

## Плазмоны, оптические фононы и поляризационные волны

В этой главе несколько важных эффектов будет рассмотрено на простых примерах.

а. Спектр возбуждений фононов, состоящий из  $3s$  ветвей, если элементарная ячейка кристалла содержит  $s$  атомов или ионов. Три ветви фононного спектра, частота которых стремится к нулю при уменьшении до нуля волнового вектора, называются акустическими. Остальные  $3s - 3$  ветви фононного спектра называются оптическими; при  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  собственные частоты для этих ветвей имеют конечные значения.

б. Кристалл, каждая элементарная ячейка которого содержит два иона, имеющих равные, но противоположные по знаку заряды. Кулоновское взаимодействие, играющее важную роль и на больших расстояниях между ионами, будет значительно увеличивать частоту продольных колебаний, соответствующих оптической ветви, по сравнению с частотами поперечных колебаний той же оптической ветви. Появление плазменной частоты в электронном газе с положительно заряженным фоном можно рассматривать как предельный случай этого эффекта.

в. При некоторых обстоятельствах длинноволновые поперечные колебания оптической ветви оказываются сильно связанными друг с другом и взаимодействуют с электромагнитным полем. Это оказывает сильное влияние на характер дисперсионных законов.

Таким образом, ниже мы будем иметь дело с полями, обусловленными смещением зарядов одного знака относительно зарядов другого знака.

В качестве первого примера рассмотрим электронный газ в металле. Это детальнее обсуждается в гл. 5 и 6. Мы обсудим также вопрос об оптических фононах в ионных кристаллах как в отсутствие электромагнитного поля, так и при наличии его.

### Плазмоны

Рассмотрим модель электронного газа в виде непрерывной среды с неподвижным статическим фоном положительного заряда. Такая модель является, конечно, приближенной, но она

позволяет описать некоторые основные черты проблемы определения собственных частот системы при наличии кулоновского взаимодействия, когда надо учитывать взаимодействия на больших расстояниях. Пусть в единице объема электронного газа содержится  $n$  электронов. В этом объеме однородно распределены создающие фон неподвижные положительные заряды с плотностью  $\rho_0 = n|e|$ , т. е. с плотностью, равной и противоположной по знаку средней плотности электронов. В нашем приближении на сдвиговые волны не действуют какие-либо восстанавливающие силы, поскольку такие волны не изменяют локальной нейтральности системы. Следовательно, поперечные собственные колебания отсутствуют. Продольные волны в плазме вызывают разрежения и сжатия в электронном газе, нарушая тем самым нейтральность и вводя в игру мощные кулоновские силы, восстанавливающие нарушение. Собственные частоты продольных колебаний, называемые плазменными частотами, — это довольно высокие частоты.

Плотность гамильтониана в этом случае можно записать аналогично (2.72), включив туда электростатические члены и опуская сдвиговые:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2nm} \Pi_\mu \Pi_\mu + \frac{1}{2} \alpha \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\mu} \frac{\partial R_\nu}{\partial x_\nu} + \frac{1}{2} (\rho - \rho_0) \varphi(\mathbf{x}), \quad (3.1)$$

где  $nm$  — плотность массы газа; разрежения  $\Delta$  записаны как  $\partial R_\mu / \partial x_\mu$ ,  $\alpha$  — упругий модуль среды для случая, когда газ можно считать незаряженным,  $\varphi$  — электростатический потенциал, определяемый уравнением Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi(\rho - \rho_0). \quad (3.2)$$

Множитель  $1/2$  в последнем члене правой части выражения (3.1) появляется потому, что электростатический член представляет собой как раз собственную энергию электронного газа. Положительный фон точно компенсируется однородной ( $\mathbf{k}=0$ ) компонентой плотности отрицательного заряда, как это будет детально показано в гл. 5.

Для малых локальных разрежений электронного газа флуктуации плотности заряда  $\delta\rho = \rho - \rho_0$  определяются соотношением

$$\frac{\delta\rho}{\rho} = -\Delta(\mathbf{x}). \quad (3.3)$$

Итак,

$$\delta\rho = -\rho\Delta = -ne \frac{\partial R_\mu}{\partial x_\mu}. \quad (3.4)$$

Воспользовавшись соотношением (2.73) для продольных волн ( $Q_k \parallel k$ ), получим

$$R(x) = \sum_k Q_k e^{ik \cdot x} \quad (3.5)$$

и

$$\delta\rho = -ine \sum_k k Q_k e^{ik \cdot x}. \quad (3.6)$$

Потенциал  $\varphi$  представим в виде

$$\varphi = \sum_k \varphi_k e^{ik \cdot x}, \quad (3.7)$$

так что

$$\nabla^2 \varphi = - \sum_k k^2 \varphi_k e^{ik \cdot x}. \quad (3.8)$$

Тогда уравнение Пуассона дает

$$\varphi_k = 4\pi ne Q_k / k. \quad (3.9)$$

После интегрирования по объему получим для электростатического члена в (3.1)

$$\int d^3x \frac{1}{2} (\rho - \rho_0) \varphi = - \sum_{kk'} \int d^3x 2\pi n_0^2 e^2 Q_k Q_{k'} \times \\ \times \exp[i(k+k') \cdot x] \cdot (k/k') = 2\pi n^2 e^2 \sum_k Q_k Q_{-k}. \quad (3.10)$$

