

3. Interacción materia-luz

Contents

- [Repaso de vibraciones mecánicas](#)
- [Interacción de luz con moléculas](#)
- [Interacción de la luz con materiales sólidos](#)
- [Referencias](#)

MEC501 - Manejo y Conversión de Energía Solar Térmica

Profesor: Francisco Ramírez CueSvas

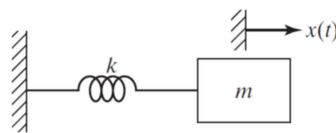
Fecha: 26 de Agosto 2022

Repaso de vibraciones mecánicas

Frecuencia natural de un sistema vibratorio

La frecuencia natural de un sistema vibratorio representa la frecuencia de oscilación del sistema en ausencia de amortiguación y fuerzas externas.

Por ejemplo, en el caso simplificado de un sistema masa resorte



donde, k es la constante de rigidez del resorte, y m es la masa.

La ecuación gobernante está dada por:

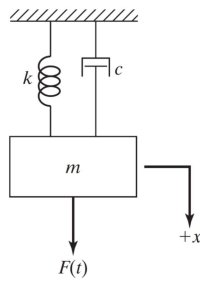
$$\ddot{x} - \omega_n^2 x = 0$$

donde $\omega_n = \sqrt{k/m}$, es la frecuencia natural del sistema

Vibración forzada amortiguada con un grado de libertad

La frecuencia natural cobra relevancia cuando analizamos vibraciones forzadas.

Consideremos, por ejemplo, el sistema masa-resorte amortiguado, con constante de amortiguación c , excitado por una fuerza externa oscilatoria de la forma $F(t) = F_0 e^{i\omega t}$, donde F_0 es una constante.



La ecuación gobernante de este sistema está dada por:

$$\ddot{x} + 2\zeta\omega_n\dot{x} + \omega_n^2x = \frac{F_0}{m}e^{i\omega t},$$

donde $\zeta = \frac{c}{2\omega_n m}$ es la razón de amortiguación

En su forma general, la solución a este sistema está dada $x(t) = x_p(t) + x_h(t)$, donde:

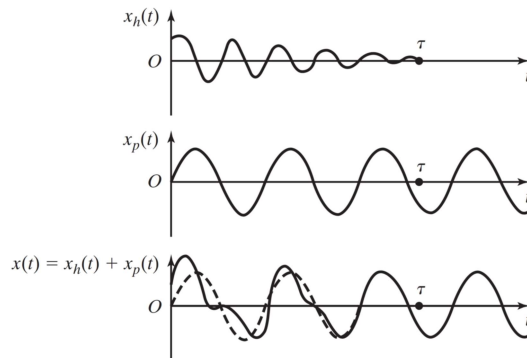
$$x_h(t) = Ce^{-\zeta\omega_n t} e^{i\omega_n \sqrt{1-\zeta^2} t} \quad \text{solución homogénea}$$

$$x_p(t) = \frac{F_0/k}{\omega^2 - \omega_n^2 + 2i\zeta\omega_n\omega} e^{i\omega t} \quad \text{solución particular}$$

donde C es una amplitud arbitraria condicionada por las condiciones iniciales del sistema.

La solución homogénea $x_h(t)$, representa la oscilación libre del sistema. Debido al término $e^{-\zeta\omega_n t}$, esta componente decae en el tiempo y se le conoce como **respuesta transiente**.

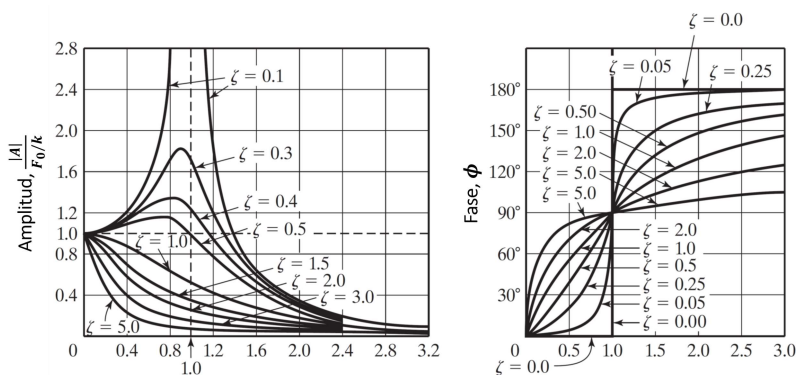
La solución particular $x_p(t)$, por otro lado, representa la vibración en estado estacionario.



