

INSTITUTO DE FÍSICA
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROPIEDADES ÓPTICAS DE MATERIALES

Curso 2022

Práctico IV – Aislantes.

Fecha de Entrega: 21 de Octubre de 2022.¹

Ejercicio N° 1 – Propiedades ópticas de materiales vítreos.

La adición de compuestos (como PbO) a materiales vítreos (ejemplo SiO₂) tiende a disminuir la energía de su borde de absorción y aumentar su índice de refracción. Justifique este hecho asumiendo que el material tiene un coeficiente de absorción constante α_0 en una región de energías entre E_1 y E_2 y es nula fuera de ella, usando las relaciones de Kramers-Kronig entre el índice de refracción y el coeficiente de extinción.

Ejercicio N° 2 (*) – Fórmulas de Cauchy y Sellmeier.

Las propiedades ópticas de los materiales transparentes pueden aproximarse considerando el modelo clásico de Lorentz (oscilador armónico amortiguado) con una única frecuencia de resonancia equivalente al ancho de la región de transparencia E_0 (por ejemplo, en semiconductores corresponde a la región prohibida E_g). Dentro de este modelo y usando que la constante dieléctrica puede escribirse como:

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}$$

donde $\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}}$ es la frecuencia de plasma (o genéricamente $\tilde{f} = \omega_p^2/\omega_0$ es la

intensidad de la resonancia), $\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar}$ ($\omega_0 = \omega_g = \frac{E_g}{\hbar}$ en semiconductores) y $\tau = \Gamma^{-1}$ es el tiempo de relajación característico del proceso.

- a) Halle la dependencia del cuadrado del índice de refracción con la frecuencia $n^2(\omega)$ en la zona de transparencia (no hay absorción); esto es, lejos de las resonancias, por lo que vale la aproximación: $(\omega_0 - \omega)^2 \gg \Gamma^2$.
- b) La relación anterior (dispersión de Wremple) puede obtenerse directamente de las relaciones de Kramers-Kronig suponiendo que el material tiene resonancias en una región espectral bien definida $\omega_A < \omega^* < \omega_B$ de forma que $\epsilon''(\omega) = 0$ para $\omega \notin [\omega_A, \omega_B]$. Verifique esta afirmación aplicando el teorema del valor medio en alguna de las relaciones de Kramers-Kronig.

¹ - La entrega mínima debe contener los ejercicios marcados con asterisco, que en este repartido son: Ejercicios N° 2, 3 y 9.

- c) La relación hallada en las partes anteriores ¿corresponde a dispersión normal o anómala?
- d) Deduzca de la relación anterior cuál debe ser la dependencia del índice de refracción con la longitud de onda, y verifique que obedece la ecuación de Sellmeier:

$$\frac{1}{n^2 - 1} = C \left(\frac{1}{\lambda_0^2} - \frac{1}{\lambda^2} \right)$$

- e) La mayoría de los materiales transparentes pueden considerarse como materiales con una banda prohibida muy grande. Partiendo de los datos de la tabla adjunta, del índice de refracción n del vidrio Crown, para distintas longitudes de onda λ , realice un

Longitud de onda λ (nm)	Índice de refracción n (adim.)
728.1	1.5346
706.5	1.5352
667.8	1.53629
587.6	1.53954
504.8	1.54417
501.6	1.54473
492.2	1.54528
471.3	1.54624
447.1	1.54943
438.8	1.55026
414.4	1.55374
412.1	1.55402
402.6	1.55530
388.9	1.55767

gráfico de $\frac{1}{n^2 - 1}$ contra $\frac{1}{\lambda^2}$. Verifique que obedece la ecuación de Sellmeier.

- f) Halle los valores correspondientes de C y λ_0 para ese caso.
- g) Despejando n en función de λ de la ecuación de Sellmeier para el caso $\frac{\lambda_0}{\lambda} \ll 1$, deduzca la ecuación de Cauchy:

$$n = P + \frac{Q}{\lambda^2} + \frac{R}{\lambda^4}$$

hallando P , Q y R en función de C y λ_0 .

Ejercicio N° 3 (*) – Modelo de Lorentz.

