

# Lorentzov model

Atómy dielektrickej látky sú tlmené elektrické oscilátory. Všetky oscilátory majú vlastnú rezonančnú frekvenciu  $\omega_0$  a faktor tlmenia  $\gamma$ . Ak takýto oscilátor interaguje s harmonickým elektrickým poľom, dochádza k jeho rozkmitaniu a teda aj k časovej perieodickej zmene jeho elektrického dipólového momentu. Objemová hustota oscilátorov poznáme ako vektor polarizácie  $\vec{P}$ . Pomocou materiálového vzťahu  $P_0 = \varepsilon_0(1 - \varepsilon)E_0$  nájdeme Lorentzov vzťah pre závislosť komplexnej relatívnej permitivity od frekvencie

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{f\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

Táto funkcia opisuje fyzikálny systém s rezonančnou frekvenciou blízkou  $\omega_0$ . Bezrozmernú veličinu  $f$  nazývame *sila oscilátora*.

Pre lepšiu predstavu nakreslíme graf závislosti reálnej a imaginárnej časti relatívnej permitivity od frekvencie  $\omega$ , ktorú budeme škálovať voči vlastnej frekvencii  $\omega_0$ . Urobíme to tak, že celý zlomok vydělíme druhou mocninou vlastnej frekvencie:

$$\varepsilon(\omega/\omega_0) = 1 + \frac{f}{1 - (\omega/\omega_0)^2 - i(\gamma/\omega_0)(\omega/\omega_0)} = 1 + \frac{f}{1 - x^2 - iwx}$$

Je to výhodné, pretože takto môžeme pracovať s relatívnymi veličinami a namiesto stoviek terahertzov stačí používať príjemné čísla okolo jednotky. Riadiace pole uhlových frekvencií v programe na vykreslenie závislosti bude nadobúdať hodnoty od 0 do  $2\omega_0$ . Faktor tlmenia zadáme taktiež ako násobok  $\omega_0$ , povedzme  $\gamma = 0,25\omega_0$

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Nastavenie desatinnej čiarky namiesto bodky v grafoch
import locale
locale.setlocale(locale.LC_ALL, "sk_SK")
plt.rcParams["axes.formatter.use_locale"] = True
plt.rcParams["axes.formatter.use_mathtext"] = True

def LorentzEps(x, F, G):
    return 1 + F/(1 - x**2 - 1j*G*x)

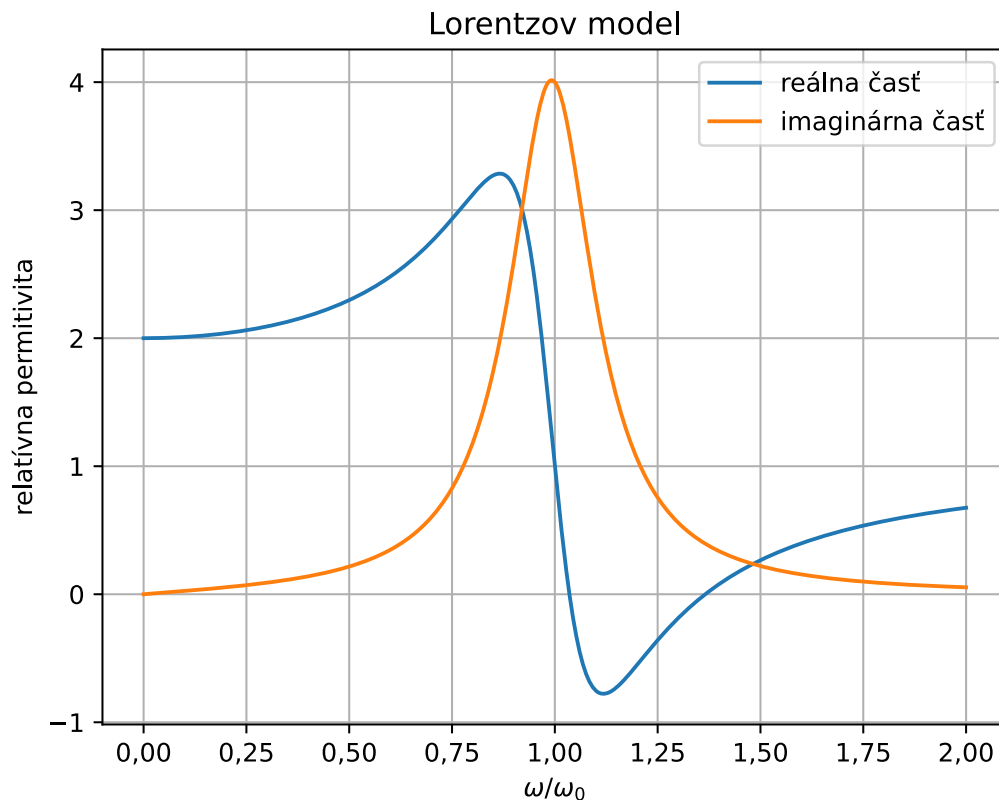
omegaMin = 0
omegaMax = 2.0
numPoints = 501
omega = np.linspace(omegaMin, omegaMax, numPoints)