Podemos representar la amplitud de $x_p = Ae^{i\omega t}$, como $A = |A|e^{i\phi}$, donde ϕ es la fase. Así, la solución estacionaria queda de la forma:

$$x_p = |A|e^{i(\omega t + \phi)}$$

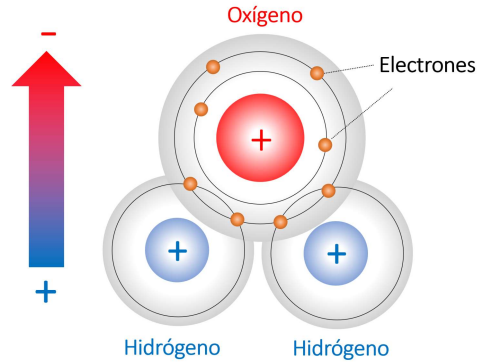
Cuando $\omega/\omega_n = 1$, el sistema entra en resonancia. Esta respuesta se manifiesta con la característica amplificación de $|A|$.



Interacción de luz con moléculas

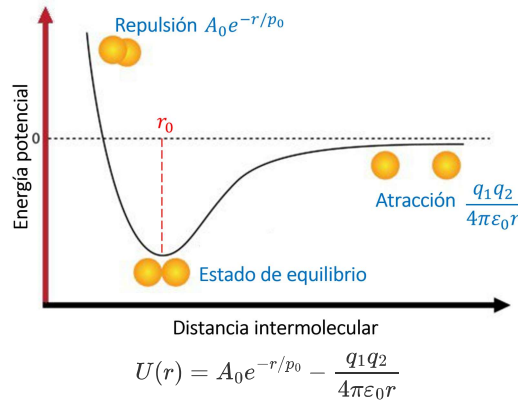
El oscilador armónico

Consideremos la molécula de agua.



Esta molécula es del tipo polar, es decir, posee una carga eléctrica neta positiva en un extremo y negativa en otro. Esto ocurre debido a que la densidad de electrones es mayor en la región cercana al núcleo del oxígeno.

El enlace entre el hidrógeno y el oxígeno es del tipo covalente. El siguiente modelo representa la energía potencial, U en función de la separación entre los núcleos r :



donde A_0 y p_0 son constantes de ajuste, y q_1 y q_2 son, respectivamente, la carga eléctrica neta negativa y positiva.

Se puede demostrar que para oscilaciones pequeñas:

$$U(r) \approx \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$$

donde $k = \left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{r=r_0}$, y r_0 es la posición en el punto de equilibrio.

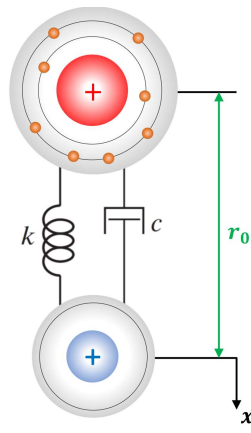
En otras palabras, el enlace entre las moléculas se comporta como un resorte, con una fuerza definida por:

$$F = -k(r - r_0)$$

En otras palabras, la vibración de la molécula de agua puede ser representada como un oscilador armónico.

Modelo de Lorentz

Podemos representar la interacción de la molécula con una onda electromagnética como una vibración forzada amortiguada.



Esto es debido a que una onda electromagnética genera un campo eléctrico oscilatorio de la forma $E_0 e^{-i\omega t}$. La fuerza sobre ejercida sobre cada polo es

$$F = qE_0 e^{-i\omega t},$$

donde q es la carga eléctrica del polo positivo (o negativo).

Por otro lado, la amortiguación surge a raíz de la colisión entre los electrones y los núcleos, además de otras interacciones electromagnéticas.

Asumiendo un eje de referencia situado en el polo positivo, la ecuación de movimiento está dada por:

$$m\ddot{x} + m\Gamma\dot{x} + kx = qE_0 e^{-i\omega t},$$

donde m es la masa del polo positivo, k es la constante de rigidez del enlace entre los polos, y Γ es la **taza de decaimiento** (se mide en unidades 1/s).

