Краткие сообщения по физике № 5 1983

О НАРУШЕНИИ ДИСПЕРСИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ ДЛЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ

В. В. Лосяков

УДК 537.226.I

В работе исследованы условия существования соотношений Крамерса-Кронига для диэлектрической проницаемости. Найдены критерии нарушения дисперсионных соотношений и вычислены соответствующие поправки к ним.

Важной величиной, характеризующей электродинамические свойства конденсированной системы, является диэлектрическая проницаемость (ДП) $\varepsilon(\omega,\vec{k})$. Эта величина связывает внешнее продольное электрическое поле $\vec{D}$ с полным полем $\vec{E}$ ($\delta\vec{D}(\omega,\vec{k}) = \varepsilon(\omega,\vec{k})\delta\vec{E}(\omega,\vec{k})$). Как было показано в /I/, величина $1/\varepsilon(\omega,\vec{k})$ представляет собой функцию отклика на внешнее поле $\vec{D}$ при любых волновых векторах $\vec{k}$ и поэтому удовлетворяет дисперсионному соотношению Крамерса-Кронига (СКК):

$$1/\varepsilon(\omega,\vec{k}) = 1 + \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\ 1/\varepsilon(\omega_1,\vec{k})}{\omega_1^2 - \omega^2 - i0}\, d\omega_1^2. \qquad (I)$$

Сама же величина ДП не является причинной функцией отклика и, вообще говоря, не обязана подчиняться СКК (за исключением случая $\vec{k} = 0$ (см. /I/)). Более того, СКК для $1/\varepsilon(\omega,\vec{k})$ допускает существование сред с $\varepsilon(0,\vec{k}) < 0$, что принципиально несовместимо с СКК для ДП (о конкретной реализации таких систем см. /I,4/). Поэтому возникает вопрос: при каких условиях СКК для ДП нарушаются, и какой вид они в этом случае принимают ?

I. Принцип причинности математически выражается в отсутствие в верхней полуплоскости ω особенностей у функции отклика.

Выясним, в каких случаях в верхней полуплоскости ω у ДП возникает особенность.

Из аналитичности $1/\varepsilon(\omega,\vec{k})$ следует, что ДП не имеет в верхней полуплоскости особых точек, отличных от полюсов (напр., точек ветвления). Приравняв (I) нулю и подставив $\omega = i\Omega_0 + \Omega_1$, где $\Omega_0 > 0$, получим условие возникновения полюсов

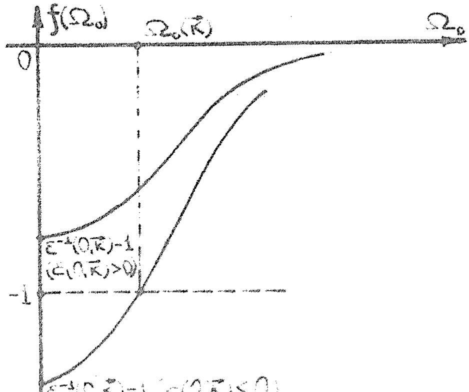
$$\Omega_1 = 0, \quad 1 + f(\Omega_0) = 0, \tag{2}$$

где $$f(\Omega_0) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\operatorname{Im} 1/\varepsilon(\omega,\vec{k})}{\omega^2 + \Omega_0^2}\, d\omega^2.$$

Исследуем вид функции $f(\Omega_0)$. Прежде всего, из неравенства $\operatorname{Im} 1/\varepsilon(\omega,\vec{k}) \leqslant 0$ следует, что производная этой функции положительна при $\Omega_0 > 0$. Кроме того, из СКК для $1/\varepsilon(\omega,\vec{k})$ легко видеть, что

$$f(0) = 1/\varepsilon(0,\vec{k}) - 1, \quad f(\infty) = 0. \tag{3}$$

Примерный вид функции изображен на рис. I. Отсюда видно, что уравнение (2) имеет единственное решение, если $\varepsilon(0,\vec{k}) < 0$, и