f = 1.0
gamma = 0.25

eps = LorentzEps(omega, f, gamma)
```

```
plt.plot(omega, eps.real, label="reálna časť")
plt.plot(omega, eps.imag, label="imaginárna časť")

plt.grid(True)
plt.xlabel("\omega/\omega_0")
plt.ylabel("relatívna permitivita")
plt.title("Lorentzov model")
plt.legend()
plt.show()
```



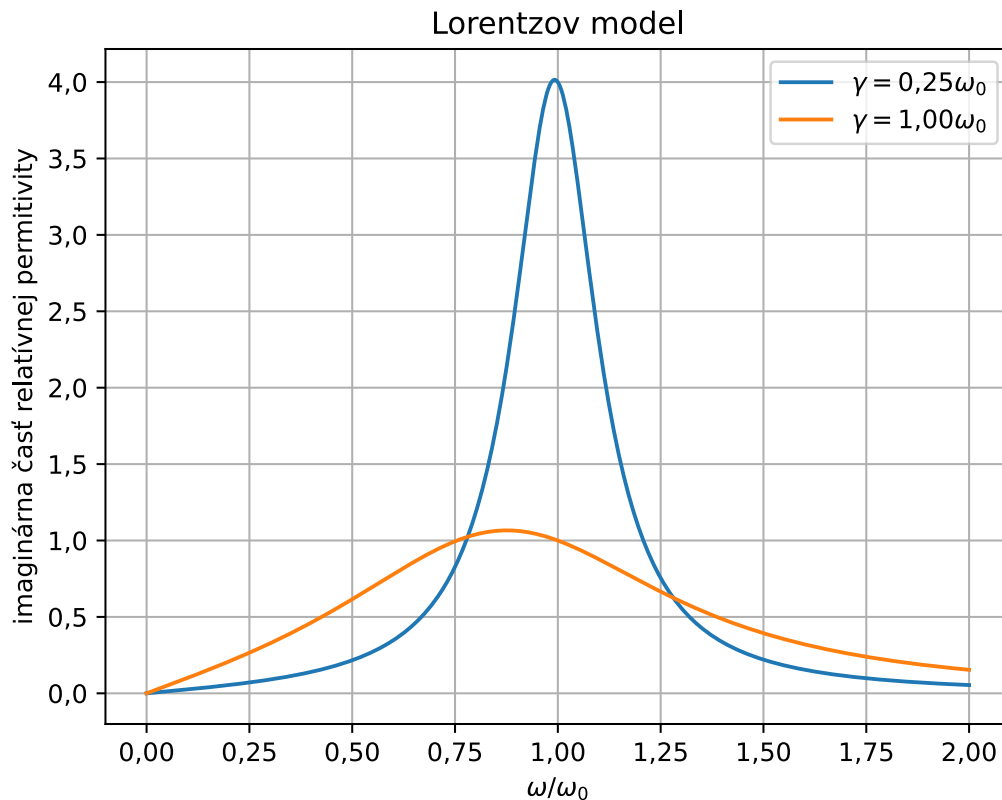
Imaginárna časť permitivity je symetrická píkova funkcia, tzv. *Lorentzova krivka*. Maximálnu hodnotu dosahuje pre rezonančnú frekvenciu  $\omega_R = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2/4}$ , čo je v našom prípade pre  $\gamma = 0,25\omega_0$  bod  $\omega/\omega_0 = 0,992$ . Čím je maximum užšie, tým je vyššie. Šírka maxima v polovici amplitúdy krivky (FWHM) sa rovná práve parametru  $\gamma$ . V predchádzajúcom kóde nahradíme časť, ktorá vykresľuje graf nasledujúcimi riadkami:

