

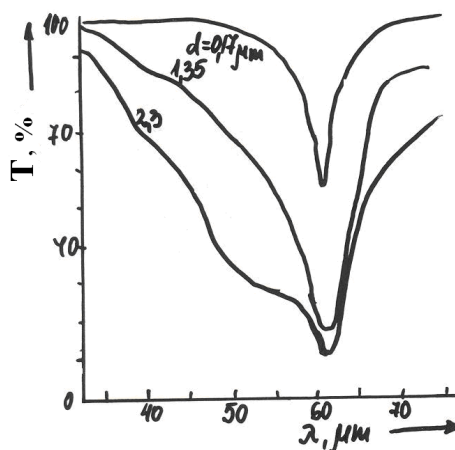
## 28. ПОГЛЪЩАНЕ И ОТРАЖЕНИЕ НА ИНФРАЧЕРВЕНИТЕ ЛЪЧИ В КРИСТАЛИ В ЧЕСТОТНАТА ОБЛАСТ НА ФОНОННИТЕ ИМ СПЕКТРИ

### 1. Селективно поглъщане на инфрачервени лъчи от йонни кристали

Възбуждане на оптични трептения в кристалната решетка (КР) на йонните кристали при преминаване през тях на електромагнитни вълни (ЕМВ) с честоти от диапазона на инфрачервените вълни (ИЧВ).

Йонните кристали се характеризират с рязък максимум на поглъщане на ИЧВ в тясна спектрална област. – Фиг.1.

Извън тези резки ивици на поглъщане йонните кристали добре пропускат ИЧВ и затова се използват в ИЧ оптика.



Фиг.1. Спектър на пропускане на инфрачервени лъчи през кристални пластинки от NaCl с различна дебелина при стайна температура.

Разглеждаме поглъщане на ИЧВ от едномерна КР, съставена от два вида частици с различни маси и противоположен електричен заряд. Единия вид частици с маса  $m$  и заряд  $+q$  номерираме с нечетни номера  $(2n-1), (2n+1), \dots$ , а другия вид с маса  $M$  и заряд  $-q$  номерираме с четни номера  $(2n-2), 2n, (2n+2), \dots$

Уравненията за движение на двата вида частици под действие на електричното поле на електромагнитната вълна са:

$$(1) \quad \begin{aligned} M \frac{d^2 u_{2n}}{dt^2} &= \beta(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}) + qE_0 e^{i\omega t} \\ m \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} &= \beta(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1}) - qE_0 e^{i\omega t} \end{aligned}$$

Членовете  $qE_0 e^{i\omega t}$  описват външните сили, с които електричното поле на ИЧВ действа на двата вида йони.

Решенията на тези уравнения дават принудените трептения на КР под действието на ЕМВ и са от вида:

$$(2) \quad \begin{aligned} u_{2n} &= A e^{i[\omega t + k 2na]} \\ u_{2n+1} &= B e^{i[\omega t + k(2n+1)a]} \end{aligned}$$

От квантово механичната теория, поглъщането е процес на възникване на оптични фонони за сметка на поглъщане на ИЧ фотони. Ако не участват други частици от законите за запазване на енергията и импулса (ЗЗИ и ЗЗЕ) следва, честотите и вълновите вектори на фотоните и възникналите в резултат на поглъщането им фонони да са равни:

$$\omega_1(k_1) = \omega_2(k_2)$$

За ИЧ фотони: за  $\lambda=100\mu\text{m}$ ,  $k = 2\pi/\lambda = 6,28 \cdot 10^2 \text{cm}^{-1}$

За фононите:  $k_{\text{max}} = \pi/2a \approx 10^8 \text{cm}^{-1}$

$\Rightarrow k(\text{фотони}) \ll k_{\text{max}} \Rightarrow$  поглъщането на фотони е свързано с възбуждане на оптични

фонони с малко  $k$  и  $\omega_{0\text{max}}^2 = 2\beta\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$ .

За  $k \approx 0$  от (2)  $\Rightarrow$

$$(3) \quad \begin{aligned} u_{2n} &= Ae^{i\omega t} \\ u_{2n+1} &= Be^{i\omega t} \end{aligned}$$

Заместваме (3) в (1) и получаваме:

$$(4) \quad \begin{aligned} -M\omega^2 A &= \beta(2B - 2A) + qE_0 \\ -m\omega^2 B &= \beta(2A - 2B) - qE_0 \end{aligned}$$

$$(5) \quad \begin{aligned} A &= \frac{q/M}{\omega_{0\text{max}}^2 - \omega^2} E_0 \\ B &= \frac{q/m}{\omega_{0\text{max}}^2 - \omega^2} E_0 \end{aligned}$$

При  $\omega = \omega_{0\text{max}}$  настъпва резонанс ( $A \rightarrow \infty, B \rightarrow \infty$ ), т.е има максимално поглъщане на ИЧВ.

