Лекция №14

Плазменные волны в твердых телах

На предыдущих лекциях рассматривались элементарные возбуждения в твердых телах, связанные с коллективным движением нейтральных атомов, молекул или тяжелых ионов. Квантами этих элементарных возбуждений являются фононы или поляритоны. Рассмотрим теперь возбуждения, связанные с коллективным движением электронов относительно тяжелых ионов в твердых телах. Эти элементарные возбуждения обусловлены кулоновским взаимодействием между электронами и положительными ионами. Им соответствуют продольные волны, которые получили название **плазменных волн**. Кванты плазменных волн называют **плазмонами.**

Плазменные колебания не очень высоких частот возникают в металлах и полупроводниках, то есть, в твердых телах, имеющих слабо связанные с ионами электроны. В основном состоянии электроны полностью компенсируют положительный заряд ионов и каждая элементарная ячейка кристалла нейтральна. Пусть ν_0 - среднее число электронов в единице объема кристалла, соответствующее такому нейтральному состоянию. Отклонение числа электронов ν от среднего значения ν_0 приводит к нарушению нейтральности и появлению электрических сил, восстанавливающих равновесие. Так возникают колебания плотности электронов относительно среднего значения ν_0.

В простейшей теории плазменных колебаний в твердых телах, развитой Бомом и Пайнсом и в ряде последовавших работ других авторов, положительные ионы твердого тела заменяются однородно распределенным положительным зарядом с плотностью, равной средней плотности заряда электронов. Такая модель твердого тела называется **моделью желе**. Валентне электроны и электроны проводимости рассматриваются как электронный газ, разрежение и сжатие которого относительно среднего значения приводят к продольным колебаниям. Плотность электронов в твердом теле порядка $10^{23} cm^{-3}$ в отличие от малой плотности электронов ($\sim 10^{12} cm^{-3}$) в обычной газовой плазме. При большой плотности электронов кинетическая энергия их «нулевого движения» значительно превышает энергию теплового движения, поэтому последнее можно не принимать во внимание.

Рассмотрим длинноволновые плазменные колебания в изотропном кристалле. Для длинноволновых колебаний электроны можно рассматривать как непрерывную среду. Изменение плотности электронов относительно среднего значения ν_0 можно записать в виде

$$\nu(\mathbf{r},t)-\nu_0=\nu_0 div\mathbf{R}(\mathbf{r},t), \qquad (1)$$

где $\mathbf{R}(\mathbf{r},t)$ вектор малого смещения электронного газа из своего нормального положения. Если e - единичный положительный заряд, то изменение плотности электрического заряда дается выражением

$$\delta\rho = \rho(\mathbf{r},t) - \rho_0 = -e\nu_0 div\mathbf{R}(\mathbf{r},t). \quad (2)$$

Изменение плотности электронов нарушает нейтральность. Появляется элек4тростатический потенциал $\varphi(\mathbf{r},t)$, удовлетворяющий уравнению Пуассона

$$\Delta\varphi(\mathbf{r},t) = -4\pi\delta\rho(\mathbf{r},t) = 4\pi e\nu_0 div\mathbf{R}(\mathbf{r},t). \quad (3)$$

Потенциальная энергия, возникающая при смещении электронов, будет слагаться из изменения упругой и электростатической энергий

$$U = \frac{1}{2}\int d\tau\left\{\gamma\left(div\mathbf{R}\right)^2 + \varphi\delta\rho\right\}, \quad (4)$$

где γ - модуль упругости электронного газа без учета зарядов. Мы рассматриваем только продольные смещения, то есть, полагаем $rot\mathbf{R} = 0$. Если m - масса электрона, то кинетическая энергия смещений электронов равна

$$K = \frac{m\nu_0}{2}\int d\tau\dot{\mathbf{R}}^2. \quad (5)$$

Предположим, что кристалл имеет форму куба со стороной L и объемом $V = L^3$.

Для удобства введем циклические граничные условия. Тогда волновые функции

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\mathbf{kr}), \quad (6)$$

где компоненты k_x имеют значения

$$\frac{2\pi l_x}{L}, \qquad (l_x = 0, \pm1, \pm2, \ldots),$$

образуют полную ортонормированную систему функций. Разложим смещения $\mathbf{R}(\mathbf{r},t)$ по этой системе ортонормированных функций

$$\mathbf{R}(\mathbf{r},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{e}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr}), \tag{7}$$

где $\mathbf{e}(\mathbf{k})$ - единичный вектор продольной поляризации, удовлетворяющий условиям

$$\mathbf{e}(\mathbf{k})=\mathbf{e}(-\mathbf{k}), \qquad \mathbf{e}^2(\mathbf{k})=1, \quad \mathbf{k}\,||\,\mathbf{e}(\mathbf{k}).$$