Наконец, вводя плотность импульса согласно (2.75), имеем

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \left( \frac{1}{nm} P_k P_{-k} + \alpha k^2 Q_k Q_{-k} + 4\pi n^2 e^2 Q_k Q_{-k} \right). \quad (3.11)$$

Из прямой аналогии с решением (2.81) находим

$$\boxed{\omega_k^2 = \omega_p^2 + \frac{\alpha}{nm} k^2, \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}.} \quad (3.12)$$

Это дисперсионный закон для плазмонов. Величину  $\omega_p$  обычно называют плазменной частотой. Возбуждение одного собственного колебания с энергией  $\omega_k$  описывается как возбуждение плазмона. В пределе  $e^2 \rightarrow 0$  электростатические эффекты исчезают, и мы приходим к обычному дисперсионному закону для фононов в газе  $\omega = (\alpha/nm)^{1/2} k$ . Для электронов в щелочном металле  $n \approx 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ,  $m \approx 10^{-27} \text{ г}$ , откуда  $\omega_p \approx 10^{16} \text{ сек}^{-1}$ ; если величину  $(\alpha/nm)^{1/2}$  принять равной скорости звука в твердом теле, а значение волнового вектора  $k$  взять близким к его вероятному максимальному значению  $10^8 \text{ см}^{-1}$ , то член  $(\alpha/nm)k^2$

в (3.12) можно считать пренебрежимо малым по сравнению с  $\omega_p^2$ .

Выражение для  $\omega_p$  — частоты однородных ( $k=0$ ) колебаний — легко получить прямым расчетом. Пусть величина смещения электронного газа составляет  $x$ ; тогда диэлектрическая поляризация  $P = nex$ . Рассмотрим образец в виде плоской пластинки и будем считать, что смещение нормально к плоскости пластинки; тогда поляризация определяется величиной деполяризующего поля  $E_d = -4\pi P = -4\pi nex$ . Уравнение движения электрона в плазме имеет вид

$$m\ddot{x} = eE_d = -4\pi ne^2x, \quad (3.13)$$

и, следовательно, для резонансной частоты получим

$$\omega^2 = \frac{4\pi ne^2}{m} \equiv \omega_p^2. \quad (3.14)$$

Резонансная частота однородных колебаний зависит от геометрической формы образца. Если длина волны плазмона становится малой по сравнению с размерами образца, то влияние формы исчезает.

Теперь кратко рассмотрим вопрос о диэлектрической проницаемости, соответствующей однородным плазменным колебаниям. Если переменное электрическое поле  $E$  частоты  $\omega$  наложено параллельно поверхности плоского образца плазмы, то можно считать, что деполяризующее поле отсутствует. Тогда

$$m\ddot{x} = eE, \quad x = -\frac{eE}{m\omega^2}, \quad P = -\frac{ne^2E}{m\omega^2}, \quad (3.15)$$

и для диэлектрической проницаемости имеем

$$\epsilon = 1 + 4\pi \frac{P}{E} = 1 - \frac{4\pi ne^2}{m\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (3.16)$$

Если  $\omega \gg \omega_p$ , то проницаемость  $\epsilon$  положительна и показатель преломления  $n = \epsilon^{1/2}$  — вещественная величина. Тогда пороговая частота для прозрачности металла в ультрафиолетовой области равна  $\omega = \omega_p$ . При этом мы пренебрегаем поляризацией ионных остовов, которая не относится к плазменным эффектам. Если электрическое поле  $E$  приложено перпендикулярно плоскости образца, то, обозначая внутреннее поле через  $E_{\text{вн}}$ , имеем  $E_{\text{вн}} = E - 4\pi P = E - 4\pi\chi E_{\text{вн}}$  и, согласно (3.13),

$$m\ddot{x} = eE_{\text{вн}}, \quad E_{\text{вн}} = \frac{E}{1 + 4\pi\chi} = \frac{E}{\epsilon}. \quad (3.17)$$

Тогда

$$x = -\frac{eE}{m(\omega^2 - \omega_p^2)}. \quad (3.18)$$

Свободные колебания системы, параллельные плоскости пластинки (поперечные), описываются полюсами функции  $\epsilon$ , а свободные колебания, перпендикулярные плоскости пластинки (продольные), — нулями этой функции.

### Длинноволновые оптические фононы в изотропном кристалле <sup>1)</sup>

В связи с рассмотрением оптических фононов представляет интерес обсудить следующие три вопроса:

а. Спектр колебаний кристалла, содержащего  $s$  неэквивалентных ионов в элементарной ячейке, будет иметь три ветви (одна — в основном продольные колебания, и две — в основном поперечные), частоты которых стремятся к нулю при  $k \rightarrow 0$ . Эти ветви называются *акустическими*. Кроме того, будет существовать  $3(s-1)$  ветвей, частоты которых при  $k \rightarrow 0$  имеют конечные предельные значения. Эти ветви называются *оптическими*. При обычном макроскопическом анализе, например анализе типа, приведенного в гл. 2 и выполненного на основе формулы (2.71), оптические колебания не выявляются. В ионных кристаллах, имеющих два иона на элементарную ячейку, таких, как NaCl, из трех оптических ветвей в области длинных волн одну можно приближенно считать продольной, а остальные две поперечными.

