ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ПЛАЗМОННОГО СПЕКТРА ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

И. М. Алешин и Д. В. Перегудов

Аннотация. Изучается влияние периодического неоднородного фона на распространение волн зарядовой плотности в простых металлах. Показано, что учет пространственной неоднородности в уравнениях Власова—Пуассона приводит к спектру плазмонов, качественно согласующемуся с экспериментальным. В частности, появляется обратная дисперсия и ненулевое затухание плазмона при нулевом значении квазиимпульса. Предложена наглядная интерпретация затухания длинноволновых плазмонов.

Введение

Недавние экспериментальные исследования показали, что классическая модель электронной плазмы на фоне однородного положительного "желе" [1] является недостаточной для описания свойств плазмонов в "простых" металлах. Отметим некоторые особенности спектра плазмонов в щелочных металлах, используя данные работы [2] (см. рисунок 1). Во-первых, в длинноволновой области спектра некоторых щелочных металлов (в частности, цезия) наблюдается обратная дисперсия. Во-вторых, затухание плазмонов остается конечным при нулевом значении волнового вектора. Последнее явление наблюдалось ранее в индии и алюминии [3]. В зависимости затухания от квадрата волнового вектора ясно прослеживается наличие двух областей: длинноволновой и коротковолновой (вплоть до границы первой зоны Бриллюэна), в каждой из которых зависимость имеет линейный характер, но коэффициенты наклона различны. Изменения частоты и затухания оказываются некоторым образом связанными друг с другом: восстановление нормальной дисперсии при больших значениях волнового вектора примерно совпадает с изменением характера зависимости затухания.

Для теоретического объяснения указанных особенностей предлагались два механизма. В работе [4] учитывалось электрон-плазмонное взаимодействие. В работах [5] кроме эффектов корреляции и обмена принята во внимание зонная структура спектра плазмонов. Фактически это означает учет периодической неоднородности положительного фона, обусловленной наличием кристаллической решетки. Некоторым симбиозом упомянутых подходов является работа [6], в которой дисперсия плазмонов в цезии объяснена взаимодействием газа свободных валентных электронов с локализованными электронами внутренних оболочек. Недостатком перечисленных работ является использование формализма равновесной статистической механики. Кроме того, в каждой из них объясняется лишь часть наблюдаемых явлений.

Мы полагаем, что указанные трудности нужно преодолевать в рамках кинетической теории. Примером такого подхода является работа [7], в которой, однако, вычислялась лишь статическая диэлектрическая проницаемость ионных кристаллов. Мы также считаем, что основным фактором, оказывающим влияние на распространение плазменных волн, является наличие периодического неоднородного фона. При этом учет взаимодействия электронов в рамках теории самосогласованного поля является вполне достаточным. В настоящей работе мы рассматриваем задачу, моделирующую возбуждения электронной плазмы в слабом периодическом поле ионов. Динамика возмущения описывается линеаризованным (по этому возмущению) уравнением Власова [8]. Впервые задача в такой постановке сформулирована в [9], где показано, что спектр плазменных волн в кристалле имеет зонный характер. В предлагаемой работе, рассматривая периодическую неоднородность как возмущение, мы находим первую неисчезающую поправку (второго порядка по амплитуде периодического поля) к дисперсионному уравнению.

Для того чтобы получить результаты в обозримом виде нам пришлось предельно упростить постановку задачи. При конкретных вычислениях мы предполагали, что среда неоднородна в одном направлении и, кроме того, равновесное распределение электронов по скоростям считали максвелловским. Таким образом, рассмотренная задача является модельной. В реальных металлах электронный газ сильно вырожден, и для его описания нужно использовать кинетическое уравнение для матрицы плотности [10] и, конечно же, учитывать трехмерную структуру кристаллической решетки. Реализация этой программы, не представляющая принципиальных трудностей, требует, однако, гораздо большего объема вычислений. В то же время, даже в рамках наших модельных предположений удается качественно описать как дисперсию плазменных волн в металлах, так и особенности их затухания. При сопоставлении результатов с экспериментальными данными нужно просто заменять температуру T (характерный параметр распределения Максвелла) на энергию Ферми ε_F (характерный параметр фермиевского распределения).

Постановка задачи

Рассмотрим простейшую модель кристалла, состоящего из частиц двух сортов: положительных ионов (i) и электронов (e). Ионы считаются неподвижными и образуют периодический неоднородный фон. Функцию распределения ионов напишем в виде

$$f_i = [n + \rho(\mathbf{r})]\delta(\mathbf{p}), \quad \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = 0,$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — периодическая функция, n — средняя концентрация ионов, угловыми скобками здесь и далее обозначается среднее по периоду решетки.

