FIZIKA ČVRSTOG STANJA I

Treći kolokvij 05.06.2020.

1. Elektromagnetski val koji se širi površinom metala može otežati opažanje (volumnih) plazmona, kolektivnih pobuđenja slobodnih elektrona u metalima. Pretpostavimo da metal ispunjava poluprostor $z > 0$ i neka se u poluprostoru $z < 0$ nalazi vakuum. Prepostavite, nadalje, da je gustoća slobodnog naboja jednaka nuli u oba poluprostora. Površinski plazmon je rješenje Maxwellovih jednadžbi oblika:

$$E_x^> = Ae^{iqx}e^{-Kz}, \quad E_y^> = 0, \quad E_z^> = Be^{iqx}e^{-Kz}, \quad z > 0$$

$$E_x^< = Ce^{iqx}e^{K'z}, \quad E_y^< = 0, \quad E_z^< = De^{iqx}e^{K'z}, \quad z < 0$$

gdje su q, K i K' i realni, te K i $K' > 0$.

(a) Uvrstite navedena rješenja u Maxwellove jednadžbe (CGS sustav)

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

$$-\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)\mathbf{E}$$

gdje je $\epsilon(\omega)$ kompleksna dielektrična konstanta za metal dobivena u Drudeovom modelu. Primijetite da za vakuum vrijedi $\epsilon = 1$. Kako glase jednadžbe za A, B, C, D, q, K i K' koje dobivate nakon uvrštavanja?

(b) Pretpostavite uobičajene rubne uvjete za električno polje $\mathbf{E}$ i električni pomak $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$ po ravnini $z = 0$

$$\mathbf{n} \times \left(\mathbf{E}^> - \mathbf{E}^<\right) = 0$$

$$\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{D}^> - \mathbf{D}^<\right) = 0$$

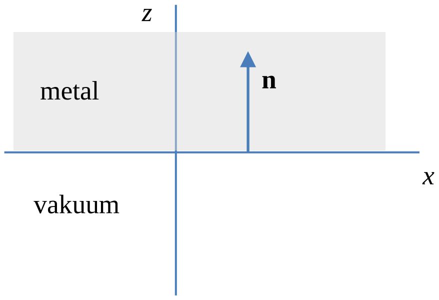
Napišite dvije jednadžbe za koeficijente A, B, C i D koje dobivate uvrštavanjem pretpostavljenog rješenja u rubne uvjete.

(c) Iz šest jednadžbi koje ste dobili pod (a) i (b), nađite q, K i K' kao funkcije od ω. Koji uvjet mora zadovoljiti dielektrična konstanta da ove veličine budu realne?

(d) Pokažite da u granici $qc >> \omega$ postoji rješenje za frekvenciju

$$\omega_0 = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$$

gdje je ω_p plazmena frekvencija. Zbog $\omega_0 \sim \omega_p$ uzmite da $\omega\tau >> 1$ i $\epsilon(\omega) = 1 - (\omega_p/\omega)^2$. Ispitajte K i K' i pokažite da je val omeđen uz površinu $z = 0$. Kakva je polarizacija ovog površinskog EM vala?



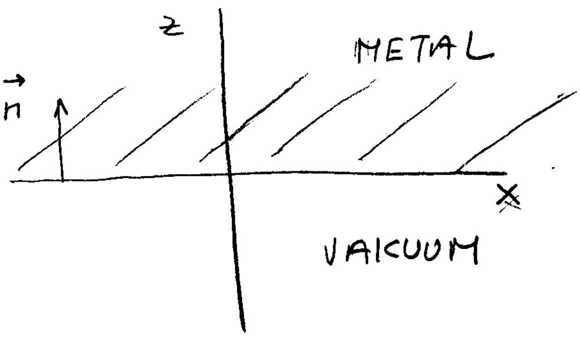
2. (a) Upotrijebite aproksimaciju čvrste veze te izvedite izraz za energijsku s-vrpcu u bcc rešetki iz atomske s-razine. Tijekom računa uzimite u obzir standardne pretpostavke: sumacija po najbližim susjedima te zanemarite koeficijent $\alpha_{lm}(\mathbf{R})$.

(b) Kakva je ovisnost energije o valnom vektoru na dnu vrpce, za $\mathbf{k} \approx 0$?

(c) Kakva je ovisnost energije o valnom vektoru na rubovima 1BZ, za $\mathbf{k} \approx (\pm\pi/a, \pm\pi/a, \pm\pi/a)$?