Из условия вещественности смещений вытекает равенство

$$A_{\mathbf{k}}=A^*_{-\mathbf{k}}.$$

Из (7) следует, что

$$div\mathbf{R}(\mathbf{r},t)=\frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}(t)(\mathbf{ke}(\mathbf{k}))\exp(i\mathbf{kr}). \tag{8}$$

Разложим потенциал по ортонормированной системе функций (6)

$$\varphi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(t)\exp(i\mathbf{kr}). \tag{9}$$

Из уравнения Пуассона (3) при учете (8) получаем

$$\varphi_0=0, \qquad \varphi_{\mathbf{k}}=-\frac{i4\pi e\nu_0}{\mathbf{k}^2}(\mathbf{ke}(\mathbf{k}))A_{\mathbf{k}}, \qquad k\neq 0. \tag{10}$$

При учете (7)-(10) потенциальная энергия (4) преобразуется к виду

$$U=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\left\{\mathbf{k}^2\gamma+4\pi e^2\nu_0^2\right\}A_{\mathbf{k}}A_{-\mathbf{k}}. \tag{11}$$

Кинетическая энергия обретает вид

$$K=\frac{m\nu_0}{2}\sum_{\mathbf{k}}\dot{A}_{\mathbf{k}}\dot{A}_{-\mathbf{k}}. \tag{12}$$

Из (11) и (12) следует уравнение движения

$$m\nu_0\ddot{A}_{\mathbf{k}}+\left\{\mathbf{k}^2\gamma+4\pi e^2\nu_0^2\right\}A_{\mathbf{k}}=0.$$

Полагая

$$\ddot{A}_{\mathbf{k}} = -\omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}},$$

получаем закон дисперсии плазменных колебаний в области малых значений $\mathbf{k}$

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_p^2 + \frac{\gamma}{m\nu_0}\mathbf{k}^2, \tag{13}$$

где

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 \nu_0^2}{m}$$

- квадрат **плазменной частоты**.

Заметим, что при $e \to 0$ электростатические эффекты исчезают и

$$\omega(\mathbf{k}) \approx k\sqrt{\frac{\gamma}{m\nu_0}} = \omega_{ac}(\mathbf{k}).$$

Такая зависимость совпадает с законом дисперсии частоты для звуковых волн, распространяющихся в газе со скоростью $\sqrt{\gamma / m\nu_0}$. Значение $\sqrt{\gamma / m\nu_0} \sim 5\cdot 10^5 cm/cek$, $k_{l\max} \sim 10^8 cm^{-1}$. Поэтому $\omega_{ac} \sim 5\cdot 10^{13} cek^{-1}$. Для оценки величины плазменной частоты примем во внимание, что $\nu_0 \approx 10^{23} cm^{-3}$, $m = 9\cdot 10^{23} г$ и $e = 5\cdot 10^{-10} СГСЭ$. Тогда $\omega_p \approx 2\cdot 10^{16} cek^{-1}$, $\hbar\omega_p \approx 12 эв$. Следовательно, $\omega_p \gg \omega_{ac}$, и дисперсия плазменных волн очень мала. Относительное изменение $\omega(\mathbf{k})$ в пределах первой зоны Бриллюэна менее 10^{-3}.

Обобщенный импульс, сопряженный коллективной переменной $A_{\mathbf{k}}$, находится по общему правилу

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{\partial(K-U)}{\partial \dot{A}_{\mathbf{k}}} = m\nu_0 \dot{A}_{-\mathbf{k}}.$$

Поэтому классическая функция Гамильтона плазменных колебаний, выражающаяся через обобщенные координаты и импульсы, определяется выражением:

$$H(P,A) = \frac{1}{m\nu_0}\sum_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} P_{-\mathbf{k}} + m\nu_0 \sum_{\mathbf{k}} \omega^2(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} . \qquad (14)$$

Переход к оператору Гамильтона в представлении чисел заполнения плазмонов осуществляется в (14) преобразованием

$$A_{\mathbf{k}} \to \hat{A}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\nu_0\omega(\mathbf{k})}}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}^{+}_{-\mathbf{k}}\right), \qquad (15)$$

$$P_{\mathbf{k}} \to \hat{P}_{\mathbf{k}} = i\sqrt{\frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k}) m\nu_0}\left(\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} - \hat{a}_{-\mathbf{k}}\right),$$

где $\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ - бозевские операторы рождения и уничтожения плазмонов с волновым вектором $\mathbf{k}$. Таким образом, получим

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(\mathbf{k})\left(\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\right). \qquad (16)$$

Стационарные состояния кристалла изображаются функциями от чисел заполнения плазмонов $n_{\mathbf{k}}$. Вакуумное состояние характеризуется вектором $|0\rangle$. В этом состоянии нулевая энергия плазмонов

$$\langle 0|\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(\mathbf{k}).$$

Квадрат амплитуды нулевых колебаний определяется выражением

$$\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{k}}\hat{A}_{-\mathbf{k}}|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\nu_0\omega(\mathbf{k})} \equiv x^2_{0\mathbf{k}} .$$