Динамика электронной компоненты описывается уравнениями Власова—Пуассона

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} + e\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$

$$\Delta\varphi = -4\pi e \int d^3p\,(Zf_i - f_e).$$

В функции распределения электронов выделим три слагаемых, описывающих однородный фон F_0, равновесную периодическую неоднородную добавку f_0 и неравновесное возмущение f_1:

$$f_e = F_0(\mathbf{p}) + f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) + f_1(\mathbf{p},\mathbf{r},t).$$

В силу условия квазинейтральности

$$\int d^3p\, F_0(\mathbf{p}) = Zn,$$
$$\left\langle \int d^3p\, f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) \right\rangle = 0,$$
$$\int d^3r \int d^3p\, f_1(\mathbf{p},\mathbf{r},t) = 0.$$

Потенциал φ представим в виде суммы равновесной части и неравновесного возмущения $\varphi = \varphi_0(\mathbf{r}) + \varphi_1(\mathbf{r},t)$, где

$$\Delta\varphi_0(\mathbf{r}) = -4\pi e \left[Z\rho(\mathbf{r}) - \int d^3p\, f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) \right], \tag{1}$$
$$\Delta\varphi_1(\mathbf{r},t) = 4\pi e \int d^3p\, f_1(\mathbf{p},\mathbf{r},t).$$

Положим также $\langle \varphi_0(\mathbf{r}) \rangle = 0$, чего всегда можно добиться выбором начала отсчета потенциала.

Равновесная функция распределения определяется из стационарного уравнения Власова

$$\mathbf{v}\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + e\frac{\partial \varphi_0}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial (F_0 + f_0)}{\partial \mathbf{p}} = 0.$$

Нас интересует случай, когда F_0 — максвелловское распределение. Тогда

$$f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) = \left[C \exp\left(\frac{e}{T}\varphi_0(\mathbf{r})\right) - 1 \right] F_0(\mathbf{p}).$$

Постоянная C определяется из условия $\left\langle \int d^3p\, f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) \right\rangle = 0$ и равна $C = \left\langle \exp\left(\frac{e}{T}\varphi_0(\mathbf{r})\right) \right\rangle^{-1}$.

После того, как функция распределения f_0 выражена через потенциал φ_0, последний, в принципе, может быть определен из уравнения (1) по известному распределению ионов $\rho(\mathbf{r})$. Из явного вида f_0 следует, что мы получим нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных. Таким образом, уже определение равновесного состояния представляет собой сложную проблему. Мы не будем здесь заниматься ее решением, заметив только, что в линейном (по φ_0) приближении получается обычное дебаевское экранирование ионов электронами. Нашей целью является исследование уравнений для возмущений, в которые входят только f_0 и φ_0, но не $\rho(\mathbf{r})$. Поэтому нам будет достаточно уже установленной связи между f_0 и φ_0. Саму же функцию φ_0 мы будем считать известной из опыта и равной псевдопотенциалу металла [11].

Уравнение для возмущений имеет вид

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + e\frac{\partial \varphi_0}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} + e\frac{\partial \varphi_1}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial (F_0 + f_0)}{\partial \mathbf{p}} + e\frac{\partial \varphi_1}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = 0 \tag{2}$$

Последний, нелинейный, член будем далее отбрасывать. Это можно сделать при условии $2e\varphi_1 k^2/m\omega^2 \ll 1$, где ω и k — частота и волновой вектор возмущения. При этом на значения параметра $e\varphi_1/T$ (в случае фермиевского равновесного распределения электронов $e\varphi_1/\varepsilon_F$) не накладывается никаких ограничений.

Линеаризованное уравнение представляет собой уравнение с периодическими коэффициентами, решения которого имеют вид блоховских волн

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{p},\mathbf{r},t) &= e^{-i\omega t+i\mathbf{kr}}\sum_n h_n(\mathbf{p})e^{i\mathbf{b}n\mathbf{r}}, \\ \varphi_1(\mathbf{r},t) &= e^{-i\omega t+i\mathbf{kr}}\sum_n \chi_n e^{i\mathbf{b}n\mathbf{r}}. \end{aligned} \tag{3}$$

Для упрощения обозначений мы применяем составной индекс $n = \{n_1, n_2, n_3\}$ и вектор обратной решетки $\mathbf{b} = \{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\}$, запись $\mathbf{b}n$ означает $\mathbf{b}_1 n_1 + \mathbf{b}_2 n_2 + \mathbf{b}_3 n_3$.