Р и с. I. Примерный вид функции $f(\Omega_0)$

не имеет решений вовсе, если $\varepsilon(0,\vec{k}) > 0$. Поэтому <u>дисперсионные соотношения Крамерса-Кронига для диэлектрической проницаемости нарушаются тогда и только тогда, когда $\varepsilon(0,\vec{k}) < 0$.</u>

2. Повторяя теперь стандартный вывод СКК (см., напр., /2/), но учитывая, что внутри контура интегрирования теперь есть полюс при $\omega_1 = i\Omega_0(\vec{k})$, вычет в котором приводит к появлению дополнительного члена $\delta(\varepsilon(\omega,\vec{k}))$, получаем [ж)]

$$\varepsilon(\omega,\vec{k}) = 1 + \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\operatorname{Im}\,\varepsilon(\omega_1,\vec{k})}{\omega_1^2 - \omega^2 - i0}\, d\omega_1^2 - \tag{4}$$
$$- \frac{2\Omega_0(\vec{k})}{\omega^2 + \Omega_0^2(\vec{k})}\left|\left.\frac{\partial\varepsilon^{-1}(\omega,\vec{k})}{\partial\omega}\right|_{\omega=i\Omega_0(\vec{k})}\right|^{-1}.$$

Отсюда следует, что добавка к СКК для ДП всегда отрицательна. Как функция частоты она представлена на рис. 2. Что же касается зависимости дополнительного члена от волнового вектора $\vec{k}$, то она определяется функциями $\Omega_0(\vec{k})$, $1/\varepsilon(\omega,\vec{k})$. Так как при $\vec{k} = 0$ СКК для ДП справедливы, то при $\vec{k} \to 0$ добавочный член исчезает как только $1/\varepsilon(0,\vec{k})$ становится равной нулю.

3. Рассмотрим некоторые предельные случаи. Пусть $|\varepsilon^{-1}(0,\vec{k})| \gg 1$. Физически такая ситуация реализуется в системе, которая находится в состоянии, близком к переходу в волну зарядовой плотности. В этом пределе Ω_0 - большая величина. Поэтому разложим $f(\Omega_0)$ в ряд по $1/\Omega_0^2$ до второго члена

$$f(\Omega_0) = -\Omega_p^2/\Omega_0^2 + \Omega^4/\Omega_0^4,$$

где $\Omega_p^2 = -\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \operatorname{Im} 1/\varepsilon\, d\omega^2 = 4\pi e^2 N/m$ - первый момент по частоте $\operatorname{Im} 1/\varepsilon$ (плазменная частота);

ж) Отметим здесь, что добавочный член $\delta(\varepsilon(\omega,\vec{k}))$ можно полностью выразить через $\operatorname{Im}\,\varepsilon(\omega,\vec{k})$ и статическую ДП $\varepsilon(0,\vec{k})$.

$$\Omega^4 = -\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \operatorname{Im} 1/\varepsilon \, d\omega^2\omega^2 = \Omega_p^2\left\{\left(\frac{k^2}{2m}\right)^2 + \frac{2k^2}{mN}\langle T\rangle + \right.$$

$$\left. + \frac{\Omega_p^2}{N}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{(\vec{k}\vec{q})^2}{k^2q^2}\left[S(\vec{q}+\vec{k}) - S(\vec{q})\right]\right\}$$

– третий момент $\operatorname{Im} 1/\varepsilon$ (см. /3/). Здесь $\langle T\rangle$ – средняя кинетическая энергия системы, $S(\vec{k})$ – статический структурный фактор рассеяния системы. Предполагая, что $\Omega_p \gg \Omega$, найдем корень Ω_0 и поправку к СКК:

$$\delta(\varepsilon(\omega,\vec{k})) = -\Omega_p^2\left\{\omega^2 + \Omega_p^2\left(1 - \frac{\Omega^4(\vec{k})}{\Omega_p^4}\right)\right\}^{-1}. \qquad (5)$$

