathbf{D_0} e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)},$$

$$\mathbf{E_0} e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)}(-i\mathbf{k})^2 = \mu_0 \mathbf{D_0} e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)}(i\omega)^2,$$

$$\mathbf{E}\mathbf{k}^2 = \mu_0 \omega^2 \mathbf{D},$$

$$\mathbf{E}\mathbf{k}^2 = \mu_0 \omega^2 \epsilon(\omega) \epsilon_0 \mathbf{E},$$

$$\epsilon(\omega) = \frac{\mathbf{k}^2}{\omega^2 \mu_0 \epsilon_0}, \tag{14}$$

$$\epsilon(\omega) = \frac{\mathbf{k}^2 c^2}{\omega^2}$$

$$\Rightarrow k = \frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon(\omega)}.$$

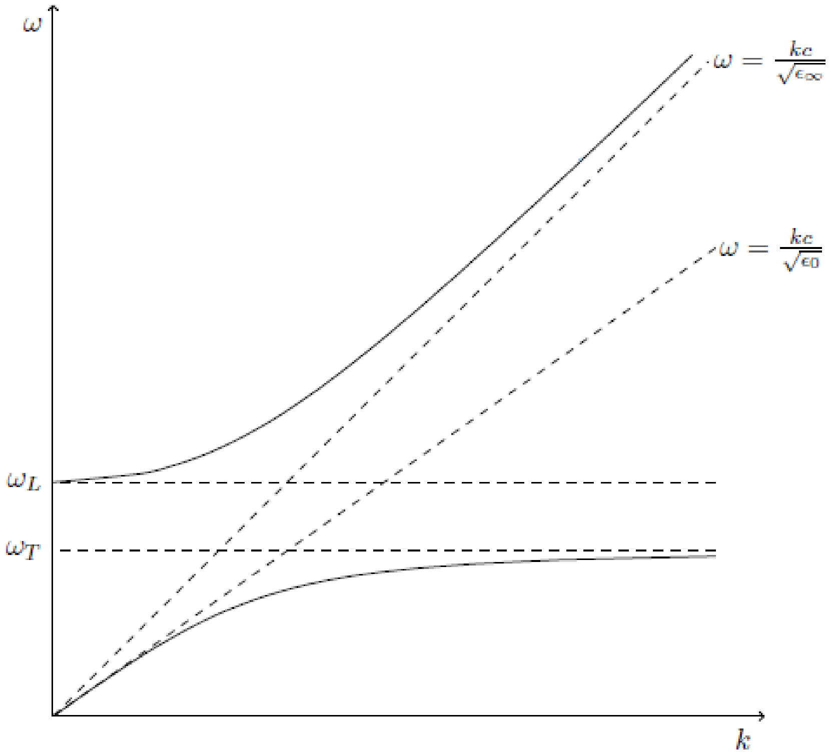
Če v enačbo (14) vstavimo enačbo (8), potem dobimo:

$$k = \frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon_\infty + \frac{\epsilon_\infty - \epsilon_0}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2} - 1}}. \tag{15}$$

Izračunajmo limite enačbe (15):

$$\lim_{\omega\to\infty} k = \frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon_\infty} \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{kc}{\sqrt{\epsilon_\infty}},$$
$$\lim_{\omega\to 0} k = \frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon_0} \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{kc}{\sqrt{\epsilon_0}}. \tag{16}$$

S pomočjo teh limit (16) in relacije $\epsilon(\omega)$ (Slika 2) lahko približno narišemo disperzijsko zvezo za polaritone:



Slika 3: Disperzijska relacija za polaritone.

Viri:

[1] N. W. Aschroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, 1976.