б. Предельная (при  $k \rightarrow 0$ ) частота  $\omega_l$  продольной ветви в силу электростатических эффектов заметно больше предельных частот  $\omega_t$  поперечных волн; приближенная теория дает соотношение

$$\omega_l^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \omega_t^2, \quad (3.19)$$

где  $\epsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость, а  $\epsilon_\infty$  — квадрат оптического показателя преломления.

в. Электромагнитная связь между фононами и фотонами особенно заметна для длинноволновых поперечных оптических фононов. В этой области имеется интервал запрещенных частот между  $\omega_t$  и  $\omega_l$ ; электромагнитное излучение, частота которого попадает в данный интервал, не проходит через кристалл. В области запрещенных частот фононов наблюдается полоса сильного оптического отражения.

Рассмотрим теперь эти вопросы, но не будем особенно вдаваться в детали, которые читатель может найти в книге Борна и Хуан Куна [1] и в работе Лиддена и Герцфельда [2]. При  $k=0$  нормальные колебания имеют простую форму: соответствующие ионы в каждой ячейке, по определению ( $k=0$ ), ко-

<sup>1)</sup> Основным источником служит монография Борна и Хуан Куна [1].

леблются в фазе и с одной и той же амплитудой. Для  $s$  ионов в элементарной ячейке можно написать  $3s$  уравнений движения.

Три типа колебаний соответствуют неискаженному перемещению ячейки как целого, и следовательно, частоты этих колебаний равны нулю. Это — предельные значения частот акустических колебаний. Остальные  $3(s - 1)$  типов колебаний с  $k=0$  оптические. Они представляют собой перемещения ионов относительно друга внутри ячейки или вращения группы ионов в той же ячейке. Частоты всех этих  $3(s - 1)$  типов колебаний при  $k=0$  вообще не обращаются в нуль.

Частоты длинноволновых поперечных и продольных оптических колебаний различны. В случае ионных кристаллов кубической структуры можно оценить их значения при помощи элементарного расчета. Поперечные оптические колебания в кристалле, содержащем два иона на элементарную ячейку, например, NaCl или CsCl, схематически изображены на рис. 3.1, а. Обозначив через

$$u = u_+ - u_- \quad (3.20)$$

относительное смещение подрешеток положительных и отрицательных ионов, получим уравнение движения для поперечных колебаний в виде

$$M\ddot{u} + M\omega_i^2 u = 0, \quad (3.21)$$

где  $M$  — приведенная масса,  $\omega_i$  — резонансная частота поперечных колебаний. Мы предположили, что длина волны значительно меньше размеров образца, но достаточно велика по сравнению с межатомным расстоянием.

Продольные оптические колебания схематически изображены на рис. 3.1, б. Возвращающая сила, действующая на ион

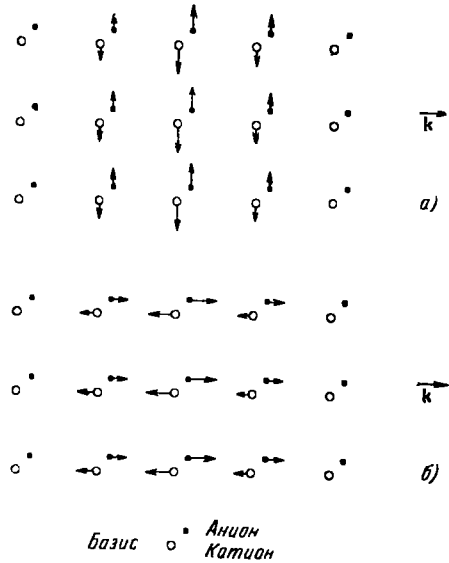


Рис. 3.1. Схематическое изображение модели ионного кристалла, в котором происходят упругие колебания, соответствующие оптической ветви частот.

а — поперечные колебания, б — продольные колебания. Направления смещений ионов обоих типов показаны стрелками.

в этом случае, равна уже не  $-\omega_i^2 M u$ , а величине

$$-\omega_i^2 M u = -\omega_i^2 M u + E_i e, \quad (3.22)$$

где  $E$  — внутреннее электрическое поле, возникающее при деформации. Поле электрической индукции  $D=0=E_i+4\pi P$  и, следовательно,  $E_i = -4\pi P$ . Если пренебречь индуцированной поляризацией ионов, считая их внутренне жесткими, то  $P = enu$ , где  $n$  — число ячеек на единицу объема. Тогда возвращающая сила равна  $-\omega_i^2 M u - 4\pi n^2 e u$  и, следовательно,

$$\omega_i^2 = \omega_i^2 + \frac{4\pi e n^2}{M}. \quad (3.23)$$

Полагая  $n = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ ,  $M = 10^{-22} \text{ г}$ ,  $e^2 \approx 25 \cdot 10^{-20}$  (эл. ст. ед)<sup>2</sup>, получим  $(4\pi n e^2 / M)^{1/2} \approx 10^{13} \text{ сек}^{-1}$ , т. е. величину того же порядка, что и  $\omega_i$ . Если ионы не считают жесткими, то можно прийти к тому же выражению (3.23), только вместо  $e$  придется писать эффективный заряд  $e^*$ .

