

7 Elektrodynamik in Materie und optische Leitfähigkeit

7.1 Maxwell-Gleichungen „in Materie“

Bisher haben wir die mikroskopischen *Maxwell-Gleichungen* im Vakuum betrachtet (SI-Einheiten):

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \frac{1}{\epsilon_0} \rho & \vec{\nabla} \times \vec{B} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= \mu_0 \vec{j} \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= \vec{0} & \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 \end{aligned}$$

Die inhomogenen Mbs lassen sich verallgemeinern:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{j},$$

wobei der Vakuum-Fall für $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$, $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B}$ reproduziert wird.

Wenn man „freie“ (explizit zu beschreibende) Ladungen und Ströme von (in Materie) induzierten unter-

scheiden will, kann man auch schreiben:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{\text{frei}} \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{j}_{\text{frei}}$$

mit den Materialgleichungen

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \quad \vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M},$$

in der die Polarisation \vec{P} und die Magnetisierung \vec{M} als zunächst unbekannte externe Felder auftreten.

Einfachste **Approximation**: homogenes, isotropes und lineares Medium mit instantaner, rein lokaler Antwort:

$$\vec{D}(\vec{x}, t) = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}(\vec{x}, t), \quad \vec{H}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} \vec{B}(\vec{x}, t)$$

↪ Theorie innerhalb des Mediums qualitativ wie im Vakuum, aber z.B. Brechung an Grenzflächen.

7.2 Optische Leitfähigkeit: Definition und Zusammenhang mit dielektrischer Funktion

Äußere elektrische Felder führen in Materie i.A. zur Umverteilung von Ladungen und induzieren Ströme. Falls das ungestörte System zeitunabhängig und die Störung (d.h. \vec{E}) genügend klein ist, gilt in *linearer Antworttheorie*:

$$j_i(\vec{x}, t) = \sum_j \int d^3x' \int_{-\infty}^t dt' \sigma_{ij}(\vec{x}, \vec{x}', t-t') E_j(\vec{x}', t')$$

Hier und im Folgenden vernachlässigen wir Magnetfelder und Magnetisierungen.

Falls das System *homogen* ist oberhalb einer Längenskala a gilt für genügend große Wellenlängen:

$$\sigma(\vec{x}, \vec{x}', t-t') \approx \sigma(\vec{x}-\vec{x}', t-t')$$

Wir können also Fourier-transformieren:

$$j_i(\vec{q}, \omega) = \sigma_{ij}(\vec{q}, \omega) E_j(\vec{q}, \omega)$$

Da Photonen eine viel steilere Dispersion $v_{\omega} = c/|\vec{q}|$ als Elektronen haben, gilt für optische und niedrigere Frequenzen: $\vec{q} \approx \vec{0}$

Die zugehörige Antwortfunktion $\sigma_{ij}(\omega)$ nennt man optische Leitfähigkeit.

Für Materialien mit kubischer Symmetrie ist

diese isotrop: $\vec{j}(\omega) = \sigma(\omega) \vec{E}(\omega)$

Unter den gleichen Voraussetzungen gilt für die Elektrische Verschiebung: $\vec{D}(\omega) = \epsilon(\omega) \vec{E}(\omega)$, wobei die dielektrische Funktion die Form

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega}$$

hat. Offensichtlich sind $\sigma(\omega)$ und $\epsilon(\omega)$ i. A. beide komplex. Weil $\vec{j}(\vec{x}, t)$, $\vec{E}(\vec{x}, t)$ und $\vec{D}(\vec{x}, t)$ reell sind, gilt: $\sigma^*(\omega) = \sigma(-\omega)$; $\epsilon^*(\omega) = \epsilon(-\omega)$

7.3 Leitfähigkeit und Reflektivität

Am direktesten lassen sich optische Eigenschaften von Materialien in Transmissionsexperimenten bestimmen, bei denen Absorption und Phasenverschiebung gemessen werden. Dabei gilt:

$$\epsilon_{\text{Medium}}(\omega) = \frac{c}{n(\omega)}; \quad I(d, \omega) \propto e^{-d k(\omega)},$$

↑ Intensität nach Dicke d

wo bei der Brechungsindex $n(\omega)$ und der Absorptionskoeffizient $k(\omega)$ Real- und Imaginärteil der komplexen Größe $\kappa(\omega)$ sind, mit

$$\kappa(\omega) = n(\omega) + i k(\omega) = \sqrt{\epsilon(\omega)}$$

Dabei sind $\sigma(\omega)$, $\epsilon(\omega)$ und $\kappa(\omega)$ analytische Funktionen in der oberen Halbebene, erfüllen also Kramers-Kronig-Relationen wie z.B.

