



[UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXVI SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2022

As equações de Maxwell no espaço de Fourier e acoplamento entre excitações elementares em sólidos

Maisa Ferreira da Silva Brandão¹; Antonio Vieira de Andrade Neto²

1. Bolsista PROBIC/UEFS, Graduando em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail:

bmaisa37@gmail.com

2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: aneto@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Função Dielétrica; Espaço de Fourier; Equações de Maxwell.

INTRODUÇÃO

Nesse trabalho, começaremos primeiro pelo ponto de partida do estudo da plasmônica: as equações de Maxwell. Essas equações são usualmente reescritas de uma forma diferente da qual conhecemos, chama-se equações de Maxwell no espaço de Fourier. Podemos encontrar essas expressões escritas no espaço de Fourier em diversos livros da área da plasmônica (Maier, 2007; Novotny & Hetch, 2006; Pelton & Bryant, 2013). Dito isso, notou-se ser de suma importância demonstrar explicitamente como usamos e por que usamos as equações de Maxwell escritas pela linguagem de Fourier, assim a primeira parte do trabalho é dedicado a isso.

Há uma ligação entre essas equações escritas em Fourier com excitações elementares em sólidos. Estudamos a função dielétrica do modelo de gás de elétrons livres, onde as oscilações longitudinais desse modelo e sua interação com ondas eletromagnéticas transversais foram obtidas através das equações no domínio de Fourier. Além das excitações dos elétrons livres, trouxemos também a participação dos fônons, um tipo de excitação elementar realizada pelos átomos que se encontram “presos”, obteve-se expressões genéricas para movimentos vibracionais longitudinais e a relação de dispersão do poláriton de fônon.

MATERIAL E MÉTODOS OU METODOLOGIA (ou equivalente)

A metodologia utilizada é a usual em trabalhos de Física teórica. Iniciamos o trabalho com uma revisão bibliográfica sobre a função dielétrica e sua importância para a determinação das propriedades ópticas dos materiais. Para isso consultamos livros de eletromagnetismo (Jackson, 1999; Nussenzveig, 2015), plasmônica (Maier, 2007; Novotny & Hetch, 2006) e estado sólido (Cardona & Yu Peter, 2005), e artigos que também tratam do tema (Andrade-Neto, 2016; Andrade-Neto *et al*, 2017; Andrade-Neto, 2018). Já os gráficos do trabalho foram feitos pela linguagem de programação Python.

RESULTADOS E/OU DISCUSSÃO (ou Análise e discussão dos resultados)

As equações de Maxwell são as expressões básicas que descrevem o comportamento do campo eletromagnético e também são fundamentais no estudo da interação radiação-

matéria. Em sua forma mais familiar as equações de Maxwell são escritas em função da posição e do tempo. Contudo, no estudo das propriedades ópticas dos materiais é muito mais conveniente escrever essas equações no espaço de Fourier.

Na ausência de carga externa e corrente livres, as equações de Maxwell em termos de componentes de Fourier são escritas como:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (2)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \omega \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) \quad (3)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H}(\mathbf{k}, \omega) = -\omega \mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) \quad (4)$$

Multiplicando vetorialmente a equação (3) por \mathbf{k} , depois de algumas manipulações obtemos a seguinte equação de onda no espaço de Fourier:

$$\mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)) - \mathbf{k}^2 \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \quad (5)$$

onde $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ é a função dielétrica do sistema. Ainda que a equação (5) seja muito geral e de difícil solução analítica, a partir dela é possível obter relevantes informações sobre as excitações elementares do sistema válidas para qualquer material. Dessa equação, temos dois casos possíveis:

1- Oscilações Longitudinais (\mathbf{k} paralelo a \mathbf{E})

Se \mathbf{k} for paralelo a \mathbf{E} o lado esquerdo da equação (5) é nulo e devemos ter

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (6)$$

Assim, as raízes da função dielétrica determinam as oscilações longitudinais do sistema.

2- Oscilações Transversais (\mathbf{k} perpendicular a \mathbf{E})

Se \mathbf{k} for perpendicular a \mathbf{E} , a equação (5) torna-se

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \quad (7)$$

A expressão (7) representa a relação de dispersão genérica de um material no qual o comportamento pode ser determinado pela função dielétrica $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$.

