Übungen zur theoretischen Festkörperphysik II - Zettel 3

Sommersemester 2012 Abgabe: 22.05.

Auf diesem Zettel geht es in allen drei Aufgaben um Gold. Die Parameter für Gold sind: fürs Drude Modell: Plasmafrequenz $\hbar\omega_p = 8.95$ eV, Dämpfungskonstante $\hbar\Gamma = 65.8$ meV, für gebundene Elektronen: Plasmafrequenz $\hbar\tilde{\omega}_p = 2.96$ eV, Dämpfungskonstante $\hbar\gamma = 0.59$ eV, statische Abschirmung: $\varepsilon_\infty = 12.0$, Goldpreis: 39551 EUR/kg. Benutzen Sie zum Zeichnen von Kurven ein geeignetes plot-Programm (z.B. gnuplot, Maple, Mathematica).

Aufgabe 7: Dielektrizitätsfunktion 5P.

Wir nehmen an, dass ein elektrisches Feld, welches an einem Metall anliegt, die Elektronen um den Vektor $\vec{r}$ verschiebt. Damit ist ein Dipolmoment $\vec{\mu} = e\vec{r}$ verbunden und die Polarisation $\vec{P} = n\vec{\mu}$, wobei n die Anzahl der Elektronen pro Volumen ist.

a) Für freie Teilchen kann man das Drude Modell benutzen mit

$$m_e \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} + m_e \Gamma \frac{d\vec{r}}{dt} = e\vec{E}_0 e^{-i\omega t}.$$

m_e ist die Elektronmasse, Γ ist eine Dämpfungskonstante und ω die Frequenz des angelegten Feldes. Lösen sie diese Gleichung mit dem Ansatz $\vec{r} = \vec{r}_0 e^{-i\omega t}$. Bestimmen Sie damit die Dielektrizitätsfunktion $\varepsilon_D(\omega)$ mit Hilfe der üblichen Relationen der Elektrodynamik. Führen Sie dafür die Plasmafrequenz $\omega_p^2 = ne^2/(m_e\varepsilon_0)$ ein.

b) Für gebundene Teilchen ist das Drude Modell nicht sehr gut. Stattdessen kann folgende Gleichung benutzt werden:

$$m_e^* \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} + m_e^* \gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + \alpha\vec{r} = e\vec{E}_0 e^{-i\omega t}.$$

m_e^* ist die effektive Elektronenmasse, γ und α sind Konstanten. Lösen Sie analog zu (a) die Gleichung und bestimmen Sie die Dielektrizitätsfunktion $\varepsilon_B(\omega)$. Benutzen Sie hier eine modifizierte Plasmafrequenz mit $\tilde{\omega}_p^2 = \tilde{n}e^2/(m_e^*\varepsilon_0)$ mit $\tilde{n}$ der Dichte der gebundenen Elektronen pro Volumen und $\omega_0^2 = \alpha/m_e^*$.

c) Tragen Sie Real- und Imaginärteile der Dielektrizitätsfunktionen $\varepsilon_D(\omega)$ und $\varepsilon_B(\omega)$ für Gold mit oben genannten Parametern sowie $\omega_0 = 2\pi c/\lambda$ mit $\lambda = 450$ nm auf.

Aufgabe 8: Oberflächenplasmon 8P.+1

Um Oberflächenplasmonen zu untersuchen, betrachten wir eine einfache Oberfläche bei $z = 0$ zwischen zwei Medien mit dem Brechungsindex $\varepsilon_1(\omega)$ und $\varepsilon_2(\omega)$. Wir suchen eine homogene Lösung der Maxwell-Gleichungen, die eine Eigenmode des Systems ist. Insbesondere ist dies eine Lösung zu der Wellengleichung

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) = 0,$$

wobei $\varepsilon(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_1(\omega)$ für $z < 0$ und $\varepsilon(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_2(\omega)$ für $z > 0$. Um eine Lokalisierung der Welle an der Oberfläche zu haben, soll das Feld in z-Richtung in beide Halbräume exponentiell abfallen. Zusätzlich machen wir die Einschränkung, dass wir uns nur auf p-polarisierte (TM)-Wellen beschränken, so dass der Ansatz für das elektrische Feld in den Halbräumen $j = 1, 2$ lautet:

$$\vec{E}_j = \begin{pmatrix} E_{j,x} \\ 0 \\ E_{j,z} \end{pmatrix} e^{ik_x x - i\omega t} e^{ik_{j,z} z}$$

a) Nutzen Sie die Stetigkeitsbedingungen an der Oberfläche aus (Erinnerung: Parallelkomponente von $\vec{E}$ und Normalkomponente von $\vec{D}$ sind stetig) aus und, dass das Feld in den Halbräumen quellenfrei ist ($\nabla \cdot \vec{D} = 0$). Beachten Sie, dass der Wellenvektor parallel zur Oberfläche k_x erhalten ist. Stellen Sie damit ein Gleichungssystem für die Amplituden $E_{j,x/z}$ auf und bestimmen Sie die Lösbarkeitsbedingung. Benutzen Sie, dass in beiden Halbräumen der Betrag des Wellenvektors $|\vec{k_j}|^2 = \varepsilon_j k^2$ mit $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$ gleich dem Vacuum-Wellenvektor ist und stellen Sie einen Zusammenhang zwischen k_x und k sowie zwischen $k_{j,z}$ und k auf.