La solución estacionaria está dada por la solución particular:

$$x_p(t) = \frac{q/mE_0}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} e^{-i\omega t}$$

El desplazamiento del polo positivo respecto a su estado en equilibrio induce un **momento dipolar**, \vec{p} , el cual expresamos a través de la relación:

$$\vec{p} = q\vec{x}_p(t) = \frac{q^2/m}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} E_0 e^{-i\omega t} \hat{e} \quad [\text{C} \cdot \text{m}]$$

donde \hat{e} es la dirección del campo eléctrico

Definimos como **densidad de polarización**, \vec{P} , al momento dipolar total por unidad de volumen:

$$\vec{P} = N_p \vec{p} = \frac{N_p q^2/m}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \vec{E} \quad \left[\frac{\text{C} \cdot \text{m}}{\text{m}^3} \right]$$

En presencia de un medio polarizado, la ley de Gauss se modifica como: $\nabla \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \rho$.

Representando esta relación en la forma, $\nabla \cdot \epsilon_0 \vec{E} = \rho$, podemos deducir un modelo para la constante dieléctrica del sistema ϵ :

$$\epsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega},$$

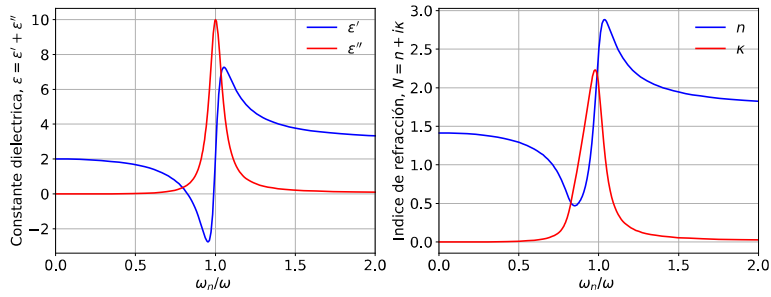
$$\text{con } \omega_p^2 = \frac{N_p q^2}{\epsilon_0 m}$$

En el caso del agua, la molécula posee un dipolo eléctrico neto adicional al dipolo inducido. El efecto de la polarización neta se puede representar, cambiando el primer término por un valor constante ϵ_∞ .

El modelo completo se conoce como **modelo de Lorentz**:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \frac{\omega_p^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad \text{Modelo de Lorentz,} \quad (31)$$

Por ejemplo, para $\varepsilon_{\infty} = 2.0$, $\Gamma = 0.1\omega_n$, y $\omega_p = \omega_n$



El modelo de Lorentz se utiliza como modelo de ajuste para representar la interacción de la luz con los modos vibratorios en la materia

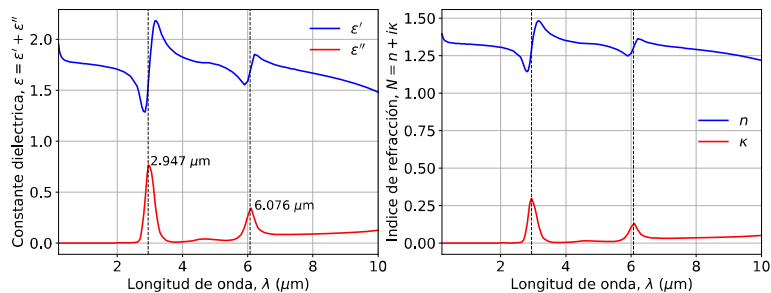
Por ejemplo, la molécula de agua tiene 3 modos de vibración fundamentales en las longitudes de onda $\lambda = 2.98, 2.93$ y $5.91 \mu\text{m}$ ($3351, 3412$ y 1691 cm^{-1})

```
from IPython.display import YouTubeVideo
YouTubeVideo('1uE21vVkkW0', width=600, height=400, playsinline=0)
```

Vibration of a H2O molecule



El índice de refracción del agua muestra dos oscilaciones de Lorentz.



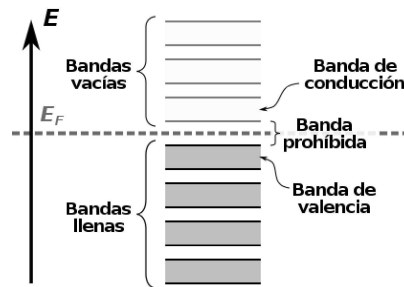
La resonancia en $\lambda = 2.98 \mu\text{m}$ (3351 cm^{-1}) no está presente en el espectro.

