

УДК 533.951

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ СПЕКТРА ПЛАЗМОНОВ В ПРОСТЫХ МЕТАЛЛАХ

И. М. Алешин, Д. В. Перегудов

(кафедра физики Земли)

Изучается влияние периодического неоднородного фона на распространение волн зарядовой плотности в простых металлах. Показано, что учет пространственной неоднородности в уравнениях Власова–Пуассона приводит к спектру плазмонов, качественно согласующемуся с экспериментальным. А именно, вычисления показывают, что в неоднородной среде волны зарядовой плотности затухают даже при нулевом значении квазиимпульса; при некоторых значениях вектора обратной решетки наклон дисперсионной кривой отрицателен.

Экспериментальные исследования плазмонного спектра простых металлов [1] показали, что необходимо уточнить обычно используемую в расчетах модель газа «свободных» электронов [2]: во-первых, в длинноволновой области спектра некоторых щелочных металлов (в частности, цезия) наблюдается обратная дисперсия; во-вторых, затухание плазмонов остается конечным при нулевом значении волнового вектора (см. также [3]). В теоретических работах [4, 5] указанные выше эффекты объясняются слабой неоднородностью «газа» валентных электронов, обусловленной потенциалом кристаллической решетки. Однако использованный авторами статей [4, 5] формализм равновесной статистической механики приводит к громоздким вычислениям, что, на наш взгляд, затушевывает физический механизм явления. Кроме того, в каждой из этих работ объясняется лишь часть наблюдаемых явлений.

В настоящей работе мы предлагаем простой метод расчета длинноволновой части спектра плазмонов, основанный на использовании аппарата кинетической теории [6]. Впервые задача в такой постановке сформулирована в [7], где показано, что спектр плазменных волн в кристалле имеет зонный характер.

При конкретных вычислениях мы предполагали, что среда неоднородна в одном направлении и, кроме того, равновесное распределение электронов по скоростям считали максвелловским. Таким образом, рассмотренная задача является модельной. В реальных металлах электронный газ сильно вырожден, так что его адекватное описание требует использования кинетического уравнения для матрицы плотности [8] и, конечно же, учета трехмерной структуры кристаллической решетки. Реализация этой программы, не представляющая принципиальных трудностей, требует, однако, значительного объема вычислений. В то же время даже в рамках наших модельных предположений удастся качественно описать как дисперсию плазменных волн в металлах, так и особенности их затухания*).

Рассмотрим простейшую модель кристалла, состоящего из частиц двух сортов: положительных ио-

*) При сопоставлении результатов с экспериментальными данными нужно просто заменять температуру T (характерный параметр распределения Максвелла) на энергию Ферми ϵ_F (характерный параметр фермиевского распределения).

нов (i) и электронов (e). Считается, что ионы неподвижны и образуют периодический неоднородный фон. Функцию распределения ионов напишем в виде

$$f_i = [n + \rho(\mathbf{r})]\delta(\mathbf{p}), \quad \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = 0,$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — периодическая функция, n — средняя концентрация ионов; \mathbf{p} — импульс, $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, $\delta(\mathbf{p})$ — трехмерная дельта-функция Дирака. Угловыми скобками здесь и далее обозначается среднее по периоду решетки.

Динамика электронной компоненты описывается уравнениями Власова–Пуассона

$$\partial_t f_e + \mathbf{v} \partial_{\mathbf{r}} f_e + e \partial_{\mathbf{r}} \phi \partial_{\mathbf{p}} f_e = 0,$$

$$\Delta \phi = -4\pi e \int d^3 p (Z f_i - f_e),$$

где e — элементарный заряд, f_e — функция распределения электронов, ϕ — самосогласованный потенциал, Z — заряд ионов. В функции распределения электронов выделим три слагаемых, описывающие однородный фон F_0 , равновесную периодическую неоднородную добавку f_0 и неравновесное возмущение f_1 :

$$f_e = F_0(\mathbf{p}) + f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + f_1(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t).$$

В силу условия квазинейтральности

$$\int d^3 p F_0(\mathbf{p}) = Z n, \quad \left\langle \int d^3 p f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \right\rangle = 0,$$

$$\int d^3 r \int d^3 p f_1(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = 0.$$

Потенциал ϕ представим в виде суммы равновесной части и неравновесного возмущения $\phi = \phi_0(\mathbf{r}) + \phi_1(\mathbf{r}, t)$, где

$$\Delta \phi_0(\mathbf{r}) = -4\pi e \left[Z \rho(\mathbf{r}) - \int d^3 p f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \right],$$

$$\Delta \phi_1(\mathbf{r}, t) = 4\pi e \int d^3 p f_1(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t).$$

Положим также $\langle \phi_0(\mathbf{r}) \rangle = 0$, чего всегда можно добиться выбором начала отсчета потенциала.