Периодические функции f_0 и φ_0 можно записать в виде

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) &= \sum_n g_n(\mathbf{p})e^{i\mathbf{b}n\mathbf{r}}, \\ \varphi_0(\mathbf{r}) &= \sum_n \psi_n e^{i\mathbf{b}n\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Подставляя эти разложения в уравнение (2), получим систему уравнений для гармоник

$$\begin{aligned} &[\omega - (\mathbf{k}+\mathbf{b}n)\mathbf{v}]h_n - e\chi_n(\mathbf{k}+\mathbf{b}n)\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} - \\ &\qquad - e\sum_{n'}\left(\psi_{n-n'}\mathbf{b}(n-n')\frac{\partial h_{n'}}{\partial \mathbf{p}} + \chi_{n'}(\mathbf{k}+\mathbf{b}n')\frac{\partial g_{n-n'}}{\partial \mathbf{p}}\right) = 0, \\ &(\mathbf{k}+\mathbf{b}n)^2\chi_n = -4\pi e\int d^3p\, h_n(\mathbf{p}) \end{aligned} \tag{4}$$

Уравнения (4) представляют собой задачу на собственные значения, решение которой определяет зависимость $\omega = \omega(\mathbf{k})$, то есть дисперсию и затухание плазмонов.

Вывод дисперсионного соотношения

Точное решение уравнений (4) не представляется возможным, поэтому будем искать приближенное решение. В простых металлах потенциал φ_0 невелик [5], а именно $e\varphi_0/\varepsilon_F \ll 1$. В нашей модельной задаче это соответствует малости параметра $\xi = e\varphi_0/T$, так что оказывается возможным строить решение в виде разложения по степеням этого параметра. Оказывается, что первая неисчезающая поправка к частоте возникает во втором порядке теории возмущений, поэтому нам понадобится выражение для фукнции распределения с точностью до квадратичных по потенциалу φ_0 членов:

$$f_0(\mathbf{p},\mathbf{r}) = \left[\frac{e}{T}\varphi_0(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2T^2}\left(\varphi_0^2(\mathbf{r}) - \langle\varphi_0^2(\mathbf{r})\rangle\right)\right]F_0(\mathbf{p}) + \dots$$

После преобразования Фурье получаем

$$g_n(\mathbf{p}) = \left[\frac{e}{T}\psi_n + \frac{e^2}{2T^2}\sum_{n'}(\psi_{n'}\psi_{n-n'} - \delta_{n0}|\psi_{n'}|^2)\right] F_0(\mathbf{p}) + \dots$$

Мы хотим исследовать волновые решения, которые при $\xi \to 0$ описывают обычные плазменные волны в модели “желе”. В соответствие с этим в нулевом приближении мы оставляем только χ_0 и h_0. Для этих величин имеем уравнения

$$[\omega^{(0)} - \mathbf{kv}]h_0^{(0)} - e\chi_0^{(0)}\mathbf{k}\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$
$$k^2\chi_0^{(0)} = -4\pi e\int d^3p\, h_0^{(0)},$$

из которых следует стандартное дисперсионное соотношение для ленгмюровских волн [8]:

$$\varepsilon(\omega^{(0)}, \mathbf{k}) = 0, \quad \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2}\int d^3p\, (\mathbf{kG})F_0. \tag{5}$$

Здесь использован оператор

$$\mathbf{G} = \frac{1}{\omega - \mathbf{kv}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}.$$

В первом приближении

$$[\omega^{(0)} - \mathbf{k}_n\mathbf{v}]h_n^{(1)} + \omega^{(1)}h_n^{(0)} - e\chi_n^{(1)}\mathbf{k}_n\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} - e\psi_n\mathbf{b}n\frac{\partial h_0^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} - e\chi_0^{(0)}\frac{e}{T}\psi_n\mathbf{k}\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$
$$k_n^2\chi_n^{(1)} = -4\pi e\int d^3p\, h_n^{(1)}.$$

Здесь $\mathbf{k}_n = \mathbf{k} + \mathbf{b}n$. При $n = 0$ имеем

$$[\omega^{(0)} - \mathbf{kv}]h_0^{(1)} + \omega^{(1)}h_0^{(0)} - e\chi_0^{(1)}\mathbf{k}\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} = 0.$$

Если мы исключим $h_0^{(1)}$ обычным образом и вспомним дисперсионное соотношение в нулевом порядке, то получим $\omega^{(1)} = 0$, а значения $\chi_0^{(1)}$ и $h_0^{(1)}$ остаются неопределенными. Аналогично остаются неопределенными амплитуды $\chi_0^{(s)}$ и $h_0^{(s)}$ в любом порядке s теории возмущений. Мы можем считать их равными нулю, полагая, что амплитуда основной гармоники в нулевом приближении есть полная амплитуда основной гармоники в точном решении.