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im } \sigma(\omega')}{\omega' - \omega}$$

$$\text{Im } \sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Re } \sigma(\omega')}{\omega' - \omega}$$

↑ Hauptwert

Falls keine hinreichend (dünnen und) transparenten Proben hergestellt werden können, sind Reflexionsmessungen hilfreich. Bei senkrechtem Einfall gilt für die Reflektivität

$$r(\omega) = \left| \frac{1 - \kappa(\omega)}{1 + \kappa(\omega)} \right| = \frac{(1 - n(\omega))^2 + k^2(\omega)}{(1 + n(\omega))^2 + k^2(\omega)}$$

Nur eine Messung über hinreichend große Frequenzbereiche erlaubt mit Kramers-Kronig-Analyse die Bestimmung von $\kappa(\omega) \rightarrow \epsilon(\omega) \sim \nu(\omega)$

Verfeinerung: Reflexion bei Winkel θ .

Eine weitere experimentelle Methode ist die Messung des Energieverlusts von Elektronen, die durch dünne Schichten geschossen werden (EELS).

Die Wahrscheinlichkeit für einen Verlust $\hbar\omega$ ist dabei proportional zu $\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(\omega)} \right)$

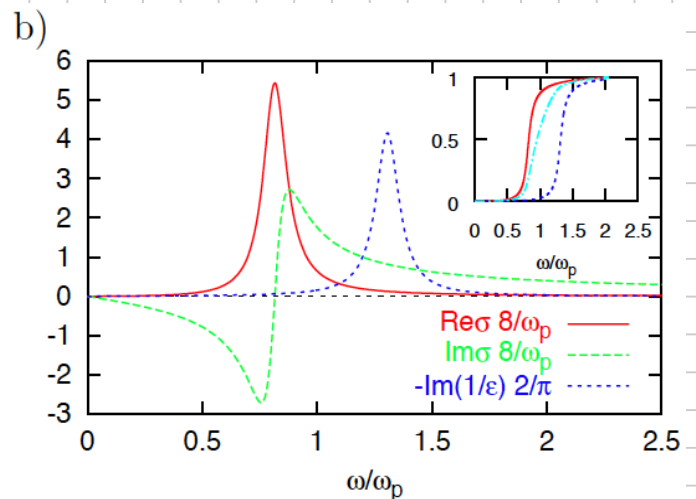
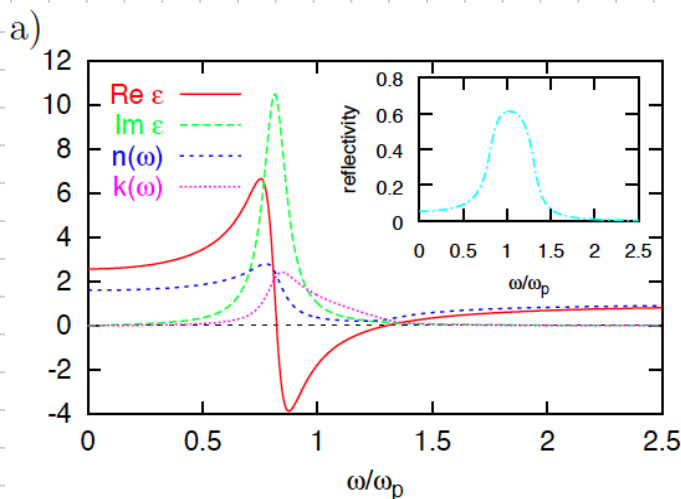
↑
Maximum für $\text{Re} \epsilon(\omega) \approx 0$

7.4 Lorentz-Oszillator-Modell

Die optischen Eigenschaften von Materialien sind eng mit ihren Anregungen verknüpft. Speziell sind $\text{Re } \epsilon(\omega)$ und damit auch $\text{Im } \epsilon(\omega)$ nur in Frequenzbereichen von 0 verschieden, die **inneren Anregungsenergien** entsprechen.