Излагаемая здесь макроскопическая теория оптических колебаний в двухатомных кристаллах была предложена Хуан Кунем. Для оптических колебаний при  $k=0$  введем координату

$$w = \frac{(u^+ - u^-)}{(Mn)^{1/2}}, \quad (3.24)$$

где  $u^+ - u^-$  — относительное смещение подрешеток положительных и отрицательных ионов,  $M = \frac{M_+ M_-}{M_+ + M_-}$  — приведенная масса;  $n$  — число ячеек на единицу объема. Заметим, что величину  $Mn$  можно рассматривать как эффективную плотность приведенной массы. Плотность кинетической энергии, соответствующей движению одной подрешетки по отношению к другой, можно тогда записать в виде  $(1/2) \dot{w}^2$ . Плотность потенциальной энергии может содержать члены с  $w^2$ ,  $E^2$  и  $w \cdot E$ , где  $E$  — макроскопическое внутреннее электрическое поле. Рассмотрим более общий случай, когда ионы могут обладать индуцированной поляризацией (т. е. нежесткие ионы). Для плотности лагранжиана имеем

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{w}^2 - \left( \frac{1}{2} \gamma_{11} w^2 - \gamma_{12} w \cdot E - \frac{1}{2} \gamma_{22} E^2 \right), \quad (3.25)$$

где  $\gamma_{11}$ ,  $\gamma_{12}$ ,  $\gamma_{22}$  — константы, смысл которых будет выяснен ниже. Пользуясь (3.25) для составления уравнений Лагранжа, получим уравнения движения

$$\ddot{w} + \gamma_{11} w - \gamma_{12} E = 0. \quad (3.26)$$

Соответствующая  $\mathbf{w}$  плотность импульса равна

$$\Pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{w}}} = \dot{\mathbf{w}},$$

а плотность гамильтониана —

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \Pi^2 + \frac{1}{2} \gamma_{11} \mathbf{w}^2 - \gamma_{12} \mathbf{w} \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{2} \gamma_{22} \mathbf{E}^2. \quad (3.27)$$

Для поляризации, по определению, имеем

$$\mathbf{P} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{E}} = \gamma_{12} \mathbf{w} + \gamma_{22} \mathbf{E}. \quad (3.28)$$

Выразим  $\gamma_{11}$ ,  $\gamma_{12}$ ,  $\gamma_{22}$  через более привычные константы  $\epsilon_0$ ,  $\epsilon_\infty$  и  $\omega_i$ . При поперечных оптических колебаниях не возникает деполяризующего поля  $\mathbf{E}$ , и поэтому (3.26) примет вид  $\ddot{\mathbf{w}}_t + \gamma_{11} \mathbf{w}_t = 0$ . Это уравнение идентично уравнению  $\ddot{\mathbf{w}} + \omega_i^2 \mathbf{w} = 0$ , откуда

$$\gamma_{11} = \omega_i^2. \quad (3.29)$$

В статическом случае  $\mathbf{w} = 0$ ; наложение внешнего статического электрического поля приводит, согласно (3.26), к величине смещения  $\mathbf{w}$ , определяемой соотношением  $\mathbf{w} - \frac{\gamma_{12}}{\gamma_{11}} \mathbf{E} = 0$ . Подставляя в (3.28) величину  $\mathbf{w} = \frac{\gamma_{12}}{\gamma_{11}} \mathbf{E}$ , получим для статического случая

$$\mathbf{P} = \left[ \frac{\gamma_{12}^2}{\gamma_{11}} + \gamma_{22} \right] \mathbf{E} = \frac{\epsilon_0 - 1}{4\pi} \mathbf{E}, \quad (3.30)$$

где  $\epsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость. При очень больших частотах величина  $\mathbf{w} \rightarrow 0$  и

$$\mathbf{P} = \gamma_{22} \mathbf{E} = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \mathbf{E}, \quad (3.31)$$

где величина  $\epsilon_\infty$  определяется электронной поляризуемостью. Итак, имеем

$$\gamma_{22} = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \quad (3.32)$$

и

$$\gamma_{12} = \left( \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \omega_i. \quad (3.33)$$

Для длинноволновых продольных оптических колебаний в отсутствие внешнего поля имеем  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = 0$ . Тогда (3.28) дает

$$\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = (1 + 4\pi \gamma_{22}) \mathbf{E} + 4\pi \gamma_{12} \omega_i = 0. \quad (3.34)$$