Para el modelo de Lorentz de oscilador armónico amortiguado:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma, ω_0 es la frecuencia de resonancia y $\tau = \Gamma^{-1}$ es el tiempo de relajación característico del proceso (Γ las pérdidas) y ϵ_∞ la constante dieléctrica debido a los electrones no resonantes. Salvo en casos particulares² es físicamente razonable suponer que $\omega_p > \omega_0 > \Gamma$.³ Bajo estas suposiciones:

² - Como lo son el modelo de Drude (que corresponde a $\omega_0 = 0$) o y el de Debye ($\Gamma \gg \omega_0$).

³ - Para los ejemplos numéricos puede suponerse un caso suficientemente genérico que $\epsilon_\infty = 1$, ω_p corresponde a 500 cm^{-1} , ω_0 a 100 cm^{-1} y Γ a 10 cm^{-1} .

- a) Bosqueje la parte real $\epsilon'(\omega)$ e imaginaria $\epsilon''(\omega)$ hallando, en cada caso, los límites de alta y baja frecuencia, las posiciones de los máximos y mínimos de cada una de ellas y los valores de ambas en estas posiciones.

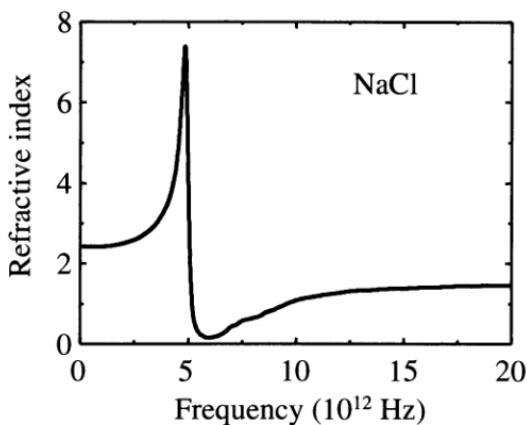
NOTA: En algunos casos sólo se obtiene un resultado simple en el caso $\Gamma \ll \omega_0$.

- b) (Opcional) Compruebe si esta función dieléctrica verifica las relaciones de Kramers Kronig.
- c) Calcule la función pérdida dieléctrica (ver Ejercicio N° 7 del Práctico III) y encuentre la posición del máximo de la misma.
- d) (Numérico) Para $\epsilon_\infty = 1$ y variando la relación $\frac{\Gamma}{\omega_0} < 1$ (o en el caso particular de la Nota ³) realice gráficas de:
- $\epsilon'(\omega)$ y $\epsilon''(\omega)$,
 - índice de refracción $n(\omega)$ y coeficiente de extinción $\kappa(\omega)$,
 - reflectancia ante incidencia normal de una interfaz con aire,
 - la velocidad de grupo. ¿En que región hay dispersión anómala?
 - $\sigma'(\omega)$ y $\sigma''(\omega)$, siendo estas la parte real e imaginaria de la conductividad óptica $\sigma(\omega)$ definida a partir de la relación obtenida para un material óhmico en la parte a) del Ejercicio N° 7 del Práctico I.
- e) Verifique analíticamente que:
- el coeficiente de absorción en el centro de una línea no depende de la frecuencia de resonancia ω_0 .
 - La velocidad de grupo en el caso $\epsilon_\infty = 1$ y $\Gamma = 0$ es siempre menor que la velocidad de la luz en el vacío.

Ejercicio N° 4 – Modelo de Lorentz.

La figura muestra una gráfica del índice de refracción del NaCl en el infrarrojo que presenta una resonancia debido a la vibración de la molécula de $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$. Los pesos atómicos de las del sodio y el cloro son 23 y 35.5 respectivamente. Use estos datos para estimar:

- La constante dieléctrica estática del NaCl.
- La frecuencia natural de oscilación de esta molécula.
- La constante elástica de la



fuerza restauradora (suponiendo la masa en el modelo de Lorentz es la masa reducida de la molécula).

- d) La densidad de moléculas de NaCl por unidad de volumen.
- e) La constante de amortiguamiento o pérdidas.
- f) El coeficiente de absorción de pico.

Ejercicio N° 5 – Análisis Espectral Cuantitativo.