```
plt.plot(omega, LorentzEps(omega, 1.0, 0.25).imag,
         label="\gamma = 0{,}25\omega_0")

plt.plot(omega, LorentzEps(omega, 1.0, 1.0).imag,
         label="\gamma = 1{,}00\omega_0")

plt.xlabel("\omega/\omega_0")
plt.ylabel("imaginárna časť relatívnej permitivity")
plt.title("Lorentzov model")
```

```
plt.legend()
plt.show()
```



Vidíme, že okrem poklesu maxima došlo aj k posunutiu rezonančnej frekvencie do bodu  $0,866\omega_0$ .

Reálna časť permitivity môže v okolí rezonančnej frekvencie nadobúdať aj záporné hodnoty. Index lomu je však stále kladný. Nakoľko bežne majú zápornú permitivitu kovy, hovoríme, že z optického hľadiska má dielektrikum v tejto oblasti kovový charakter.

## Normálna a anomálna disperzia

Priebeh indexu lomu vykreslíme jednoducho tak, že odmocníme permitivitu použitím funkcie `np.sqrt()`. Táto metóda na rozdiel od `c.sqrt()` odmocní celé pole naraz. Index lomu vykreslíme v závislosti od vlnovej dĺžky, pričom využijeme to, že  $\omega/\omega_0 = \lambda_0/\lambda$ , kde  $\lambda_0$  je vlnová dĺžka svetla vo vákuu zodpovedajúca rezonančnej frekvencii  $\omega_0$ .

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Nastavenie desatinnej čiarky namiesto bodky v grafoch
import locale
locale.setlocale(locale.LC_ALL, "sk_SK")
plt.rcParams["axes.formatter.use_locale"] = True
plt.rcParams["axes.formatter.use_mathtext"] = True

def LorenzEps(x, F, G):
    return 1 + F/(1 - x**2 - 1j*G*x)
```

```

omegaMin = 0.4
omegaMax = 10.0
numPoints = 1001
omega = np.linspace(omegaMin, omegaMax, numPoints)

f = 1.0