***Uputa*:** prisjetite se da u bcc rešetki broj najbližih susjeda (koordinacijski broj) iznosi 8

$$\mathbf{R}_{nn} = \left\{\frac{a}{2}\left(\pm1, \pm1, 1\right), \frac{a}{2}\left(\pm1, \pm1, -1\right)\right\}$$



Rješenja:

$$z>0;\quad E_x^{>} = A e^{iqx}\cdot e^{-\kappa z};\quad E_y^{>}=0;\quad E_z^{>} = B e^{iqx}\cdot e^{-\kappa z}$$

$$z<0;\quad E_x^{<} = C e^{iqx} e^{\kappa' z};\quad E_y^{<}=0;\quad E_z^{<} = D e^{iqx}\cdot e^{\kappa' z}$$

(a) Uvrstimo u $\vec{\nabla}\cdot\vec{E}=0$ rješenje za $z>0$

$$A\cdot(iq)e^{iqx}e^{-\kappa z} - B\kappa e^{iqx}\cdot e^{-\kappa z} = 0$$

$$\boxed{iAq = B\kappa}$$

Uvrstimo u $-\vec{\nabla}^2\vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)\vec{E}$ rješenje $z>0$

$$x:\quad -\vec{\nabla}^2 E_x = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)E_x$$

$$-(-q^2)Ae^{iqx}e^{-\kappa z} - A\kappa^2 e^{iqx}e^{-\kappa z}$$

$$= \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)Ae^{iqx}\cdot e^{-\kappa z}$$

$$\boxed{q^2-\kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)}$$

$$z:\quad -\vec{\nabla}^2 E_z = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)E_z$$

dobije se očito isto

$$q^2-\kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)$$

Uvrstimo u $\vec{\nabla}\cdot\vec{E}=0$ rješenje $z<0$

$$C\cdot(iq)\,e^{iqx}e^{\kappa' z}+D\kappa' e^{iqx}e^{\kappa' z}=0$$

$$\boxed{iCq=-D\kappa'}$$

Uvrstimo rješenje za $z<0$ u $-\vec{\nabla}^2\vec{E}=\frac{\omega^2}{c^2}\vec{E}$

$$x:\ -\vec{\nabla}^2E_x=\frac{\omega^2}{c^2}E_x$$

$$-(-q^2)Ce^{iqx}e^{\kappa' z}-\kappa'^2Ce^{iqx}e^{\kappa' z}=\frac{\omega^2}{c^2}Ce^{iqx}e^{\kappa' z}$$

$$\boxed{q^2-\kappa'^2=\frac{\omega^2}{c^2}}$$

(b) Rubni uvjeti: $\vec{n}=\vec{e}_z$

$$\vec{e}_z\times\vec{e}_x\left(Ae^{iqx}e^{-\kappa z}-Ce^{iqx}\cdot e^{\kappa' z}\right)\Big/_{z=0}=0$$

$$\Rightarrow\ \boxed{A=C}$$

$$\vec{e}_z\cdot\vec{e}_z\left(B\,\epsilon(\omega)e^{iqx}e^{-\kappa z}-De^{iqx}\cdot e^{\kappa' z}\right)\Big/_{z=0}=0$$

$$\boxed{B\,\epsilon(\omega)=D}$$

(c) Jednadžbe su sljedeće:

1. $A=C$
2. $B\cdot\epsilon(\omega)=D$
3. $iAq=B\kappa$
4. $iCq=-D\kappa'$
5. $q^2-\kappa^2=\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)$
6. $q^2-\kappa'^2=\frac{\omega^2}{c^2}$

Iz 1., 2. i 4.

$$iAq = -B\,\epsilon(\omega)\,\kappa'$$

S jednadžbom 3., imamo

$$\kappa = -\kappa'\,\epsilon(\omega)$$

Zadnju jednadžbu uvrstimo u 5.

$$q^2 - \kappa'^2\epsilon^2(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)$$

Iz jednadžbe 6. je $q^2 = \kappa'^2 + \frac{\omega^2}{c^2}$ pa imamo

$$\kappa'^2 + \frac{\omega^2}{c^2} - \kappa'^2\epsilon^2(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\omega)$$

$$\kappa'^2(1-\epsilon^2) = -\frac{\omega^2}{c^2}(1-\epsilon)$$

$$\kappa'^2 = -\frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{1-\epsilon}{1-\epsilon^2} = -\frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{1}{1+\epsilon}$$

$$\boxed{\kappa'^2 = -\frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{1}{1+\epsilon}}$$

Uvrstimo u $\kappa^2 = \kappa'^2\epsilon^2$.

