

## Solidi in campi esterni

- Polarizzazione

Affrontiamo il problema di che succede ad un solido se è immerso in un campo elettrico.

Dal corso di “Fisica Generale II” sappiamo che l’effetto macroscopico è la comparsa di un vettore di polarizzazione (vedi), che per un intervallo molto grande di valori del campo è proporzionale al campo stesso :

$$\vec{P} = \chi \vec{E}$$

(gli effetti non lineari si hanno per campi molto intensi).

Poniamoci il problema della dipendenza dal tempo di questo fenomeno.

In generale sia il campo che dunque la polarizzazione dipendono dalla posizione e dal tempo :

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \chi \vec{E}(\vec{r}, t).$$

Questo è essenzialmente quello che abbiamo detto a Fisica II; in particolare abbiamo considerato la suscettività  $\chi$  come una costante.

Per generalizzare le cose teniamo conto del fatto che anche la  $\chi$  può dipendere dalla posizione e dal tempo. Inoltre teniamo conto della ‘memoria’ del sistema, ovvero del fatto che la polarizzazione in una certa posizione e ad un certo istante può dipendere dai valori del campo in altre posizioni ed in istanti precedenti (**non località**, spaziale e temporale) :

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' \chi(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \vec{E}(\vec{r}', t') \text{ (polarizzazione)}$$

Se supponiamo che il campo esterno agisce solo in un certo istante  $t_0$  e in una certa posizione  $\vec{r}_0$ , possiamo descrivere la cosa nella notazione precedente usando delle delta di Dirac :

$$\vec{E}(\vec{r}', t') = \vec{E}_0 \delta(\vec{r}', \vec{r}_0) \delta(t', t_0)$$

da cui

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) \vec{E}_0$$

e questo ci fornisce anche il *significato fisico della suscettività*  $\chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)$  :

« $\chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)$  è la polarizzazione che assume il sistema nel punto  $\vec{r}$  e al tempo  $t$  quando nel punto  $\vec{r}_0$  e al tempo  $t_0$  agisce un campo unitario, istantaneo, e localizzato nel solo punto  $\vec{r}_0$ ».

- **Conseguenze del principio di riproducibilità**

Vediamo adesso quali sono le conseguenze del “principio di riproducibilità”, cioè del principio secondo il quale se si riproducono le stesse condizioni in un sistema a due istanti diversi tutte le grandezze fisiche devono essere le stesse.

A tal fine supponiamo di far agire di nuovo (istantaneamente e localmente) il campo in un altro istante successivo a  $t_0$  :

$$\vec{E}(\vec{r}, t') = \vec{E}_0 \delta(\vec{r}, \vec{r}_0) \delta(t', t_0 + \Delta t)$$

in linea di principio la polarizzazione è diversa, e vale

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0 + \Delta t) \vec{E}_0.$$

Sempre rimanendo in questo caso in cui il campo ha agito in un istante successivo, ritardiamo anche il tempo della misura, cioè consideriamo la polarizzazione misurata non al tempo  $t$  ma al tempo  $t + \Delta t$  :

$$\vec{P}(\vec{r}, t + \Delta t) = \chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t + \Delta t, t_0 + \Delta t) \vec{E}_0.$$

Ora, invocando il principio di riproducibilità di cui sopra, poichè abbiamo applicato il campo dopo  $\Delta t$  e abbiamo misurato la polarizzazione dopo lo stesso intervallo di tempo, imponiamo che le due polarizzazioni siano uguali :

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) = \chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t + \Delta t, t_0 + \Delta t).$$

Questa relazione si può esprimere anche nella forma più espressiva :

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t - t_0, 0) = \chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)$$

la quale si può ‘leggere’ dicendo che la polarizzazione misurata al tempo  $t - t_0$  dovuta ad un campo unitario istantaneo e locale applicato al tempo  $0$  deve essere uguale alla polarizzazione misurata al tempo  $t$  dovuta ad un campo unitario istantaneo e locale applicato al tempo  $t_0$ , cioè alla polarizzazione che si ha quando sia nel tempo di applicazione del campo che nel tempo di misurazione si fa lo stesso ‘shift temporale’ pari

a  $t_0$ .

In definitiva questa relazione ci dice che la dipendenza non è in assoluto da  $t$  ma dalla differenza tra il tempo di osservazione e il tempo in cui ho applicato il campo.

Possiamo adesso rivolgerci alla dipendenza spaziale.

Se facciamo anche l'ipotesi che il solido è omogeneo otteniamo

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) = \chi(\vec{r} - \vec{r}_0, 0, t - t_0, 0).$$

Ma a ben vedere, se teniamo conto della struttura reticolare dei cristalli, l'ipotesi di omogeneità è intrinsecamente scorretta, e va sostituita con la proprietà di "omogeneità per traslazioni reticolari" :

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}_0, t - t_0) = \chi(\vec{r} + \vec{R}, \vec{r}_0 + \vec{R}, t - t_0).$$

### • Convoluzione e trasformata

Ritorniamo alla formula generale della polarizzazione. La possiamo scrivere in modo molto più significativo scrivendo

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \theta(t - t') \vec{E}(\vec{r}', t')$$

dove abbiamo esteso l'integrale da  $-\infty$  a  $+\infty$ , e abbiamo introdotto una funzione gradino che fa diventare nullo l'integrando 'nel futuro'.

L'aver messo le cose in questa forma è molto utile, infatti in questo modo otteniamo ciò che si definisce 'integrale di convoluzione'.

Per rendere le cose più chiare immaginiamo di considerare una sola coordinata spaziale, o il solo tempo : unidimensionalmente l'espressione della polarizzazione assume la forma

$$P(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(x - x') E(x') dx'$$

che è appunto un integrale di convoluzione.

Ora, una nota proprietà della trasformata di Fourier ci dice che se 'passiamo alle trasformate' (cioè consideriamo l'equazione equivalente tra le trasformate dei due membri), l'integrale di convoluzione diventa un semplice prodotto.

In altri termini, se passiamo alle trasformate di Fourier sia rispetto allo spazio che rispetto al tempo otteniamo :

$$\vec{P}(\vec{k}, \omega) = \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega).$$

Dunque, passando allo spazio duale, abbiamo ottenuto una relazione lineare tra la polarizzazione e il campo, quasi uguale a quella che in genere si usa a Fisica II, tranne che per il fatto che la  $\chi$  non è costante.

Avendo le stesse relazioni viste in Fisica Generale possiamo portare avanti gli stessi conti, e ottenere gli stessi risultati.

Tuttavia il fatto che la  $\chi$  dipende dal vettore d'onda e dalla frequenza comporta come conseguenza che la velocità di fase delle varie componenti di Fourier di un'onda elettromagnetica che si propaga nel cristallo varia. In altre parole il materiale è *dispersivo*.

Altro risultato che vedremo è che oltre alla classe di 'soluzioni delle equazioni di Maxwell' di tipo trasversale, compaiono delle soluzioni di tipo longitudinale.

#### • Equazioni di Maxwell in trasformata

Andiamo a vedere in dettaglio i conti partendo dalle equazioni di Maxwell.

Le equazioni di Maxwell con i campi "non in trasformata", scritte usando il sistema di unità di misura di Gauss sono :

$$1) \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4 \pi (\rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{cond}})$$

$$2) \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

$$3) \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$4) \vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4 \pi}{c} (\vec{J}_{\text{ext}} + \vec{J}_{\text{cond}})$$

(equazioni di Maxwell)

dove

$$\vec{D} \equiv \vec{E} + 4 \pi \vec{P} \quad (\text{vettore di spostamento})$$

e

$$\vec{B} \equiv \vec{H} - 4 \pi \vec{M} \quad (\text{vettore di induzione magnetica}).$$

Nella prima equazione compaiono la densità di carica esterna, sorgente dei campi e la densità di carica di conduzione.

La corrente che compare nella quarta equazione è la somma di correnti 'di conduzione' che si generano nel solido, più 'eventuali' correnti esterne (sorgenti dei campi).

Anticipiamo che ad un certo punto faremo l'ipotesi di stare lontani dalle sorgenti, e dunque sia la densità di carica esterna che le correnti esterne verranno trascurate.

Quando introdurremo singolarmente le equazioni vedremo in dettaglio questi aspetti.

### - prima equazione di Maxwell

Cominciamo con la prima equazione.

Scriviamola in una forma in cui esplicitiamo i vari tipi di cariche che sono in gioco :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4 \pi (\rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{cond}}) \quad (\text{viene dal teorema di Gauss})$$

dove i tipi di densità di carica presenti sono :

- a) la carica esterna (quella per ottenere i campi esterni)
- b) le cariche di conduzione, responsabili delle eventuali correnti.

A questo punto possiamo passare alle trasformate di Fourier.

Stabiliamo innanzitutto la seguente convenzione riguardo ai segni all'argomento dell'esponenziale :

$$E(\vec{r}, t) = \int \tilde{E}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k} d\omega$$

Ciò posto, passiamo alle trasformate nell'equazione di Maxwell.

In un certo senso anziché sostituire a  $E$  la parte destra della relazione (con l'integrale) è come se considerassi il "solo integrando", cioè, detto in altre parole, una sola 'componente monocromatica' :

$$i \vec{k} \cdot \vec{D}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi [\rho_{\text{ex}}(\vec{k}, \omega) + \rho_{\text{cond.}}(\vec{k}, \omega)] \quad (1^{\text{a}} \text{ equazione di Maxwell in trasf.})$$

Ricordiamo che il vettore di spostamento tiene conto del campo esterno e della polarizzazione del mezzo.

Se esplicitiamo il vettore di polarizzazione, abbiamo :

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) \equiv \left[ \vec{E}(\vec{k}, \omega) + 4 \pi \vec{P}(\vec{k}, \omega) \right]$$

- solidi in campi esterni -

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \left[ \vec{E}(\vec{k}, \omega) + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) \right]$$

e dunque mettendo in evidenza

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \vec{E}(\vec{k}, \omega) [1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega)]$$

possiamo definire la **funzione dielettrica** :

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \quad (\text{funzione dielettrica}).$$

Possiamo dire che questa ottenuta qui è un'espressione provvisoria : in seguito otterremo un'espressione 'migliore' della prima equazione di Maxwell in trasformata, dove in particolare riusciremo ad inglobare anche le cariche di conduzione in un unico termine al primo membro, lasciando al secondo membro le sole cariche esterne, sorgenti del campo, che poi verranno poste a zero.

- seconda equazione di Maxwell

Consideriamo adesso la seconda equazione di Maxwell :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad ;$$

passando alle trasformate

$$i \vec{k} \cdot \vec{B}(\vec{k}, \omega) = 0 \quad (2^{\text{a}} \text{ equazione di Maxwell in trasformata})$$

- terza equazione di Maxwell

Consideriamo ora la terza :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

passando alle trasformate diventa :

$$i \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = i \frac{\omega}{c} \vec{B}(\vec{k}, \omega) \quad (3^{\text{a}} \text{ equazione di Maxwell in trasformata})$$

notare che il segno meno al secondo membro va via col segno meno che viene dalla convenzione sui segni delle trasformate che abbiamo fatto all'inizio.

A questo punto, anziché affrontare la 4<sup>a</sup> equazione di Maxwell e scriverla subito ‘in trasformata’, vogliamo introdurre una funzione dielettrica che tenga conto oltre che del campo legato alla polarizzazione, anche del campo legato alle correnti di conduzione. In questo modo otterremo oltre che la 4<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata, una forma più compatta per la 1<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata.

### \* legge di conservazione e legge di Ohm locale

# Consideriamo la legge di conservazione della carica.

E’ possibile considerare separatamente le cariche esterne e le cariche di conduzione, e quindi si può scrivere una legge di conservazione per le sole cariche di conduzione :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{\text{cond}} + \frac{\partial \rho_{\text{cond}}}{\partial t} = 0 \quad (\text{legge di conservazione per le cariche di conduzione}).$$

Passando alle trasformate :

$$i \vec{k} \cdot \vec{j}_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) - i \omega \rho_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) = 0$$

$$i \omega \rho_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) = i \vec{k} \cdot \vec{j}_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega)$$

$$\rho_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) = i \frac{\vec{k}}{i \omega} \cdot \vec{j}_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) \quad (\text{legge di conservazione in trasformata}).$$

# In generale, la legge di Ohm espressa con il campo e la densità di corrente (dunque “in forma locale”) è :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sigma \vec{E}(\vec{r}, t)$$

dove  $\sigma$  è la conducibilità.

