

## Glanz und Farbe der Metalle

Dietrich Zawischa  
ITP, Leibniz University Hannover, Germany

Ausgehend von den Maxwellgleichungen soll das Reflexionsvermögen von Metallen und die daraus resultierende Farbe berechnet werden. Um die Rechnung einfach zu halten, wird nur der senkrechte Einfall des Lichtes betrachtet und Isotropie des Metalls vorausgesetzt.

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu\mu_0 \vec{j} + \epsilon\epsilon_0 \mu\mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \rho \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (4)$$

Üblicherweise führt man jetzt die Potentiale  $\vec{A}$  und  $\phi$  ein; hier soll das anschaulichere elektrische Feld beibehalten werden.

Gleichung (2) wird nach der Zeit abgeleitet und  $\vec{B}$  eliminiert:

$$-\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \mu\mu_0 \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} + \epsilon\epsilon_0 \mu\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (5)$$

Mit

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} \quad (6)$$

und der Annahme einer ebenen, in  $z$ -Richtung fortschreitenden linear polarisierten Welle ( $\rho = 0$ ) wird daraus mit  $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \mu\mu_0 \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} \quad (7)$$

Sei  $E_y = 0$ , so vereinfachen sich die Gleichungen zu

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} = \mu\mu_0 \frac{\partial j_x}{\partial t}. \quad (8)$$

### Modellannahmen

Für die Stromdichte  $\vec{j}$  setzen wir für niedrige Frequenzen an  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$  (Ohmsches Gesetz). Für optische Frequenzen ist dies keine gute Näherung mehr, die Trägheit der Ladungsträger muß berücksichtigt werden. Es ist

$$\vec{j} = Nq_e \vec{v}, \quad (9)$$

und die Bewegungsgleichung eines Ladungsträgers ist

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q_e (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) - \frac{m}{\tau} \vec{v}, \quad (10)$$

wobei die Relaxationszeit  $\tau$  im Reibungsterm so zu wählen ist, daß sich im Grenzfall niedriger Frequenzen das Ohmsche Gesetz ergibt. Da die Geschwindigkeit der Ladungsträger sehr klein gegenüber der Lichtgeschwindigkeit  $c$  ist, wird der Term  $\vec{v} \times \vec{B}$  im folgenden vernachlässigt.

Diese Annahmen basieren auf der Modellvorstellung eines freien Elektronengases im Metall. Dem Sachverhalt, daß die Elektronen Fermionen sind, also quantenmechanisch zu behandeln sind, wird nicht Rechnung getragen, insbesondere werden keine Details der Bandstruktur berücksichtigt. Man kann die Hoffnung haben, daß

sich bei einer exakteren Rechnung nur andere Werte für die Parameter  $\sigma$ ,  $\epsilon$  und  $\tau$  ergeben.

Für die Stromdichte erhält man dann

$$\frac{d\vec{j}}{dt} = \frac{Nq_e^2}{m} \vec{E} - \frac{1}{\tau} \vec{j}, \quad (11)$$

daraus ergibt sich im stationären Fall

$$\vec{j} = \frac{Nq_e^2 \tau}{m} \vec{E} = \sigma \vec{E}, \quad (12)$$

also

$$\tau = \frac{\sigma m}{Nq_e^2}. \quad (13)$$

Es ist allgemein  $\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}$ , aber der zweite Term ist hier Null, da wir voraussetzen, daß die Ströme nur in  $x$ -Richtung fließen. Somit erhalten wir

$$\frac{dj_x}{dt} = \frac{Nq_e^2}{m} E_x - \frac{1}{\tau} j_x. \quad (14)$$

Betrachten wir nun einen Ort  $z$  unter dem Einfluß eines periodischen elektrischen Feldes

$$E_x = E e^{-i\omega t} \quad (15)$$

wobei hier und im folgenden für physikalische Größen immer der Realteil gemeint ist. Wir setzen an

$$j_x = j e^{-i\omega t} \quad (16)$$

und erhalten aus Gleichung (14)

$$j = \frac{\sigma E}{1 - i\omega \sigma m / (Nq_e^2)} = \frac{\sigma E}{1 - i\omega \tau} = \tilde{\sigma} E \quad (17)$$

und dann aus Gl. (8)

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \left( \epsilon\mu \frac{\omega^2}{c^2} + i \frac{\mu\mu_0\sigma\omega}{1 - i\omega\tau} \right) E = 0. \quad (18)$$

Ich betrachte zunächst den Grenzfall unendlich großer Leitfähigkeit,  $\sigma^{-1} = 0$ . Dann wird aus Gl. (18)

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{\epsilon\mu}{c^2} \left( \omega^2 - \frac{Nq_e^2}{\epsilon\epsilon_0 m} \right) E = 0. \quad (19)$$