В противоположном предельном случае ($|\varepsilon^{-1}(0,\vec{k})| \ll 1$) поправка к СКК выражается через асимптотику мнимой части $1/\varepsilon(\omega,\vec{k})$ при $\omega \to 0$

$$\delta(\varepsilon(\omega,\vec{k})) = \frac{2\Omega_A^2(\vec{k})}{\varepsilon(0,\vec{k})}\left\{\omega^2 + \frac{\Omega_A^2(\vec{k})}{\varepsilon^2(0,\vec{k})}\right\}^{-1}, \qquad (6)$$

где $\Omega_A(\vec{k}) = \lim_{\omega\to 0}\operatorname{Im}\varepsilon^{-1}(\omega,\vec{k})/\omega$.

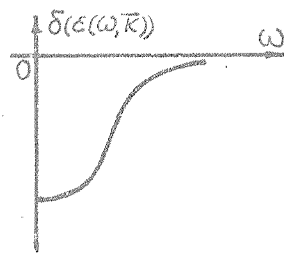


Рис. 2. Зависимость поправки к СКК от частоты

4. В заключение рассмотрим некоторую модель, в которой возможна ситуация с $\varepsilon(0,\vec{k})<0$. Как было показано в /4/, отрицательные значения ДП обусловлены эффектами локального поля. ДП выражается черз поправку на локальное поле $G(\omega,\vec{k})$ следующим образом:

$$\varepsilon(\omega,\vec{k}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2}\chi_0(\omega,\vec{k})\left\{1 - \frac{4\pi e^2}{k^2}\chi_0(\omega,\vec{k})G(\omega,\vec{k})\right\}^{-1}, \qquad (7)$$

где $\chi_0(\omega,\vec{k})$ – линдхардовская восприимчивость электронного газа. Поскольку эта функция аналитична в верхней полуплоскости ω, то при $G = 0$ ДП не может иметь полюса. Таким образом, в этом случае справедливы СКК для ДП, что запрещает отрицательные значения $\varepsilon(0,\vec{k})$.

В одной из простейших моделей, учитывающих эффекты локального поля, ДП при $\vec{k}\to 0$ имеет вид (см. /3/)

$$1/\varepsilon(0,\vec{k}) = (1 - q_{FT}^2/4p_F^2)k^2/q_{FT}^2, \qquad (8)$$

где q_{FT} – импульс Томаса-Ферми, а p_F – импульс Ферми. Отсюда видно, что при $2p_F < q_{FT}$ можно воспользоваться (6). Не останавливаясь на вычислительных подробностях, приведем лишь конечный результат:

$$\delta(\varepsilon(\omega,\vec{k})) = -2\Big/\left[C^2\frac{\omega^2}{q_{FT}^2 v_F^2} + k^2\left(\frac{1}{4p_F^2} - \frac{1}{q_{FT}^2}\right)\right], \qquad (9)$$

где $C = \pi(1 + q_{FT}^2/16p_F^2)\Big/\sqrt{q_{FT}^2/4p_F^2 - 1}$.

Таким образом, в работе получены поправки к СКК и выяснено, что условием их возникновения является отрицательный знак статической ДП.

Автор пользуется случаем поблагодарить О. В. Долгова и Д. А. Киржница за постоянную помощь в работе и многочисленные обсуждения.

Поступила в редакцию
3 декабря 1982 г.

Литература

1. Д. А. Киржниц, УФН, 119, 367 (1976).
   O. V. Dolgov, D. A. Kirzhnits, E. G. Maksimov, Rev. Mod. Phys., 53, 81 (1981).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, ч. I, "Наука", М., 1976 г.
3. В. Д. Горобченко, Е. Г. Максимов, УФН, 130, 65 (1980).
4. О. В. Долгов, Е. Г. Максимов, УФН, 135, 441 (1981).