Для $n \neq 0$ имеем

$$h_n^{(1)} = e\chi_n^{(1)}(\mathbf{k}_n\mathbf{G}_n)F_0 + e\chi_0^{(0)}\frac{e\psi_n}{T}[T(\mathbf{b}n\mathbf{G}_n)(\mathbf{kG}) + (\mathbf{kG}_n)]F_0,$$
$$\chi_n^{(1)} = -\frac{4\pi e^2}{k_n^2\varepsilon_n}\frac{e\psi_n}{T}\chi_0^{(0)}M_{n0} \tag{6}$$

где

$$M_{nn'} = \int d^3p\,[T(\mathbf{b}(n-n')\mathbf{G}_n)(\mathbf{k}_{n'}\mathbf{G}_{n'}) + (\mathbf{k}_{n'}\mathbf{G}_n)]F_0.$$

Мы ввели обозначение $\mathbf{G}_n$ для оператора $\mathbf{G}$, в котором вместо $\mathbf{k}$ стоит $\mathbf{k}_n$, и аналогичное обозначение для диэлектрической проницаемости ε.

Поскольку диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ зависит только от модуля волнового вектора $\mathbf{k}$, а дисперсионное соотношение в нулевом приближении имеет вид (5), то в формуле (6) из-за наличия множителя $1/\varepsilon_n$ возможно появление резонансного знаменателя. Нетрудно сообразить, что это происходит тогда, когда вектор $\mathbf{k}$ лежит вблизи границы зоны Бриллюэна. При некотором n вектор $\mathbf{k}_n$ имеет модуль, близкий к $|\mathbf{k}|$, и диэлектрическая проницаемость ε_n становится аномально малой, а поправка $\chi_n^{(1)}$ — аномально большой. Таким образом, вблизи границ зон Бриллюэна теория возмущений становится неприменимой.

Во втором порядке получаем поправку к частоте

$$\omega^{(2)}P = \sum_n \left|\frac{e}{T}\psi_n\right|^2 \left\{\frac{4\pi e^2}{k_n^2\varepsilon_n} M_{0n}M_{n0} - \right.$$
$$\left. - \int d^3p\,[T^2(\mathbf{b}n\mathbf{G})(\mathbf{b}n\mathbf{G}_n)(\mathbf{k}\mathbf{G}) + T(\mathbf{b}n\mathbf{G})(\mathbf{k}\mathbf{G}_n)]F_0\right\},$$

где

$$P = \int \frac{d^3p}{\omega^{(0)} - \mathbf{k}\mathbf{v}}(\mathbf{k}\mathbf{G})F_0$$

С точностью до второго порядка

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega^{(0)}, \mathbf{k}) - \frac{4\pi e^2\omega^{(2)}}{k^2}P + \ldots = -\frac{4\pi e^2\omega^{(2)}}{k^2}P + \ldots$$

Поэтому можно записать дисперсионное соотношение в виде

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) - \frac{4\pi e^2}{k^2}\sum_n \left|\frac{e}{T}\psi_n\right|^2 \left\{\frac{4\pi e^2}{k_n^2\varepsilon_n} M_{0n}M_{n0} - \right.$$
$$\left. - \int d^3p\,[T^2(\mathbf{b}n\mathbf{G})(\mathbf{b}n\mathbf{G}_n)(\mathbf{k}\mathbf{G}) + T(\mathbf{b}n\mathbf{G})(\mathbf{k}\mathbf{G}_n)]F_0\right\} = 0.$$

Как уже отмечалось, это соотношение справедливо везде, кроме областей квазиимпульса вблизи границ зон Бриллюэна. В последнем случае имеются два конкурирующих малых параметра: потенциал φ_0 и импульс k, отсчитанный от границы зоны, поэтому нужно перестроить ряд теории возмущений. Первая поправка будет определяться суммой наиболее сингулярных членов (членов, содержащих наибольшие степени резонансного знаменателя) во всех порядках теории возмущений. Рассмотрим самый простой случай, когда имеется всего один резонансный знаменатель ε_N, соответствующий N-ой гармонике. Выписывая k-ый порядок теории возмущений

$$[\omega^{(0)} - \mathbf{k}_n\mathbf{v}]h_n^{(k)} + \sum_{p=2}^{k-1}\omega^{(p)}h_n^{(k-p)} + \omega^{(k)}h_n^{(0)} - e\chi_n^{(k)}\mathbf{k}_n\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} -$$
$$- e\sum_{n'}\psi_{n-n'}\mathbf{b}(n-n')\frac{\partial h_{n'}^{(k-1)}}{\partial \mathbf{p}} - e\sum_{n'}\sum_{p=0}^{k-1}\chi_{n'}^{(p)}\mathbf{k}_{n'}\frac{\partial g_{n-n'}^{(k-p)}}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$