Possiamo dire che questa è una “legge di Ohm in forma locale”, scritta cioè in termini di corrente, conducibilità e campo. Questa è un’espressione della relazione tra la corrente e il “campo di conduzione” che la genera.

Anche in questo caso, come per la polarizzazione, si può tenere conto della non omogeneità e della non costanza nel tempo del fenomeno.

Con passaggi del tutto analoghi a quelli visti all’inizio per la polarizzazione, si può arrivare ad un’espressione in cui compare un integrale di convoluzione.

Passando alle trasformate si ha dunque :

$$\vec{j}(\vec{k}, \omega) = \tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) \quad (\text{legge di Ohm ‘locale’ in trasformata}).$$

Se adesso mettiamo insieme i due risultati ottenuti (legge di conservazione e legge di Ohm, entrambe in trasformata) possiamo scrivere la densità di cariche di conduzione in termini del campo :

$$\rho_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) = i \frac{\vec{k}}{i \omega} \cdot \vec{j}_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega)$$

$$\rho_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) = i \frac{\vec{k}}{i \omega} \cdot \vec{\sigma}(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

### \* funzione dielettrica generalizzata

Ciò detto abbiamo gli strumenti per introdurre la funzione dielettrica complessiva cui abbiamo accennato.

Ricordiamo come abbiamo introdotto la funzione dielettrica.

Considerando l'espressione del vettore di spostamento che abbiamo introdotto in precedenza :

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) \equiv \vec{E}(\vec{k}, \omega) + 4 \pi \vec{P}(\vec{k}, \omega)$$

si può mettere in evidenza il campo al secondo membro

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \vec{E}(\vec{k}, \omega) [1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega)]$$

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \vec{E}(\vec{k}, \omega) \varepsilon(\vec{k}, \omega)$$

dove abbiamo posto

$$\varepsilon(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \quad (\text{funzione dielettrica})$$

Ricordiamo la prima equazione di Maxwell in trasformata

$$i \vec{k} \cdot \vec{D}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi [\rho_{\text{ex}}(\vec{k}, \omega) + \rho_{\text{cond.}}(\vec{k}, \omega)]$$

$$i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i \vec{k} \cdot 4 \pi \vec{P}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi [\rho_{\text{ex}}(\vec{k}, \omega) + \rho_{\text{cond.}}(\vec{k}, \omega)]$$



- solidi in campi esterni -

$$i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i \vec{k} 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi [\rho_{\text{ex}}(\vec{k}, \omega) + \rho_{\text{cond.}}(\vec{k}, \omega)]$$

$$i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i \vec{k} 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) - 4 \pi \rho_{\text{ex}}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi \rho_{\text{cond.}}(\vec{k}, \omega)$$

e ricordiamo l'espressione che abbiamo appena ottenuto per la densità delle cariche scritte in funzione del campo (legge di conservazione + legge di Ohm), che ci permette di esprimere la densità di carica in trasformata in termini del campo elettrico in trasformata :

$$\rho_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) = i \vec{k} \frac{1}{i \omega} \vec{\sigma}(\vec{k}, \omega) \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega).$$

Guardando al primo membro dell'equazione di Maxwell messo in questa forma ci viene in mente di definire la "funzione dielettrica complessiva" :

$$\epsilon_{\text{tot}}(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) - \frac{4 \pi}{\omega i} \vec{\sigma}(\vec{k}, \omega) \text{ (funzione dielettrica generalizzata).}$$

In un certo senso è come se volessimo arrivare a scrivere un "vettore di spostamento più grande", che tiene conto anche di eventuali fenomeni di conduzione che intervengono nel solido. Tornando all'espressione del vettore di spostamento :

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) \equiv \vec{E}(\vec{k}, \omega) + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

osserviamo che nelle equazioni di Maxwell in trasformata compare un fattore  $i \vec{k}$  davanti ad entrambi i termini :

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

Dunque possiamo scrivere il "vettore di spostamento più grande", cioè il campo nei tre termini "esterno" "di polarizzazione" e "di conduzione" :

$$\vec{\Delta}(\vec{k}, \omega) = i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i \vec{k} \frac{\vec{\sigma}(\vec{k}, \omega)}{i \omega} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

(**nota bene** : questo vettore è una mia 'invenzione', il prof "non ne sa niente". Mi raccomando, acqua in bocca...;-) )

\* 1<sup>a</sup> e 4<sup>a</sup> equazione in trasformata scritte usando la funzione dielettrica generalizzata

Ora siamo in grado di riformulare e formulare rispettivamente la prima e la quarta equazione di Maxwell scritte in trasformata utilizzando questo concetto di funzione

dielettrica generalizzata.

Vedremo che in questo modo riusciamo a scrivere al primo membro tutti i campi che si producono all'interno del solido per i vari fenomeni di polarizzazione o di conduzione, lasciando al secondo membro le sole "sorgenti" dei campi.

Scriviamo infatti la prima equazione di Maxwell 'svilupata' opportunamente :

$$i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + i \vec{k} \cdot 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) - 4 \pi \rho_{ex}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi \rho_{cond.}(\vec{k}, \omega)$$

e sostituiamo alla densità di carica di conduzione (in trasformata) la sua espressione in funzione del campo elettrico (in trasformata) ce abbiamo ottenuto usando la legge di conservazione e la legge di Ohm :

$$i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) + 4 \pi i \vec{k} \cdot \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) - \frac{4 \pi}{\omega i} i \vec{k} \cdot \sigma(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) =$$
$$= 4 \pi \rho_{ex}(\vec{k}, \omega)$$

A questo punto mettendo in evidenza  $i \vec{k}$  e il campo elettrico è facile far comparire la funzione dielettrica complessiva che abbiamo definito poc'anzi (vedi) :

$$i \vec{k} \cdot \left[ 1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega) - \frac{4 \pi}{\omega i} \sigma(\vec{k}, \omega) \right] \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi \rho_{ex}(\vec{k}, \omega)$$

In questo modo possiamo dire di aver inglobato i fenomeni di conduzione in una "funzione dielettrica complessiva", e dunque l'equazione (1<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata) diventa

$$i \vec{k} \cdot \epsilon_{tot}(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi \rho_{ex}(\vec{k}, \omega)$$

(1<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata, versione definitiva)

- quarta equazione di Maxwell

Affrontiamo adesso finalmente la 4<sup>a</sup> equazione di Maxwell :

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4 \pi}{c} (\vec{J}_{cond} + \vec{J}_{ext})$$

Anche in questo caso, come fatto per la prima, scriviamo esplicitamente tutte le correnti e tutti i campi presenti :

- solidi in campi esterni -

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} + 4 \pi \vec{\nabla} \times \vec{M} = \frac{4 \pi}{c} \vec{J}_{\text{ext}} + \frac{4 \pi}{c} \vec{J}_{\text{cond}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4 \pi}{c} \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}$$

I vari termini, oltre al rotore di B, sono come segue :

a) corrente di magnetizzazione (indotta dal campo magnetico esterno)

$$\vec{M}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_m(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{B}(\vec{r}', t')$$

(dove )

b) correnti esterne (sorgenti del campo magnetico esterno)

c) correnti di conduzione interne al materiale

d) corrente di spostamento

e) corrente di polarizzazione.

vediamo che anche in questo caso tra campo magnetico e magnetizzazione c'è una relazione tramite un integrale di convoluzione.

Comunque per semplificarci la vita supporremo che il cristallo in questione sia dielettrico, cioè polarizzabile, ma non magnetizzabile.

In altre parole supponiamo  $\chi_m=0$  e dunque  $\vec{H} = \vec{B}$ .

In questo modo trascuriamo il secondo termine del primo membro :

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4 \pi}{c} (\vec{J}_{\text{cond}} + \vec{J}_{\text{ext}})$$

Passando alle trasformate si ha :

$$i \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = \frac{4 \pi}{c} \left[ \vec{j}_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) + \vec{j}_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \right] - \frac{i \omega}{c} \vec{D}(\vec{k}, \omega).$$

Esplicitiamo il campo elettrico nel vettore di polarizzazione :

$$i \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = \frac{4 \pi}{c} \vec{j}_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) + \frac{4 \pi}{c} \vec{j}_{\text{cond}}(\vec{k}, \omega) - i \frac{\omega}{c} \vec{E}(\vec{k}, \omega) - \frac{4 \pi}{c} i \omega \chi(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega).$$

Adesso è facile inglobare sia gli effetti di polarizzazione che quelli di conduzione nella

funzione dielettrica complessiva, lavorando opportunamente sul termine della corrente di conduzione, con passaggi analoghi a quelli visti per la 1<sup>a</sup> equazione di Maxwell (legge di Ohm locale e legge di conservazione).

In questo modo si ottiene :

$$\begin{aligned} i \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) &= \\ &= -i \frac{\omega}{c} \left[ 1 + 4\pi \chi(\vec{k}, \omega) + \frac{4\pi}{\omega i} \tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega) \right] \vec{E}(\vec{k}, \omega) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \end{aligned}$$

e finalmente, introducendo la funzione dielettrica generalizzata

$$i \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = -i \frac{\omega}{c} \epsilon_{\text{tot}}(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega)$$

(4<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata).

Se adesso ci mettiamo lontano dalle sorgenti, cioè eliminando sia le cariche esterne che le correnti esterne, le quattro equazioni si scrivono :

$$\text{I) } \vec{k} \cdot \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 0$$

$$\text{II) } \vec{k} \cdot \vec{B}(\vec{k}, \omega) = 0$$

$$\text{III) } \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega}{c} \vec{B}(\vec{k}, \omega)$$

$$\text{IV) } \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = -\frac{\omega}{c} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}$$

(Equazioni di Maxwell in trasformata in assenza di sorgenti)

(NB abbiamo diviso per l'unità immaginaria tutte le equazioni)

## • Onde elettromagnetiche

Adesso che ci siamo procurati le equazioni di Maxwell in trasformata cerchiamo le soluzioni.

A Fisica II le soluzioni che abbiamo trovato sono le onde elettromagnetiche, in particolare onde trasversali.

In questo caso più sofisticato, in cui teniamo conto degli effetti di “non località sia nel tempo che nello spazio”, la differenza sostanziale è che le “costanti dielettriche” non sono appunto costanti ma sono funzioni.

Vedremo che questo porta ad altre soluzioni, oltre alle onde trasverse.

Seguiamo la strategia seguita a Fisica II.

Guardando la prima equazione :

$$\vec{k} \cdot \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 0,$$

se la  $\epsilon_{\text{tot}}$  fosse una costante, l'unica possibilità sarebbe porre

$$\vec{k} \perp \vec{E}(\vec{k}, \omega);$$

ma nel nostro caso, essendo la 'costante' una funzione, esiste un'altra possibilità, e cioè

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) = 0,$$

e in questo secondo caso non è necessario che  $\vec{k} \perp \vec{E}(\vec{k}, \omega)$ .

Vedremo dunque i due casi separatamente, ma prima facciamo un pò di manipolazioni sulle equazioni di Maxwell.

Ripercorrendo i conti fatti a Fisica II vogliamo arrivare ad un'equazione per le onde : moltiplichiamo vettorialmente a sinistra per  $\vec{k}$  la 3<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata :

$$\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega}{c} \vec{B}(\vec{k}, \omega) \quad (3^{\text{a}} \text{ equazione di Maxwell in trasformata})$$

$$\vec{k} \times \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega}{c} \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega).$$

Ma il secondo membro di questa relazione è (a meno del fattore  $\omega/c$ ) il primo membro della 4<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata

$$\vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = -\frac{\omega}{c} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E} \quad (4^{\text{a}} \text{ equazione di Maxwell in trasformata})$$

pur di moltiplicare ambo i membri per  $\omega/c$  :

$$\frac{\omega}{c} \vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}$$

Sostituendo si ha

$$\vec{k} \times \left[ \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) \right] = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega).$$

Adesso si usa la relazione vettoriale (valida in generale) :

$$\vec{a} \times (\vec{a} \times \vec{b}) = [\vec{a}(\vec{a} \cdot \vec{b}) - a^2 \vec{b}]$$

(è un caso particolare di una formula più generale, cfr. Mencuccini Silvestrini, vol II, appendice A, formula [A.II.13c] (prodotto vettoriale doppio), pag 642 :

$$(\vec{a} \times \vec{b}) \times \vec{c} = \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{a}(\vec{b} \cdot \vec{c})$$

da cui

$$\vec{c} \times (\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{a}(\vec{b} \cdot \vec{c}) - \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c})$$

e, rinominando opportunamente :

$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b}(\vec{c} \cdot \vec{a}) - \vec{c}(\vec{b} \cdot \vec{a}).$$

Dunque

$$\vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{E}) - k^2 \vec{E} = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}$$

(equazione delle onde per il campo elettrico in trasformata).