Den Ausdruck

$$\omega_0 := \sqrt{\frac{Nq_e^2}{\epsilon\epsilon_0 m}} \quad (20)$$

nennt man charakteristische Frequenz. Für endliche Werte von  $\sigma$  gilt dann auch

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{\sigma}{\epsilon\epsilon_0\tau}} \quad \text{bzw.} \quad \tau = \frac{\sigma}{\epsilon\epsilon_0\omega_0^2}. \quad (21)$$

Für  $\omega < \omega_0$  erhält man als Lösung von Gl. (19) reelle Exponentialfunktionen, d.h. die Welle klingt im Metall exponentiell ab, wird also (von einem metallischen Halbraum) vollständig reflektiert, für  $\omega > \omega_0$  ergeben sich Lösungen der Form  $Ae^{ikz}$  – wie in einem Isolator, das Metall wird transparent. Für  $\omega \approx \omega_0$  ist die Lösung unphysikalisch wie die Annahme unendlicher Leitfähigkeit.

### Komplexer Brechungsindex

Jetzt zurück zu Gl. (18), die wir in die Form

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \left( \epsilon\mu + i \frac{\sigma\mu}{\omega\epsilon_0 - i \frac{\sigma\omega^2}{\epsilon\omega_0^2}} \right) E = 0. \quad (22)$$

oder, mit  $\tilde{\sigma} = \sigma(1 + i\omega\tau)/(1 + \omega^2\tau^2)$ ,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \left( \epsilon\mu + i \frac{\mu}{\omega\epsilon_0} \frac{\sigma(1 + i\omega\tau)}{1 + \omega^2\tau^2} \right) E = 0 \quad (23)$$

bringen. Die Lösung hat die Form (ich beschränke mich auf eine in  $z$ -Richtung abklingende und fortschreitende Welle)

$$E(z) = Ae^{i(n+i\kappa)kz} \quad (24)$$

Dabei ist  $\tilde{n} = n + i\kappa$  der komplexe Brechungsindex. Da die Berechnung des Reflexionsvermögens und der sich daraus ergebenden Farbe numerisch erfolgt, werden für  $n$  und  $\kappa$  keine expliziten Ausdrücke angegeben.

$$(n + i\kappa)^2 = f(\omega) + ig(\omega) \quad (25)$$

und es ist

$$n^2 - \kappa^2 = f(\omega) = \epsilon\mu - \frac{\frac{\mu\sigma^2\omega^2}{\epsilon\omega_0^2}}{\epsilon_0^2\omega^2 + \frac{\sigma^2\omega^4}{\epsilon^2\omega_0^4}} = \epsilon\mu - \frac{\mu\sigma\tau}{\epsilon_0(1 + \omega^2\tau^2)} \quad (26)$$

$$2n\kappa = g(\omega) = \frac{\sigma\mu\epsilon_0\omega}{\epsilon_0^2\omega^2 + \frac{\sigma^2\omega^4}{\epsilon^2\omega_0^4}} = \frac{\mu\sigma}{\epsilon_0\omega(1 + \omega^2\tau^2)} \quad (27)$$

Dies kann man auflösen und erhält

$$n = \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{f^2 + g^2} + f)} \quad (28)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{f^2 + g^2} - f)} \quad (29)$$

### Stetigkeitsbedingungen an der Grenzfläche

Der Halbraum  $z > 0$  sei von Metall erfüllt; eine ebene Welle wird in  $z$ -Richtung eingestrahlt. Für  $z < 0$  gilt

$$E_x(z) = e^{i(kz-\omega t)} + (a_1 + ia_2)e^{i(-kz-\omega t)} . \quad (30)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = ike^{i(kz-\omega t)} + (a_2 - ia_1)ke^{i(-kz-\omega t)} \quad (31)$$

wobei  $k = \omega/c$  ist.

Für  $z > 0$  haben wir

$$E_x(z) = (a_3 + ia_4)e^{i((n+i\kappa)kz-\omega t)} \quad (32)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = (a_3 + ia_4)(in - \kappa)ke^{i((n+i\kappa)kz-\omega t)} . \quad (33)$$

An der Grenzfläche muß  $E_x$  und  $\frac{\partial E_x}{\partial z}$  stetig sein. Dies führt auf die Gleichungen

$$1 + a_1 = a_3 \quad (34)$$

$$a_2 = a_4 \quad (35)$$

$$a_2 = -a_3\kappa - a_4n \quad (36)$$

$$1 - a_1 = a_3n - a_4\kappa \quad (37)$$

Daraus folgt

$$a_1 = -\frac{n^2 + \kappa^2 - 1}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad (38)$$

$$a_2 = -\frac{2\kappa}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad (39)$$

und schließlich das Reflexionsvermögen der Metalloberfläche

$$R = a_1^2 + a_2^2 = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} . \quad (40)$$

