

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ПЛАЗМЫ И ПЛАЗМЕННО-ЭКСИТОННЫЙ РЕЗОНАНС

Э.Л.Начаев

Как известно, межзонные переходы электронов существенно сказываются на плазменных колебаниях [1]. В легких элементах можно не учитывать переходов электронов из внутренних оболочек атомов, поскольку их частоты велики по сравнению с плазменными. Однако для элементов с большими порядковыми номерами эти частоты, вообще говоря, сравнимы. Обычно электрон, возбужденный из внутренней оболочки, переходит в токовое состояние, т.е. спектр возбуждений ионного остова непрерывен. Однако в некоторых случаях можно ожидать, что этот спектр начинается с дискретных уровней относительно малой ширины. Это относится, например, к разбавленным растворам переходных элементов, когда электроны из внутренних оболочек магнитных ионов могут возбуждаться на свободные *d*-уровни того же иона. Из-за возможного резонанса частот таких переходов с частотами плазменных колебаний растворителя в системе могут возникнуть локализованные плазменные колебания.

Аналогичная ситуация может возникнуть в сильно легированных полупроводниках, если кроме примесей с мелкими уровнями ввести в них еще и примеси с глубокими электронными уровнями. При температурах, когда степень ионизации глубоких уровней мала, возможны переходы электронов между уровнями дискретного спектра примеси. Соответствующим подбором концентрации носителей можно добиться, чтобы выполнялись оптимальные условия для существования локальных плазменных уровней. Возникновение локализованных плазмонов, как и рассмотренное в [2] возникновение локализованных оптических фононов, можно объяснить локальным всплеском поляризуемости кристалла вблизи примесных атомов.

Если рассматривать возбужденное состояние примесного атома как локализованный экситон, гамильтониан системы можно записать в виде

$$H = \sum_{p\sigma} E_p a_{p\sigma}^* a_{p\sigma} + 2\pi V \sum_{k \neq 0} \frac{\rho_k \rho_k^*}{k^2} + \omega_0 b^* b - 4\pi e \sum_{k \neq 0} \frac{g_k \rho_k}{k^2} (b^* + b) \quad (1)$$

$$\rho_q = e/V \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^* a_{k-q\sigma}$$

Здесь $a_{p\sigma}^*$, $a_{p\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона с импульсом *p* и спином σ , b^* , b — экситонные операторы. Заряд *e*,

вообще говоря, ренормирован, чтобы учесть затравочную диэлектрическую проницаемость кристалла. Величина g_k представляет собой матричный элемент оператора $\exp(ikr)$ между возбужденным и основным состояниями примесного атома.

Спектр плазменных колебаний отыскивается по полюсам запаздывающей функции Грина

$$\langle\langle \rho_q | L \rangle\rangle = -i \theta(t) \langle \rho_q(t) L - L \rho_q(t) \rangle,$$

где

$$L = \sum_{\rho\rho'\sigma\sigma'} a_{\rho\sigma}^* a_{\rho'\sigma'},$$

$\theta(t)$ – ступенчатая функция. Чтобы найти $\langle\langle \rho_q | L \rangle\rangle$, составляется уравнение движения для функции Грина $\langle\langle a_{\rho\sigma}^* a_{\rho-q\sigma} | L \rangle\rangle$. Фигурирующие в нем высшие функции Грина, построенные только из электронных операторов, расщепляются, и сохраняются лишь члены, расходящиеся при $q \rightarrow 0$ (приближение, эквивалентное суммированию лестничных диаграмм):

$$\sum_r \frac{1}{r^2} \langle\langle \rho_r a_{\rho-r\sigma}^* a_{\rho-q\sigma} | L \rangle\rangle = 1/q^2 n_{\rho-q} \langle\langle \rho_q | L \rangle\rangle.$$

Для функций Грина, включающих в себя экситонные операторы, также составляются уравнения движения, и высшие по отношению к ним функции Грина расщепляются путем спаривания фермиевских операторов. При этом опять-таки удерживаются лишь члены с особенностями при малых передачах импульса. Суммированием функций Грина

$$\langle\langle a_{\rho\sigma}^* a_{\rho-q\sigma} | L \rangle\rangle$$

по индексам ρ и σ получается следующее интегральное уравнение для определения искомой функции Грина

$$\langle\langle \rho_q | L \rangle\rangle = \left[\frac{1}{\epsilon_0(q\omega)} - 1 \right] \left[\frac{q^2}{4\pi e} + \frac{8\pi g_q^* \omega_0}{(\omega^2 - \omega_0^2)V} \sum_k \frac{g_k \langle\langle \rho_k | L \rangle\rangle}{k^2} \right], \quad (3)$$