Ottenuta questa relazione, affrontiamo separatamente i due casi :

$$\text{caso a) } \vec{k} \perp \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

$$\text{caso b) } \epsilon_t(\vec{k}, \omega) = 0$$

\* prima classe di soluzioni (onde trasversali)

$$\text{Caso a) : } \vec{k} \perp \vec{E}$$

Osserviamo innanzitutto che, poiché la 2<sup>a</sup> equazione di Maxwell in trasformata

$$\vec{k} \cdot \vec{B} = 0$$

ci dice che  $\vec{k} \perp \vec{B}$ , si ha anche  $\vec{B} \perp \vec{E}$  e dunque  $\vec{k}$ ,  $\vec{B}$  e  $\vec{E}$  sono tre vettori mutuamente ortogonali.

Partiamo dall'equazione delle onde appena trovata :

$$\vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{E}) - k^2 \vec{E} = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}.$$

e ricaviamo una relazione tra vettore d'onda e pulsazione, ossia una 'relazione di dispersione'.

Tenendo conto che stiamo considerando il caso  $\vec{k} \perp \vec{E}(\vec{k}, \omega)$ , al primo membro il primo termine (prodotto scalare) è nullo, e dunque l'equazione diventa :

$$k^2 \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}$$

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \quad (1^a \text{ relazione di dispersione}).$$

Dunque abbiamo ottenuto una relazione (implicita) tra  $\omega$  e  $\vec{k}$  : una relazione di dispersione.

Vediamo che se  $\epsilon_t$  fosse una costante si otterrebbe una relazione di dispersione lineare, che è quello che abbiamo ottenuto a Fisica II quando abbiamo trascurato la non località e la 'memoria' dei fenomeni).

Invece, in questo caso otteniamo una relazione di dispersione non lineare, che descrive una propagazione dispersiva : ogni componente monocromatica ha una velocità di propagazione diversa.

Riassumendo, questa classe di soluzioni è caratterizzata dalle seguenti relazioni :

$$\vec{k} \perp \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

$$\vec{k} \perp \vec{B}(\vec{k}, \omega)$$

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega)$$

\* seconda classe di soluzioni (onde longitudinali)

Caso b) :  $\epsilon_t(\vec{k}, \omega) = 0$ .

La relazione in ipotesi è già di per se è una relazione di dispersione, cioè una relazione tra  $\omega$  e  $\vec{k}$  :

$$\omega_l(\vec{k}) \quad (2^a \text{ relazione di dispersione}).$$

Vediamo in questo caso cosa possiamo dire sulla direzione dei campi.

L'equazione per le onde per il campo elettrico che abbiamo trovato in precedenza è

$$\vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{E}) - k^2 \vec{E} = -\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}$$

e dunque in questo caso diventa

$$(\vec{E} \cdot \vec{k})\vec{k} - k^2 \vec{E} = 0$$

$$(\vec{E} \cdot \vec{k})\vec{k} = k^2 \vec{E}$$

Da questa relazione si deduce che :

$$\vec{k} \parallel \vec{E}$$

in quanto il membro di sinistra è un vettore diretto come  $\vec{k}$  mentre il membro di destra è un vettore diretto come  $\vec{E}$ .

D'altra parte, dalla 3<sup>a</sup> equazione di Maxwell (in trasformata)

$$i \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = i \frac{\omega}{c} \vec{B}(\vec{k}, \omega)$$

si ha che se il campo elettrico è parallelo al vettore d'onda il campo magnetico è identicamente nullo.

Allora, riassumendo, questa seconda classe di soluzioni è caratterizzata da

$$\vec{k} \parallel \vec{E}$$

$$\vec{B} = 0$$

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega = \omega_l(\vec{k})$$

Come preannunciato, questa classe di soluzioni descrive delle onde longitudinali, col campo elettrico parallelo alla direzione di propagazione e il campo magnetico



identicamente nullo.

### \* commenti sulle onde longitudinali

Vediamo di dare un significato a questo secondo tipo di soluzioni (onde longitudinali). Innanzitutto cominciamo col dire che per come abbiamo impostato il discorso questi risultati sono del tutto generali, cioè non sono specifici per cristalli, metalli, o per solidi con cariche libere.

Comunque per fissare le idee consideriamo un metallo (in effetti abbiamo fatto un'ipotesi di uniformità spaziale che mal si adatta alla struttura reticolare dei cristalli ...). Il metallo presenta una distribuzione uniforme di carica (elettroni).

Immaginiamo di perturbare ad un certo istante l'uniformità di carica, ad esempio mettendo all'interno del materiale una carica, e togliendola subito dopo.

In quell'istante si altera la neutralità elettrica del materiale : se immaginiamo che la carica esterna è positiva, gli elettroni vi si addenseranno attorno, e dunque in altre zone si avranno delle cariche positive in eccesso.

Una volta che la carica viene poi rimossa, gli elettroni tendono a ritornare alla configurazione iniziale, e quindi si innesca un moto oscillatorio della densità di carica. Questo rende conto anche del perché il campo magnetico in questo tipo di onde è nullo.

Nel concreto l'esperimento si può fare con un film metallico, abbastanza spesso perché non siano importanti gli effetti di superficie (il nostro modello è fatto con il bulk del materiale, rappresentato come infinito), ma nemmeno troppo spesso. L'idea è di prendere un flusso di particelle cariche, ad esempio ioni idrogeno, e spararle sul materiale. Se il film è abbastanza sottile queste cariche lo attraversano, innescando l'effetto sopra descritto.

Se si vanno a misurare le energie delle cariche prima e dopo del film, si vede che la differenza di energia è proprio multipla di  $\hbar\omega$  dove le frequenze sono quelle del secondo tipo di soluzioni delle equazione delle onde in trasformata (onde longitudinali). Questo è l'aspetto quantistico del fenomeno; infatti notiamo che il modello sviluppato fino a questo punto è strettamente quantistico.

### • Carattere complesso della funzione dielettrica

Ricordiamo la definizione di funzione dielettrica complessiva (vedi) :

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4\pi \chi(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{\omega i} \tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega)$$

Vediamo che non abbiamo detto niente sul fatto se le funzioni  $\chi(\vec{k}, \omega)$  e  $\tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega)$  che vi compaiono sono reali o complesse, e comunque c'è un'unità immaginaria al denominatore.

Dunque immaginiamo che in generale la funzione dielettrica sia una quantità complessa.

Allora, in entrambi i casi che abbiamo visto per le equazioni delle onde (che portano alle due classi di soluzioni) abbiamo a che fare con equazioni differenziali complesse di

funzioni reali (i campi  $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$ ).

Ma un'equazione complessa di variabili reali può avere soluzioni complesse !

Quindi si può dare il caso che almeno una tra  $\vec{k}$  e  $\omega$  siano grandezze complesse.

Supponiamo che  $\vec{k}$  sia reale, e che  $\omega$  abbia una parte reale e una parte immaginaria.

Per capire le conseguenze di questo fatto, torniamo ai campi 'diretti' (e non le loro trasformate).

Se consideriamo il campo elettrico come "antitrasformata" si ha :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int d\vec{k} \vec{E}(\vec{k}, \omega(\vec{k})) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k}) t)}$$

dove notiamo che abbiamo limitato l'integrazione al solo  $\vec{k}$  (integrale triplo e non quadruplo) perché abbiamo utilizzato la relazione di dispersione (una delle due possibili, per le due classi di soluzioni), e dunque non c'è dipendenza da  $\omega$ .

Osserviamo due cose :

a) la funzione  $\omega(k)$  'modula' l'integrando (dispersione) in modo da avere un pacchetto d'onda

b) se scriviamo esplicitamente  $\omega$  come somma di parte reale e parte immaginaria, nell'integrando compare anche un esponenziale reale, quindi o rapidamente crescente o rapidamente decrescente.

Questo esponenziale reale è associato alla parte immaginaria della  $\omega$ .

Da questa cosa concludiamo che la parte immaginaria della funzione dielettrica  $\epsilon_t$  è legata a fenomeni di assorbimento o di amplificazione della radiazione nel mezzo (attenuazione o laser).

### • Propagazione di onde elettromagnetiche nei solidi

La trattazione generale delle proprietà di  $\vec{k}$  e  $\omega$ , e della relazione di dispersione, e dunque il dettaglio dei fenomeni di propagazione nei solidi, va al di là degli scopi del corso. Vogliamo qui trattare due casi limite :

il caso metallico;

il caso dielettrico, in cui c'è un reticolo di ioni e saranno rilevanti i modi 'ottici' di oscillazione.

Questi due sono 'casi limite' nel senso che :

il **metallo** viene studiato come un caso di solido in cui sono trascurabili i fenomeni di polarizzazione, e dunque nella funzione dielettrica generalizzata si trascura il termine con la suscettività ( $\chi=0$ ).

Viceversa il **dielettrico** viene studiato come un caso di solido in cui sono trascurabili i fenomeni di conduzione, e dunque nell'espressione della funzione dielettrica generalizzata si trascura il termine con la conducibilità ( $\sigma=0$ ).

### **\*\* Propagazione nei metalli \*\***

Consideriamo l'espressione della funzione dielettrica generalizzata (o 'totale') :

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4\pi\chi(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{\omega i} \tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega)$$

il secondo termine descrive i fenomeni di polarizzazione degli ioni, e il terzo termine descrive i fenomeni legati alla conduzione degli elettroni.

Allora il caso più semplice è quello in cui non c'è la polarizzazione degli ioni :

$$\chi = 0.$$

Rimarchiamo che questo non è mai vero, ed è un limite ideale per cominciare a studiare i fenomeni.

### **\* espressione esplicita della (trasformata della) conducibilità**

Vediamo cosa possiamo dire su  $\tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega)$ .

In particolare vogliamo calcolare questa quantità con un approccio classico.

Il modello classico del metallo è un sistema di cariche che si muovono in un mezzo viscoso (se non ci fosse la viscosità un campo esterno potrebbe far accelerare indefinitamente le cariche).

La viscosità ce la possiamo immaginare come dovuta a urti tra le cariche.

Per mantenere un corpo in moto rettilineo uniforme in un mezzo viscoso è necessario applicare una forza costante, uguale e opposta alla forza viscosa.

Sulla base di questo modello impostiamo dunque un'equazione *classica* di moto per gli elettroni nel metallo :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{e}{c}\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}(\vec{r}, t) + e\frac{\vec{p}}{mc} \times \vec{B}(\vec{r}, t)$$

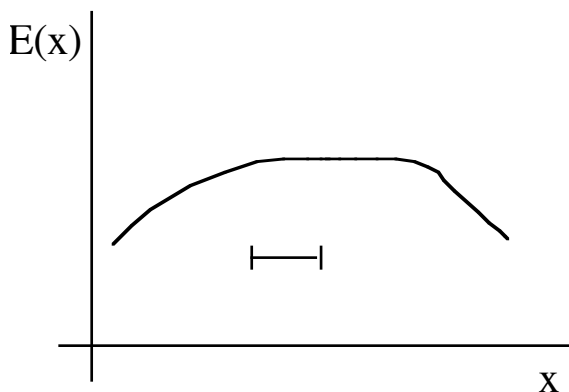
dove  $\vec{p}$  è la quantità di moto dell'elettrone, mentre al secondo membro compaiono la forza viscosa, che è proporzionale alla velocità ( $\tau$  è il tempo caratteristico del meccanismo di urto che è alla base della forza viscosa), la forza elettrica, e la forza di Lorentz.

Cominciamo col trascurare la forza di Lorentz, in quanto la velocità dell'elettrone è molto minore della velocità della luce  $c$ , rendendo dunque trascurabile il termine.

Vediamo poi che ci sono due lunghezze che caratterizzano il fenomeno : il libero cammino medio (distanza media percorsa dagli elettroni tra due urti successivi) e la lunghezza d'onda del campo elettrico (distanza su cui varia apprezzabilmente il campo).

Facciamo l'ipotesi che il libero cammino medio è piccolo rispetto alla lunghezza d'onda del campo (dell'onda).