Usando o modelo de Drude a função dielétrica do gás de elétrons livres é dada por

$$\varepsilon_{\text{Drude}}(\omega) = \varepsilon(\infty) \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} \right] \quad (8)$$

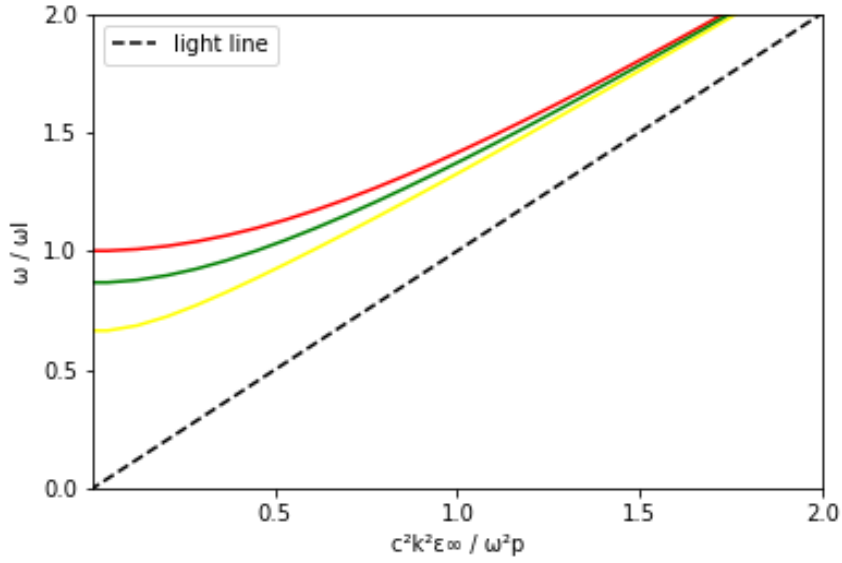
onde $\varepsilon(\infty)$ é a constante dielétrica relativa surgida das cargas ligadas do fundo da rede, γ é o coeficiente de amortecimento e ω_p é a frequência de plasma.

Substituindo a parte real da equação (8) em (7) obtemos a seguinte equação

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{\omega_p^2 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon_{\infty}} - \gamma^2}{2} \pm \frac{\omega_p^2}{2} \sqrt{\left(1 + \frac{k^2 c^2}{\varepsilon_{\infty} \omega_p^2} - \frac{\gamma^2}{\omega_p^2} \right)^2 + \frac{4\gamma^2 k^2 c^2}{\varepsilon_{\infty} \omega_p^4}} \quad (9)$$

Que representa a relação de dispersão para ondas eletromagnéticas transversais em um gás de elétrons livres (8) para um material genérico, cujo gráfico é mostrado na Figura 1, para três diferentes valores de γ . $\gamma = 0$ (curva vermelha), $\gamma = 0.1 \omega_p$ (curva verde) e $\gamma = 0.5 \omega_p$ (curva amarela).

Figura 1. Relação de dispersão para ondas eletromagnéticas transversais em um gás de elétrons livres com amortecimento.



No modelo de Drude, considerou-se apenas os elétrons livres, agora consideraremos a contribuição da rede para a função dielétrica, em particular a contribuição dos modos vibracionais. A função dielétrica é:

$$\epsilon_{\text{lattice}}(\omega) = \epsilon(\infty) \left[\frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{(\omega_T^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega)} \right] \quad (10)$$

onde $\epsilon(\infty)$ é a constante dielétrica de alta frequência, ω_L e ω_T são as frequências dos fônons ópticos longitudinais e transversais, respectivamente, e Γ é uma constante de amortecimento.

A função dielétrica total do sistema, negligenciando amortecimento, é dada por

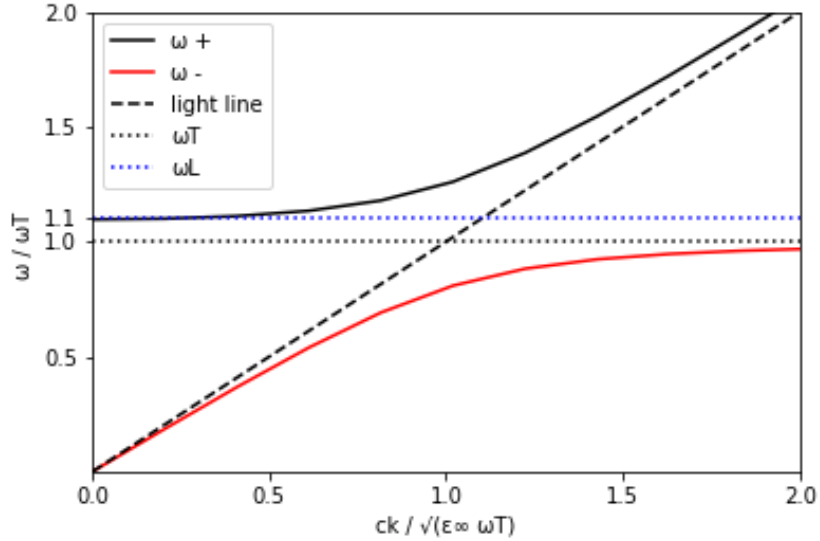
$$\epsilon_{\text{total}}(\omega) = \epsilon(\infty) \left[1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right] \quad (11)$$