- a) A partir de la relación de Kramers-Kronig que permite calcular el límite de $\epsilon'(\omega)$ para frecuencias muy altas ($\omega \rightarrow \infty$) deduzca que cualquier material tiene un comportamiento tipo Drude a frecuencias suficientemente altas.
- b) Considere un material en que se modela la relación de dispersión por una superposición de varios osciladores armónicos (m en total) con N_m electrones en cada resonancia. Verifique que en el límite $\omega \rightarrow \infty$ se recupera el modelo de Drude.
- c) Igualando las relaciones que se obtuvieron en las partes anteriores obtenga una expresión que permita obtener el número total de cargas presentes en una muestra material en función de los espectros (supuestos conocidos) de índice de refracción y coeficiente de absorción. Chequee la dimensionalidad del resultado.

Ejercicio N° 6 – Propagación de pulsos en Fibras Ópticas.

- a) Muestre que el ensanchamiento temporal de un pulso corto al transmitirse por un medio dispersivo de largo L está dado en forma aproximada por:

$$\Delta\tau = \frac{L}{c} \left(\lambda^2 \frac{d^2n}{d\lambda^2} \right) \frac{\Delta\lambda}{\lambda}$$

donde λ es la longitud de onda en el vacío, $\Delta\lambda$ es el ancho espectral del pulso.

- b) Estime $\Delta\tau$ para un pulso ultracorto con un ancho temporal de 1 ps en 1 metro de fibra óptica a 1550 nm donde $\lambda^2 \frac{d^2n}{d\lambda^2} = -0.01$.

Ejercicio N° 7 – Propiedades Infrarrojas.

La constante dieléctrica que se obtiene en el modelo de una cadena lineal diatómica polar para la absorción de fonones⁴, agregando una fuerza disipativa es:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + (\epsilon_{st} - \epsilon_{\infty}) \frac{\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}$$

donde $\epsilon_{st} = \epsilon(0)$ es la constante dieléctrica estática, ϵ_{∞} es la constante por encima de la resonancia infrarroja (corresponde a la región del visible), ω_{TO} es la frecuencia angular de los fonones ópticos transversales y el amortiguamiento $\gamma = \tau^{-1}$, siendo τ el tiempo de vida de los fonones.

⁴ - Ver Ejercicio N° 3 del Práctico II

- a) Demuestre que la reflectancia de una interfaz plana de este material, en el caso sin disipación ($\gamma=0$):

$$R = \left| \frac{\hat{n}-1}{\hat{n}+1} \right|^2$$

vale uno en una región que se determinará (banda de Reststrahl o rayo residual) y decae a cero en la frecuencia:

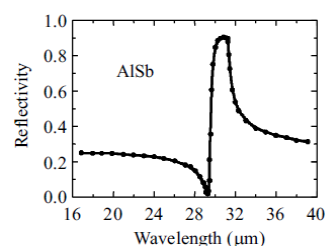
$$\omega = \sqrt{\frac{\epsilon_{st}-1}{\epsilon_{\infty}-1}} \omega_{TO}$$

- b) Para $\nu_{TO} = 10$ THz, $\epsilon_{st} = 12.1$ y $\epsilon_{\infty} = 10$, y en los casos que $\tau = 10$ ps y 1 ps, estime:

- i. La reflectancia en el centro de la banda de Reststrahl.
- ii. El coeficiente de absorción en ν_{TO} .

- c) Para la reflectancia de AlSb que se muestra en la figura estime:

- i. Las constantes dieléctricas estática y en la región del visible.
- ii. La frecuencia de los fonones ópticos transversales y longitudinales en el centro de la zona de Brillouin. ¿Se verifica la relación de Lyddane–Sachs–Teller?
- iii. El tiempo de vida de los fonones ópticos transversales.



Ejercicio N° 8 – Factores de Depolarización.

Repetiendo los argumentos del cálculo de Lorentz, pero para materiales que no sean isotrópicos sino que tengan una dirección privilegiada, se puede separar el campo eléctrico en dos componentes: $\vec{E} = \vec{E}_{\perp} + \vec{E}_{\parallel}$, donde \vec{E}_{\parallel} y \vec{E}_{\perp} son las componentes perpendicular y paralela a esa dirección, y aplicar el principio de superposición usando cavidades cilíndricas. Dependiendo de la morfología del material estos cilindros serán mucho más largos que anchos (agujas) o más anchos que largos (panqueques). En el primer caso se dice que se tendrá un sistema bidimensional, y en el segundo uno unidimensional (para las componentes del campo que deben ser corregidas).