Равновесная функция распределения определяется из стационарного уравнения Власова ($\partial f_0/\partial t = 0$). Нас интересует случай, когда F_0 — максвелловское распределение. Тогда

$$f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \left[C \exp\left(\frac{e}{T}\phi_0(\mathbf{r})\right) - 1 \right] F_0(\mathbf{p}).$$

Постоянная C определяется из условия $\langle \int d^3p f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \rangle = 0$ и равна $C = \langle \exp\left(\frac{e}{T}\phi_0(\mathbf{r})\right) \rangle^{-1}$.

В дальнейшем будем считать, что функция ϕ_0 известна из опыта и равна псевдопотенциалу металла [9].

Уравнение для возмущений имеет вид

$$\begin{aligned} \partial_t f_1 + \mathbf{v} \partial_{\mathbf{r}} f_1 + e \partial_{\mathbf{r}} \phi_0 \partial_{\mathbf{p}} f_1 + \\ + e \partial_{\mathbf{r}} \phi_1 \partial_{\mathbf{p}} (F_0 + f_0) + e \partial_{\mathbf{r}} \phi_1 \partial_{\mathbf{p}} f_1 = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Последний, нелинейный, член будем далее отбрасывать. Это можно сделать при условии $2e\phi_1 k^2/m\omega^2 \ll \ll 1$, где ω и k — частота и волновой вектор возмущения.

Линеаризованное уравнение представляет собой уравнение с периодическими коэффициентами, решения которого имеют вид блоховских волн:

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} h_0(\mathbf{p}) + \sum_{n \neq 0} h_n(\mathbf{p}) e^{-i\omega t + i\mathbf{k}_n \mathbf{r}} = \\ = F + \delta f, \end{aligned}$$

$$\phi_1(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} \chi_0 + \sum_{n \neq 0} \chi_n e^{-i\omega t + i\mathbf{k}_n \mathbf{r}} = \Phi + \delta\phi.$$

Для упрощения обозначений мы применяем составной индекс $n = \{n_1, n_2, n_3\}$ и вектор обратной решетки $\mathbf{b} = \{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\}$, запись $\mathbf{b}n$ означает $\mathbf{b}_1 n_1 + \mathbf{b}_2 n_2 + \mathbf{b}_3 n_3$.

В последних формулах F и Φ обозначают нулеву гармонику функции распределения и потенциала, а все слагаемые с $n \neq 0$ обозначены как δf и $\delta\phi$. Физически это означает разложение возмущения на медленно ($n = 0$) и быстро ($n \neq 0$) меняющиеся в пространстве компоненты. Такое разложение имеет смысл при условии, что $k \ll b$.

Периодические функции f_0 и ϕ_0 можно записать в аналогичном виде (напомним, что по построению $\psi_0 = 0$):

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \sum_n g_n(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{b}n\mathbf{r}} = F_0 + \delta f_0, \\ \phi_0(\mathbf{r}) = \sum_n \psi_n e^{i\mathbf{b}n\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

При подстановке полученных выражений в уравнение (1) быстро и медленно меняющиеся слагаемые должны сокращаться по отдельности. Выделяя быстро меняющиеся слагаемые, имеем

$$\begin{aligned} (\partial_t + \mathbf{v} \partial_{\mathbf{r}}) \delta f + e \partial_{\mathbf{r}} \delta\phi \partial_{\mathbf{p}} F_0 + \\ + e \partial_{\mathbf{r}} \Phi \partial_{\mathbf{p}} \delta f_0 + e \partial_{\mathbf{r}} \phi_0 \partial_{\mathbf{p}} F = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\Delta \delta\phi = 4\pi e \int \delta f d^3p.$$

Чтобы получить уравнения для медленно меняющихся слагаемых, усредним (1) по периоду решетки:

$$\begin{aligned} (\partial_t + \mathbf{v} \partial_{\mathbf{r}}) F + e \partial_{\mathbf{r}} \Phi \partial_{\mathbf{p}} F_0 + \\ + e \langle \partial_{\mathbf{r}} \delta\phi \partial_{\mathbf{p}} \delta f_0 \rangle + e \langle \partial_{\mathbf{r}} \phi_0 \partial_{\mathbf{p}} \delta f \rangle = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\Delta \Phi = 4\pi e \int F d^3p.$$

Здесь имеется прямая аналогия с методом, предложенным П. Л. Капицей для решения механической задачи о движении маятника с осциллирующей точкой подвеса [10]. Эта аналогия использовалась ранее одним из авторов [11] для решения уравнений холодной гидродинамики плазмы (исследовалась нелинейная динамика плазменных волн в периодически неоднородной среде).