Dunque in tali ipotesi l'elettrone, nel breve tempo tra un urto e l'altro, 'vede' il campo come spazialmente costante :



Poichè dopo ogni urto l'elettrone perde la memoria del moto precedente, possiamo in definitiva trascurare la dipendenza spaziale del campo.

Le lunghezze d'onda del visibile e del vicino infrarosso soddisfano queste ipotesi.

Dunque, con questa ipotesi l'equazione dinamica è :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}(t)$$

Abbiamo dunque davanti un'equazione differenziale lineare inomogenea a coefficienti costanti.

Passiamo alle trasformate di Fourier, solo rispetto al tempo avendo trascurato la dipendenza spaziale :

$$-i\omega\tilde{p}(\omega) = -\frac{\tilde{p}(\omega)}{\tau} - e\tilde{E}(\omega)$$

$$\tilde{p}(\omega) \left( \frac{1}{\tau} - i\omega \right) = -e\tilde{E}(\omega)$$

$$\tilde{p}(\omega) = \frac{-e\tilde{E}(\omega)}{\frac{1}{\tau} - i\omega}$$

e dunque abbiamo ottenuto la trasformata dell'impulso (momento lineare) in funzione di  $\omega$ .

Se adesso dividiamo l'impulso per la massa abbiamo (la trasformata de) la velocità, e se moltiplichiamo per la carica dell'elettrone e per il numero (medio) di elettroni per unità di volume, abbiamo una densità di corrente (in trasformata di Fourier) :

$$\tilde{j}(\omega) = -\frac{\tilde{p}(\omega)}{m} e n = \frac{e^2 n}{m \left( \frac{1}{\tau} - i\omega \right)} \tilde{E}(\omega)$$

In questo modo abbiamo trovato la trasformata della conducibilità. Infatti il fattore di proporzionalità tra la trasformata densità di corrente e la trasformata del campo è proprio  $\tilde{\sigma}$  :

$$\tilde{j}(\omega) = \tilde{\sigma}(\omega) \tilde{E}(\omega)$$

da cui

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{e^2 n}{m \left( \frac{1}{\tau} - i\omega \right)} \quad (\text{conducibilità in trasformata}).$$

Riassunto di ipotesi e approssimazioni :

- siamo nell'ipotesi che il reticolo non sia polarizzabile :  $\chi=0$   $\vec{P} = 0$  (in modo 'da ridurre' la funzione dielettrica generalizzata)

- siamo nell'ipotesi che la carica sia distribuita uniformemente nel solido (atomi della base distribuiti uniformemente nella cella unitaria).  
(essenzialmente, e in prima approssimazione, queste prime due ipotesi sono applicabili ad un metallo).

- abbiamo fatto l'ipotesi che  $\omega\tau \ll 1$  (in modo che il libero cammino medio è molto minore della lunghezza d'onda, e dunque è possibile approssimare il campo come spazialmente uniforme).

Questa ipotesi è ben verificata dalla radiazione nel visibile e nel vicino infrarosso.

Infine abbiamo trascurato la forza di Lorentz nell'equazione dinamica classica.

### \* espressione esplicita della funzione dielettrica generalizzata

Avendo trovato un'espressione esplicita per la conducibilità, possiamo sostituirla nell'espressione della funzione dielettrica.

Ricordiamo che in generale la funzione dielettrica *totale* è

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4\pi \chi(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{\omega i} \tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega)$$

e nel caso che stiamo trattando il secondo termine, dovuto alla polarizzazione, è nullo. Sostituendo nel terzo termine l'espressione della conducibilità (notiamo che in queste ipotesi la sua espressione dipende solo da  $\omega$  e non da  $\vec{k}$ ) si ha :

$$\epsilon_t(\omega) = 1 - \frac{4\pi}{\omega i} \frac{e^2 n}{m \left( \frac{1}{\tau} - i\omega \right)}$$

moltiplicando e dividendo per  $\tau$

$$\epsilon_t(\omega) = 1 - \frac{4\pi\tau}{i\omega} \frac{e^2 n}{m (1 - i\omega\tau)}$$

razionalizzando

- solidi in campi esterni -

$$\begin{aligned}\varepsilon_t(\omega) &= 1 - \frac{i 4 \pi \tau}{i \omega} \frac{e^2 n (1 + i \omega \tau)}{m (1 - i \omega \tau) (1 + i \omega \tau)} \\ &= 1 + \frac{i 4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n (1 + i \omega \tau)}{m [1 - (i \omega \tau)^2]}\end{aligned}$$

separando parte reale e parte immaginaria

$$\begin{aligned}&= 1 + \frac{i 4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n}{m [1 + \omega^2 \tau^2]} + \frac{i 4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n i \omega \tau}{m [1 + \omega^2 \tau^2]} \\ &= 1 - \frac{4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n \omega \tau}{m [1 + \omega^2 \tau^2]} + i \frac{4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n}{m [1 + \omega^2 \tau^2]}\end{aligned}$$

e dunque

$$\mathcal{R}_\varepsilon[\varepsilon_t(\omega)] = 1 - \frac{4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n \omega \tau}{m [1 + \omega^2 \tau^2]}$$

$$\mathcal{I}_m[\varepsilon_t(\omega)] = \frac{4 \pi \tau}{\omega} \frac{e^2 n}{m [1 + \omega^2 \tau^2]}$$

(espressione esplicita della funzione dielettrica generalizzata nel caso dei metalli).

### \* relazione di dispersione & propagazione

A questo punto, ricordando il discorso delle due classi di soluzioni, vogliamo esplicitare la relazione di dispersione nei due casi di onde trasverse e onde longitudinali.

- ipotesi 'di alta frequenza'

Facciamo l'ipotesi che

$$\omega \tau \gg 1.$$

Il significato fisico di questa ipotesi è che il tempo caratteristico della forza viscosa, ossia il tempo medio tra due urti, è molto maggiore di  $1/\omega$ , che è il periodo di oscillazione dell'onda elettromagnetica. Dunque tra un urto e l'altro l'onda, cioè i campi, hanno il tempo di compiere molte oscillazioni.

In questa ipotesi, nella parentesi che compare al denominatore sia della parte reale che della parte immaginaria della funzione di dispersione si può trascurare l'1, e dunque si ha

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_\varepsilon[\varepsilon_t(\omega)] &\simeq 1 - \frac{4\pi\tau}{\omega} \frac{e^2 n \omega \tau}{m \omega^2 \tau^2} \\ &= 1 - \frac{4\pi e^2 n}{m \omega^2} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\end{aligned}$$

dove abbiamo posto

$$\omega_p^2 \equiv \frac{4\pi e^2 n}{m} \quad (\text{frequenza di plasma})$$

che è una costante caratteristica del materiale (tra poco ne vedremo il significato fisico).

Viceversa, per la parte immaginaria si ha

$$\mathcal{I}_m[\varepsilon_t(\omega)] \simeq \frac{4\pi\tau e^2 n}{\omega m \omega^2 \tau^2}$$

e dunque, nell'ipotesi  $\omega\tau \gg 1$  possiamo trascurare la parte immaginaria che ricordiamo è associata ai fenomeni di (amplificazione o) assorbimento.

((?) dubbio : ma quello che abbiamo visto è che la parte reale e immaginaria di  $\omega$  sono rispettivamente legate ai fenomeni di dispersione e a quelli di amplificazione/attenuazione! come fa da  $\omega$  a passare a  $\varepsilon_t$  ?!).

In altre parole quando è  $\omega\tau \gg 1$  i fenomeni di (amplificazione o) assorbimento sono trascurabili.

Per contro, nell'altra ipotesi, e cioè  $\omega\tau \ll 1$ , diciamo solo che è la parte reale ad essere trascurabile rispetto alla parte immaginaria, e dunque diventano predominanti i fenomeni di (amplificazione o) assorbimento. Comunque noi tratteremo soprattutto il caso precedente.

In definitiva, nell'ipotesi  $\omega\tau \gg 1$  si ha



$$\varepsilon_t(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

che è dunque una quantità reale.

- onde trasversali -

Ciò posto, possiamo scrivere esplicitamente la relazione di dispersione per le onde trasversali (prima classe di soluzioni) nel caso del metallo, andando a sostituire l'espressione della funzione dielettrica appena trovata nella relazione di dispersione che abbiamo trovato in precedenza :

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t(\vec{k}, \omega)$$

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)$$

(forma esplicita della relazione di dispersione nei metalli per le onde trasversali).

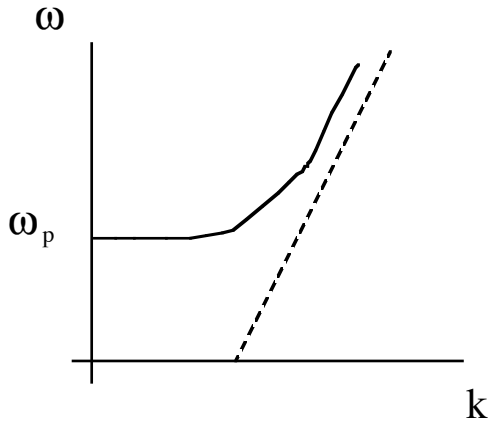
Facciamo la seguente importante osservazione : se  $\omega < \omega_p$  succede che nella parentesi la frazione è maggiore dell'unità, e dunque il secondo membro di questa relazione è negativo. Ma poiché il primo termine è un quadrato, la conclusione è che se  $\omega < \omega_p$ , non ci sono soluzioni dell'equazione delle onde!

Che significa questo in concreto?

Ricordiamo che la  $\omega_p$  è una costante del materiale. E dunque, se mandiamo un'onda elettromagnetica contro un materiale che ha una frequenza di plasma maggiore della frequenza dell'onda, l'onda, arrivata all'interfaccia non può continuare a propagarsi nel mezzo (non esistono soluzioni dell'equazione delle onde). D'altra parte ricordiamo che stiamo nelle ipotesi in cui i fenomeni di assorbimento sono trascurabili. Dunque l'unica possibilità è che l'onda venga riflessa totalmente.

D'altra parte, quando consideriamo frequenze maggiori della frequenza di plasma, la relazione di dispersione è un'equazione lineare.

Il prof non fa i conti, e fornisce solo un grafico :

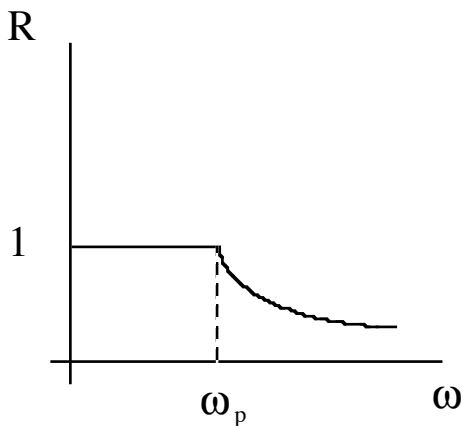


il valore asintotico è un certo  $c_k$ .

\* frequenza di plasma & riflettività

Se definiamo la *riflettività*  $R$  come il rapporto tra la potenza riflessa e la potenza totale incidente sul materiale, misurando la riflettività possiamo determinare sperimentalmente la frequenza di plasma.

Infatti, per quanto visto prima, la riflettività è costantemente uguale a 1 per tutte le frequenze incidenti minori della frequenza di plasma, e per frequenze maggiori comincia a diminuire, in quanto parte della radiazione può cominciare a propagarsi nel materiale



D'altro canto nell'espressione della frequenza di plasma che abbiamo trovato

$$\omega_p^2 \equiv \frac{4 \pi e^2 n}{m}$$

l'unico valore che ci serve è il numero  $n$  di elettroni di conduzione per unità di volume, e questo è un dato abbastanza accessibile, quindi possiamo ottenere anche un 'valore teorico' della frequenza di plasma.

Il prof spiega come il fenomeno della propagazione delle onde radio tra posizioni geografiche non collegabili in linea retta a causa della curvatura terrestre (addirittura località agli antipodi) è possibile grazie al fatto che la frequenza delle onde radio è abbastanza bassa da essere inferiore alla frequenza di plasma della ionosfera,

permettendo così riflessioni multiple (anche la superficie terrestre è in parte riflettente).

Viceversa questo non è possibile per i segnali televisivi che (dovendo trasportare più informazione, ma questo lo aggiungo io) hanno una frequenza più alta, maggiore di quella di plasma della ionosfera. Inoltre questa seconda circostanza permette l'uso di trasmissioni da e per i satelliti, con onde che riescono a propagarsi attraverso tutta l'atmosfera.