b) Wir betrachten jetzt einen Übergang zwischen Gold ($z < 0$) und Luft (Brechungsindex $n = 1$) und machen weiterhin die Annahme, dass $\varepsilon_1(\omega)$ reell sei. Es ist gefordert, dass k_x reell und $k_{j,z}$ imaginär sind (warum). Welche Bedingungen ergeben sich daraus für $\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2$ und $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$?

c) Das einfachste Modell für $\varepsilon_1(\omega)$ ist das Drude-Modell mit verschwindendem Imaginärteil ($\Gamma = 0$), d.h. $\varepsilon_1(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$. Berechnen Sie $\omega(k_x)$ und tragen Sie beide Zweige der Funktion auf. Welcher Zweig beschreibt die Oberflächenplasmomen? Tragen Sie zusätzlich die Dispersion für Licht $\omega = ck_x$ ein. Können in Luft Oberflächenplasmonen durch Licht angeregt werden? Bonuspunktfrage: Wie könnte man eine Kopplung von Licht und Oberflächenplasmonen erreichen?

Aufgabe 9: Plasmonen an Nanopartikeln 8P.

Ein hoch aktuelles Forschungsthema sind die Plasmonen von Nanopartikeln, z.B. von kleinen Gold- oder Silberkugeln. Dazu wollen wir das elektrische Feld einer kleinen Goldkugel mit Radius R und der dielektrischen Funktion $\varepsilon_1(\omega)$ in einer quasi-stationären Näherung betrachten. Die Goldkugel befindet sich in einer Umgebung mit der Dielektrizitätskonstanten ε_2 und ein externes elektrisches Feld $\vec{E} = E_0 e^{i\omega t} \vec{e_z}$ ist in $z-$Richtung angelegt.

a) Um das elektrische Feld der Goldkugel zu berechnen, müssen wir die Laplace-Gleichung

$$\Delta\Phi = 0$$

lösen. Benutzen Sie Kugelkoordinaten und lösen Sie die Laplace-Gleichung mit Hilfe eines Entwicklungsansatzes

$$\Phi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Y_{lm} sind die Kugelflächenfunktionen. Stellen Sie die Radialgleichung auf und lösen Sie diese mit dem Ansatz $R(r) = \frac{1}{r} u(r)$ um Φ zu bekommen. (Tipp: $u(r) = Ar^{l+1} + Br^l$)

b) Im nächsten Schritt beachten Sie das Verhalten des Potentials bei $r = 0$ und $r = \infty$. Zusätzlich muss das Potential des angelegten Feldes mit $\Phi_{ext} = -E_0 z = -E_0 r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\vartheta, \varphi)$

addiert werden. Benutzen Sie die Stetigkeitsbedingungen

$$\Phi_i(r = R) = \Phi_a(r = R) \qquad \varepsilon_1 \frac{\partial \Phi_i}{\partial r}|_{r=R} = \varepsilon_2 \frac{\partial \Phi_a}{\partial r}|_{r=R}$$

um das Potential auszurechnen. Beachten Sie dabei, dass man sich wegen der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen auf $l = 1$ und $m = 0$ beschränken kann.

c) Berechnen Sie $\vec{E}(\vec{r})$ über $\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla\Phi(\vec{r})$. Das elektrische Feld eines oszillierenden Dipols mit dem Dipolmoment p in der Näherung $kr \ll 1$ ist gegeben durch:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{p}{r^3} \left(2\cos(\vartheta)\vec{e}_r + \sin(\vartheta)\vec{e}_\vartheta\right).$$

$\vec{e}_r$ und $\vec{e}_\vartheta$ sind Einheitsvektoren. Vergleichen Sie diesen Term mit dem E-Feld für $r > R$ und identifizieren Sie den Betrag des Dipolmoment p.

d) Der Streuquerschnitt is proportional zum Dipolmoment

$$\sigma_{scatt} \propto \frac{\omega^4}{c^4} |p(\omega)|^2 \qquad \text{mit} \qquad p \propto \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2}$$

Benutzen Sie die modifizierte Drude-Dispersionsrelation $\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty - \omega_p^2/(\omega^2 + i\Gamma\omega)$ und $\varepsilon_2 = 1$ um σ_{scatt} zu bestimmen. Bei welchen ω bekommt man eine Resonanz (Hinweis: Betrachten sie Nullstellen des Nenners für $\Gamma = 0$)? Bei welcher Lichtfarbe liegt die Resonanz? Lesen Sie zu diesen Thema etwas über den *Lycurgus Becher* (z.B. die englische Wikipedia).