$$\boxed{\kappa^2 = -\frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{\epsilon^2}{1+\epsilon}}$$

Iz $q^2 = \kappa'^2 + \frac{\omega^2}{c^2}$ imamo

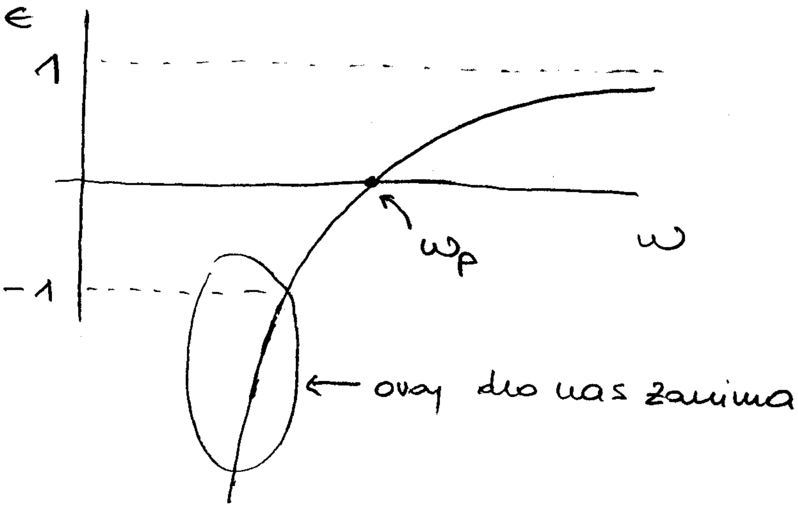
$$q^2 = -\frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{1}{1+\epsilon} + \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{\epsilon}{1+\epsilon}$$

$$\boxed{q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\cdot\frac{\epsilon}{1+\epsilon}}$$

Da q, κ, κ' budu realni $\epsilon < -1$.

(d) Za $\omega\tau \gg 1$ dielektrična konstanta postaje

$$\epsilon = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2$$



Za $\varkappa c \gg \omega$ imamo

$$K'^2 = \varkappa^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \quad / : \frac{\omega^2}{c^2}$$

$$\frac{K'^2 c^2}{\omega^2} = \frac{\varkappa^2 c^2}{\omega^2} - 1 \simeq \frac{\varkappa^2 c^2}{\omega^2}$$

$$\Longrightarrow \quad \boxed{K' \simeq \varkappa}$$

Iz

$$\varkappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \cdot \frac{\epsilon}{1+\epsilon}$$

$$\frac{\varkappa^2 c^2}{\omega} = \frac{\epsilon}{1+\epsilon} \gg 1 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\epsilon \simeq -1}$$

Ako je $\epsilon \simeq -1$, tada je

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \simeq -1$$

$$\Longrightarrow \quad \boxed{\omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}}$$

Iz $K = -K'\epsilon(\omega)$ je tada

$$\boxed{K' \simeq K}$$

No, $\varkappa \neq \varkappa'$ postaje jako velik dio $\omega \to \omega_0$ s lijeva

$$\lim_{\omega \to \omega_0^-} \varkappa(\omega) \to \infty$$

Rješenje koja sadrže članove $e^{-\varkappa|z|}$ postaju ograničena uz $z = 0$.

Za $q \simeq \varkappa$ je

$$iAq = B\varkappa \Rightarrow iA = B$$

pa rješenje za $z>0$ postaje

$$\vec{E}^{>} = A e^{iqx} e^{-qz} (\vec{e}_x + i\vec{e}_z)$$

Za $q \simeq \varkappa'$ i $z<0$

$$\vec{E}^{<} = A e^{iqx} e^{qz} (\vec{e}_x - i\vec{e}_z)$$

Vidimo da je val cirkularno polariziran

$\boxed{2.}$

(a) Izraz za aproksimaciju čvrste veze za s-vrpcu izveli smo na vježbama

$$\varepsilon(\vec{k}) = E_s - \beta - \sum_{n.n.} \gamma(\vec{R}) \cos(\vec{k}\cdot\vec{R})$$

gdje suma ide po najbližim susjedima

$$R_{nn} = \left\{ \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 1), \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, -1) \right\}$$

