

RESONANCIA EN UN MEDIO DIELECTRICO TENIENDO EN CUENTA LA ANISOTROPIA EN EL CAMPO LOCAL.

Adrián H. Buep y J. Ignacio Casaubon.

Depto. de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.
e-mail: casaubon@ub.edu.ar

Se estudió el defasaje del movimiento de un electrón respecto al campo eléctrico macroscópico, considerando que el campo local que actúa sobre el electrón es el de una cavidad elipsoidal con uno de sus ejes principales en la dirección del campo externo. Como resultado se obtienen dos defasajes, uno debido al campo local que depende del factor de forma y el otro debido a la fricción que es independiente del campo local. Se estudió además el comportamiento de las partes real e imaginaria de la permitividad compleja variando el factor de forma.

In this paper the phase difference of the movement of an electron with respect to the macroscopic electric field was studied, considering that the local electric field acting on the electron is that of the ellipsoidal cavity with an axis in the direction of the external applied field. As a result two phase differences were obtained, the first one is due to the local field and depends on the form factor while the second one is due to the friction coefficient and is independent of the local field. The behaviour of both the real and imaginary parts of the complex permittivity, for different form factors, was also examined.

Introducción

El uso de un tratamiento clásico para estudiar la dispersión dieléctrica, permite deducir una expresión para la permitividad compleja del medio que se conoce como ecuación de dispersión. Esta ecuación provee un modelo conceptual sumamente útil para analizar fenómenos ópticos tales como reflexión, refracción, dispersión, etc.¹⁻⁴.

En dos trabajos previos^{5,6} se ha realizado un estudio detallado del comportamiento de la permitividad compleja en la zona de frecuencias ópticas. En el primero de ellos se consideró que el campo que actúa sobre una molécula del medio era igual al de Maxwell y en el segundo igual al campo local de Lorentz. De esta manera, se tuvo en cuenta la influencia del medio sobre una molécula en particular, pero no se consideraron las anisotropías moleculares. Como una mejora, en este trabajo estudiaremos el comportamiento de la permitividad compleja incluyendo las anisotropías moleculares. Para ello se considerará que sobre una determinada molécula del medio actúa el campo eléctrico local de una cavidad elipsoidal que se supondrá con un eje principal en la dirección del campo aplicado. Por otra parte, se estudiará el defasaje provocado por el movimiento del electrón respecto al campo macroscópico debido a la influencia del campo local y a la anisotropía de forma.

Discusión

Para simplificar, en el desarrollo que sigue consideraremos que cada molécula del medio contiene un electrón activo que oscila con una frecuencia natural ω_0 en la dirección del campo aplicado o, lo que es lo mismo, en la dirección de un eje del elipsoide. Para este electrón la ecuación de movimiento en la dirección del eje, 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 en la dirección del campo aplicado queda dada por la expresión

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

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, y la constante de fricción γ y E_{loc} el campo local.

El campo local que surge de usar una cavidad elipsoidal se escribe como⁷:

$$E_{loc} = (1 + (\epsilon^* - 1)A_a) E_0 e^{i\omega t} \quad (2)$$

donde $E_0 e^{i\omega t}$ es el campo macroscópico alterno, ϵ^* es la permitividad compleja ($\epsilon^* = \epsilon' - j \epsilon''$) que depende de la frecuencia angular ω y A_a es el factor de forma correspondiente al semieje a del elipsoide. El factor de forma A_a viene dado por la expresión⁷:

$$A_a = \frac{abc}{2} \int_0^{\pi/2} \frac{ds}{(s+a^2) \left[(s+a^2)(s+b^2)(s+c^2) \right]^{1/2}} \quad (3)$$

en donde a , b y c son los semiejes de elipsoide y s una variable de integración.

En el caso particular de una cavidad esférica se cumple que $A_a = A_b = A_c = 1/3$ y el campo local dado por la ecuación (2) se reduce al campo local de Lorentz⁶.

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

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

donde las tangentes de los defasajes quedan dadas como:

$$\tan \varphi = \frac{A_a \epsilon''}{1 + A_a (\epsilon' - 1)} \quad (5)$$

$$\tan \phi = \frac{\omega \gamma}{m (\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (6)$$

En la ecuación (4) se observa que el desplazamiento r se ve afectado por los defasajes φ y ϕ respecto al campo macroscópico. El primero (φ) tiene su origen en el defasaje del campo local respecto al macroscópico y depende del factor de forma A_a . El segundo (ϕ) se debe a la consideración de una fuerza friccional y es independiente del campo local.