Este modo no es compatible con la oscilación de una onda electromagnética plana. Así la luz no interactúa con esta vibración y, por lo tanto, no se ve representada en el espectro del índice de refracción.

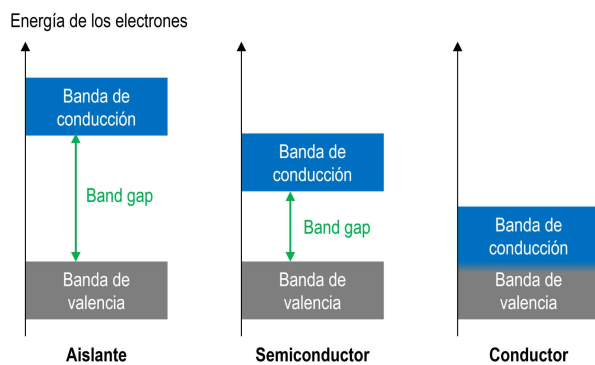
Interacción de la luz con materiales sólidos

El análisis anterior generalmente se aplica a gases, donde las moléculas no interactúan entre sí. En el caso de materiales sólidos, la interacción entre moléculas es fuerte, y genera bandas electrónicas de energía.

- **Banda de valencia:** corresponde a la banda ocupada por electrones con el mayor nivel de energía. En esta banda los electrones permanecen en un estado "ligado" al núcleo.
- **Banda de conducción:** corresponde a la banda no ocupada por electrones con el menor nivel de energía. En esta banda los electrones se mueven libremente por el material
- **Banda prohibida (*band-gap*):** Es la diferencia entre la banda de conducción y la banda de valencia



A partir de la separación entre la banda de conducción y la banda de valencia, podemos clasificar tres tipos de materiales en función de sus propiedades electrónicas:



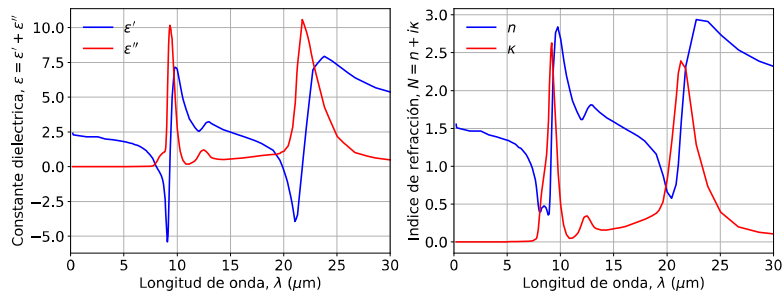
- **Conductor**, donde las bandas de conducción y valencia están traslapadas ($\text{bandgap} = 0$). En estos materiales, parte de los electrones están alojados en la banda de conducción y, por lo tanto, son capaces de conducir corriente eléctrica en presencia de un campo eléctrico.
- **Semiconductor**, donde las bandas de conducción y valencia están separadas. Sin embargo, la energía del bandgap es relativamente pequeña, de manera que un electrón puede ser llevado a la banda de conducción mediante un potencial eléctrico razonable, o mediante una onda electromagnética.
- **Aislante**, donde las bandas de conducción y valencia están muy separadas. El umbral para excitar un electrón a la banda de conducción es demasiado grande y, por lo tanto, el material no es capaz de conducir corriente.

La respuesta óptica de cada tipo de material está condicionada por sus propiedades electrónicas

Aislantes (modelo de Lorentz)

Debido a que los electrones en un aislante están fuertemente ligados al núcleo, la respuesta óptica de este material está condicionada por los modos de vibración de la red atómica. Así, la constante dieléctrica (y el índice de refracción) sigue un comportamiento similar al modelo de Lorentz.

Por ejemplo, el sílice (SiO_2)



Conductores (modelo de Drude)

En este caso los electrones se mueven libremente por la red atómica.

Podemos representar la interacción de los electrones libres con una onda electromagnética utilizando la ecuación de movimiento. En este caso, la fuerza de restauración $kx = 0$, y la ecuación es:

$$m_e \ddot{x} + m_e \Gamma_e \dot{x} = e E_0 e^{-i\omega t},$$

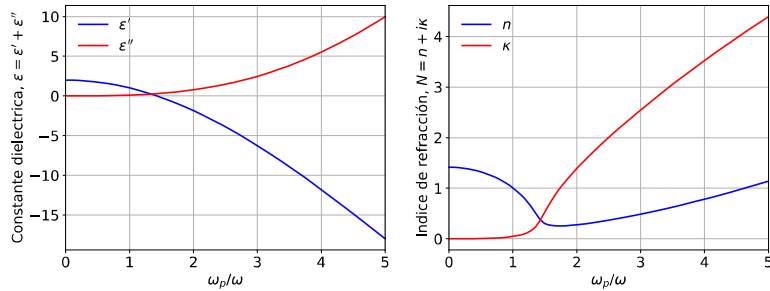
donde m_e , e y Γ_e son, respectivamente, la masa, la carga elemental y la tasa de decaimiento del electrón.