и вспоминая, что $\chi_0^{(k)}=0$, $h_0^{(k)}=0$ при $k\neq 0$, из уравнения для $n=0$ получаем поправку к частоте

$$\omega^{(k)}P\chi_0^{(0)}=\sum_{n'}\int d^3p\left\{-\psi_{-n'}(\mathbf{b}n'\mathbf{G})h_{n'}^{(k-1)}+\sum_{p=0}^{k-1}\chi_{n'}^{(p)}(\mathbf{k}_{n'}\mathbf{G})g_{-n'}^{(k-p)}\right\},$$

а из уравнений для $n\neq 0$ — поправки к потенциалу и функции распределения

$$\chi_n^{(k)}=\frac{1}{k_n^2\varepsilon_n}\left[4\pi e\sum_{p=2}^{k-1}\omega^{(p)}\int\frac{d^3p}{\omega^{(0)}-\mathbf{k}_n\mathbf{v}}h_n^{(k-p)}-\right.$$
$$\left.-4\pi e^2\sum_{n'}\int d^3p\left\{\psi_{n-n'}(\mathbf{b}(n-n')\mathbf{G}_n)h_{n'}^{(k-1)}+\sum_{p=0}^{k-1}\chi_{n'}^{(p)}(\mathbf{k}_{n'}\mathbf{G}_n)g_{n-n'}^{(k-p)}\right\}\right]$$
$$h_n^{(k)}=-\frac{1}{\omega^{(0)}-\mathbf{k}_n\mathbf{v}}\sum_{p=2}^{k-1}\omega^{(p)}h_n^{(k-p)}+e\chi_n^{(k)}(\mathbf{k}_n\mathbf{G}_n)F_0+$$
$$+e\sum_{n'}\psi_{n-n'}(\mathbf{b}(n-n')\mathbf{G}_n)h_{n'}^{(k-1)}+e\sum_{n'}\sum_{p=0}^{k-1}\chi_{n'}^{(p)}(\mathbf{k}_{n'}\mathbf{G}_n)g_{n-n'}^{(k-p)}.$$

Из выписанных выражений видно, что наиболее сингулярные члены имеют вид

$$\chi_N^{(k)}\sim\frac{1}{\varepsilon_N^k},\quad h_N^{(k)}\sim\frac{1}{\varepsilon_N^k},\quad \omega^{(k)}\sim\frac{1}{\varepsilon_N^{k-1}}$$

Оставляя только эти члены, напишем приближенные соотношения

$$\chi_N^{(k)}=\frac{4\pi e}{k_N^2\varepsilon_N}\sum_{p=2}^{k-1}\omega^{(p)}\int\frac{d^3p}{\omega^{(0)}-\mathbf{k}_N\mathbf{v}}h_N^{(k-p)},\quad k=3,4,\ldots,$$
$$\chi_N^{(1)}=-\frac{4\pi e^2}{k_N^2\varepsilon_N}\int d^3p\left\{\psi_N(\mathbf{b}N\mathbf{G}_N)h_0^{(0)}+\chi_0^{(0)}(\mathbf{k}\mathbf{G}_N)g_N^{(1)}\right\},\quad \chi_N^{(2)}=0,$$
$$h_N^{(k)}=e\chi_N^{(k)}(\mathbf{k}_N\mathbf{G}_N)F_0,$$
$$\omega^{(k)}P\chi_0^{(0)}=\int d^3p\left\{-\psi_{-N}(\mathbf{b}N\mathbf{G})h_N^{(k-1)}+\chi_N^{(k-1)}(\mathbf{k}_N\mathbf{G})g_{-N}^{(1)}\right\}$$

Исключая h_N имеем

$$\chi_N^{(k)}=\frac{4\pi e^2}{k_N^2\varepsilon_N}P_N\sum_{p=2}^{k-1}\omega^{(p)}\chi_N^{(k-p)},\quad k=3,4,\ldots,$$
$$\chi_N^{(1)}=-\frac{4\pi e^2}{k_N^2\varepsilon_N}\frac{e\psi_N}{T}M_{N0}\chi_0^{(0)},\quad \chi_N^{(2)}=0,$$
$$\omega^{(k)}P\chi_0^{(0)}=\frac{e\psi_{-N}}{T}\chi_N^{(k-1)}M_{0N}$$