Уравнение (2) справедливо для любых значений потенциала ψ_0 , однако его точное решение затруднительно. Воспользуемся поэтому тем фактом, что в простых металлах параметр ϕ_0 мал, для построения теории возмущений. В дальнейшем мы ограничимся учетом первых исчезающих поправок (квадратичных по ϕ_0^2).

Чтобы получить зависимость $\omega(\mathbf{k})$ явно, сделаем дальнейшие упрощающие предположения. Будем рассматривать одномерную задачу и считать, что потенциал ϕ_0 имеет только одну (первую) гармонику. Удобно ввести характерные параметры: ленгмюровскую частоту, дебаевский радиус и тепловую скорость: $\omega_p = (4\pi e^2 n/m)^{1/2}$ (m — масса электрона), $r_D = (T/4\pi e^2 n)^{1/2}$, $v_T = (T/m)^{1/2}$, и перейти к безразмерным частоте, волновому вектору и скорости. Кроме того, введем безразмерный параметр $\xi = |e\psi_1/T|$.

Поправка к частоте выражается через три эталонных интеграла:

$$\begin{aligned} J_1(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z-v} \partial_v F(v) dv, \\ J_2(z_1, z_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z_1-v} \partial_v \frac{1}{z_2-v} \partial_v F(v) dv, \\ J_3(z_1, z_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z_1-v} \partial_v \frac{1}{z_2-v} \partial_v \frac{1}{z_1-v} \partial_v F(v) dv, \end{aligned}$$

где $F(v) = e^{-v^2/2}/\sqrt{\pi}$, а обход полюсов зависит от знака z [12]. Интегралы J_2 и J_3 сводятся к J_1 посредством формул

$$J_2(z_1, z_2) = \partial_{z_1} \frac{J_1(z_1) - J_1(z_2)}{z_2 - z_1},$$

$$J_3(z_1, z_2) = -\partial_{z_1} \left(\frac{1}{3} \partial_{z_1} + \frac{1}{2} \partial_{z_2} \right) J_2(z_1, z_2).$$

Интеграл J_1 с учетом правила обхода полюсов, соответствующего правилу Ландау [12], выражается через интеграл ошибок [13]:

$$J_1(z) = \begin{cases} 1 + iz \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-z^2/2} \operatorname{erfc}(-iz/\sqrt{2}), & z > 0, \\ 1 - iz \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-z^2/2} \operatorname{erfc}(iz/\sqrt{2}), & z < 0. \end{cases}$$

Дисперсионное соотношение в нулевом приближении имеет вид

$$\varepsilon(\omega^{(0)}, \mathbf{k}) = 1 + \frac{1}{k^2} J_1 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k} \right) = 0.$$

Все дальнейшие вычисления были проведены для одномерного кристалла с синусоидальной координатной зависимостью фонового потенциала ϕ_0 . При этом суммирование по обратной решетке сводится к сумме двух слагаемых с $n = \{0, 0, \sigma\}$, $\sigma = \pm 1$. Поправка к частоте во втором порядке равна

$$\omega^{(2)} = \xi^2 \sum_{\sigma=\pm 1} \left[\frac{M_{\sigma 0}^2}{k_\sigma^2 \varepsilon_\sigma} + \frac{b\sigma}{k_\sigma} J_2 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k}, \frac{\omega^{(0)}}{k_\sigma} \right) + \frac{b^2 \sigma^2}{k k_\sigma} J_3 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k}, \frac{\omega^{(0)}}{k_\sigma} \right) \right].$$