gamma = 0.25

n = np.sqrt(LorenzEps(omega, f, gamma))

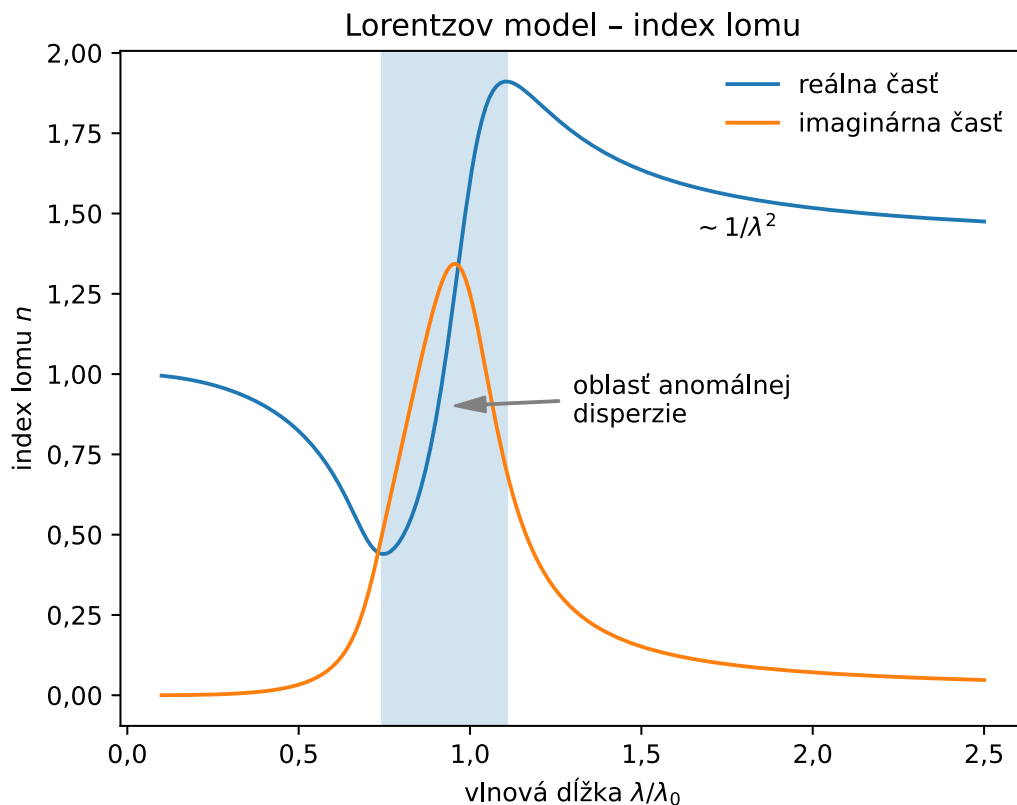
plt.plot(1/omega, n.real, label = "reálna časť")
plt.plot(1/omega, n.imag, label = "imaginárna časť")
plt.legend(frameon = False)
plt.xlabel("vlnová dĺžka  $\lambda/\lambda_0$ ")
plt.ylabel("index lomu  $n$ ")
plt.title("Lorentzov model - index lomu")

#vyznačenie oblasti anomálnej disperzie
limits = plt.axis("tight")
plt.fill_between([0.74, 1.11], limits[3], limits[2], alpha = 0.2)
plt.annotate("oblasť anomálnej\ndisperzie",
            xy = (0.93, 0.9), xytext = (1.3, 0.85),
            arrowprops = dict(color = "grey", shrink = 0.07,
                               width =
0.5, headwidth = 6))

plt.annotate(" $\sim 1/\lambda^2$ ", xy = (1.65, 1.43))

plt.show()

```



Aby sme sa vyhli deleniu nulou pri výpočte počtu vlnových dĺžok, zmenili sme začiatočnú frekvenciu `omegaMin` na hodnotu 0,4.

Môžeme si všimnúť, že napravo od rezonančnej vlnovej dĺžky (maximum absorpcie) klesá reálna časť indexu lomu približne ako  $1/\lambda^2$ . To je závislosť, ktorú objavil [Cauchy](#) analýzou experimentálnych dát. Takéto správanie sa indexu lomu nazývame *normálna disperzia*. V okolí maxima absorpcie však pozorujeme nárast indexu lomu s vlnovou dĺžkou. Ide o oblasť tzv. *anomálnej disperzie*, ktorá je v grafe vyznačená modrým obdĺžnikom.

#### Poznámka

- Zvýrazňujúci obdĺžnik sme nakreslili pomocou funkcie `plt.fill_between()`.
- V grafe sa objavili ďalšie vysvetľujúce texty a šípka. Ich umiestnenie v obrázku zariadi metóda `plt.annotate()`.