Поправка к частоте определяется величиной

$$\Omega = \sum_{k=2}^{\infty} \omega^{(k)} = \frac{e\psi_{-N}}{T} \frac{M_{0N}}{P\chi_0^{(0)}} \sum_{k=1}^{\infty} \chi_N^{(k)} = \frac{e\psi_{-N}}{T} \frac{M_{0N}}{P\chi_0^{(0)}} \left[\chi_N^{(1)} + \sum_{k=3}^{\infty} \chi_N^{(k)} \right] =$$

$$= \frac{e\psi_{-N}}{T} \frac{M_{0N}}{P\chi_0^{(0)}} \left[-\frac{4\pi e^2}{k_N^2 \varepsilon_N} \frac{e\psi_N}{T} M_{N0} \chi_0^{(0)} + \frac{4\pi e^2}{k_N^2 \varepsilon_N} P_N \Omega \sum_{k=1}^{\infty} \chi_N^{(k)} \right] =$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{k_N^2 \varepsilon_N} \left| \frac{e\psi_N}{T} \right|^2 \frac{M_{0N} M_{N0}}{P} + \frac{4\pi e^2}{k_N^2 \varepsilon_N} P_N \Omega^2$$

Решая квадратное уравнение, найдем

$$\Omega = \frac{k_N^2 \varepsilon_N}{8\pi e^2 P_N} \pm \sqrt{\left(\frac{k_N^2 \varepsilon_N}{8\pi e^2 P_N} \right)^2 + \left| \frac{e\psi_N}{T} \right|^2 \frac{M_{0N} M_{N0}}{P P_N}} \tag{7}$$

Разные ветви корня выбираются с разных сторон от границы зоны Бриллюэна. Когда k приближается к границе зоны Бриллюэна, $\varepsilon_N \to 0$, а k_N, P, P_N, M_{0N} имеют конечные ненулевые пределы. Первое слагаемое в формуле (7) сокращает аналогичный линейный по отклонению от границы зоны член в $\omega^{(0)}$, обеспечивая, тем самым, выполнение равенства $\partial\omega/\partial k = 0$ на границе зоны. Второе слагаемое имеет неаналитическую зависимость от двух малых параметров (вида $\sqrt{a^2+b^2}$). Как видно, разрыв в спектре при переходе через границу зоны Бриллюэна имеет первый порядок по периодичскому потенциалу φ_0 [9].

Дисперсия плазмонов в одномерном кристалле

Чтобы получить явно зависимость $\omega(\mathbf{k})$ и продемонстрировать качественные отличия предложенной модели от модели "желе", сделаем дальнейшие упрощающие предположения. Будем рассматривать одномерную задачу и считать, что потенциал φ_0 имеет только одну (первую) гармонику. Удобно ввести характерные параметры: ленгмюровскую частоту, обратный дебаевский радиус и тепловую скорость

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}}, \quad \frac{1}{r_D} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{T}}, \quad v_T = \sqrt{\frac{T}{m}},$$

и перейти к безразмерным частоте, волновому вектору и скорости, кроме того введем безразмерный параметр

$$\xi = |e\psi_1/T|.$$

Поправка к частоте выражается через три эталонных интеграла

$$J_1(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{z-v} \partial_v F(v)\, dv,$$

$$J_2(z_1, z_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{z_1 - v} \partial_v \frac{1}{z_2 - v} \partial_v F(v)\, dv,$$

$$J_3(z_1, z_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{z_1 - v} \partial_v \frac{1}{z_2 - v} \partial_v \frac{1}{z_1 - v} \partial_v F(v)\, dv,$$

где $F(v) = e^{-v^2/2}/\sqrt{\pi}$, а обход полюсов зависит от знака z [12]. Интегралы J_2 и J_3 сводятся к J_1 посредством формул

$$J_2(z_1, z_2) = \partial_{z_1} \frac{J_1(z_1) - J_1(z_2)}{z_2 - z_1},$$
$$J_3(z_1, z_2) = -\partial_{z_1} \left(\frac{1}{3} \partial_{z_1} + \frac{1}{2} \partial_{z_2} \right) J_2(z_1, z_2)$$

Сам J_1 с учетом правила обхода выражается через интеграл ошибок [13]

$$J_1(z) = \begin{cases} 1 + iz\sqrt{\pi/2}\, e^{-z^2/2} \operatorname{erfc}(-iz/\sqrt{2}), & z > 0, \\ 1 - iz\sqrt{\pi/2}\, e^{-z^2/2} \operatorname{erfc}(iz/\sqrt{2}), & z < 0 \end{cases}$$