Вспомогательная величина $M_{\sigma 0}$ равна

$$M_{\sigma 0} = \frac{k}{k_\sigma} J_1 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k_\sigma} \right) + \frac{\sigma b}{k_\sigma} J_2 \left(\frac{\omega^{(0)}}{k_\sigma}, \frac{\omega^{(0)}}{k} \right) = M_{0\sigma},$$

$$\varepsilon_\sigma \equiv \varepsilon \left(\omega^{(0)}, k_\sigma \right).$$

В длинноволновой части спектра можно получить более простые и явные формулы, раскладывая выражение для $\omega^{(2)}$ в ряд по k :

$$\omega^{(2)} = \xi^2 R(b) + \frac{3}{2} k^2 (1 + \xi^2 S(b)) + \dots,$$

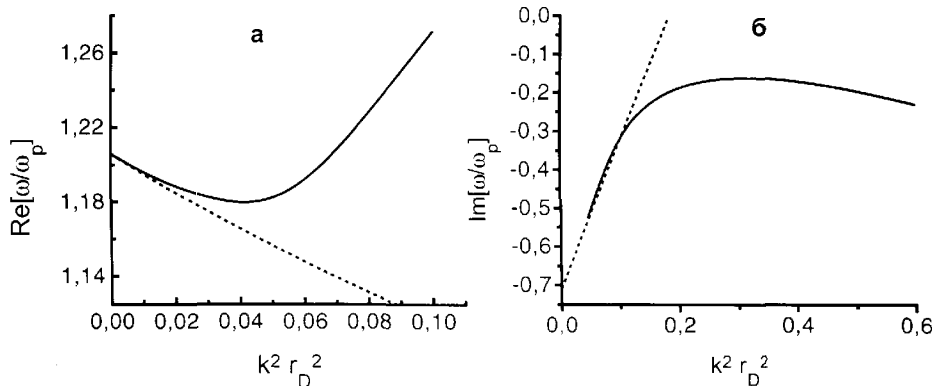
$$R(b) = \frac{(b^2 + b^4)(1 - J_1(1/b))}{b^2 + J_1(1/b)}.$$

Выражение $S(b)$ через эталонный интеграл J_1 мы не приводим из-за его громоздкости.

Зависимость вещественной и мнимой частей частоты от квазиимпульса представлена на рисунке. Обычно в металлах значение b порядка дебаевского радиуса [2] (в наших безразмерных переменных — порядка единицы). Оказывается, что для таких значений b выполнены неравенства $\operatorname{Re} R > 0$, $\operatorname{Im} R < 0$, $\operatorname{Re} S < 0$, $\operatorname{Im} S > 0$. Неравенства для R означают, что в модели с неоднородным фоном ширина плазмонного спектра конечна даже при нулевом значении квазиимпульса, что и наблюдается в экспериментах [1]. Неравенства для S говорят, что при достаточно больших значениях ξ в области малых значений волнового вектора будет наблюдаться обратная дисперсия, что также подтверждается экспериментально.

Поведение вещественной и мнимой частей частоты для больших k может быть исследовано численно. Как показывают вычисления, приведенные формулы длинноволнового приближения справедливы для $k < 0,2$. Для больших k существенны следующие члены разложения, которые качественно меняют ход кривых, возвращая «нормальные» дисперсию и затухание.

Изложенный подход позволяет дать простую и наглядную интерпретацию затуханию длинноволновых плазмонов. Если «разрешающая способность» измерительного прибора много больше размера мелкомасштабных неоднородностей, то при экспериментальном наблюдении происходит «усреднение» быстро осциллирующих пространственно-временных составляющих измеряемых величин. Наличие периодического потенциала приводит к перетеканию энергии от «медленной» компоненты поля к «быстрой». Поэтому конечная ширина плазмонного спектра (в координатном представлении это соответствует затуханию плазменных волн) объясняется нарастанием мелкомасштабной части возмущения.



Зависимость частоты (а) и декремента затухания (б) плазмонов от квадрата квазиимпульса. Сплошные линии — длинноволновое приближение, пунктир — результат численного расчета

Литература

1. Felde A. vom, Sprosser-Prou J., Fink J. // Phys. Rev. 1989. В 40. P.10181.
2. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. М.: Мир, 1965. С. 82.
3. Krane K.J. // J. Phys. F. 1978. 8. P. 2133.
4. Sturm K. // Z. f. Phys. B. 1976. 25. P. 247; Sturm K. // Solid State Commun. 1992. 82. P. 295.
5. Fleszar A., Stumpf R., Eguiluz A. G. // Phys. Rev. 1997. В 55. P. 2068.
6. Власов А.А. // ЖЭТФ. 1938. 8. С. 291.

7. Зырянов П.С. // ЖЭТФ. 1953. 25. С. 441.
8. Климонтович Ю.Л., Силин В.П. // ЖЭТФ. 1952. 23. С. 151.
9. Харрисон У. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972. С. 111.
10. Капица П. Л. // ЖЭТФ. 1951. 21. С. 588.
11. Алешин И.М. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1997. № 4. С. 11 (Moscow University Phys. Bull. 1997. No. 4. P. 14).
12. Ландау Л.Д. // ЖЭТФ. 1946. 16. С. 574.
13. Справочник по специальным функциям/ Под ред. М. Аб-рамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979. С. 119.