а уравнение движения (3.26) примет вид

$$\ddot{\omega}_l + \left( \gamma_{11} + \frac{4\pi\gamma_{12}^2}{1 + 4\pi\gamma_{22}} \right) \omega_l = 0, \quad (3.35)$$

или

$$\omega_l^2 = \gamma_{11} + \frac{4\pi\gamma_{12}^2}{1 + 4\pi\gamma_{22}} = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \omega_l^2. \quad (3.36)$$

Этот результат, впервые полученный Лидденом, Саксом и Теллером, согласуется с (3.23), поскольку там мы неявно полагаем  $\epsilon_\infty = 1$ . Используя экспериментальные значения  $\omega_l = 3,09 \cdot 10^{13} \text{ сек}^{-1}$  и считая  $\epsilon_0 = 5,02$ ,  $\epsilon_\infty = 2,25$ , можно получить для NaCl величину  $\omega_l = 4,87 \cdot 10^{13} \text{ сек}^{-1}$ .

### Взаимодействие оптических фононов с фотонами

В изложенной выше проблеме оптических колебаний решетки при  $\mathbf{k} = 0$  мы пренебрегали взаимодействием оптических фононов с фотонами (т. е. с электромагнитным полем). Это взаимодействие становится особенно существенным, когда частоты (и волновые векторы) фононных и фотонных полей совпадают. Даже при слабом взаимодействии этих полей в области пересечения дисперсионных кривых могут иметь место существенные эффекты. Мы не будем здесь рассматривать зависимость  $\omega$  от  $\mathbf{k}$  для невзаимодействующих оптических фононов; кстати, в области  $k \approx 0$  эта зависимость обычно не очень сильна. Решения для независимых фононов в одномерном случае описаны в книге автора [3]. Дисперсионный закон для фотонов имеет вид  $\omega = ck$ , где  $c$  — скорость света. Очевидно, что его график — прямая — пересечет в какой-то точке дисперсионную кривую для оптических фононов (точнее — каждую из оптических ветвей).

Наша задача состоит в том, чтобы решить уравнения Максвелла

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H} &= \frac{1}{c} (\dot{\mathbf{E}} + 4\pi\dot{\mathbf{P}}), & \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{H}}, \\ \text{div } \mathbf{H} &= 0, & \text{div } (\mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}) &= 0 \end{aligned}$$

совместно с уравнениями движения решетки

$$\ddot{\mathbf{w}} + \gamma_{11}\mathbf{w} - \gamma_{12}\mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{P} = \gamma_{12}\mathbf{w} + \gamma_{22}\mathbf{E}.$$

Сначала будем искать решения, соответствующие поперечным колебаниям  $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$ , считая, что фотонное поле имеет такой же характер, как и в свободном пространстве. А именно,

предположим, что

$$E_x = E_x(0) \exp[i(\omega t - kz)], \quad P_x = P_x(0) \exp[i(\omega t - kz)], \\ \omega_x = \omega_x(0) \exp[i(\omega t - kz)], \quad H_y = H_y(0) \exp[i(\omega t - kz)].$$

После подстановки этих решений в дифференциальные уравнения, получим

$$ikH_y = \frac{i\omega}{c} (E_x + 4\pi P_x), \quad -ikE_x = -\frac{i\omega}{c} H_y, \\ (-\omega^2 + \gamma_{12}) \omega_x = \gamma_{12} E_x, \quad P_x = \gamma_{12} \omega_x + \gamma_{22} E_x.$$

Эти уравнения имеют нетривиальные решения лишь в том случае, если детерминант, составленный из коэффициентов при неизвестных  $E_x$ ,  $H_y$ ,  $P_x$  и  $\omega_x$ , равен нулю:

$$\begin{vmatrix} \frac{\omega}{c} & \frac{4\pi\omega}{c} & -k & 0 \\ k & 0 & -\frac{\omega}{c} & 0 \\ \gamma_{12} & 0 & 0 & \omega^2 - \gamma_{11} \\ \gamma_{22} & -1 & 0 & \gamma_{12} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.37)$$

Раскрывая детерминант, получим

$$\omega^4 \epsilon_\infty - \omega^2 (\omega_i^2 \epsilon_0 + c^2 k^2) + \omega_i^2 c^2 k^2 = 0, \quad (3.38)$$

где  $\omega_i^2$ , согласно (3.29), следует рассматривать как обозначение для  $\gamma_{11}$ , а  $\epsilon_\infty$  и  $\epsilon_0$  — величины, определенные соотношениями (3.32) и (3.33). Решение уравнения (3.38) запишется в виде

$$\omega^2 = \frac{1}{2\epsilon_\infty} (\omega_i^2 \epsilon_0 + c^2 k^2) \pm \left[ \frac{1}{4\epsilon_\infty^2} (\omega_i^2 \epsilon_0 + c^2 k^2)^2 - \omega_i^2 k^2 \left( \frac{c^2}{\epsilon_\infty} \right) \right]^{1/2}. \quad (3.39)$$

В пределе  $k \rightarrow 0$  находим следующие решения для частот:

$$\omega^2 = \omega_i^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} = \omega_i^2 \quad (3.40)$$

и

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\epsilon_0} k^2. \quad (3.41)$$