Die Phasenverschiebung der reflektierten Welle erhält man aus

$$a_1 + ia_2 = |a_1 + ia_2|e^{i\phi} = \sqrt{R}e^{i\phi} \quad (41)$$

zu

$$\phi = \arctan\left(\frac{a_2}{a_1}\right). \quad (42)$$

## Ergebnisse

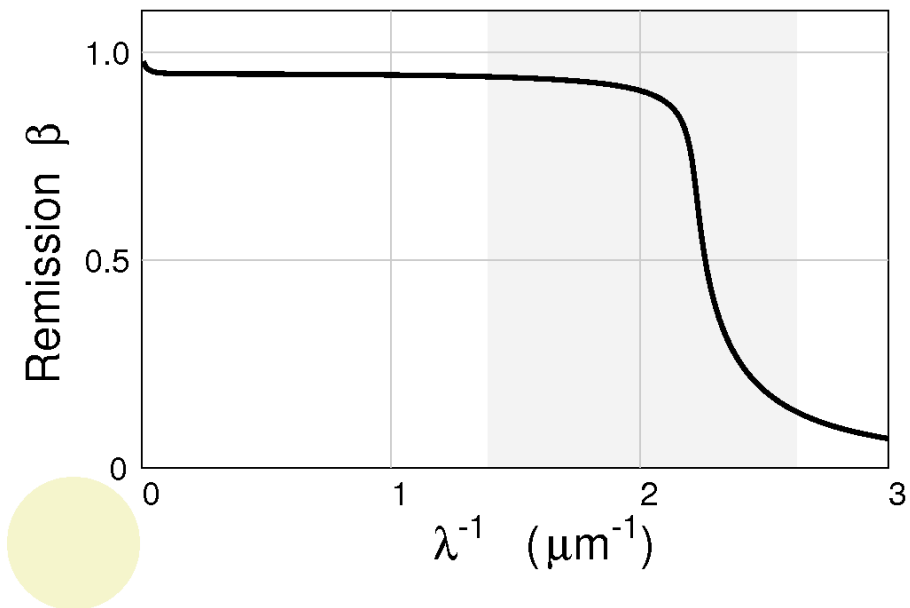


Abbildung 1: Reflexionskoeffizient eines Metalls im Elektronengas-Modell mit den Parametern  $\sigma = 1.2 \cdot 10^6 (\Omega \text{ m})^{-1}$ ,  $\lambda_{\text{ch}} = 450 \text{ nm}$ ,  $\epsilon_{\text{rel}} = 0.75$ . Der Bereich des sichtbaren Lichtes ist grau unterlegt.

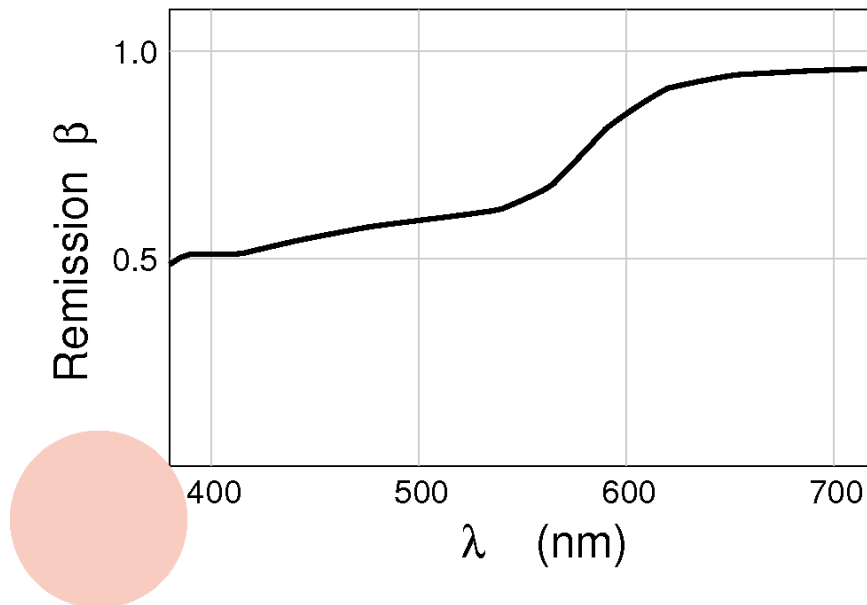


Abbildung 2: Aus den experimentellen Daten zu  $n$  und  $\kappa$  (aus <http://refractiveindex.info/>) berechnete Remission und Farbe von Kupfer.