Поступила в редакцию
09.04.99

УДК 519.6

К ОБОСНОВАНИЮ МЕТОДА МАКСИМАЛЬНОЙ ЭНТРОПИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНЫХ ЗАДАЧ

А. С. Леонов^{*)}, А. Г. Ягола

(кафедра математики)

Показано, что различные обоснования метода максимальной энтропии для решения линейных некорректных задач, предложенные недавно рядом авторов (1991–1993 гг.), легко получить из общих утверждений теории нелинейных некорректных задач в топологических пространствах, развитой авторами настоящей статьи в 1986–1988 гг. В результате применения этой общей теории получается и простое обоснование метода максимальной энтропии для нелинейных некорректных задач.

1. Пусть A — оператор (вообще говоря, нелинейный) действует из пространства $Z[a, b]$, состоящего из функций $z(s), s \in [a, b]$, в нормированное пространство U . Пусть, далее, τ — некоторая топология секвенциальной сходимости в пространстве $Z[a, b]$, а D — некоторое заданное множество функций из $Z[a, b]$. Рассмотрим операторное уравнение на множестве D :

$$Az = u, \quad z = z(s) \in D, \quad u \in U. \quad (1)$$

Предположим, что множество $Z^* = \arg \inf \{ \|Az - u\|_U : z \in D \}$ его квазирешений на D не пусто и, возможно, содержит более одного элемента. Тогда для нахождения конкретного квазирешения вариационным методом обычно используется дополнительный функционал $\Omega(z)$. С его помощью производится отбор специальных квазирешений из множества Z^* . Это делается путем поиска так называемых Ω -оптимальных квазирешений уравнения (1), т.е. таких функций $\bar{z}(s) \in Z^*$, для которых

$$\Omega(\bar{z}) = \inf \{ \Omega(z) : z \in Z^* \}. \quad (2)$$

Их множество обозначим как \bar{Z} . Уравнение (1) часто представляет собой некорректно поставленную задачу, в которой вместо точных данных $\{A, u\}$ заданы их приближения $\{A_h, u_\delta\}$ с точностями $\eta = \{h, \delta\}$. В этом случае требуется по набору величин $\{A_h, u_\delta, h, \delta\}$ построить устойчивое приближенное решение задачи (1), (2), т.е. такую функцию $z_\eta(s) \in D$, что $z_\eta(s) \xrightarrow{\tau} \bar{Z}$ при $\eta \rightarrow 0$. Именно специфические свойства функционала $\Omega(z)$ обеспечивают

возможность нахождения подобных устойчивых приближенных решений обратной задачи (1).

2. Метод максимальной энтропии для решения задачи (1), (2) связан с использованием функционального пространства $Z = L_1[a, b]$, множества $D = \{z(s) \in L_1[a, b] : z(s) \geq 0\}$ и функционала $\Omega_E(z) = \int_a^b z(s) \ln z(s) ds$. Тогда задача (2) с $\Omega(z) = \Omega_E(z)$ эквивалентна максимизации функционала энтропии $E(z) = -\Omega_E(z)$ на множестве всех неотрицательных псевдорешений уравнения (1). Считается, что такие квазирешения с максимальной энтропией задачи (1) полезны в ряде приложений. Применительно к решению некорректных задач метод максимальной энтропии изучен в ряде работ, из которых отметим [1–3]. В этих работах предполагается, что оператор A — линейный и ограниченный из $L_1[a, b]$ в гильбертово пространство U , причем он задан точно ($\eta = \delta$). При этом для получения приближенных решений $z_\delta(s) \in D$ используются варианты метода регуляризации А. Н. Тихонова и метода невязки [4] с $\Omega(z) = \Omega_E(z)$.

Перечислим важнейшие вспомогательные результаты, полученные в [1, 2]. 1) Функционал $\Omega_E(z)$ — строго выпуклый на выпуклом замкнутом множестве D . Он непрерывен в $L_1[a, b]$. Известно (см., напр., [5]), что это обеспечивает слабую полунепрерывность снизу на D функционала $\Omega_E(z)$. 2) Непустые множества уровня этого функционала $\Omega_C = \{z \in D : \Omega_E(z) \leq C\}$ слабо замкнуты, так как они выпуклы и замкнуты в $L_1[a, b]$. 3) Непустые множества Ω_C слабо компактны в $L_1[a, b]$. Этот

^{*)} МИФИ.