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$$

Konstante $\gamma(\vec{R})$ jednake su za svaki R. Naime, $\Delta U(x,y,z)$ ne mijenja se napravimo li permutaciju argumenata (npr. (y,x,z)) i promijenimo li predznake varijabla (npr. $(-x,y,-z)$). Također, funkcija u je s-stanje koje ovisi samo o iznosu $r = |\vec{r}|$. Prema tome,

$$\begin{aligned}
\varepsilon(\vec{k}) = E_s - \beta - \gamma \cdot \Big\{ & \cos\left[\frac{a}{2}(k_x + k_y + k_z)\right] \\
& + \cos\left[\frac{a}{2}(-k_x - k_y - k_z)\right] + \cos\left[\frac{a}{2}(-k_x - k_y + k_z)\right] \\
& + \cos\left[\frac{a}{2}(k_x + k_y - k_z)\right] + \cos\left[\frac{a}{2}(k_x - k_y + k_z)\right] \\
& + \cos\left[\frac{a}{2}(-k_x + k_y - k_z)\right] + \cos\left[\frac{a}{2}(-k_x + k_y + k_z)\right] \\
& + \cos\left[\frac{a}{2}(k_x - k_y - k_z)\right] \Big\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
= E_s - \beta - 2\gamma \cdot \Big\{ & \cos\left[\frac{a}{2}(k_x + k_y + k_z)\right] + \cos\left[\frac{a}{2}(k_x + k_y - k_z)\right] \\
& + \cos\left[\frac{a}{2}(k_x - k_y + k_z)\right] + \cos\left[\frac{a}{2}(k_x - k_y - k_z)\right] \Big\}
\end{aligned}$$

Ovo možemo još malo srediti:

$$\cos\left[\frac{a}{2}(k_x+k_y+k_z)\right]+\cos\left[\frac{a}{2}(k_x+k_y-k_z)\right]$$

$$= 2\cos\left[\frac{a}{2}(k_x+k_y)\right]\cos\left[\frac{a}{2}k_z\right]$$

$$\cos\left[\frac{a}{2}(k_x-k_y+k_z)\right]+\cos\left[\frac{a}{2}(k_x-k_y-k_z)\right]$$

$$= 2\cos\left[\frac{a}{2}(k_x-k_y)\right]\cdot\cos\left[\frac{a}{2}k_z\right]$$

Imamo

$$2\cos\left[\frac{a}{2}k_z\right]\cdot\left\{\cos\left[\frac{a}{2}(k_x+k_y)\right]+\cos\left[\frac{a}{2}(k_x-k_y)\right]\right\}$$

$$= 2\cos\left[\frac{a}{2}k_z\right]\cdot 2\cdot\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right)\cdot\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right)$$

Dobivamo,

$$\varepsilon(\vec{k}) = E_s - \beta - 8\gamma\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_z a}{2}\right)$$

(b) Razvijemo u red kosinuse do $\vec{k}=0$

$$\cos\left(\frac{k_i a}{2}\right) = 1-\frac{1}{2}\left(\frac{k_i a}{2}\right)^2, \quad i=1,2,3$$

$$\varepsilon(\vec{k}) = E_s-\beta-8\gamma\cdot\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{k_x a}{2}\right)^2\right]\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{k_y a}{2}\right)^2\right]\cdot\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{k_z a}{2}\right)^2\right]$$

$$\simeq E_s-\beta-8\gamma\left[1-\frac{1}{2}\cdot\frac{a^2}{4}\cdot(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\right]$$

$$= E_s-\beta-8\gamma+\gamma a^2 k^2$$

Ovdje smo zanemarili članove s potencijama po k_i koje su veće od 2.

(c) Na rubu zone:

$$\cos\left(\frac{k_i a}{2}\right) = \cos\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} + \cos'\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} \cdot \left(k_i \pm \frac{\pi}{a}\right)$$

$$+ \frac{1}{2}\cos''\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} \cdot \left(k_i \pm \frac{\pi}{a}\right)^2$$

$$\cos\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} = \cos\left(\pm\frac{\pi}{2}\right) = 0$$

$$\cos'\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} = -\sin\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} \cdot \frac{a}{2} \cdot \left(k_i \pm \frac{\pi}{a}\right)$$

$$= \mp \frac{a}{2}\left(k_i \pm \frac{\pi}{a}\right)$$

$$\cos''\left(\frac{k_i a}{2}\right)\Big|_{k_i=\pm\frac{\pi}{a}} = 0$$

Imamo

$$\varepsilon(\vec{k}) = E_s - \beta - \underbrace{8\gamma \cdot \left(\mp\frac{a}{2}\right)^3}_{\pm\gamma a^3}\left(k_x \pm \frac{\pi}{a}\right)\left(k_y \pm \frac{\pi}{a}\right)\left(k_z \pm \frac{\pi}{a}\right)$$