- a) Encuentre los factores de depolarización, L_j , con $j = x, y$ o z , que dan el vínculo entre las componentes del campo de depolarización $E_j(0)$ y la polarización P_j : $E_j(0) = \epsilon_0 L_j P_j$ para cada una de las morfologías descritas anteriormente. Asuma que z es la dirección privilegiada.

NOTA: El campo de depolarización es el campo que se debe sustraer al campo eléctrico macroscópico para obtener el campo local.

SUGERENCIA: En la morfología de agujas el campo \vec{E}_{\parallel} apenas se ve influenciado por las densidades de carga de polarización, o sea es continuo en la superficie lateral de la cavidad, la integral de Lorentz debe hacerse en la superficie lateral del cilindro (que es donde las cargas de depolarización serán importantes). Mientras tanto, en la morfología de panqueque el campo \vec{E}_{\perp} es continuo y las cargas de depolarización que más influyen serán las de las bases del cilindro.

- b) Verifique que $L_x + L_y + L_z = 1$ y escriba cómo queda la ecuación de Clausius – Mossotti para cada componente de cada uno de los casos.

Ejercicio N° 9 (*) – Límites de Aproximación de Bruggeman y Maxwell-Garnett.

Considere un material compuesto de dos fases o materiales diferentes 1 y 2 (entremezcladas) con fracciones volumétricas f_1 y f_2 , de forma que no existe espacio libre entre ellas ni hay una tercer fase presente; o sea $f_1 + f_2 = 1$. Asuma bien conocidas las propiedades ópticas de cada uno de ellos; es decir se conocen las constantes dieléctricas ϵ_1 y ϵ_2 . Las propiedades ópticas del material resultante ϵ pueden hallarse usando la aproximación de Bruggeman (o Aproximación de Medio Efectivo):

$$0 = f_1 \frac{\epsilon_1 - \epsilon}{\epsilon + (\epsilon_1 - \epsilon)L} + f_2 \frac{\epsilon_2 - \epsilon}{\epsilon + (\epsilon_2 - \epsilon)L}$$

donde L es el factor geométrico de depolarización asociado a la morfología de la mezcla. Por ejemplo, para una mezcla de partículas esféricas en una matriz homogénea (caso de validez de la aproximación de Maxwell-Garnett) $L = 1/3$.

- a) Obtenga ϵ como solución de una ecuación de segundo grado y verifique que se puede escribir:

$$\epsilon = \frac{\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + 8\epsilon_1\epsilon_2}}{4}$$

hallando Δ en función de los demás parámetros definidos anteriormente.

NOTA: La elección del signo correcto es el objeto de estudio de las siguientes partes.

- b) En el caso que una de las fases sea predominante en la mezcla (por ejemplo: $f_1 \ll f_2 \approx 1$) puede decirse que el material 1 se encuentra disperso en la matriz que forma el material 2 por lo que, en la aproximación de Maxwell-Garnett, debería escribirse:

$$\frac{\epsilon - \epsilon_2}{\epsilon_2 + (\epsilon - \epsilon_2)L} = f_1 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2)L}$$

- i. Despeje ϵ de esta ecuación y obtenga una aproximación a primer orden en f_1 .
- ii. Obtenga el límite de la expresión de la parte a) anterior en el caso de $f_1 \ll f_2 \approx 1$ y compare con el mismo límite de la parte b) i. anterior. ¿Existe algún caso en que ambas expresiones sean iguales?

- c) (Numérico) Considere como ejemplo el caso de partículas metálicas (plata y cobre) dispersas en una matriz de alúmina (Al_2O_3 ; $n_2 \cong 1.76$ constante). A partir de la relación hallada en la parte a), con la elección adecuada de signo, usando las tablas de propiedades ópticas para la plata y el cobre del Ejercicio N° 12 del Práctico III, estudie cómo se modifican los espectros de índice de refracción y coeficiente de extinción de partículas supuestas esféricas ($L = 1/3$) de plata y cobre en alúmina, variando la fracción de llenado desde $f = 0$ (solo alúmina) a $f = 1$ (solo metal).