Mediante un procedimiento similar al utilizado para el modelo de Lorentz, derivamos el **modelo de Drude** para conductores:

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma_e \omega}, \quad \text{Modelo de Drude,} \quad (32)$$

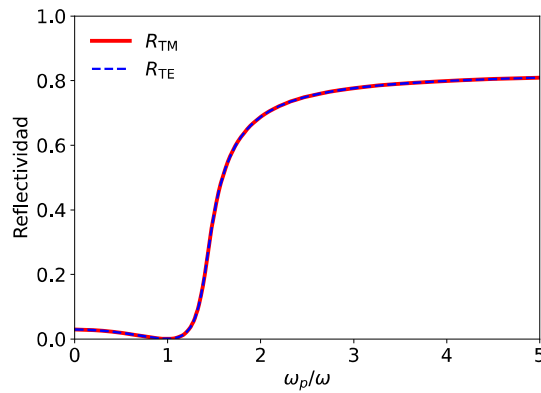
donde $\omega_p^2 = \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m}$ se conoce como frecuencia de plasma, y N_e es la densidad de número de electrones. Similar al modelo de Lorentz, ε_∞ representa la polarización neta del material.

En el siguiente ejemplo, $\varepsilon_\infty = 2.0$ y $\Gamma_e = 0.1\omega_p$

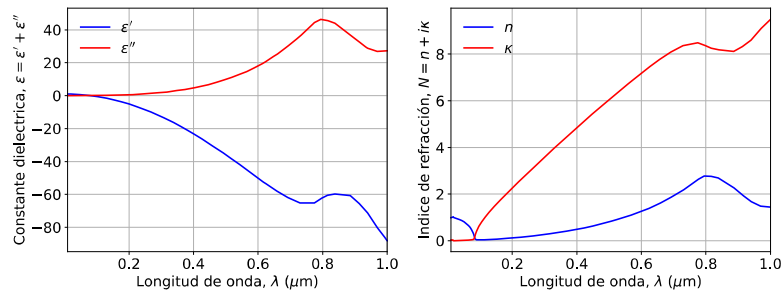


Una característica del modelo de Drude es que $\varepsilon' < 0$ para $\omega_p/\omega \gtrsim 1$. Esto se manifiesta en el índice de refracción como $\kappa > n$

Cuando $\kappa > n$ la reflectividad aumenta significativamente. Así, los materiales conductores tienen alta reflectividad en ambas polarizaciones, cuando $\omega_p/\omega \gtrsim 1$



En general, los metales pueden ser bien representados por el modelo de Drude. Por ejemplo, el aluminio:



Notemos como para $\lambda \approx 0.8 \mu\text{m}$, la respuesta del material se desvía del modelo de Drude. Esta respuesta esta asociada a un modo de vibración (modelo de Lorentz).

Además $\omega_p \lesssim 0.1 \mu\text{m}$, y por lo tanto, refleja todas las longitudes de onda del espectro visible ($\lambda \in [0.38, 0.70] \mu\text{m}$). Esto explica el efecto espejo del aluminio y otros metales

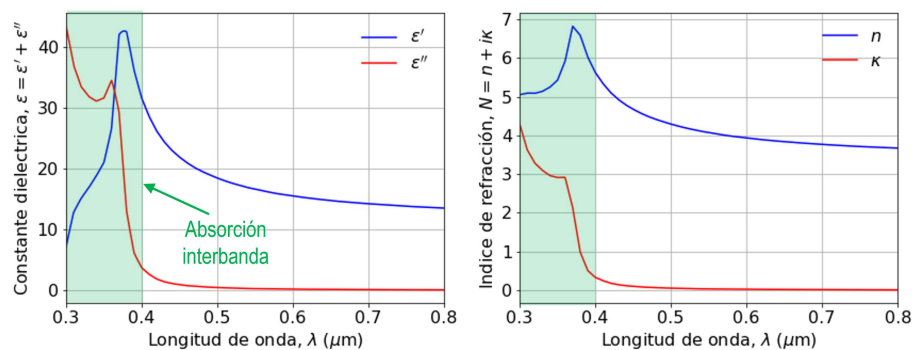
Semiconductores (absorción interbanda)

En este caso las interacciones con ondas electromagnéticas están dictadas por bandas de absorción asociadas a la excitación de electrones a la banda de conducción.