El desplazamiento r y el defasaje φ pueden quedar expresados en función de ω si ϵ' y ϵ'' se escriben en función de esa variable. Esto se logra ligando las 2 siguientes expresiones para la polarización eléctrica P:

$$P = \frac{\epsilon'' - 1}{4\pi} E_0 e^{j\omega t} \quad (7)$$

$$P = N q r \quad (8)$$

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

De esta manera, las partes real ($\epsilon'(\omega)$) e imaginaria ($\epsilon''(\omega)$) de la permitividad compleja quedan expresadas como:

$$\epsilon'(\omega) = 1 + \frac{4\pi N q^2 [m(\omega_0^2 - \omega^2) - 4\pi N q^2 A_a]}{(m(\omega_0^2 - \omega^2) - 4\pi N q^2 A_a)^2 + \omega^2 \gamma^2} \quad (9)$$

$$\epsilon''(\omega) = \frac{4\pi N q^2 \omega \gamma}{(m(\omega_0^2 - \omega^2) - 4\pi N q^2 A_a)^2 + \omega^2 \gamma^2} \quad (10)$$

En estas expresiones de ϵ' y ϵ'' en función de ω observamos que aparece el término $4\pi N q^2 A_a$. Este término, que no está presente cuando el campo local es igual al de Maxwell⁵, provoca un corrimiento de la frecuencia natural ω_0 hacia una frecuencia $\omega_0' = (\omega_0^2 - \frac{4\pi N q^2 A_a}{m})^{1/2}$.

Por lo tanto, existe una absorción del medio que se produce en una frecuencia menor que ω_0 y cuyo corrimiento depende del factor de forma elipsoidal. En las figuras 1 y 2 se muestran por separado los

comportamientos de $\epsilon'(\omega)$ y $\epsilon''(\omega)$ calculados con los parámetros dados en la Tabla 1 para distintos valores del factor de forma A_a . Además, se los compara con el caso en que el campo local es igual al de Maxwell. De allí y de la expresión de ω_0' puede observarse que el corrimiento mayor se produce cuando el elipsoide tiene su eje menor en la dirección del campo ($A_a > 1/3$) y el corrimiento menor cuando el elipsoide tiene su eje mayor en la dirección del campo ($A_a < 1/3$). El caso particular $A_a = 1/3$, coincide con el corrimiento del campo local de Lorentz.

TABLA 1: PARÁMETROS UTILIZADOS EN LOS CÁLCULOS DE LA RESONANCIA.

q (esu)	m (g)	$\omega_0 (s^{-1})$
4.8×10^{-10}	9.1×10^{-28}	10^{16}
$N (cm^{-3})$	$\gamma (g s^{-1})$	A_a
3×10^{22}	2.22×10^{-12}	1/2, 1/3, 1/4

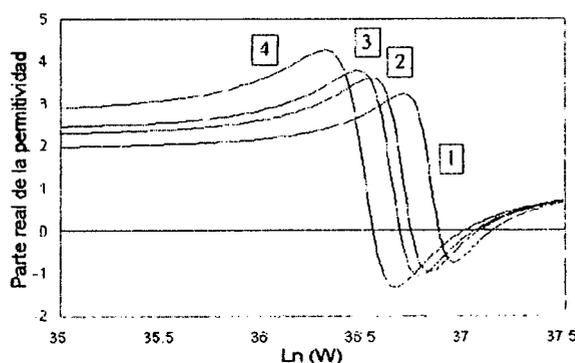


Figura 1: Permitividad real (ϵ') en función de la frecuencia angular; 1: con campo local de Maxwell; 2, 3 y 4: con campo local dado la ecuación (2) y $A_a = 1/4, 1/3$ y $1/2$ respectivamente.

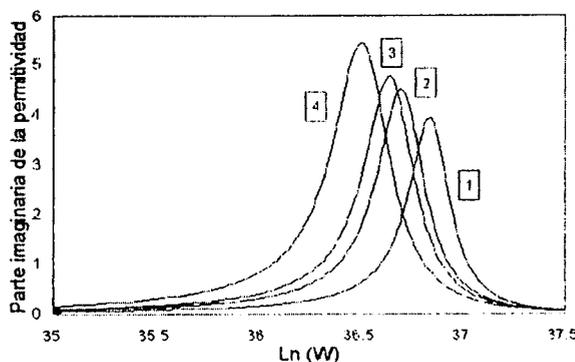


Figura 2: Permitividad imaginaria (ϵ'') en función de la frecuencia angular; 1: con campo local de Maxwell; 2, 3 y 4: con campo local dado en la ecuación (2) y $A_a = 1/4, 1/3$ y $1/2$ respectivamente.

