Лекция №15

Плазменные волны в твердых телах (продолжение)

На предыдущем занятии нами рассматривались новые коллективные возбуждения в твердом теле – плазмоны, которые могут существовать в металлах и полупроводниках. Нами был получен спектр этих коллективных возбуждений

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_p^2 + \frac{\gamma}{m\nu_0}\mathbf{k}^2, \; \omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 \nu_0^2}{m}$$

При этом электронная подсистема рассматривалась как электронный газ.

Для выяснения пределов применимости теории плазмонов, построенной на предыдущей лекции, рассмотрим, при каких условиях оправдывается представление об электронах кристаллов как о непрерывной среде. Если принять, что электрон – точечная частица, то плотность и вектор потока электронов в точке $\mathbf{r}$ можно записать в виде

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_l \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_l), \qquad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_l \mathbf{v}_l \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_l), \tag{1}$$

где $\mathbf{r}_l$, $\mathbf{v}_l$ - радиус-вектор и скорость l-го электрона, суммирование производится по всем электронам кристалла в единичном его объеме.

Будем учитывать только электростатическое взаимодействие. Потенциальная энергия взаимодействия i-го электрона со всеми другими электронами и положительным однородно распределенным зарядом ионов имеет вид:

$$U(\mathbf{r}_i) = \sum_j \left(\frac{e^2}{r_{ij}} - e^2 \int \frac{d\tau_j}{r_{ij}} \right), \quad r_{lj} \equiv \left| \mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j \right|, \qquad l \neq j \tag{2}$$

и интегрирование производится по единичному объему вокруг точки $\mathbf{r}_j$.

Пусть

$$\frac{e^2}{r_{ij}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ij}\right) \quad \mathbf{r}_{lj} = \mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j .$$

Напомним, что функции

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}\right)$$

представляют собой полный набор ортонормированных функций. С учетом того обстоятельства, что рассматривается единичный объем, имеем

$$c_k = e^2 \int d\tau_j \frac{1}{r_{ij}} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ij}\right) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{k}^2} \text{ при } \mathbf{k} \neq 0$$

$$c_0 = e^2 \int \frac{d\tau_j}{r_{ij}}.$$

Таким образом, (2) преобразуется к виду

$$U(\mathbf{r}_l) = \sum_{j,k}{}' \frac{4\pi e^2}{\mathbf{k}^2} \exp\left[i\mathbf{k}\left(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j\right)\right]. \tag{3}$$

Знак «штрих» у суммы указывает на то, что отсутствуют слагаемые с $l = j$ и $\mathbf{k} = 0$.

Кинетическая энергия электронов имеет обычный вид

$$K = \frac{m}{2} \sum_l \mathbf{v}_l^2 . \tag{4}$$

Из выражений (3), (4) следует уравнение движения для отдельных электронов

$$m\dot{\mathbf{v}}_l = -i4\pi e^2 \sum_j{}' \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{lj}\right). \tag{5}$$

Чтобы получить уравнение для плотности электронов, проведем предварительно Фурье-преобразования

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}\right), \qquad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}\right).$$

Тогда, используя обратные преобразования Фурье, имеем

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_l \exp\left(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l\right), \quad \rho_0 = \nu_0, \quad \mathbf{j}_{\mathbf{k}} = \sum_l \mathbf{v}_l \exp\left(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l\right) \tag{6}$$

Применяя к (6) уравнение непрерывности

$$\dot{\rho} + div\mathbf{j} = 0,$$

получим уравнения

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}} = -\sum_l i\left(\mathbf{k}\mathbf{v}_l\right)\exp\left(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l\right), \tag{7}$$

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}} = -\sum_l \left[\left(\mathbf{k}\mathbf{v}_l\right)^2 + i\left(\mathbf{k}\dot{\mathbf{v}}_l\right)\right] i\exp\left(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l\right).$$

Подставив в последнее равенство значение $\dot{\mathbf{v}}_l$ из (5), находим, используя (6)

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}} = -\frac{4\pi e^2}{m}\sum_{\mathbf{q}}{}' \frac{\mathbf{k}\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \sum_l \left(\mathbf{k}\mathbf{v}_l\right)^2 \exp\left(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l\right). \tag{8}$$

Если в первом слагаемом правой части этого равенства выделить слагаемое $\mathbf{q} = \mathbf{k}$, то оставшуюся сумму $\sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{k}}{}' \frac{\mathbf{k}\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ можно опустить, так как она содержит большое число малых знакопеременных слагаемых. Отбрасывая эту сумму, мы пренебрегаем связью между изменениями Фурье-образов плотностей, относящихся к разным длинам волн. Такое приближение называется **приближением беспорядочных фаз**. Используя это приближение, преобразуем уравнение (8) к виду