где $\epsilon_0(k\omega)$ – диэлектрическая проницаемость невозмущенного электронного газа в приближении случайных фаз:

$$\epsilon_0(k\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2 V} \sum_{\rho\sigma} \frac{n_{\rho-k} - n_{\rho}}{\omega - E_{\rho-k} + E_{\rho}}. \quad (4)$$

Решение уравнения (3) показывает, что наряду с объемными плазмонами, частоты которых определяются из равенства нулю $\epsilon_0(k\omega)$, возмож-

но существование локальных или квазилокальных плазмонов. Их частоты определяются из уравнения

$$\frac{8\pi\omega_0 e^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)V} \sum_k \frac{|g_k|^2}{k^2} \left[\frac{1}{\epsilon_0(k\omega)} - 1 \right] = 1. \quad (5)$$

Под квазилокальными уровнями, как обычно, понимаются те решения уравнения (5), которые попадают в непрерывный спектр, и потому обладают конечной шириной. Следует, однако, отметить, что из-за комплексности $\epsilon_0(k\omega)$ конечной шириной обладают и решения, лежащие вне непрерывного спектра, т.е. истинные локальные уровни.

Нетрудно сформулировать условия существования локального плазмонного уровня. Например, при дипольном переходе $eg_k = ikd$, где d — дипольный момент примесного атома. Предельное значение d , при котором возникает уровень, определяется из уравнения (5), в котором ω положена равной ленгмюровской частоте ω_p . Интеграл в правой части (5) сходится при $\omega = \omega_p$, и потому при заданной разности $\omega_0 - \omega_p$ локальный уровень появляется лишь начиная с некоторого критического значения $d = d_c$. В этом проявляется общая закономерность спектров трехмерных систем, отмеченная впервые И.М.Лифшицем [3]. Величина d_c стремится к нулю по мере приближения ω_0 к ω_p . Однако на практике условия для возникновения локальных плазмонов оказываются менее благоприятными из-за неучтенной здесь конечной ширины электронных уровней примесных атомов. Ширина d -уровней атомов переходных элементов, растворенных в других металлах, согласно [4] определяется их смешиванием с уровнями электронов проводимости металла и может быть весьма значительной, если d -уровень близок к поверхности Ферми.

Рассмотренный выше эффект представляет собой резонанс плазменных колебаний с локализованным экситоном. Существуют, однако, материалы, в которых возможен резонанс плазмонов с объемными экситонами, — соединения переходных элементов, в которых реализуется экситон Френкеля как возбужденное состояние электронов незаполненных d -оболочек. Такие экситоны в последнее время активно исследовались в изолирующих соединениях переходных элементов (см., например, [5]). Между тем, имеется большая группа полуметаллических соединений переходных элементов с "врожденными" концентрациями носителей $\sim 10^{18} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$, причем число носителей можно менять в довольно широких пределах легированием. Плазменные частоты здесь составляют

несколько десятых эв, и поэтому плазмоны являются четко определенными элементарными возбуждениями. Так как экситонная зона очень узка, условия для реализации плазменно-экситонного резонанса здесь весьма благоприятны. Способом, аналогичным использованному ранее, получаются следующие дисперсионные соотношения для определения частот плазмонов и экситонов соответственно:

$$1 = \frac{8\pi e^2 |g_q|^2 \omega_q}{q^2(\omega^2 - \omega_q^2) v_0} \left[\frac{1}{\epsilon_0(q\omega)} - 1 \right], \quad (6)$$

$$\omega = \omega_q + \frac{4\pi e^2 |g_q|^2}{q^2 v_0} \left[\frac{1}{\epsilon_0(q\omega)} - 1 \right], \quad (7)$$

где ω_k — частота экситона с импульсом k , v_0 — объем элементарной ячейки. При точном резонансе затравочных плазменных и экситонных частот сдвиг линий имеет порядок g_q , а не $|g_q|^2$.

В заключение следует указать, что обсужденные выше резонансы могут осуществляться и с участием поверхностных экситонов и плазмонов.

Поступило в редакцию
12 сентября 1968 г.

Литература

- [1] Д.Пайнс, Ф.Нозьер. Теория квантовых жидкостей. Изд.Мир, М., 1967.
- [2] Ш.М.Коган, Р.А.Сурис. ЖЭТФ, 50, 1279, 1966.
- [3] И.М.Лифшиц. ЖЭТФ, 17, 1017, 1076, 1947.
- [4] P. Anderson. Phys. Rev., 124, 41, 1961.
- [5] R. London. Adv. in Phys., 17, 243, 1968.