En las figura 3, 4 y 5 se muestra el comportamiento de cada uno de los defasajes en función de la frecuencia angular para los tres valores de A_a . Para una mejor visualización del comportamiento de cada uno de los

distintos defasajes, en las figuras se muestra también la posición de la frecuencia angular ω_0 mediante una línea vertical. Así, puede observarse que el defasaje total $\varphi + \phi$ toma el valor $\pi/2$ en ω_0' independientemente de los valores de γ y de A_a , dado que puede escribirse como:

$$\varphi(\omega_0') + \phi(\omega_0') = \arctg \frac{4 \pi N q^2 A_a}{\omega_0' \gamma} + \arctg \frac{\omega_0' \gamma}{4 \pi N q^2 A_a} = \frac{\pi}{2} \quad (11)$$

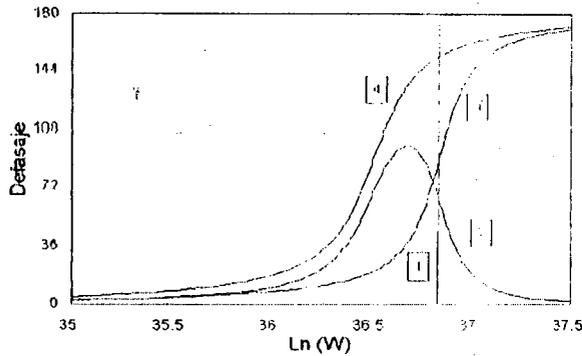


Figura 3: Defasajes en función de la frecuencia angular; 1: posición de ω_0 ; 2: φ ; 3: ϕ ; 4: $\varphi + \phi$; $A_a = 1/2$.

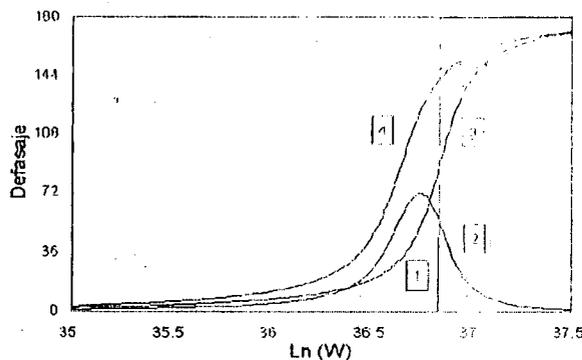


Figura 4: Defasajes en función de la frecuencia angular; 1: posición de ω_0 ; 2: φ ; 3: ϕ ; 4: $\varphi + \phi$; $A_a = 1/3$.

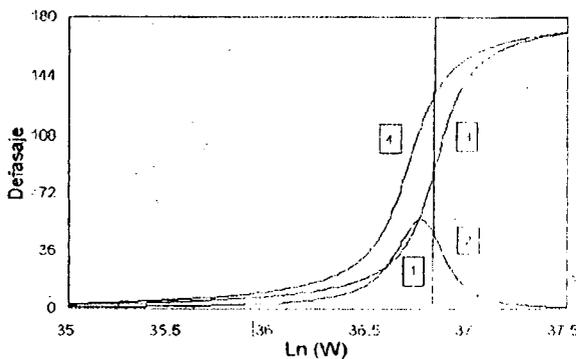


Figura 5: Defasajes en función de la frecuencia angular; 1: posición de ω_0 ; 2: φ ; 3: ϕ ; 4: $\varphi + \phi$; $A_a = 1/4$.

De las figuras 3, 4 y 5 también puede concluirse que a medida que A_a toma valores más altos el defasaje φ se hace más importante y se corre hacia valores menores de frecuencia angular mientras que el defasaje ϕ permanece inalterado y de acuerdo con la ecuación (6) siempre toma el valor $\pi/2$ en ω_0 .

Conclusiones

- 1) Existen dos defasajes del desplazamiento del electrón respecto del campo macroscópico. Uno debido a la fricción y el otro al campo local. El primero es independiente del factor de forma, mientras que el segundo depende fuertemente.
- 2) De las ecuaciones de $\epsilon'(\omega)$ y $\epsilon''(\omega)$ se concluye que tanto la resonancia como la absorción del medio se produce en un valor de frecuencia menor que la frecuencia natural ω_0 y dicha frecuencia depende del factor de forma elipsoidal.
- 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' para cualquier valor de γ y A_a .

Referencias

- 1 F. A. Jenkins and H. E. White, "Fundamentals of Optics", McGraw-Hill (1957), pp 472-477.
- 2 B. Rossi, "Fundamentos de Optica", Ed. Reverté (1978) pp 339-346.
- 3 H. D. Young, "Optica y Física Moderna", McGraw-Hill (1971), pp 87-91.
- 4 E. Hecht y A. Zajac, "Optica", Fondo Educativo Interamericano (1977) pp 41-45.
- 5 J. I. Casaubon, V. Naumenko and M. Barón, J. Mol. Liquids **56**, 77-93 (1993).
- 6 Adrián H. Buep y J. Ignacio Casaubon, Anales de AFA 1992, pág. 81 Vol 4.
- 7 C. J. F. Bottcher, "Theory of Electric Polarization", vol. 1, Elsevier (1973), pp 169 y 80.