Ďaleko od rezonančnej frekvencie, t. j. mimo oblasti absorpcie, môžeme považovať faktor tlmenia za nulový ( $\gamma = 0$ ). Relatívna permitivita bude mať podľa Lorentzovho modelu iba reálnu časť:

$$\varepsilon = 1 + \frac{f\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

Zavedením substitúcie  $\omega = 2\pi c/\lambda$  a  $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$  získame závislosť permitivity od vlnovej dĺžky:

$$\varepsilon(\lambda) = 1 + \frac{f\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2}$$

Uvážením, že  $\varepsilon = n^2$  dôjdeme k [Sellmeierovmu vzťahu](#)

$$n^2 - 1 = \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C}$$

pričom  $B = f$  a  $C = \lambda_0^2$ . Sellmeier odvodil vzťah ako upresnenie Cauchyho modelu pre oblasť blízkej infračervenej a ultrafialovej oblasti opäť len z experimentálnych dát. Vidíme, že ako Cauchyho tak aj Sellmeierov model sú v súlade s mikroskopickou predstavou látok ako sústavou neinteragujúcich tlmených dipólových oscilátorov. Sellmeierov model je súčet viacerých členov s rôznymi rezonančnými vlnovými dĺžkami a s rôznymi váhami. Reálny materiál absorbuje svetlo pri viacerých frekvenciách. Môžu to byť elektrónové stavy atómov, molekúl, vibračné alebo rotačné stavy molekúl a iné javy vyplývajúce so štruktúry látky. V ideálnom prípade, ak sa jednotlivé absorpčné javy navzájom neovplyvňujú, dokážeme spektrum opísať tzv. *multioscilátorovým modelom*, čo je súčet Lorentzových členov zodpovedajúcich spomínaným rezonančným javom:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{j=1}^N \frac{f_j \omega_{0j}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j \omega}$$

kde  $\varepsilon_\infty$  je relatívna permitivita materiálu pre vlny s vysokými frekvenciami. Teoreticky sa relatívna permitivita pre  $\omega \rightarrow \infty$  blíži k hodnote 1. V praxi však vždy pracujeme v konečnom, zväčša úzkom intervale frekvencií. Rezonančné javy, ktoré sú ďaleko od pracovného spektrálneho rozsahu nedokážeme spoľahlivo detailne vyjadriť, preto ich nahradíme predstavou, že spôsobujú mierne zvýšenie reálnej časti relatívnej permitivity o hodnotu  $\varepsilon_\infty - 1$ . Každý oscilátor je charakterizovaný tromi parametrami: váha oscilátora  $f_j$ , vlastná frekvencia oscilátora  $\omega_{0j}$  a faktor tlmenia  $\gamma_j$ .

## Nanometre a elektónvolty

Cauchyho a Sellmeierov model pracuje s vlnovou dĺžkou žiarenia, zatiaľ čo Lorentzov model predpokladá závislosť od frekvencie alebo od uhlovej frekvencie. Ak hovoríme o vlnovej dĺžke, myslíme tým vlnovú dĺžku  $\lambda$  svetelnej vlny vo vákuu<sup>[1]</sup>:

$$\lambda = \frac{c}{f} = 2\pi \frac{c}{\omega}$$

Ide teda o veličinu, ktorá jednoznačne súvisí s frekvenciou a je úmerná jej prevrátenej hodnote. Konštanta úmernosti je rýchlosť svetla vo vákuu. V princípe je teda jedno, či hovoríme o frekvencii alebo o vlnovej dĺžke (vo vákuu), pretože je medzi nimi jednoznačný vzťah.

V optike často používame práve vlnovú dĺžku vyjadrenú v nanometroch, prípadne v mikrometroch. Väčšinou sa stretáme s vlnením od 200 nm, čo zodpovedá ultrafialovej (UV) oblasti až po 2  $\mu\text{m}$  v blízkej infračervenej (IČ) oblasti. V strede spektra viditeľného žiarenia leží zelené svetlo s vlnovou dĺžkou 550 nm = 0,55  $\mu\text{m}$ .