Двукратное вырождение каждого из этих решений отражает тот факт, что вектор  $E$  имеет две независимые ориентации в плоскости, нормальной к  $k$ . Для случая больших значений  $k$  имеем решения

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\epsilon_\infty} k^2, \quad \omega^2 = \omega_i^2. \quad (3.42)$$

На рис. 3.2 можно видеть, что нижняя ветвь в области малых  $k$  близка к прямой, описывающей линейную зависимость для фотонов, а при больших  $k$  приближается к горизонтальной прямой, соответствующей фоновой частоте  $\omega_f$ . Верхняя ветвь при малых  $k$  сначала сходна с фоновой кривой для  $\omega_f$  (даже для поперечных фононов), а затем, при больших  $k$ , сливается с фотонной прямой.

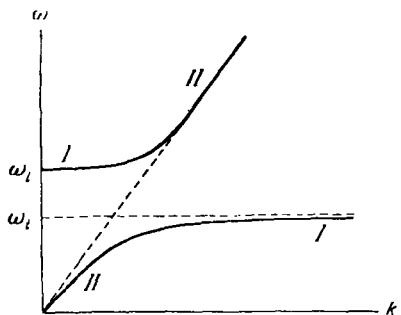


Рис. 3.2. Зависимость частоты от волнового числа при взаимодействии фотонов с поперечными оптическими фононами в ионном кристалле.

Пунктирные линии показывают ход той же зависимости в отсутствие взаимодействия. *I* — участки кривой, где ход этой зависимости  $\omega(k)$  близок к фоновому; *II* — участки кривой, где он близок к фотонному.

Для значений частот между  $\omega_f$  и  $\omega_i$  никаких решений, соответствующих поперечным волнам, не существует; в этой области частот не существует и решения, соответствующего продольным волнам, поскольку в изотропной среде фотонное поле является чисто поперечным. Таким образом, между  $\omega_f$  и  $\omega_i$  имеется запрещенная полоса частот, на которых передача энергии сквозь кристалл невозможна. Это было установлено и экспериментально (с соответствующими поправками на затухание). Полоса запрещенных частот обнаруживается по области частот, при которых наблюдается высокая отражательная способность.

Решения, соответствующие продольным волнам, можно получить, полагая  $E_z, P_z, \omega_z \sim \exp[i(\omega t - kz)]$ . Тогда  $E_z + 4\pi P_z = 0$  и  $\mathbf{H} = 0$ . В результате мы получим (3.35) и (3.36) точно такими же, как и в отсутствие запаздывания. Таким образом, в этом случае отсутствует эффективная связь между фотонным полем и полем продольных фононов.

**Квантовая теория классического диэлектрика**<sup>1)</sup>. Рассмотрим ту же проблему методами квантовой теории поля в качестве упражнения в освоении задачи о квантовании взаимодействующих полей. Мы не будем обсуждать какие-либо специфически квантовые эффекты. Вблизи области пересечения дисперсионных кривых (т. е. кривых, изображающих зависимость  $\omega$  от  $k$ ), соответствующих случаю отсутствия взаимодействия фотонного поля и поля оптических фононов, при наличии даже слабой связи должны, как уже отмечалось, обнаруживаться заметные

<sup>1)</sup> См. [4, 5].

эффекты, обусловленные «смешиванием» механического и электромагнитного полей. Для изотропных сред и для кубических кристаллов такие эффекты имеют место только для поперечных оптических фононов, поскольку только они могут взаимодействовать с электромагнитным полем, которое в изотропных средах всегда поперечно.

В случае бесконечной классической диэлектрической среды из жестких ионов плотность лагранжиана электромагнитного поля можно записать в виде

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} \left( \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} + \text{grad } \varphi \right)^2 - \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2\chi} (\dot{\mathbf{P}}^2 - \omega_0^2 \mathbf{P}^2) - \mathbf{P} \cdot \left( \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} + \text{grad } \varphi \right), \quad (3.43)$$

где  $\chi$  — константа, которая в гауссовой системе единиц имеет размерность квадрата частоты. Уравнения движения Лагранжа для полевых переменных  $\mathbf{A}$ ,  $\varphi$  и  $\mathbf{P}$  эквивалентны уравнениям Максвелла, дополненным уравнением непрерывности, т. е.

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P_\alpha} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{P}_\alpha} + \frac{\partial}{\partial X_\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left( \frac{\partial P_\alpha}{\partial X_\mu} \right)} = \frac{1}{\chi} (\ddot{P}_\alpha + \omega_0^2 P_\alpha) + \left( \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} + \text{grad } \varphi \right)_\alpha = 0, \quad (3.44)$$

или, поскольку  $\mathbf{E} \equiv -(1/c) \dot{\mathbf{A}} - \text{grad } \varphi$ ,

$$\ddot{P}_\alpha + \omega_0^2 P_\alpha = \chi E_\alpha. \quad (3.45)$$

В кулоновской калибровке с  $\text{div } \mathbf{A} = 0$  уравнение движения для  $\varphi$  записывается в виде

$$-\text{div} (\text{grad } \varphi - 4\pi \mathbf{P}) = \text{div} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = 0. \quad (3.46)$$