Дисперсионное соотношение в нулевом приближении имеет вид

$$\varepsilon(\omega^{(0)}, \mathbf{k}) = 1 + \frac{1}{k^2} J_1 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k} \right) = 0$$

Вспомогательные величины M и P выражаются по формулам

$$\tilde{M}_{N0} = TM_{N0} = \frac{k}{k_N} J_1 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k_N} \right) + \frac{Nb}{k_N} J_2 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k_N}, \frac{\omega^{(0)}}{k} \right) = \tilde{M}_{0N},$$
$$\tilde{P}_N = \omega_p T P_N = \frac{\partial}{\partial \omega^{(0)}} J_1 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k_N} \right)$$

Поправка к частоте во втором порядке

$$\omega^{(2)} = \frac{\xi^2}{\tilde{P}} \sum_{\sigma=\pm 1} \left[\frac{\tilde{M}_{0\sigma}^2}{k_\sigma^2 \varepsilon_\sigma} + \frac{b\sigma}{k_\sigma} J_2 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k}, \frac{\omega^{(0)}}{k_\sigma} \right) + \frac{b^2\sigma^2}{k k_\sigma} J_3 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k}, \frac{\omega^{(0)}}{k_\sigma} \right) \right]$$

Поправка к частоте вблизи границы первой зоны Бриллюэна ($k \to b/2 - 0$)

$$\Omega = \frac{k_{-1}^2 \varepsilon_{-1}}{2\tilde{P}_{-1}} - \sqrt{\left(\frac{k_{-1}^2 \varepsilon_{-1}}{2\tilde{P}_{-1}} \right)^2 + \xi^2 \frac{\tilde{M}_{-10}^2}{\tilde{P} \tilde{P}_{-1}}}$$

В длинноволновой части спектра можно получить более простые и явные формулы, раскладывая выражение для $\omega^{(2)}$ в ряд по k. Результат с точностью до k^2 гласит

$$\omega^{(0)} + \omega^{(2)} = 1 + \xi^2 R(b) + \frac{3}{2} k^2 (1 + \xi^2 S(b)) + \ldots,$$

где

$$R(b) = \frac{(b^2 + b^4)(1 - J_1(1/b))}{b^2 + J_1(1/b)},$$

а выражение $S(b)$ через эталонный интеграл J_1 мы не приводим из-за его громоздкости.

Зависимость вещественной и мнимой частей частоты от k схематически представлена на рисунке 2. Обычно в металлах b порядка дебаевского радиуса [1] (в наших безразмерных переменных порядка единицы). Оказывается, что для таких значений b выполнены неравенства $\mathfrak{Re}\, R > 0$, $\mathfrak{Im}\, R < 0$, $\mathfrak{Re}\, S < 0$, $\mathfrak{Im}\, S > 0$. Неравенства для R означают, что появляется конечное затухание плазмона при нулевом значении волнового вектора, что подтверждается в экспериментах [2]. Одновременно увеличивается частота плазмона при нулевом значении волнового вектора. Это можно интерпретировать как уменьшение эффективной массы электрона в решетке по сравнению со свободным электроном, что, по-видимому, противоречит эксперименту. Однако эффективная масса не является однозначно определяемой величиной, для согласия с экспериментом приходится в разных процессах приписывать электрону разные эффективные массы [11].

Неравенства для S говорят, что при достаточно больших значениях ξ в области малых значений волнового вектора будет наблюдаться обратная дисперсия, что также подтверждается экспериментально. “Большие” значения ξ отнюдь не означают выход за рамки теории возмущений. Действительно, применение теории возмущений оправдывается неравенством $1 + 3/2k^2 \gg \xi^2|R + 3/2Sk^2|$. С другой стороны, обратная дисперсия появляется при условии $|\xi^2\mathfrak{Re}\, S| > 1$. Если R достаточно мало, то всегда можно указать такую область малых k, что выполняются оба неравенства.

Затухание плазмона уменьшается с ростом волнового вектора. Насколько можно судить, это явление не наблюдается в эксперименте, так что его следует отнести к недостаткам нашего упрощенного подхода. Можно надеяться, что вычисления в более реалистической модели с использованием формализма матрицы плотности и с учетом трехмерной структуры решетки исправят положение.

Поведение вещественной и мнимой частей частоты для больших k может быть исследовано численно. Как показывают вычисления, приведенные формулы длинноволнового приближения справедливы для $k < 0.2$. Для больших k существенны следующие члены разложения, которые качественно меняют ход кривых, возвращая “нормальные” дисперсию и затухание. Интересно отметить, что характер зависимости для вещественной и мнимой частей частоты меняется согласованно, приблизительно в одной и той же области значений k. Подобное же свойство имеют экспериментальные кривые (см. рисунок 1).