Osserviamo che tutto quanto abbiamo detto fin'ora è basato sull'ipotesi  $\omega\tau \gg 1$ , dove  $\tau$  è una costante legata ai fenomeni 'viscosi' che rallentano gli elettroni di conduzione, e  $\omega$  è la frequenza della radiazione incidente.

Come possiamo sapere che è valida?

### \* il meccanismo di urto

Soffermiamoci su questi fenomeni di viscosità.

Innanzitutto si può vedere che la meccanica quantistica prevede che, se gli ioni del materiale sono considerati fissi nelle posizioni di equilibrio, viene meno la legge di Ohm. Infatti in tal caso la meccanica quantistica prevedrebbe che se si applicasse un campo elettrico costante si otterrebbero correnti variabili.

D'altra parte per ottenere la legge di Ohm la cosa più semplice, che aveva previsto già Lorentz, è immaginare una forza viscosa, dovuta a ripetuti urti che gli elettroni fanno propagandosi nel mezzo.

Ma allora contro chi urtano gli elettroni?

Non possono essere gli ioni del reticolo perché abbiamo detto che è previsto che se si considerano fermi essi fanno produrre a campi fissi correnti variabili.

Allora è legittimo pensare che il moto di vibrazione degli ioni sia cruciale.

E infatti si può descrivere la forza viscosa con gli urti tra gli elettroni e i fononi!

Facciamo dunque qualche considerazione sugli ordini di grandezza : l'energia di un fonone è  $\hbar\omega_f$  (dove  $\omega_f$  è la frequenza del fonone) ed è dell'ordine di  $10^{-2} \div 10^{-3}$  eV che, considerando il valore di  $\hbar$ , corrisponde a frequenze dell'ordine di  $\omega_f \approx 10^{13}$  sec<sup>-1</sup>. Questo ci porta a dire che l'ordine di grandezza di  $\tau$  è di  $10^{-13}$  sec.

Allora, affinché sia valida l'ipotesi  $\omega\tau \gg 1$  la frequenza della radiazione incidente deve essere maggiore di  $10^{13}$  sec<sup>-1</sup>, che è una frequenza dell'infrarosso.

Il prof poi mostra un altro modo di ricavare sperimentalmente il valore di  $\tau$ .

Consideriamo l'espressione della conducibilità

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{e^2 n \tau}{m} \frac{1}{1 - i \omega \tau}$$

vediamo che se la frequenza dell'onda incidente si annulla ( $\omega \rightarrow 0$ ) la seconda frazione fa 1, e dunque si ha

$$\bar{\sigma}(\omega) = \frac{e^2 n \tau}{m}$$

che è un'espressione in cui compare la  $\tau$  a cui siamo interessati, e il numero  $n$  di elettroni di conduzione per unità di volume, che è una grandezza che un modello della struttura chimica del materiale ci può facilmente fornire.

D'altra parte fisicamente un'onda di frequenza nulla significa applicare al materiale un campo costante.

Dunque è possibile ricavare la  $\tau$  misurando la conducibilità del materiale quando vi si applichi un campo elettrico costante.

Anche così si ottiene una stima di

$$\tau \approx 10^{-13} \text{ sec.}$$

(c'è da dire che la conducibilità sperimentale dipende dalla temperatura, mentre nella nostra espressione  $\sigma$  non dipende da  $T$ . Comunque prendiamo per buono almeno l'ordine di grandezza).

#### \* la conduzione

Notiamo che è possibile dare una lettura diversa della conduzione nei solidi.

Abbiamo infatti detto che gli elettroni soggetti ad un campo (uniforme) non accelerano perché urtano con i fononi. Possiamo anche dire, più pedestremente, che oscillando gli ioni alterano continuamente la struttura del reticolo; dunque vengono meno i presupposti su cui si basa la teoria che porta alla struttura a bande dello spettro.

Per altro, quando abbiamo studiato la diffusione anelastica dei neutroni da parte dei cristalli (vedi), l'elemento importante che ci dava la diffusione anelastica era proprio la presenza delle oscillazioni. Lì poi abbiamo ottenuto una regola di selezione che richiedeva che la differenza di energia del neutrone fosse pari a  $\hbar\omega_f$  (quanto di energia fononica).

Ma a ben vedere, se invece dei neutroni consideriamo gli elettroni del materiale stesso, l'hamiltoniana è la stessa, e quindi uguali sono i risultati: gli elettroni interagiscono con le oscillazioni del reticolo, scambiando quanti di energia pari a  $\hbar\omega_f$ .

La cosa importante è che queste energie fononiche sono piccole ( $10^{-2} \div 10^{-3}$  eV), gli elettroni non riescono a saltare da una banda all'altra, cioè sono confinati in una banda. Comunque la questione della conduzione la riprenderemo in seguito.

#### **- onde longitudinali -**

Consideriamo adesso la seconda classe di soluzioni, cioè le onde longitudinali.

Ricordiamo che la condizione da imporre per ottenere questa seconda classe è

$$\varepsilon_t(\omega) = 0$$

(vediamo che non c'è dispersione perché non c'è dipendenza da  $\vec{k}$ , almeno nelle ipotesi in cui ci siamo messi).

Questa relazione si può esplicitare usando l'espressione della funzione dielettrica che abbiamo trovato prima (trascurando tra l'altro la sua parte immaginaria) è :

$$\varepsilon_t(\omega) = 0$$

$$1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 0$$

$$\frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 1$$

$$\omega_p^2 = \omega^2$$

$$\omega = \omega_p.$$

Questo tra l'altro ci fornisce il significato fisico della frequenza di plasma : si tratta della frequenza caratteristica del modo di oscillazione longitudinale (seconda classe di soluzioni per l'equazione delle onde), ottico, nel caso 'limite' che stiamo trattando di solido totalmente non polarizzabile (metallo).

#### \* oscillazioni della densità di carica

Abbiamo già accennato che questo modo di oscillazione longitudinale è connesso a oscillazioni della densità di carica.

Per studiare in dettaglio il fenomeno dovremmo sviluppare una teoria completamente quantistica, ma è troppo onerosa.

Dunque vediamo solo i tratti essenziali che ci permettono di capire la fisica del fenomeno.

Tutto comincia col creare un momentaneo addensamento di elettroni in un punto del materiale (immettendo per un breve istante una carica positiva. Quando si rimuove questa carica gli elettroni si allontanano e comincia un moto oscillatorio.

Per approfondire la cosa portiamo avanti un esempio.

Consideriamo un condensatore inizialmente scarico, e mettiamo un gas di elettroni liberi tra le armature.

Supponiamo che oltre al gas di elettroni liberi ci sia anche un reticolo di ioni positivi, in modo che il tutto sia neutro.

Immaginiamo di 'rastrellare' gli elettroni, spostandoli tutti verso un'armatura di un tratto  $\eta$ . In questo modo, se il numero di elettroni per unità di volume è  $n$ , su quell'armatura compare una carica.

La densità di carica (per unità di superficie) che si crea su questa armatura è  $-e n \eta$ . Sull'altra armatura (o almeno nei pressi) si 'crea' altrettanta carica, ma di segno opposto, a causa del fatto che spostando gli elettroni degli ioni rimangono scoperti (questo è il modello 'omogeneo' di metallo).

Dunque il condensatore si carica, e tra le armature si crea un campo elettrico, diretto dall'armatura positiva a quella negativa, il cui modulo è :

$$E = 4 \pi e n \eta.$$

Se tra le armature c'è un campo elettrico, allora sugli elettroni (liberi) c'è una forza, diretta in verso opposto a quello in cui abbiamo 'rastrellato' gli elettroni inizialmente. L'intensità di questa forza è

$$- 4 \pi e^2 n \eta.$$

Notiamo che la forza dipende dallo spostamento, e notiamo anche il segno '-' che dice che la forza è opposta allo spostamento.

Se scriviamo l'equazione dinamica classica si ha quindi

$$m \ddot{\eta} = - 4 \pi n e^2 \eta$$

che è un'equazione di oscillatore armonico, la cui frequenza di oscillazione è (grandezza  $\omega_p$ ) proprio la frequenza di plasma :

$$\omega_p^2 = \frac{4 \pi n e^2}{m}.$$

Dunque il gas di elettroni, se 'spostato' inizialmente, comincia ad oscillare armonicamente con frequenza pari alla frequenza di plasma.

Per inciso osserviamo che questi risultati poggiano sul fatto che il campo tra le armature sia costante, e questo viene fuori dal teorema di Gauss, che a sua volta è basato sul fatto che l'interazione tra gli elettroni è coulombiana (va come  $1/r^2$ ).

Ricordiamo sinteticamente che per realizzare in concreto questa oscillazione si prende una lastra metallica e ci si manda su un flusso di particelle cariche positivamente. La lastra deve essere abbastanza spessa da simulare un solido 'infinito' (gli atomi di bulk devono essere prevalenti rispetto a quelli superficiali) ma abbastanza sottile da far uscire le particelle dall'altro lato.

Quello che si osserva sperimentalmente è che la differenza di energia delle particelle

(prima e dopo lo scambio di energia col sistema) è un multiplo di  $\hbar \omega_p$ .

Questo fatto è legato all'interpretazione quantistica del fenomeno : dobbiamo passare da una descrizione di 'oscillazione collettiva' a una descrizione di 'energie di eccitazione del sistema'.

Cioè l'attenzione si sposta dalle 'frequenze di oscillazione'  $\omega_p$  ai 'quanti di energia di eccitazione del sistema'  $\hbar \omega_p$ .

Dobbiamo dunque 'quantizzare'.

Per farlo, introduciamo un altro esempio, in cui intervengono i fononi.

## **\*\* Propagazione nei dielettrici \*\* (A301)**

Consideriamo adesso un dielettrico anziché un metallo, e cerchiamo di esplicitare la funzione dielettrica per questo caso particolare.

Partiamo dalla definizione di funzione dielettrica totale :

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + 4\pi \chi(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{\omega i} \tilde{\sigma}(\vec{k}, \omega)$$

Nel caso particolare dei metalli che abbiamo appena visto, abbiamo supposto che non ci fossero fenomeni di polarizzazione, e dunque abbiamo posto nulla la (trasformata della) suscettività elettrica  $\chi$ .

In questo caso invece, supponiamo che sia nulla la corrente di conduzione, e dunque poniamo nulla la (trasformata della) conducibilità  $\tilde{\sigma}$  :

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) = 1 + 4\pi \chi(\vec{k}, \omega)$$

Ricordiamo che la trasformata della suscettività elettrica è la costante di proporzionalità tra la trasformata di Fourier (spaziale e temporale) del campo elettrico e la trasformata della polarizzazione :

$$\vec{P}(\vec{k}, \omega) = \vec{\chi}(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

Dobbiamo dunque sviluppare un modello per 'calcolare' la trasformata della suscettività elettrica  $\chi$ .

### **\* espressione esplicita della suscettività**

Consideriamo un cristallo con base : nella cella elementare ci sta uno ione positivo e uno ione negativo (ad es. Na Cl).

Impostiamo delle equazioni del moto, limitandoci alla cella elementare (nota la dinamica degli elementi della cella elementare, la possiamo estendere facilmente a quelli delle altre celle col teorema di Bloch).

Supponiamo che ci sia una forza elastica tra gli ioni della base, ed in più consideriamo la forza dovuta al campo elettrico :

$$m_1 \frac{d^2 \vec{s}_1}{dt^2} = C (\vec{s}_2 - \vec{s}_1) + e \vec{E} \quad (\text{ione positivo})$$

$$m_2 \frac{d^2 \vec{s}_2}{dt^2} = -C (\vec{s}_2 - \vec{s}_1) - e \vec{E} \quad (\text{ione negativo})$$

dove :

$C$  è la costante elastica

$m_1$  e  $m_2$  sono le masse

inoltre il campo è diretto nel verso positivo del riferimento delle posizioni.

((nota mia) questo è un approccio simile a quello visto per lo studio dei fononi nel caso di reticolo unidimensionale con due atomi per cella. Tuttavia qui sembrerebbe che non si considerano le interazioni elastiche tra atomi di celle contigue, ma solo (una) interazione elastica tra i due atomi della stessa cella)

Notiamo il segno diverso delle due forze elastiche, che sono uguali e opposte (terzo principio).

Se il vettore d'onda dei fononi  $\vec{k}$  è piccolo, il teorema di Bloch ci dice che gli spostamenti nelle celle vicine è quasi uguale, in quanto il fattore 'di Floquet' da mettere davanti agli spostamenti è quasi 1.