Spomenutým hodnotám zodpovedajú nasledujúce frekvencie:

vlnová dĺžka	frekvencia	energia fotónu	farba
200 nm = 0,2 $\mu\text{m}$	1500 THz	6,2 eV	UV
400 nm = 0,4 $\mu\text{m}$	750 THz	3,1 eV	fialová
550 nm = 0,55 $\mu\text{m}$	545 THz	2,3 eV	zelená

vlnová dĺžka	frekvencia	energia fotónu	farba
700 nm = 0,7 μm	429 THz	1,8 eV	červená
2000 nm = 2 μm	150 THz	0,62 eV	IČ

Energia fotónu súvisí s frekvenciou elektromagnetickej vlny podľa Planckovho vzťahu

$$E = hf$$

kde  $h = 6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$  je Planckova konštanta. Ak do Planckovho vzťahu dosadíme frekvenciu v herzoch, dostaneme energiu fotónu v jouloch, pričom  $1 \text{ J} = 1 \text{ CV}$  (coulombvolt). Jeden elektrónvolt je teda  $1 \text{ eV} = 1,60217663 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ , pretože  $e = 1,60217663 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  je veľkosť náboja elektrónu. Vzhľadom na vzťah medzi vlnovou dĺžkou a frekvenciou, môžeme energiu fotónu v elektrónvoltoch vyjadriť nasledujúcim spôsobom:

$$E = \frac{hc}{e} \frac{1}{\lambda}$$

V tomto vzťahu vystupujú tri základné fyzikálne konštanty: Plancková konštanta, rýchlosť svetla vo vákuu a elementárny náboj. Dosadením hodnôt konštánt a uvažovaním vlnovej dĺžky v nanometroch získame praktický vzťah:

$$E = \frac{1240}{\lambda} \text{ nm eV} = \frac{1,24}{\lambda} \text{ μm eV}$$

### Stručne

Farba svetla je určená frekvenciou. Frekvenciu môžeme udávať aj v elektrónvoltoch, čo je praktické, pretože viditeľné svetlo má fotóny s energiou v rozsahu od 1,6 eV do 3,1 eV. V optike pracujeme s vlnovými dĺžkami v nanometroch, ktoré sú úmerné prevrátenej hodnote frekvencie. Viditeľné svetlo je v rozsahu (380 nm až 780 nm). Medzi energiou fotónu v elektrónvoltoch a vlnovou dĺžkou v nanometroch je jednoduchý prevodový vzťah:  $E = (1240/\lambda) \text{ nm eV}$  alebo  $\lambda = (1240/E) \text{ nm eV}$ .

### 🔗 Úlohy

1. V oblasti anomálnej disperzie nadobúda index lomu hodnoty menšie než 1. Fázová rýchlosť optickej vlny je teda väčšia než  $c$ . Napíšte program, ktorý vypočíta pomer vlnovej dĺžky svetla a hĺbky prieniku pre frekvenciu, na ktorú pripadá minimum reálnej časti indexu lomu. Všimnite si, že tento pomer je menší než jedna, čo znamená, že vlna sa v prostredí takmer nešíri.
2. Napíšte program, ktorý bude fitovať reálnu časť indexu lomu zadaného ako Lorentzov model podľa príkladov v texte pomocou Cauchyho a Sellmeierovho modelu v oblasti normálnej disperzie.
3. Nájdite parametre dvojosilátorového modelu indexu lomu vody podľa experimentálne získaných dát z databázy refractiveindex.info: <https://refractiveindex.info/?shelf=main&book=H2O&page=Warren-1984> rozsahu vlnových dĺžok od 127,2 nm do 4,348 μm.

---

1. 1 Vlnová dĺžka v prostredí s reálnym indexom lomu  $n$  je  $n$ -krát kratšia:  $\lambda_n = \lambda/n$ . Navyše je to zložitá funkcia frekvencie. ↩