Механизм затухания длинноволновых плазмонов

Формализм теории возмущений, использованный нами в работе, удобен для анализа общих свойств решения и построения более точных приближений, однако он несколько затушевывает простую физическую идею, составляющую основу работы. В этом разделе мы разовьем другой, более интуитивный подход к задаче, который позволит нам дать физическую интерпретацию явлению затухания длинноволновых плазмонов.

Исходным пунктом будет формула (3), в которой мы выделим член $n = 0$:

$$f_1(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t + i\mathbf{kr}} h_0(\mathbf{p}) + \sum_{n \neq 0} h_n(\mathbf{p}) e^{-i\omega t + i(\mathbf{k}+\mathbf{b}n)\mathbf{r}} = F + \delta f,$$
$$\varphi_1(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t + i\mathbf{kr}} \chi_0 + \sum_{n \neq 0} \chi_n e^{-i\omega t + i(\mathbf{k}+\mathbf{b}n)\mathbf{r}} = \Phi + \delta\varphi,$$

В длинноволновой области спектра $k \ll b$, и такое разбиение соответствует разделению на быстро и медленно меняющиеся слагаемые. Учитывая, что равновесные потенциал φ_0 и функция распределения f_0 являются быстро меняющимися, можно в уравнении (2) выделить быстро и медленно меняющиеся слагаемые, которые, очевидно, должны сокращаться по отдельности. Выделяя быстро меняющиеся слагаемые, имеем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)\delta f + e\frac{\partial \delta\varphi}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} + e\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} + e\frac{\partial \varphi_0}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} = 0,$$
$$\Delta\delta\varphi = 4\pi e \int \delta f \, d^3p. \tag{8}$$

Чтобы получить уравнения для медленно меняющихся слагаемых, усредним (2) по периоду решетки

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right) F + e\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} + e\left\langle \frac{\partial \delta\varphi}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle + e\left\langle \frac{\partial \varphi_0}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle = 0,$$
$$\Delta\Phi = 4\pi e \int F \, d^3p.$$

Здесь имеется прямая аналогия с методом, предложенным П. Л. Капицей при рассмотрении механической задачи движения маятника с осциллирующей точкой подвеса [14]. Эта аналогия использовалась ранее одним из авторов [15] для решения уравнений холодной гидродинамики плазмы (исследовалась нелинейная динамика плазменных волн в периодически неоднородной среде).

В длинноволновой области этот подход приводит к выражениям, полученным выше с помощью стандартной схемы теории возмущений. При этом для вычисления δf и $\delta\varphi$ нужно в уравнение (8) подставить власовские выражения для F и Φ.

Изложенный подход позволяет дать простую и наглядную интерпретацию затуханию длинноволновых плазмонов. Если “разрешающая способность” измерительного прибора много больше размера мелкомасштабных неоднородностей, то при экспериментальном наблюдении происходит “усреднение” быстро осциллирующих пространственно-временных составляющих измеряемых величин. Наличие периодического потенциала приводит к перераспределению энергии между двумя этими слагаемыми. Поэтому затухание плазменных волн может быть объяснено как нарастание мелкомасштабной части возмущения, что, в свою очередь, приводит к уменьшению амплитуды основной гармоники.

Литература

1. Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах*, Мир, Москва, 1965, p. 82.
2. A. vom Felde, J. Sprosser-Prou, J. Fink, Phys. Rev. **B40** (1989), 10181.
3. K. J. Krane, J. Phys. **F8** (1978), 2133.
4. D. N. Tripathy, M. K. Singh, L. K. Mishra, Indian J. Pure & Appl. Phys. **31** (1993), 361.
5. K. Sturm, Z. Phys. **B25** (1976), 247; Solid State Comm. **82** (1992), 295.
6. A. Fleszar, R. Stumpf, A. G. Eguiluz, Phys. Rev. **B55** (1997), 2068.
7. S. L. Adler, Phys. Rev. **126** (1962), 413.
8. А. А. Власов, ЖЭТФ **8** (1938), 291.
9. П. С. Зырянов, ЖЭТФ **25** (1953), 441.
10. Ю. Л. Климонтович, В. П. Силин, ЖЭТФ **23** (1952), 151.
11. У. Харрисон, *Теория твердого тела*, Мир, Москва, 1972, p. 111.
12. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **16** (1946), 574.
13. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Наука, Москва, 1979, p. 119.
14. П. Л. Капица, ЖЭТФ **21** (1951), 588.
15. И. М. Алешин, Вестник Моск. ун-та. Серия 3. Физика, Астрономия (1997), no. 4, 11.