Zur Illustration betrachten wir das Lorentz-Oszillator-Modell mit einer einzigen Anregung bei der Frequenz ω_0 , die mit der Stärke γ gedämpft ist. Es gilt:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{e^2}{m} \frac{f}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega}$$



7.5 Optische f-Summen-Regeln und Aluminium

Wenn/da in Festkörpern das Anregungsspektrum begrenzt ist, gilt das auch für die „spektralen“ optischen Größen, z.B.: $\text{Re } \sigma(\omega) = 0$ für $|\omega| > \omega_{\text{max}}$

Daraus ergibt sich die sogenannten f-Summen-

Regeln:
$$\int_0^{\infty} d\omega \text{Re } \sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{8}$$
 | ab hier nur für cgs-Einh. geprüft

$$\int_0^{\infty} d\omega \omega \text{Re } \epsilon(\omega) = \frac{\pi}{4} \omega_p^2$$

$$\int_0^{\infty} d\omega \omega \text{Im } \frac{-1}{\epsilon(\omega)} = \frac{\pi}{2} \omega_p^2$$

und andererseits, dass die jeweils durch eine Kramers-Kronig-Transformierte verbundenen Größen jeweils wie $\frac{1}{\omega}$ abfallen: $\text{Im } \sigma(\omega) \xrightarrow{|\omega| \rightarrow \infty} -\frac{\omega_p^2}{4\pi\omega}$

Da die Elektronen asymptotisch frei sind, kann ω_p nur von ihrer Dichte abhängen:

(168)
$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

Umgekehrt kann man über Teilsummen die in einem bestimmten Frequenzbereich effektiv freien Elektronen identifizieren.

Beispiel Aluminium:

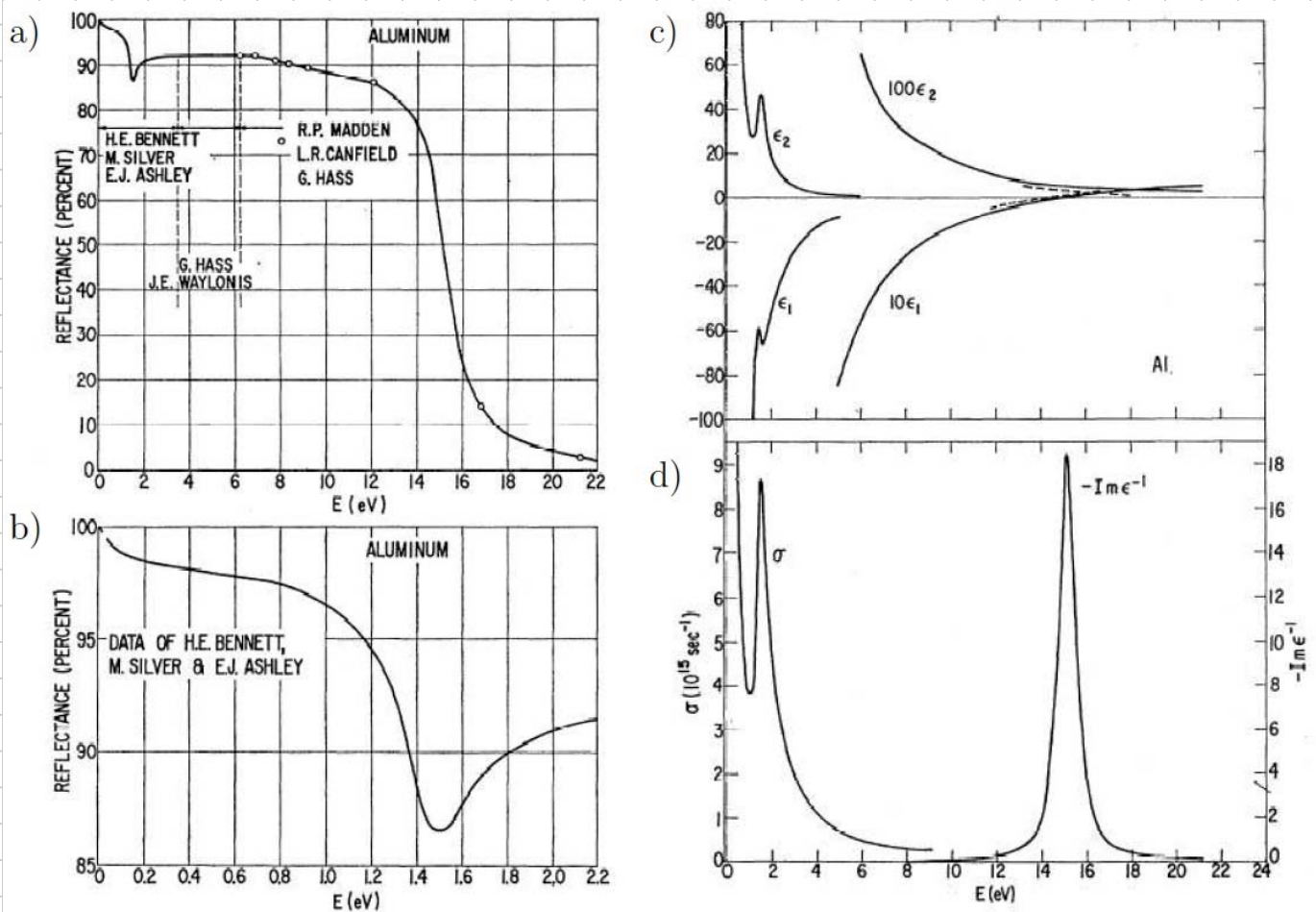


Figure 4.2: Low-energy optical properties of aluminum: a)+b) measured specular reflectivity; c) corresponding dielectric function $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$. d) Optical conductivity $\sigma(\omega)$ and loss function $-\text{Im} \epsilon^{-1}(\omega)$ (Ehrenreich et al., 1963).