Portando le masse al secondo membro le due equazioni diventano

$$\frac{d^2 \vec{s}_1}{dt^2} = \frac{C}{m_1} (\vec{s}_2 - \vec{s}_1) + \frac{e}{m_1} \vec{E}$$

$$\frac{d^2 \vec{s}_2}{dt^2} = -\frac{C}{m_2} (\vec{s}_2 - \vec{s}_1) - \frac{e}{m_2} \vec{E}$$

Facciamo la differenza della prima equazione meno la seconda :



- solidi in campi esterni -

$$\frac{d^2 \vec{s}_1}{dt^2} - \frac{d^2 \vec{s}_2}{dt^2} = -C \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) (\vec{s}_1 - \vec{s}_2) + e \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \vec{E}$$

Osserviamo che :

- a) al secondo membro compare la distanza relativa tra gli ioni
- b) la derivata è un operatore lineare.

Allora, posto

$$\vec{w} \equiv \vec{s}_1 - \vec{s}_2$$

e notando che

$$\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} = \frac{1}{\mu} \quad (\text{inverso della massa ridotta})$$

si ha :

$$\frac{d^2 \vec{w}}{dt^2} = -\frac{C}{\mu} \vec{w} + \frac{e}{\mu} \vec{E}$$

che è l'equazione di un oscillatore armonico forzato di frequenza propria  $C/\mu$ .

Osserviamo che se lo spostamento (degli ioni)  $\vec{w}$  fosse perpendicolare al campo  $\vec{E}$ , proiettando l'equazione sulla direzione di  $\vec{w}$  (ovvero moltiplicando tutto per il versore  $\hat{w}$ ) il termine col campo elettrico se ne andrebbe.

Dunque avremmo un'equazione di oscillatore armonico (non forzato).

Allora in questa ipotesi ( $\vec{w} \perp \vec{E}$ ) il modo di oscillazione sarebbe sicuramente ottico, in quanto le forze, e dunque gli spostamenti, sono in senso opposto per i diversi ioni.

Inoltre, per l'ipotesi  $\vec{w} \perp \vec{E}$ , sarebbe un modo di oscillazione trasverso (spostamento perpendicolare al campo elettrico).

Questo ci dice che  $C/\mu$  è una frequenza fononica ottica 'trasversa' :

$$\omega_t^2 \equiv \frac{C}{\mu} \quad (\text{frequenza fononica ottica trasversa}).$$

Tornando alla forma generale dell'equazione :

$$\frac{d^2 \vec{w}(t)}{dt^2} = -\omega_t^2 \vec{w}(t) + \frac{e}{\mu} \vec{E}(t)$$

Affrontiamone dunque lo studio per componenti, suddividendo il campo in parte perpendicolare e parte parallela a  $\vec{w}$

e noi siamo interessati alla componente di  $w$  parallela al campo elettrico, in quanto quella perpendicolare l'abbiamo già 'sviscerata': è un'oscillazione armonica ottica trasversa.

Osserviamo che siamo interessati al caso in cui il campo elettrico è dipendente dal tempo (radiazione incidente).

Ancora una volta per affrontare l'equazione passiamo alle trasformate:

$$-\omega^2 \vec{w}(\omega) = -\omega_t^2 \vec{w}(\omega) + \frac{e}{\mu} \vec{E}(\omega)$$

$$\vec{w}(\omega) = \frac{e}{\mu} \frac{\vec{E}(\omega)}{(\omega_t^2 - \omega^2)}$$

Ricordiamo che  $w$  è lo spostamento relativo degli ioni. Allora possiamo dire che  $w$  descrive il momento di dipolo indotto dal campo elettrico, se lo moltiplichiamo per la carica degli ioni.

D'altra parte il vettore di polarizzazione è il momento di dipolo per unità di volume; allora, se moltiplichiamo  $w$  per la carica dello ione e per il numero di celle per unità di volume  $n$  abbiamo proprio il vettore di polarizzazione (in trasformata):

$$\vec{P}(\omega) = \frac{n e^2}{\mu} \frac{\vec{E}(\omega)}{\omega_t^2 - \omega^2}$$

A questo punto, ricordando che

$$\vec{P}(\vec{k}, \omega) = \vec{\chi}(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega)$$

possiamo dire di aver 'trovato' la suscettività (in trasformata)

$$\vec{\chi}(\omega) = \frac{n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2}$$

e dunque la funzione dielettrica (in questo caso in cui abbiamo supposto nulle le cariche di conduzione e abbiamo considerato solo quelle di polarizzazione) è

- solidi in campi esterni -

$$\epsilon_t(\omega) = 1 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2}$$

(notiamo che anche questa volta non dipende da  $\vec{k}$ ).

Sottolineiamo che qui  $\omega$  è la frequenza del campo, cioè la frequenza dell'onda incidente.

Osservazioni e confronto col caso metallico :

- la  $n$  che compare qui è il numero per unità di volume delle celle unitarie del reticolo (e non degli elettroni);
- la prima frazione del secondo membro deve avere le dimensioni di una frequenza al quadrato
- la massa che compare al denominatore è la massa ridotta degli ioni (invece della massa dell'elettrone).

\* propagazione

Adesso studiamo la propagazione delle due classi di soluzioni dell'equazione delle onde.

Ricordiamo che le condizioni per le due classi di soluzioni sono rispettivamente :

$$\vec{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\omega) \quad \text{e} \quad \epsilon_t(\omega) = 0$$

per le soluzioni 'onde elettromagnetiche' e 'oscillazioni longitudinali' rispettivamente. Da queste condizioni possiamo ottenere le relazioni di dispersione.

Cominciamo con la prima classe di soluzioni.

Sostituendo l'espressione di  $\epsilon_t(\omega)$  che abbiamo trovato si ha :

$$\begin{aligned} \vec{k}^2 &= \frac{\omega^2}{c^2} \left( 1 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2} \right) \\ &= \frac{\omega^2}{c^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2} \end{aligned}$$

La prima cosa da guardare è per quali valori di  $\omega$  il secondo membro è negativo. Infatti, come abbiamo visto in precedenza, se il secondo membro è negativo, essendo il primo membro un quadrato (reale) significa che per quei valori di  $\omega$  non ci sono soluzioni

accettabili, e dunque l'onda incidente viene completamente riflessa.

Per studiare questo fatto studiamo l'andamento di  $\epsilon_t$  in funzione di  $\omega$

$$\epsilon_t(\omega) = 1 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2}$$

(che poi è uno lavoro utile anche per studiare la condizione per la seconda classe di soluzioni) :

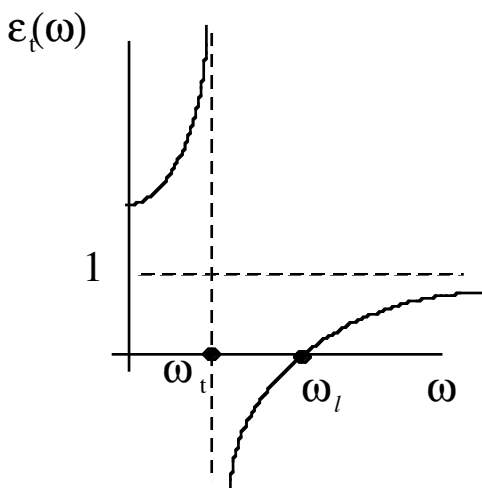
in  $\omega=0$  la  $\epsilon_t(\omega)$  è una quantità sicuramente positiva :

$$\epsilon_t(0) = 1 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \omega_t^2} ;$$

quando  $\omega$  si avvicina a  $\omega_t$  da valori più piccoli il denominatore tende a zero mantenendosi positivo, e dunque la funzione tende a  $+\infty$ , mentre se  $\omega$  tende a  $\omega_t$  da valori più grandi il denominatore tende a zero mantenendosi negativo, e dunque la funzione tende a  $-\infty$ . Allora, dopo il valore  $\omega_t$  la  $\epsilon_t$  è negativa.

Vediamo che però al limite  $\omega \rightarrow \infty$  la  $\epsilon_t$  tende a 1, e dunque ci deve essere un valore di  $\omega$  in cui da negativa la  $\epsilon_t$  diventa positiva (cioè si annulla).

Per chiarezza vediamo un grafico :



Dunque per trovare  $\omega_l$  imponiamo l'annullamento di  $\epsilon_t(\omega)$  :

$$1 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2} = 0$$

$$\omega_t^2 - \omega^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} = 0$$

$$\omega^2 = \omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu}$$

$$\omega_l = \sqrt{\omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu}}$$

Notiamo che per questo valore la  $\epsilon_t$  si annulla, e dunque per questo valore viene soddisfatta la condizione per avere la seconda classe di soluzioni, quelle longitudinali (da cui il pedice  $l$ ).

Tornando alla questione dell'esistenza delle soluzioni, concludiamo che per frequenze

$$\omega_t < \omega < \omega_l$$

la  $\epsilon_t$  è negativa e dunque la condizione per avere onde elettromagnetiche nel cristallo non può essere soddisfatta : onde incidenti con queste frequenze vengono totalmente riflesse.

### \* Realzione di Lyddane Sach e Teller

Questo fatto lo si può anche presentare in un altro modo, ma prima dobbiamo fare una considerazione.

- polarizzazione per alte frequenze (dell'onda elettromagnetica incidente) -

Consideriamo l'espressione della funzione dielettrica da cui siamo partiti :

$$\epsilon_t(\vec{k}, \omega) = 1 + 4 \pi \chi(\vec{k}, \omega)$$

D'altra parte la funzione dielettrica totale viene dall'aver 'manipolato' la prima equazione di Maxwell (in trasformata) in modo da raggruppare anche gli effetti di polarizzazione (e di conduzione, ma nel caso del cristallo li abbiamo annullati) in un'unica costante :

$$i \vec{k} \cdot \epsilon_t(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 4 \pi \rho_{ex}(\vec{k}, \omega)$$

Dunque il termine '1' che compare nell'espressione di  $\epsilon_t(\omega)$  è dovuto al '4  $\pi$ ' proveniente dal teorema di Gauss.

Ma un solido è tale che, quando consideriamo le frequenze ‘notevoli’ dei fononi[...].

In precedenza abbiamo visto che al limite di frequenze infinite  $\epsilon_t$  tende a 1

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \epsilon_t(\omega) = 1$$

e questo è coerente con la fisica : per frequenze infinite dell’onda incidente, nessun elemento del materiale è in grado di polarizzarsi abbastanza rapidamente, e dunque viene meno il termine legato alla polarizzazione e rimane solo il termine 1.

Ma c’è un ‘ma’ : questo è vero solo se non si tiene conto degli effetti di polarizzazione dovuti agli elettroni ‘di core’ che si trovano attorno agli ioni.

In questo modello di cristallo, che trascura il termine ‘di conduzione’, abbiamo fin’ora studiato le ‘frequenze caratteristiche’ di vibrazione degli ioni legate alla polarizzazione per spostamento degli ioni.

((?) qui il prof accenna ad un concetto che mi sfugge : frequenze caratteristiche legate ai fenomeni di polarizzazione. Credo che, riferendosi anche al caso precedente del metallo, si possa parlare anche di frequenze caratteristiche legate ai fenomeni di conduzione. Ma mi sfugge qualcosa, che forse è legato ai rapporti tra modello classico e modello quantistico. Spero che ritornandoci mi si chiarisca).

Dobbiamo dunque rivolgere la nostra attenzione anche sulle frequenze caratteristiche legate alla polarizzazione degli stessi ioni, dovute alle deformazioni degli ioni e non al loro spostamento.

A cosa sono collegate queste frequenze caratteristiche?

Queste frequenze sono legate alle frequenze caratteristiche di eccitazione e diseccitazione degli elettroni.

Infatti eccitando o diseccitando gli elettroni si dà luogo a fenomeni di polarizzazione dello ione (a causa delle forme diverse dei vari orbitali atomici? intuizione mia).

Ma le frequenze caratteristiche di eccitazione/diseccitazione degli elettroni non sono dell’ordine dei decimi di eV, ma sono dell’ordine degli eV.

Dunque in un solido dielettrico dobbiamo individuare due classi di frequenze caratteristiche : il primo legato alle vibrazioni reticolari, e il secondo legato al fatto che gli elettroni degli ioni, benché non contribuiscano alla conduzione, possono dar luogo a polarizzazione.

Le frequenze caratteristiche di questo secondo fenomeno sono più alte delle prime.

In definitiva le formule fin qui usate non tengono conto di questo fenomeno di polarizzazione degli ioni, e dunque le dobbiamo modificare per tenerne conto.