Este fenómeno se conoce como absorción interbanda, y ocurre cuando la energía del fotón $\hbar\omega$ ($\hbar = 6.58 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$) es superior al bandgap del material.

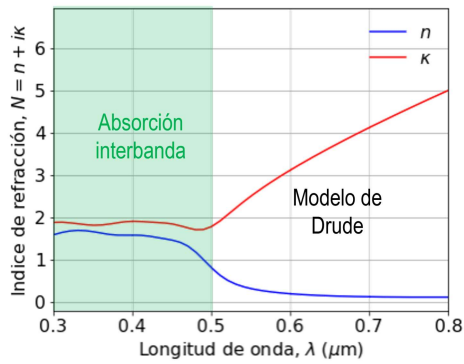
Los semiconductores son los materiales fundamentales en transistores, LED y celdas fotovoltaicas. El semiconductor más conocido es el silicio (Si).

El índice de refracción del silicio es:



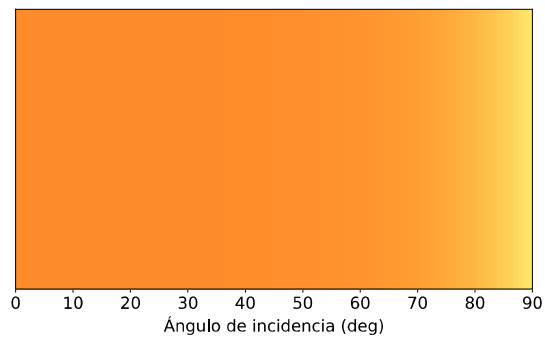
En general, los materiales pueden presentar más de un tipo de respuesta.

Por ejemplo, el oro tiene absorción interbanda en longitudes de onda $\lambda < 0.5 \mu\text{m}$, combinado con el modelo de Drude.

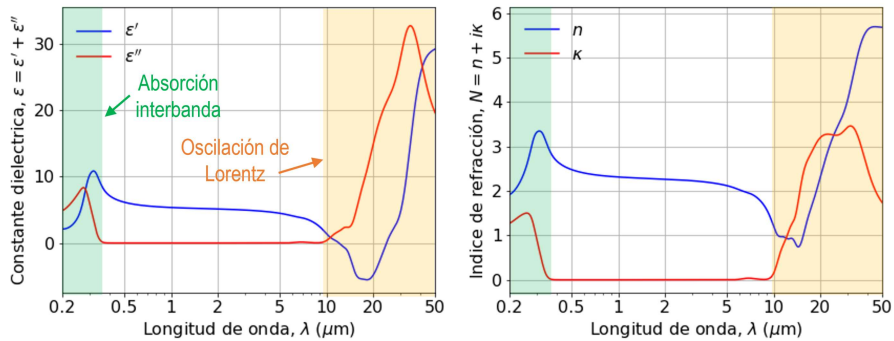


Debido a esta respuesta, el oro absorbe las longitudes de onda correspondientes al azul y violeta, y refleja el resto de los colores.

La siguiente figura muestra el color del oro según el ángulo de incidencia en base al espectro de reflexión de una interface aire/oro.



Otro ejemplo es el dióxido de titanio (TiO_2), el cual presenta absorción interbanda en el espectro ultravioleta, y oscilaciones de Lorentz en el infrarrojo.



Debido a la absorción UV, TiO_2 es muy utilizado en cremas para protección solar.

Referencias

- Rao S. S. **Chapter 4 - Vibration Under General Forcing Conditions** in *Mechanical Vibrations*, 6th Ed, Pearson, 2018
- Griffiths D., **Chapter 4.1 - Polarization** in *Introduction to Electrodynamics*, 4th Ed, Pearson, 2013
- Simmons J. and Potter K., **Chapter 2 and 3** in *Optical Materials*, 1st Ed, Academic Press, 2000