В той же калибровке уравнение движения для  $A_\alpha$  имеет вид

$$\nabla^2 A_\alpha - \frac{1}{c^2} \ddot{A}_\alpha = \frac{1}{c} [(\nabla \varphi)_\alpha - 4\pi \dot{P}_\alpha]. \quad (3.47)$$

Поскольку, по определению,  $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ , то мы завершили получение из лагранжиана уравнений Максвелла и уравнения (3.44). Для модели диэлектрика с жесткими ионами (отсутствие электронной поляризуемости) последнее эквивалентно дисперсионному закону

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi\chi}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (3.48)$$

Выше мы установили, что продольные волны поля диэлектрической поляризации не взаимодействуют с фотонами, и

поэтому они нас сейчас не интересуют. Можно опустить  $\varphi$ . Тогда выражение для плотности лагранжиана примет вид

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi c^2} \dot{\mathbf{A}}^2 - \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2\chi} (\dot{\mathbf{P}}^2 - \omega_0^2 \mathbf{P}^2) - \mathbf{P} \cdot \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}. \quad (3.49)$$

Импульс  $\mathbf{M}$ , сопряженный с  $\mathbf{A}$ , определяется соотношением

$$M_\alpha \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_\alpha} = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_\alpha - \frac{1}{c} P_\alpha, \quad (3.50)$$

и аналогично для  $\mathbf{\Pi}$  имеем

$$\Pi_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{P}_\alpha} = \frac{1}{\chi} \dot{P}_\alpha. \quad (3.51)$$

Для плотности гамильтониана получим

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = M_\alpha \dot{A}_\alpha + \Pi_\alpha \dot{P}_\alpha - \mathcal{L} = 2\pi c^2 \mathbf{M}^2 + \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \mathbf{A})^2 + \\ + \frac{\chi}{2} \mathbf{\Pi}^2 + \left(2\pi + \frac{\omega_0^2}{2\chi}\right) \mathbf{P}^2 + 4\pi c \mathbf{M} \cdot \mathbf{P}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Теперь введем разложения в ряды Фурье с учетом периодических граничных условий (на единицу объема):

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left(\frac{2\pi c}{k}\right)^{1/2} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} (a_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + a_{\mathbf{k}\lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}), \quad (3.53)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left[ \frac{\chi}{2(4\pi\chi + \omega_0^2)^{1/2}} \right]^{1/2} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} (b_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + b_{\mathbf{k}\lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}); \quad (3.54)$$

здесь  $\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}$  — единичный вектор в направлении поляризации волны;  $\lambda$  — индекс поляризации;  $a$ ,  $a^+$  и  $b$ ,  $b^+$  имеют свойства бозе-операторов. Детали расчета можно узнать из цитированной выше работы Хопфилда [4]. Полагая  $\beta = \chi/\omega_0^2$ , получим для гамильтониана следующее выражение:

$$\begin{aligned} H = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ ck \left( a_{\mathbf{k}\lambda}^+ a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \omega_0 (1 + 4\pi\beta)^{1/2} \left( b_{\mathbf{k}\lambda}^+ b_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \right. \\ \left. + i [\pi c k \beta \omega_0 / (1 + 4\pi\beta)^{1/2}] (a_{\mathbf{k}\lambda}^+ b_{\mathbf{k}\lambda} - a_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}^+ - a_{-\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda} + a_{-\mathbf{k}\lambda}^+ b_{\mathbf{k}\lambda}^+) \right\}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Теперь задача поставлена, однако ее решение мы изложим лишь схематически. Гамильтониан диагонализуется введением операторов уничтожения

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \omega a_{\mathbf{k}} + x b_{\mathbf{k}} + y a_{-\mathbf{k}}^+ + z b_{-\mathbf{k}}^+, \quad (3.56)$$

где  $\omega$ ,  $x$ ,  $y$ ,  $z$  выбираются так, чтобы выполнялось соотношение

$$[\alpha_k, H] = \omega_k \alpha_k. \quad (3.57)$$

Решение задачи о собственных значениях уравнения (3.57) имеет вид дисперсионного закона

$$\omega_k^4 - \omega_k^2 [(1 + 4\pi\beta) \omega_0^2 + c^2 k^2] + \omega_0^2 c^2 k^2 = 0, \quad (3.58)$$

точно такого же, как и (3.38).