A ben vedere il primo termine ‘1’ della funzione dielettrica rappresenta proprio il fatto che gli ioni di per se non si possono polarizzare.

Allora per aggiustare le cose al posto di quel termine ‘1’ ci mettiamo un’opportuna costante.

Questa costante la battezziamo  $\epsilon_{\infty}$ , e la scelta di questo nome è da commentare con attenzione. Apparentemente è una scelta sbagliata, perché questo valore è legato alle frequenze caratteristiche delle eccitazioni/diseccitazioni degli elettroni, che non sono certo infinite (energie dell'ordine dell'eV. Ma il nome acquista un senso se stabiliamo di limitarci a studiare frequenze molto piccole rispetto a queste frequenze 'elettroniche', che dunque in questo senso diventano 'infinite'.

Questa precisazione chiarisce anche il fatto che questa è un'approssimazione : in linea di principio si tratta di una funzione di  $\omega$ , ma se ci limitiamo a frequenze molto piccole rispetto alle 'frequenze elettroniche' possiamo approssimare con una costante.

Ciò posto si ha

$$\epsilon_t(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2}$$

e dunque il valore  $\omega_l$  che annulla la funzione dielettrica è

$$\epsilon_{\infty} + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2} = 0$$

$$\omega_t^2 - \omega^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \epsilon_{\infty}} = 0$$

$$\omega^2 = \omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \epsilon_{\infty}}$$

$$\omega_l = \sqrt{\omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \epsilon_{\infty}}} \quad (\text{frequenza 'longitudinale'}).$$

A questo punto ritorniamo al nostro studio della  $\epsilon_t(\omega)$ .

Consideriamo il valore che assume la funzione dielettrica quando la frequenza è nulla :

$$\epsilon_t(0) = \epsilon_{\infty} + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \omega_t^2}$$

Dire che la frequenza del campo, cioè dell'onda elettromagnetica incidente, è nulla significa dire che il cristallo è immerso in un campo costante.

Dunque questo valore di  $\epsilon_t$  è il valore della 'costante dielettrica statica', e per questo la

chiamiamo  $\epsilon_0$  :

$$\epsilon_0 \equiv \epsilon_t(0) = \epsilon_\infty + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \omega_t^2}$$

da cui

$$\omega_t^2 \epsilon_0 = \epsilon_\infty \omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu}$$

$$\frac{\omega_t^2 \epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \epsilon_\infty}$$

ma adesso riconosciamo nel membro di destra proprio il quadrato della frequenza 'longitudinale'  $\omega_l$ , (vedi) e dunque

$$\frac{\omega_t^2 \epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \omega_l^2$$

$$\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \frac{\omega_l^2}{\omega_t^2} \quad (\text{relazione di Lyddane Sach e Teller})$$

che è nota come relazione di Lyddane Sach e Teller.

L'importanza di questa relazione sta nel fatto che il rapporto tra due grandezze 'microscopiche' (le frequenze 'longitudinale' e 'trasversa') con due grandezze macroscopiche che ricordiamo sono la costante dielettrica totale per campi statici e la costante dielettrica totale per onde elettromagnetiche con frequenza molto maggiore delle frequenze fononiche, ma molto minori delle frequenze 'elettroniche' (frequenze legate alle energie di transizione degli stati elettronici).

(il prof. ci dice che Teller fu il progettista della bomba H, e il 25/4/2001 è comparso un articolo su 'la Repubblica' in cui lui 'si pente' di questa sua realizzazione).

### \* relazione di dispersione

Consideriamo la condizione per la prima classe di soluzioni dell'equazione delle onde :

$$\vec{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\omega)$$



Se sostituiamo l'espressione della funzione dielettrica totale nel caso di dielettrico che stiamo considerando (in cui non compare il termine di conduzione) :

$$\epsilon_t(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2}$$

si ha :

$$\vec{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left( \epsilon_\infty + \frac{4 \pi n e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_t^2 - \omega^2} \right)$$

se poi utilizziamo la definizione di frequenza di plasma (vedi)

$$\omega_p^2 \equiv \frac{4 \pi e^2 n}{\mu}$$

(notiamo che questa frequenza era definita per il caso metallico, e dunque compariva la massa dell'elettrone; nel caso presente al posto della massa dell'elettrone c'è la massa ridotta dei due ioni, coerentemente con i commenti fatti a suo tempo (vedi)) abbiamo

$$\vec{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left( \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_t^2 - \omega^2} \right)$$

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_t^2 - \omega^2}} \vec{k}^2$$

$$\omega = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_t^2 - \omega^2}}} |\vec{k}|$$

che è la relazione di dispersione.

Vediamo che questa relazione di dispersione è in forma implicita, in quanto al secondo membro compare anche  $\omega$ .

Studiamo dunque due casi limite :

+ per  $\omega \gg \omega_t$  la frazione che compare sotto radice si può trascurare, e dunque possiamo approssimare con

$$\omega_+ = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_\infty}} |\vec{k}|$$

(relazione di dispersione ad alte frequenze)

relazione di dispersione approssimata che vale ad alte frequenze.

+ per  $\omega \ll \omega_t$  si può trascurare la  $\omega$  al secondo membro, e dunque si ha :

$$\omega_- = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_t^2}}} |\vec{k}|$$

da cui, utilizzando la relazione di Lyddane Sach e Teller

$$\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \frac{\omega_l^2}{\omega_t^2}$$

$$\epsilon_0 = \epsilon_\infty \frac{\omega_l^2}{\omega_t^2}$$

e, esplicitando la frequenza longitudinale

$$\omega_l^2 = \omega_t^2 + \frac{4 \pi n e^2}{\mu \epsilon_\infty} = \omega_t^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_\infty}$$

si ha

$$\epsilon_0 = \epsilon_\infty \frac{\omega_t^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_\infty}}{\omega_t^2}$$

$$\epsilon_0 = \epsilon_\infty \left( \frac{\omega_t^2}{\omega_t^2} + \frac{\frac{\omega_p^2}{\epsilon_\infty}}{\omega_t^2} \right)$$

$$\epsilon_0 = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_t^2}$$

e dunque

$$\omega_- = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_0}} |\vec{k}|$$

(relazione di dispersione a basse frequenze).

Andiamo ora a riconsiderare la relazione da cui siamo partiti per ottenere queste due relazioni di dispersione (condizione per la prima classe di soluzioni dell'equazione delle onde) :

$$\vec{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_t(\omega)$$

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\epsilon_t(\omega)} \vec{k}^2$$

$$\omega = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_t(\omega)}} |\vec{k}|$$

e confrontiamola con le due espressioni 'limite' :

$$\omega_+ = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_\infty}} |\vec{k}| \quad \omega_- = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_0}} |\vec{k}|$$

A questo punto ricordiamo il significato di  $\epsilon_0$  e  $\epsilon_\infty$ .

$\epsilon_0$  è il valore della costante dielettrica 'statica', cioè per campi elettrici costanti; possiamo dire che in questo caso non ci sono onde elettromagnetiche (fotoni) e le uniche eccitazioni del sistema sono fononiche.

$\epsilon_\infty$  viceversa è il valore della costante dielettrica quando la frequenza dell'onda elettromagnetica incidente è talmente più alta delle frequenze tipiche dei fononi, che gli ioni 'non ce la fanno a starle dietro'. In questo caso si continuano ad avere effetti di polarizzazione, ma sono dovuti solo al fatto che cominciano a polarizzarsi gli ioni stessi (deformazione della nuvola elettronica).

Dunque a queste frequenze non si riesce ad eccitare nessun fonone, e sono presenti solo le eccitazioni fotoniche.

Allora possiamo concludere che le due relazioni di dispersione, che valgono a basse ed alte frequenze rispettivamente,  $\omega_+$  e  $\omega_-$ , sono relazioni di dispersione 'per i soli fononi' e 'per i soli fotoni' rispettivamente.

\* **Polaritone**

Per frequenze intermedie nel sistema sono presenti sia eccitazioni fotoniche che eccitazioni fononiche.

Da un punto di vista 'esterno' quello che è rilevante sono gli scambi di energia (quanti di eccitazione).

In una visione quantistica dunque, possiamo immaginare che quando il sistema scambia energia, si può parlare di un'eccitazione che è in parte fotonica ed in parte fononica. Questo quanto di energia si associa ad una particella 'ibrida' che non è più né un fotone né un fonone, e viene battezzato *polaritone*.

segue una sbibinatura della parte di lezione in mio possesso (quel giorno ho fatto tardi)

[...] che interagendo tra loro danno luogo ad un'eccitazione composita, che non è l'una né l'altra, e che viene chiamata polaritone.

Quelle relazioni di dispersione che voi trovate là, moltiplicate per  $\hbar$ , mi danno esattamente le energie di eccitazione del polaritone, cioè di questa eccitazione composta.

Questo fatto significa delle cose dal punto di vista concettuale molto importanti : guardate la costruzione che ci ha portato qui.

Noi siamo partiti dalle equazioni delle vibrazioni, classiche prima, poi le abbiamo quantizzate. E quindi abbiamo sostituito alle oscillazioni degli ioni nello spazio reale, delle oscillazioni collettive, che sono le variabili dei modi normali, che una volta quantizzate hanno dato origine ai fononi (modi vibrazionali).

E quindi abbiamo detto, gli stati vibrazionali eccitati sono descritti mediante dei quanti di eccitazione elementare del sistema fononico.

Dopodiché abbiamo trattato in questo caso l'interazione di un sistema polare (perché abbiamo preso un sistema formato da due atomi per cella) sottoposto ad un campo elettrico dipendente dal tempo. Quindi stiamo adesso andando a vedere come le vibrazioni reticolari reagiscono ad un campo elettrico, e ci siamo costruiti una funzione dielettrica, quindi siamo tornati indietro ad un problema classico.

Dalla funzione dielettrica siamo andati a vedere quelle che sono le soluzioni trasverse e le soluzioni longitudinali.

Abbiamo visto che ci sta un range di frequenze per le quali la radiazione non può propagarsi all'interno del materiale, e poi abbiamo trovato le frequenze di propagazione della radiazione elettromagnetica all'interno del materiale (relazione di dispersione..?). E quindi dal punto di vista classico lo studio è fatto.

Dopodiché ho aggiunto una cosa (non dimostrata) : guardate che queste due branche, al livello dello studio che abbiamo condotto solo e semplicemente delle relazioni di dispersione (frequenza - vettore d'onda), dal punto di vista della meccanica quantistica assumono un significato più profondo.

Il significato più profondo che loro assumono deriva dal fatto che nel sistema coesistono ed interagiscono due eccitazioni quantistiche : da una parte i fotoni, da una parte i fononi ottici, longitudinali ...≈....

Queste due eccitazioni quantistiche, interagendo fra loro, danno origine ad un'eccitazione

composita, che si chiama *polaritone*.

Questo polaritone ha una relazione di dispersione che è data esattamente da questa espressione (quale?) e questo polaritone ha energia data da  $\hbar$  moltiplicata per la frequenza  $\dots \approx \dots$ .

Quindi sostanzialmente si sta realizzando questa situazione : per descrivere certi comportamenti dei sistemi a molte particelle introduce delle eccitazioni quantistiche. Poi c'ha un'ulteriore interazione, questa volta con il campo magnetico.

Allora si vede che si può mettere insieme eccitazione con eccitazione, per creare delle eccitazioni composte.

Questo è solo un esempio, ma ce ne stanno tanti altri!

Quindi, sostanzialmente, ricordando adesso quello che abbiamo detto complessivamente su questa faccenda della funzione dielettrica, abbiamo visto che nel caso dei metalli è venuta fuori una frequenza caratteristica di oscillazione delle fluttuazioni di densità (di carica) dei metalli, che sono collegate a moti coerenti degli elettroni all'interno dei metalli, e poi abbiamo visto anche che sono quantizzati, e li abbiamo chiamati plasmoni (credo che il prof, quando ha trattato quel caso, si è dimenticato di tirare fuori il nome 'plasmoni').

In questo caso degli isolanti abbiamo determinato le relazioni di dispersione dipendete da una forma di funzione dielettrica che ci siamo costruita in maniera semplice, dopodiché abbiamo trovato che queste relazioni di dispersione, che abbiamo costruito in questa maniera, moltiplicate per  $\hbar$ , corrispondono a due tipi di energie di eccitazione del solido, che abbiamo chiamato polaritoni, e che vengono dalla composizione in un'unica eccitazione complessiva di due eccitazioni elementari che sono la radiazione elettromagnetica e le vibrazioni reticolari.