Да разгледаме връзката между коефициента на квазиеластичност  $\beta$  и модула на еластичност  $c$  в направление на едномерна кристална решетка. [100] за NaCl.

Под действие на механичното напрежение  $F/a^2$  за относителната деформация имаме:

$$(6) \quad \frac{\Delta a}{a} = \frac{1}{c} \frac{F}{a^2} \Rightarrow (8) \quad \beta = c \cdot a$$

$$(7) \quad F = \beta \cdot \Delta a$$

В направление [100] за NaCl:

$$c = 5 \cdot 10^{11} \text{dyn/cm}^2; a = 3 \cdot 10^{-8} \text{cm} \Rightarrow \beta = 1,5 \cdot 10^4 \text{dyn/cm}$$

За  $\omega_{0\text{max}}^2 = 2\beta\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \Rightarrow \omega_{0\text{max}} = 3,6 \cdot 10^{13} \text{s}^{-1}$ . Това съответства на  $\lambda \sim 50\mu\text{m}$ .

Опитно наблюдаваното селективно поглъщане на ИЧВ в NaCl е  $\lambda \sim 61\mu\text{m}$ . Това е добро съвпадение, като се знае, че моделът е опростен и едномерен.

Максимум в поглъщането на ИЧВ има и при ковалентните кристали на ПП.

## 2. Селективно отражение на ИЧВ от кристали

От експерименталните резултати се знае, че при йонните кристали в съседство с максимумите на поглъщане на ИЧВ от страна на по-малките дължини на вълните се наблюдава и силно изразени максимуми на отражение на ИЧВ от повърхността на тези кристали. Това явление се използва в ИЧ спектроскопия за получаване на т.н *остатъчни лъчи* – тесни спектрални ивици в далечната ИЧ област.

Изменението на взаимното разположение на две съседни частици с противоположни заряди  $\pm q$  под действието на електричното поле на ЕМВ от (3, 5) е:

$$(9) \quad x = u_{2n+1} - u_{2n} = \frac{q}{\omega_{0,\max}^2 - \omega^2} \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right) \cdot E$$

Йонната поляризация вследствие на това е:

$$(10) \quad P_{\text{йон}} = \frac{qx}{2a^3} = \frac{q^2}{2a^3(\omega_{0,\max}^2 - \omega^2)} \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right) \cdot E$$

Тук  $a^3$  е обемът, който се пада на един диполен момент  $qx/2$ , респективно на 1 молекула натриев хлорид.  $a$  – разстоянието между два най-близки съседни.

Йонната диелектрична възприемчивост е:

$$(11) \quad \chi_{\text{йон}} = \frac{P_{\text{йон}}}{\varepsilon_0 E}$$

За изотропен диелектрик  $\varepsilon = 1 + \chi$ ,  $\chi = \chi_{\text{сл}} + \chi_{\text{йон}} + \chi_{\text{ор}}$  - диелектрична възприемчивост

За йонната част на диелектричната възприемчивост  $\Rightarrow$

$$(12) \quad \Delta\varepsilon_{\text{йон}} = \chi_{\text{йон}} = \frac{q^2}{2a^3 \varepsilon_0 (\omega_{0,\max}^2 - \omega^2)} \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)$$

Формула (12) наречена формула на Борн за йонната част на диелектричната проницаемост на кристалите показва, че при  $\omega > \omega_{0,\max}$  диелектричната проницаемост на кристала става отрицателна. Това означава, че коеф. на пречупване на ЕМВ от кристала става имагинерен, т.е ЕМВ започват да се отразяват от кристала.

$$\varepsilon = n^2, \quad n = n_x + in_y = \text{Re } n + i \text{Im } n, \quad n_y = \text{Im } n$$

За  $\omega > \omega_{0,\max}$ ,  $\Delta\varepsilon_{\text{йон}} < 0 \Rightarrow \varepsilon = (in_y)^2 = -n_y^2 = -\text{Im } n^2 \Rightarrow$  отражение на ЕМВ от кристала.