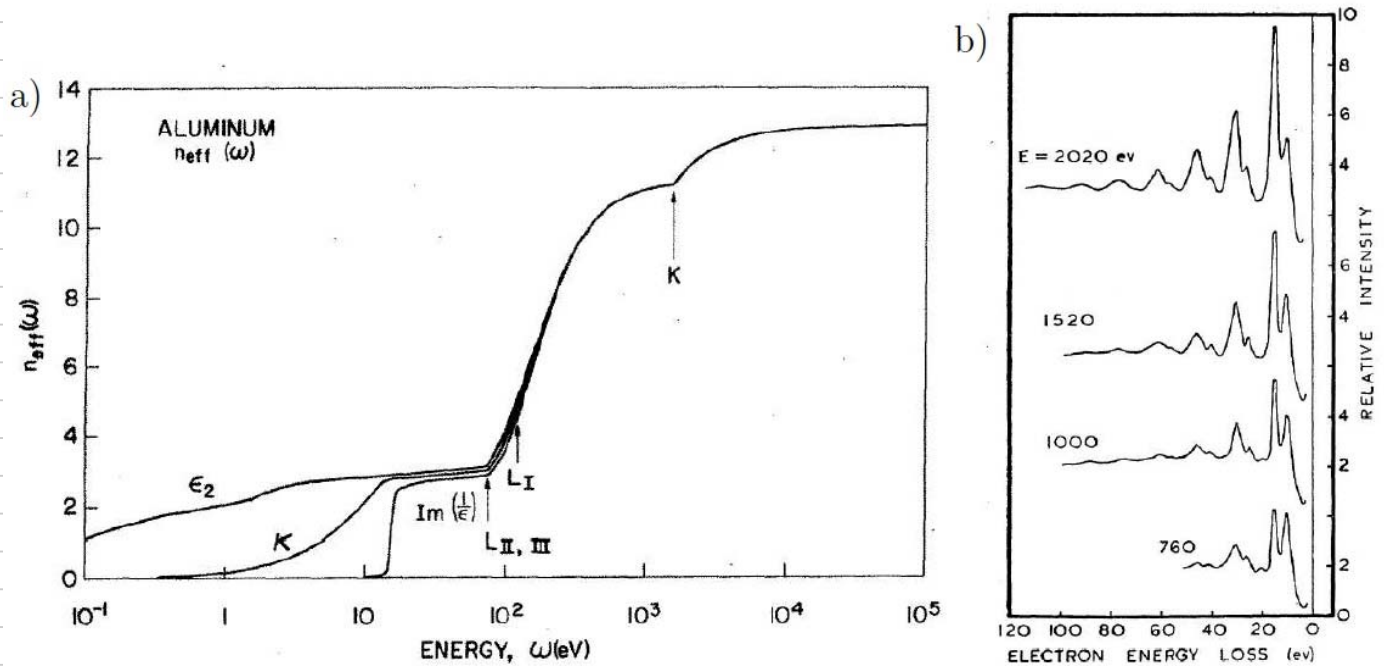


Figure 4.3: Optical properties of aluminum: a) Effective number of valence electrons defined via partial sum rules (Smith and Shiles, 1978). b) Experimental electron energy loss spectrum (reflection mode) with different incident electron energies E (Powell and Swan, 1959).

Siehe: „Mott-Hubbard Metal-Insulator Transition and Optical Conductivity in High Dimensions“,
 N. Blümer, Dissertation, Univ. Augsburg (2002)

<http://komet337.physik.uni-mainz.de/Bluemer/thesis>

6.2.13

Diese Notizen zur Vorlesung "Theoretische Physik 5: Klassische Feldtheorie" (Prof. Dr. Nils Blümer, Universität Mainz, WS 2012/13) dürfen ohne Genehmigung in keiner Form weiterverbreitet werden. Weitere Informationen zur Vorlesung:

http://komet337.physik.uni-mainz.de/Bluemer/lectures_WS2012

Kommentare/Korrekturen bitte an Nils Blümer, <mailto:Nils.Bluemer@uni-mainz.de>