Cujas raízes resultam na seguinte equação

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[(\omega_L^2 + \omega_P^2) \pm \sqrt{(\omega_L^2 + \omega_P^2)^2 - 4\omega_P^2\omega_T^2} \right] \quad (12)$$

que representa o acoplamento plásmo-fônon LO mostrado na Figura 2

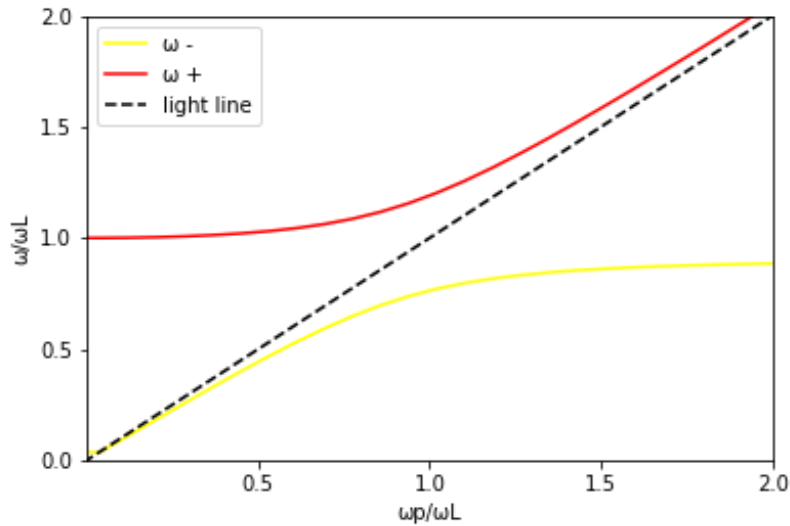
Figura 2. A oscilação longitudinal plásmo-fônon. O gráfico mostra a mistura de oscilações de fônons e plamóns longitudinais



Já o acoplamento fóton-fônon TO dá origem a uma nova quasipartícula denominada polaríton, cuja relação de dispersão é mostrada na Figura 3 e é descrita pela seguinte equação

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\omega_L^2 + \frac{c^2 k^2}{\varepsilon(\infty)} \right) \pm \sqrt{\left(\omega_L^2 + \frac{c^2 k^2}{\varepsilon(\infty)} \right)^2 - 4\omega_T^2 \frac{c^2 k^2}{\varepsilon(\infty)}} \right]$$

Figura 3. A relação de dispersão para o polaríton de fônon. Representa o acoplamento entre fóton e fônon óptico transversal.



CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

Com esse trabalho respondeu-se duas perguntas feitas inicialmente: como surgem as equações de Maxwell no espaço de Fourier e porquê elas são mais adequadas. A análise em termo de componentes de Fourier é muito mais simples do que usando as equações

no usual espaço \mathbf{r} e tempo t , isso é bastante dito na literatura, porém não demonstrado de forma explícita e por isso a importância do presente trabalho.

Utilizando a função dielétrica calculada via modelo de Drude obtém-se a relação de dispersão para um gás de elétrons como mostrada na figura 1. Nesse gráfico, levamos em conta o coeficiente de amortecimento γ diferente de zero e variando esse coeficiente obteve-se duas curvas a mais, podendo observar que com amortecimento é possível que uma onda se propague com uma frequência menor do que a de plasma.

Em suma, das equações (6) e (7), derivada da equação de onda no espaço de Fourier, é possível obter expressões de condições para oscilações coletivas longitudinais e propagação de ondas transversais. Assim, basta ter uma expressão adequada da função dielétrica substituir nesses dois casos e obter gráficos e interpretação dos fenômenos como exemplificado nas Figuras 1, 2 e 3, e naturalmente, essa simplificação ocorre pelo tratamento no espaço de Fourier.

REFERÊNCIAS

- ANDRADE-NETO, A.V. 2018. A quantum mechanical expression for the lattice contribution to the total dielectric function of semiconductors. *Chinese Journal of Physics*, vol. 56, no. 5, pp. 2308–2316.
- ANDRADE-NETO, A.V.; RIBEIRO NETO, A.; JORIO, A. 2017. Relação de dispersão para os plásmen-polárítens de superfície em uma interface plana metal/dielétrico. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 39.
- ANDRADE-NETO, A.V. 2016. Dielectric function for free electron gas: comparison between Drude and Lindhard models. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 39.
- CARDONA, M.; YU, P.Y. 2005. *Fundamentals of Semiconductors*. Vol. 619. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- JACKSON, J. D. 1999. *Classical Electrodynamics*. 3rd ed. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY.
- MAIER, S.A. 2007. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Vol. 1. New York: Springer.
- NOVOTNY, L.; HECHT, B. 2012. *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press.
- NUSSENZVEIG, H.M. 2015. *Curso de Física Básica: Eletromagnetismo (vol. 3)*. Vol. 3. Editora Edgar Blucher.
- PELTON, M.; GARNETT, W.B. 2013. *Introduction to Metal-Nanoparticle Plasmonics*. John Wiley & Sons. 296p.