Guardate, la cosa interessante è questa : i fononi trasversi di per se stessi hanno [...] relazione di dispersione nel nostro schema; la luce ha una relazione di dispersione lineare. Vedete che succede : dove c'è crossing tra le due eccitazioni, significa che c'è possibilità di scambio di energia tra le due eccitazioni, c'è una modifica, forte, della relazione di dispersione del polaritone, che vedete che per piccoli  $k$  somiglia ad un fotone, per grossi  $k$  somiglia ad un fonone; mentre questo qui per piccoli  $k$  somiglia ad un fonone, per grossi  $k$  somiglia ad un fotone.

Mentre nella regione di crossing c'è una mescolanza paritetica tra le due componenti.

- **Effetto Raman (o diffusione Brillouin)**

Abbiamo detto che quando la radiazione elettromagnetica incide su un solido si può avere una diffusione perfettamente elastica (riflessione totale) oppure una diffusione anelastica.

Nel secondo caso la radiazione scambia energia col solido.

L'effetto Raman descrive la diffusione anelastica quando il solido scambia un quanto relativo ad un fonone ottico con una radiazione che quindi è nell'infrarosso.

La diffusione Brillouin riguarda invece lo scambio di energia con un fonone acustico.

Vogliamo dunque sviluppare un modello quantistico per studiare il fenomeno di diffusione

della radiazione.

Il modello del sistema è composto da : i fononi, gli elettroni, un termine di interazione tra fononi ed elettroni, la radiazione elettromagnetica.

Se per semplicità consideriamo un solo elettrone possiamo in parte utilizzare i conti fatti per studiare l'interazione tra i cristalli e i neutroni.

Non svilupperemo tutti i conti, ma mostreremo solo la strategia di calcolo.

Per cominciare richiamiamo l'hamiltoniana di quando abbiamo studiato la diffrazione di neutroni (vedi)

$$H = \frac{P^2}{2m} + \sum_{\vec{q}, s} \hbar \omega_s(\vec{q}) \left( a_{\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{q}, s} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\underline{n}, \mu} V_\mu(\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_\mu - \vec{S}_{\underline{n}})$$

dove il primo termine è l'energia cinetica dell'elettrone, il secondo rappresenta le energie dei fononi e il terzo è un termine di interazione tra l'elettrone e i fononi.

Per studiare quest'Hamiltoniana abbiamo considerato l'ultimo termine come una perturbazione.

Abbiamo poi sviluppato in serie il termine perturbativo :

$$H' \approx \sum_{\underline{n}, \mu} V_\mu(\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_\mu) - \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_\mu(\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_\mu) \cdot \vec{S}_{\underline{n}}$$

Come detto prima, dobbiamo poi introdurre un altro termine che descrive la radiazione elettromagnetica. Utilizziamo una descrizione semiclassica :

$$- \frac{e}{m c} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + \text{h.c.} \right)$$

termine di interazione tra il campo elettromagnetico e l'elettrone dove  $\vec{k}$  è il vettore d'onda della radiazione elettromagnetica,  $\vec{A}_0$  è l'ampiezza del potenziale vettore e  $\vec{P}$  è il momento dell'elettrone; infine h.c. sta per 'hermitiano coniugato'.

Questa volta, a differenza dello studio fatto per la diffusione di neutroni, possiamo fare una cosa 'più chic'. Consideriamo il primo pezzo del termine di interazione 'fononi - elettrone' : è un pezzo in cui compare il vettore di traslazione elementare del reticolo, e dunque ha la periodicità del reticolo.

Allora, possiamo includere questo termine nell'hamiltoniana imperturbata, che in questo modo comprende l'energia cinetica dell'elettrone, le energie fononiche, e questo potenziale di interazione che è periodico sul reticolo.

Ricapitolando

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \sum_{\vec{q}, s} \hbar \omega_s(\vec{q}) \left( a_{\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{q}, s} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\underline{n}, \mu} V_\mu(\vec{r} - \vec{R}_\mu - \vec{d}_\mu)$$

Hamiltoniana imperturbata

$$H' = - \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_\mu(\vec{r} - \vec{R}_\mu - \vec{d}_\mu) \cdot \vec{S}_\mu - \frac{e}{mc} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + \text{h.c.} \right)$$

perturbazione.

Le autofunzioni dell'Hamiltoniana imperturbata sono prodotti di funzioni di Bloch per autofunzioni fononiche (che possiamo scrivere con la notazione dei numeri di occupazione) :

$$\Psi_{in} = \Psi_{\vec{k}, n}(\vec{r}) |n_{q_1}, n_{q_2} \dots\rangle$$

$$\Psi_{fin} = \Psi_{\vec{k}', n'}(\vec{r}) |n'_{q_1}, n'_{q_2} \dots\rangle$$

le energie iniziale e finale saranno la somma di un energia di banda in cui si trova l'elettrone più un'energia fononica (somme di energie di oscillatore, con i numeri di occupazione) :

$$E_{in} = E_n(\vec{k}) + \sum_{\vec{q}, s} \hbar \omega_s(\vec{q}) \left[ n_s(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right]$$

$$E_{fin} = E_{n'}(\vec{k}') + \sum_{\vec{q}, s} \hbar \omega_s(\vec{q}) \left[ n'_s(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right]$$

Fatte queste premesse, consideriamo adesso la probabilità di transizione, in modo da arrivare a delle regole di selezione.

Osserviamo che dei due operatori che compongono "la perturbazione", il primo non dipende dal tempo, mentre il secondo si.

In ogni caso la probabilità di transizione è proporzionale al modulo quadro dell'elemento di matrice dell'operatore di perturbazione tra i due stati iniziale e finale :

$$P_{in \rightarrow fin} = \left| \langle \Psi_{fin} | \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_\mu(\vec{r} - \vec{R}_\mu - \vec{d}_\mu) \cdot \vec{S}_\mu - \frac{e}{mc} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + \text{h.c.} \right) | \Psi_{in} \rangle \right|^2$$

Si tratta dunque di fare il modulo quadro di una differenza di operatori.

Avrò dunque il modulo quadro del primo, il modulo quadro del secondo, e due termini misti :

- solidi in campi esterni -

$$\begin{aligned}
 &= \left| \langle \Psi_{\text{fin}} | \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_{\mu} (\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_{\mu}) \cdot \vec{S}_{\mu}^{\underline{n}} | \Psi_{\text{in}} \rangle \right|^2 + \\
 &+ \left| \langle \Psi_{\text{fin}} | \frac{e}{m c} (e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + \text{h.c.}) | \Psi_{\text{in}} \rangle \right|^2 + \\
 &+ \left| \langle \Psi_{\text{fin}} | \left[ \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_{\mu} (\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_{\mu}) \cdot \vec{S}_{\mu}^{\underline{n}} \right] \left[ \frac{e}{m c} (e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + \text{h.c.}) \right] | \Psi_{\text{in}} \rangle \right|^2 + \\
 &+ \left| \langle \Psi_{\text{fin}} | \left[ \frac{e}{m c} (e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + \text{h.c.}) \right] \left[ \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_{\mu} (\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_{\mu}) \cdot \vec{S}_{\mu}^{\underline{n}} \right] | \Psi_{\text{in}} \rangle \right|^2 .
 \end{aligned}$$

Riguardo al primo termine c'è un pò di casino, perché il prof a lezione si è incasinato, ed è tronato due volte su questo termine. La prima volta ha detto :

«Quando abbiamo studiato la diffusione di neutroni abbiamo già fatto i conti per questo termine (vedi).

In particolare abbiamo visto che la regola di selezione legata a questo operatore di perturbazione ci dice che la probabilità di transizione è non nulla solo se i due stati iniziale e finale sono tali che le due parti di stato fononico sono uguali per tutti i numeri di occupazione tranne uno, che deve differire di un'unità».

Quando poi c'è ritornato, ha detto brevemente che :

«è un termine perturbativo indipendente dal tempo, e dunque comporta per la probabilità di transizione una delta

$$\delta(E_{\text{in}} - E_{\text{fin}})$$

e cioè una regola di selezione che prevede la conservazione dell'energia».

Riguardo al secondo termine, esso descrive semplicemente la perturbazione dovuta ad un'onda elettromagnetica. Questo caso l'abbiamo già studiato : è il fenomeno delle transizioni ottiche tra due bande, e abbiamo visto a suo tempo (vedi) che in quel caso la transizione è verticale ( $\vec{k} - \vec{k}' = 0$ ), con assorbimento di un quanto di energia pari ad  $\hbar\omega$ .

I termini interessanti sono gli ultimi due, che sono 'misti'.

In questo caso vediamo che a causa del termine 'di onda elettromagnetica', la perturbazione (a differenza della diffusione di neutroni) è una perturbazione dipendente dal tempo (in maniera armonica) !

Quindi l'energia non è l'energia iniziale uguale all'energia finale, ma è l'energia iniziale meno l'energia finale,  $\pm\hbar\omega$ , che è un termine 'portato' dalla radiazione elettromagnetica (vedi teoria delle perturbazioni armoniche fatta a struttura). In altre parole nella



probabilità di transizione c'è una delta del tipo

$$\delta(E_{in} - E_{fin} \pm \hbar \omega)$$

Dobbiamo poi calcolare il modulo quadro dell'elemento di matrice della perturbazione tra gli stati iniziale e finale. Ma attenzione che dalla perturbazione dobbiamo togliere la parte dipendente dal tempo (parte armonica) che è quella che è approssimata dalla delta di Dirac :

$$P_{in \rightarrow fin} = \left| \langle \Psi_{fin} | \left[ \sum_{\underline{n}, \mu} \nabla V_{\mu} (\vec{r} - \vec{R}_{\underline{n}} - \vec{d}_{\mu}) \cdot \vec{S}_{\mu}^{\underline{n}} \right] \left[ \frac{e}{m c} (e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{A}_0 \cdot \vec{P} + h.c.) \right] | \Psi_{in} \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f \pm \hbar \omega)$$

A causa della delta, dunque, la regola di selezione prevede che

$$E_{in} - E_{fin} \pm \hbar \omega = 0$$

$$E_{in} - E_{fin} = \pm \hbar \omega$$

ma per quello che abbiamo visto riguardo agli stati iniziali e finali

$$E_n(\vec{k}) - E_{n'}(\vec{k}') \pm \hbar \omega_s(\vec{q}) = \pm \hbar \omega$$

Dunque vediamo che (per questo termine) all'assorbimento della radiazione si accompagna un fenomeno di assorbimento o emissione di un fonone.

Poi c'è l'altra regola di selezione

$$\vec{k} - \vec{k}' + \vec{q} = 0$$

Se in particolare la radiazione che stiamo inviando ha una frequenza nell'infrarosso, questa non è in grado di far transire elettroni da una banda ad un'altra. Infatti tra una banda e l'altra ci sono gap dell'ordine dell'elettronvolt, mentre le energie trasportate da una radiazione infrarossa (fotoni) sono dell'ordine delle frazioni di eV.

Dunque si ha la regola

$$n = n'$$

Concludendo, sono permesse transizioni infrabanda indotte dall'azione combinata della radiazione e del fonone.

Invece prima avevamo transizioni infrabanda dovute al solo fonone.

Si tratta dunque di un processo misto.

- solidi in campi esterni -

Questa è la descrizione dei fenomeni Raman o Brillouin.

## Indice

- Polarizzazione 1
- suscettività 1  
(polarizzazione) 1  
    significato fisico della suscettività 2
- Conseguenze del principio di riproducibilità 2
- Convoluzione e trasformata 3
- Equazioni di Maxwell in trasformata 4
  - prima equazione di Maxwell 4
  - seconda equazione di Maxwell 6
  - terza equazione di Maxwell 6
  - quarta equazione di Maxwell 11
- Onde elettromagnetiche 13
- Carattere complesso della funzione dielettrica 17
- \*\* Propagazione nei metalli \*\* 18
- \* espressione esplicita della conducibilità 19
- \* espressione esplicita della funzione dielettrica generalizzata 21
- \* relazione di dispersione & propagazione 22
  - ipotesi 'di alta frequenza' 22
- \* frequenza di plasma & riflettività 24
- \* il meccanismo di urto 25
  - \* la conduzione 27
- \* oscillazioni della densità di carica 28
- \*\* Propagazione nei dielettrici \*\* 29
- \* espressione esplicita della suscettività 30
- \* propagazione nei dielettrici 33
- Polaritone 39
- Effetto Raman (o diffusione Brillouin) 44