**Взаимодействие намагниченности с электромагнитным полем.** Решим уравнения Максвелла совместно с уравнениями спинового резонанса для бесконечной среды. Эта задача может служить интересным и ярким примером взаимодействия с электромагнитным полем. Полагая  $\epsilon = 1$ , можем написать

$$\text{rot } \mathbf{H} = \frac{1}{c} \dot{\mathbf{E}}, \quad \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} (\dot{\mathbf{H}} + 4\pi \dot{\mathbf{M}}), \quad (3.59)$$

$$\dot{\mathbf{M}} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}, \quad (3.60)$$

где  $\gamma$  — магнетомеханическое отношение, равное  $ge/2mc$ ,  $\mathbf{M}$  — намагниченность. Комбинируя первые два уравнения, получим

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \frac{1}{c^2} (\ddot{\mathbf{H}} + 4\pi \ddot{\mathbf{M}}), \quad -kH^+ = -\frac{1}{c^2} \omega^2 (H^+ + 4\pi M^+), \quad (3.61)$$

где  $H^+ = H_x + iH_y$ ,  $M^+ = M_x + iM_y$ . Линеаризованные уравнения резонанса получим, полагая  $\omega_0 = \gamma H_0$ ,  $\omega_s = \gamma M_z$  и считая, что статическое поле  $H_0$  направлено вдоль оси  $z$ :

$$i\omega M^+ = -i(\omega_0 M^+ - \omega_s H^+); \quad (3.62)$$

отсюда

$$M^+ = \frac{\omega_s H^+}{\omega + \omega_0}. \quad (3.63)$$

Подставляя (3.63) в (3.61), получим

$$c^2 k^2 = \omega^2 \left( 1 + \frac{4\pi\omega_s}{\omega + \omega_0} \right). \quad (3.64)$$

При  $k=0$  этот дисперсионный закон дает магнонную ветвь; действительно,

$$-\omega = \omega_0 + 4\pi\omega_s = \gamma(H_0 + 4\pi M_s) = \gamma B. \quad (3.65)$$

Итак, при  $k=0$  магнонная ветвь (рис. 3.3) попадает в начало координат при  $\omega = \gamma B$ , а не при  $\omega = \gamma H$ . Этот результат не имеет никакого отношения к размагничивающим полям и обусловлен исключительно эффектом токов смещения. Он аналогичен

выражению (3.36), полученному Лидденом, Саксом и Теллером для ионных кристаллов.

Однако магнитный резонанс наблюдается в плоских пластинках (когда поле  $H$  перпендикулярно к поверхности) при  $\omega = \gamma H_i$ , где  $H_i$  — внутреннее поле, взятое с учетом размагничивающего эффекта поверхности, а вовсе не при  $\omega = \gamma B_i$ . Дело в том, что в тонких пластинках член, обусловленный токами смещения, не может «сдвинуть» решение от  $H_i$  к  $B_i$ . Этот эффект хорошо известен для ионных кристаллов и был продемонстрирован Пинкусом [6] при точном решении задачи о магнитном резонансе с учетом зависимости поверхностного импеданса пластинки от ее толщины. Грубо говоря, сдвиг резонансной частоты токами смещения

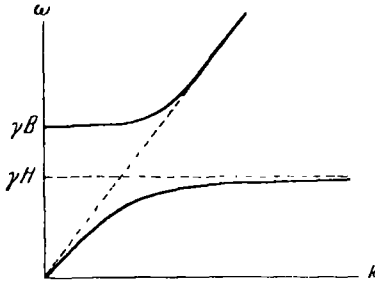


Рис 3.3. Дисперсионные кривые для случая взаимодействия фотонов с полем намагничности (без обмена).

происходит тогда, когда толщина пластинки равна длине волны падающего излучения или больше нее.

### ЗАДАЧИ

3.1. Предположим, что в электронный газ помещены атомы (в количестве  $n_a$  на единицу объема), причем атомная поляризуемость каждого равна  $\chi_a$ . Показать, что последнее из соотношений (3.15) примет в этом случае вид

$$P_{\parallel} = \left( -\frac{ne^2}{m\omega^2} + \chi_a \right) E. \quad (3.66)$$

Для металлического серебра вычислить влияние  $\chi_a$  на величину частоты, при которой  $\epsilon_{\parallel} = 0$ , используя приближенно в качестве значения  $\chi_a$  поляризуемость иона Ag в галогенидах серебра (величину последней найти в литературе).

3.2. Показать, что собственные частоты плазмы в сферической оболочке определяются соотношением

$$\omega_L^2 = \omega_p^2 \frac{L}{2L+1}, \quad (3.67)$$

где  $\omega_p^2 = 4\pi ne^2/m$ , а  $L$  — порядок полинома Лежандра в выражении для потенциалов вне ( $\varphi_e$ ) и внутри ( $\varphi_i$ ) сферы:

$$\varphi_e \approx r^{-(L+1)} P_L^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad \varphi_i \approx r^L P_L^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (3.68)$$

Считать, что эффектами, обусловленными током смещения, можно пренебречь.

*Указание.* Собственную диэлектрическую проницаемость плазмы принять равной

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (3.69)$$

Эта задача аналогична задаче о магнитоэлектростатических модах колебаний, рассмотренной Уокером [7].

### Литература

1. Борн М. и Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.
2. Lyddane R. H., Herzfeld K. F., Phys. Rev. **54**, 846 (1933).
3. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1963, гл. 5.
4. Hopfield J. J., Phys. Rev. **112**, 1555 (1958).
5. Fano U., Phys. Rev. **103**, 1202 (1956).
6. Pincus P., J. Appl. Phys. **33**, 553 (1962).
7. Walker L. R., Phys. Rev. **105**, 390 (1957).