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}} + \omega_p^2 = -\sum_l \left(\mathbf{k}\mathbf{v}_l\right)^2 \exp\left(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l\right), \tag{9}$$

где по-прежнему

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

Правая часть этого уравнения зависит от скоростей электронов и при абсолютном нуле. Это движение оказывает разупорядочивающее действие на коллективные плазменные колебания. Его влияние тем меньше, чем меньше $\mathbf{k}$. Для оценки значений $\mathbf{k}$, при которых можно пренебречь правой частью (9), можно заменить $\mathbf{v}_l$ максимальным значением скорости (скорость Ферми)

$$v_0 = \frac{\hbar}{m}\left(3\pi^2\nu_0\right)^{1/3},$$

где ν_0 - плотность электронов. Тогда

$$\sum_l \left(\mathbf{kv}_l\right)^2 \exp\left(-i\mathbf{kr}_l\right) < v_0^2 \mathbf{k}^2 \rho_{\mathbf{k}}.$$

Следовательно, при выполнении неравенства

$$\mathbf{k}^2 < \mathbf{k}_c^2 \equiv \frac{\omega_p^2}{v_0^2} \approx 6\frac{v_0^{1/3}}{a_B},\ a_B \approx 5{,}3\cdot 10^{-9} cm \qquad (10)$$

уравнение (9) переходит в уравнение коллективных плазменных колебаний

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}} + \omega_p^2 = 0.$$

При выполнении неравенства (10) фазовая скорость плазмонов ω_p / k превышает максимальную скорость электронов. Поэтому переход энергии плазмонов в энергию отдельных электронов невозможен. Затухание плазмонов в твердом теле обусловлено взаимодействием с колебаниями решетки, с примесями и другими неоднородностями решетки.

Значение k, определяемое (10), можно принять за верхню границу волновых векторов плазмонов. Таким образом, волновые векторы плазмонов занимают центральную область зоны Бриллюэна объема $\frac{4\pi k_c^3}{V}$. Так как на долю одного вектора приходится объем $\frac{(2\pi)^3}{V}$, то в кристалле может быть $\frac{Vk_c^3}{6\pi^2}$ плазмонов.

Элементарные возбуждения с $\mathbf{k}^2 > \mathbf{k}_c^2$ не имеют коллективного характера. При этих возбуждениях электронный газ следует рассматривать как систему отдельных квазичастиц с потенциальным взаимодействием

$$U_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{l\neq j} \sum_{\mathbf{k}>\mathbf{k}_c} \frac{4\pi e^2}{\mathbf{k}^2} \exp\left(i\mathbf{kr}_{lj}\right). \qquad (11)$$

Итак, неучтенные в плазменных колебаниях взаимодействия электронов, расположенных на расстоянии $\mathbf{r}$ друг от друга, определяются выражением

$$U_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}>\mathbf{k}_c} \frac{4\pi e^2}{\mathbf{k}^2} \exp\left(i\mathbf{kr}\right). \qquad (12)$$

Переходя в этом выражении от суммирования по $\mathbf{k}$ к интегрированию, получим

$$U_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{2\pi^2} \int_{k>k_c} d^3k \frac{\exp(i\mathbf{kr})}{k} = \frac{2e^2}{\pi} \int_{k_c}^{\infty} dk \frac{\sin(kr)}{kr} \approx \frac{e^2}{r} \exp(-k_c r). \quad (13)$$

Таким образом, взаимодействие между электронами проявляется только на малых расстояниях $r < k_c^{-1}$. Выражение

$$\frac{e}{r} \exp(-k_c r)$$

Называется экранированным кулоновским потенциалом заряда e. Значению

$$\mathbf{k}_c^2 \equiv \frac{\omega_p^2}{v_0^2} = \frac{2\pi e^2 n_0}{E_F},$$

где $E_F = \frac{1}{2} m\mathbf{v}_0^2$ - энергия Ферми, соответствует квадрат радиуса экранирования (радиус экранирования Томаса - Ферми)

$$\lambda_{TF}^2 = \frac{E_F}{2\pi e^2 v_0}.$$

При вычислении λ_{TF}^2 мы исходили из предположения, что плотность электронов в металле велика, и они занимают все состояния с энергией $E < E_F$ (вырождение).

В полупроводниках плотность электронов мала и вырождение не осуществляется. Распределение электронов по энергиям определяется законом Больцмана. Взаимодействие электронов экранируется и в этом случае так, что кулоновское взаимодействие $e^2 / \varepsilon_0 r$ заменяется экранированным кулоновским взаимодействием

$$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D} \right),$$

где λ_D - дебаевский радиус экранирования

$$\lambda_D^2 = \varepsilon_0 \kappa T / 4\pi v_0 e^2.$$