NOTA: Esté atento a los cambios bruscos en estos espectros y al signo del coeficiente de extinción.

Ejercicio N° 10 – Efecto de Forma en Resonancia de Plasmones Superficiales.

Considere una partícula (metálica) de forma arbitraria, donde conocemos el factor geométrico de depolarización L . A partir de la polarizabilidad de esta partícula estudie cómo se modificará la condición de Frölich para la aparición de plasmones superficiales. Aplique al caso de una nanopartícula de un metal “ideal” de Drude inmersa en un dieléctrico de constante ϵ_d y encuentre la frecuencia de resonancia en función de la frecuencia de plasma.

Ejercicio N° 11 – Material Poroso.

Considere un material poroso columnar con una densidad de empaquetamiento (fracción volumétrica de llenado de la fase sólida) de 97 %. Se asume que a temperatura ambiente los poros están llenos con agua ($n_{\text{agua}} = 1.33$). El índice de refracción del material poroso a temperatura ambiente es 2.10. Estime el índice de refracción a temperatura mayor a 100 °C, en donde se supone los poros están vacíos.

Ejercicio N° 12 – Electrones Ligados en Metales.

Para tener en cuenta los efectos de los electrones ligados en las propiedades ópticas de los metales reales, puede aplicarse una mezcla del modelo de Drude y el modelo de Lorentz (oscilador armónico amortiguado). O sea, dos osciladores armónicos, uno con frecuencia de resonancia nula (Drude) y uno con frecuencia de resonancia menor que la frecuencia de plasma de los electrones libres.

- Intente visualizar cualitativamente el efecto en la constante dieléctrica total resultante y en la función pérdida dieléctrica correspondiente.
- (Numérico) Ajuste las propiedades ópticas de la plata (tabuladas en el Ejercicio N° 12 del Práctico III) por medio de este modelo.
- ¿Puede hacerse lo mismo con las propiedades ópticas del oro?

Ejercicio N° 13 – Dispersión de Rayleigh.

El color celeste del cielo claro se debe a que la luz que viaja por un material transparente (como el aire limpio o una fibra óptica) es dispersada por el material siguiendo una dependencia con la longitud de onda λ que va como λ^{-4} . Esta dependencia fue obtenida por primera vez por Lord Rayleigh a fines del siglo XIX haciendo un análisis dimensional de las cantidades involucradas en la dispersión de la luz por partículas pequeñas de volumen V .

- a) Intente deducir esta dependencia para el coeficiente de extinción y el coeficiente de “absorción” para la intensidad de luz propagándose por el medio, si se supone que la dispersión de la luz tiene que ser más importante cuanto mayor sea el tamaño $V \ll \lambda^3$ de las partículas dispersantes.
- b) Estudie la dependencia del coeficiente de absorción que se obtiene del modelo de oscilador armónico de Lorentz:

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega}$$

en el límite de alta frecuencia (longitudes de onda azul - UV), lejos de la resonancia $(\omega^2 - \omega_0^2) \gg \Gamma\omega$. ¿Verifica la relación de dispersión de Rayleigh?

- c) Considere ahora un modelo similar al del electrón ligado de Lorentz, que en lugar de estar sometido a una fuerza dispersiva del tipo $-\Gamma \vec{v}$ se sustituye por una fuerza del tipo $\frac{1}{\tau^*} \frac{d^2 \vec{v}}{dt^2}$. Una fuerza de este tipo permite modelar en electrodinámica clásica la potencia disipada por el electrón en movimiento si $\tau^* = \frac{2e^2}{3mc^3}$ siendo e la carga del electrón, m su masa en reposo y c la velocidad de la luz en el vacío.⁵

- i. Estime el valor (orden de magnitud) de τ^* .
- ii. Deduzca cómo se modifica la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$.
- iii. Calcule el nuevo coeficiente de extinción y el coeficiente de “absorción” equivalente en el límite de la parte b) anterior comparando con los resultados de las partes anteriores.

⁵ - Este modelo es no causal. Por más detalles ver J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* 2nd Ed. (1975), o H. Naus and W. Ubachs, *Opt. Lett.* **25**, 347 (2000).