# МОДЕЛЬНАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ДЛЯ СЛОИСТЫХ ПРОВОДНИКОВ ТИПА ГРАФИТА

### Гохфельд В.М. (ИФГП НАНУ, ДонФТИ НАНУ)

Проанализізовано специфіку колективних електромагнітних коливань у шаруватому провіднику з квазідвовимірним електроним спектром

## MODEL DIELECTRIC FUNCTION FOR LAYERED GRAPHITE-LIKE CONDUCTORS

### Gokhfeld V.M.

*Features of cooperative electromagnetic oscillations in a layered conductor with quasi-two-dimensional electron spectrum were studied.* 

#### 1. Введение.

Монокристаллы графита, а в еще большей степени интеркаляты, приготовленные из них добавлением металлических атомов, обладают ярко выраженной слоистой структурой и резкой анизотропией статической электропроводности: ее значения вдоль и поперек слоев (ось *OZ*) могут отличаться несколькими порядками величины [1]. Подобная анизотропия присуща и другим, более сложным веществам: купратным металлооксидам (например, Y-Ba-Cu-O в несверхпроводящей фазе), дихалькогенидам переходных металлов (NbSe<sub>2</sub>, TaS<sub>2</sub>), а также целому ряду органических проводников типа солей тетратиофульвалена ((BEDT-TTF)<sub>2</sub> I<sub>3</sub>). По-видимому, общее свойство слоистых проводящих кристаллов (или, по крайней мере, многих из них) – это слабая зависимость энергии электронов  $\varepsilon$  от *z*-проекции их квазиим-пульса **p**, что проявляется в открытых ферми-поверхностях (ФП) типа «гофрированный цилиндр» [2, 3]. Простую, но достаточно характерную модель такого – квазидвумерного – спектра можно получить, оставляя в общем выражении

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_{zn}(\mathbf{p}_{\perp}) \cos\left(\frac{nap_z}{\hbar}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
(1)

лишь нулевую и первую гармоники и пренебрегая анизотропией в базисной плоскости:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = p_{\perp}^2 / 2m - (\hbar v_1 / a) \cos(\theta).$$
<sup>(2)</sup>

Здесь  $p_{\perp}^2 \equiv p_x^2 + p_y^2$ ,  $\theta \equiv ap_z / \hbar$ , m - эффективная масса электрона, характери $зующая движение вдоль слоев, <math>v_1$  – максимальная скорость в перпендикулярном направлении (*OZ*), a – соответствующий период кристаллической решетки. Согласно сказанному выше, отношение  $\mu \equiv v_1^2 / v_F^2$ , где  $v_F^2 \equiv 2\varepsilon_F / m$  –

#### Физика угля и горных пород

квадрат фермиевской скорости, предполагается малым. Для модели (2) число состояний в единице объема и их энергетическая плотность равны соответственно

$$N = \varepsilon_F \langle 1 \rangle, \quad \langle 1 \rangle = m / \pi a \hbar^2. \tag{3}$$

В данном сообщении рассматривается геометрия, в которой переменное электрическое поле  $E \propto \exp(-i\omega t)$  и волновой вектор k (характеризующий пространственную неоднородность) параллельны нормали к слоям (OZ)<sup>1</sup>. Мы вычислим диэлектрическую функцию с учетом ферми-жидкостного взаимодействия (ФЖВ), найдем закон дисперсии продольных плазменных колебаний, выясним характер распределения высокочастотного (ВЧ) электрического поля в полубесконечном образце, а также рассмотрим специфику низкочастотных коллективных возбуждений слоистого проводника – они возможны при наличии двух зон типа (2) в его электронном спектре.

#### 2. Диэлектрическая функция

Согласно теории ферми-жидкости [4], кинетическое уравнение в данном случае имеет вид

$$kv_{z}\Phi - \omega\Psi - ieEv_{z} = i\tau^{-1} \left( \Phi - \left\langle \Phi \right\rangle / \left\langle 1 \right\rangle \right), \tag{4}$$

где т – время релаксации, предполагаемое достаточно большим. Функцию Ландау  $L(\mathbf{p}, \mathbf{p})$ , связывающую эффективное и истинное распределения частиц, в соответствии с симметрией данной задачи достаточно выбрать в форме

$$L(\theta, \theta') = L_0 + 2L_1 \cos(\theta - \theta').$$
<sup>(5)</sup>

В таком случае

$$\Phi(\theta) = \Psi(\theta) + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta'}{2\pi} L(\theta, \theta') \Psi(\theta'), \qquad (6)$$

и уравнения (4) – (6) легко разрешаются относительно гармоник входящих в них функций. В частности, для  $\Psi_0 \equiv \langle \Psi \rangle / \langle 1 \rangle$  находим:

$$\Psi_0 = \frac{ieE}{k} \frac{\tilde{\omega}W}{\omega + W(i\tau^{-1} + \tilde{\omega}(L_0 + \lambda\omega^2 / k^2 v_0^2))},\tag{7}$$

где введены обозначения

,

$$W(k,\omega) = \left\langle \frac{kv_z}{kv_z - \tilde{\omega}} \right\rangle \langle 1 \rangle^{-1} = 1 - \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - k^2 v_1^2}}, \quad \lambda = 2L_1 / (1 + 2L_1), \quad \tilde{\omega} = \omega + i / \tau.$$
(8)

По определению,  $\in = 1 + 4\pi \langle \Psi \rangle / ikE$ , так что диэлектрическая функция равна

 $<sup>^1</sup>$ Поперечные электромагнитные колебания в слоистых проводниках (когда  $\mathbf{E}\perp OZ$ ) рассматривались в [5].

$$\in (k,\omega) = 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \frac{\tilde{\omega}W}{\omega + W(i\tau^{-1} + \tilde{\omega}(L_0 + \lambda\omega^2 / k^2 v_0^2))},$$
(9)

где

$$\kappa^2 \equiv 4\pi e^2 \left< 1 \right> = 4m e^2 / a\hbar^2 \tag{10}$$

– квадрат декремента статического экранирования в газовом приближении. Как видно из (9), (10) и дисперсионного уравнения  $\in (k, \omega) = 0$ , с учетом ФЖВ этот декремент равен  $\kappa / \sqrt{1 + L_0}$ . Для активационной частоты плазменных колебаний, полагая в (9)  $k \to 0$ ,  $\tau \to \infty$ , находим

$$\omega_p^2 = \frac{2me^2 v_1^2}{a\hbar^2} (1 + L_1) = \mu \frac{4\pi Ne^2}{m} (1 + L_1), \qquad (11)$$

где  $4\pi Ne^2/m$  – квадрат плазменной частоты в газовом приближении (в изотропном металле с той же плотностью носителей *N*). Отметим, что в обычном металле  $\omega_p \sim \varepsilon_F / \hbar$ , в то время как теория ФЖВ, строго говоря, корректна лишь при  $\hbar \omega << \varepsilon_F$  [6]. В нашем же случае плазменная частота существенно понижается (в меру малости  $\sqrt{\mu}$ ), и это позволяет непосредственно использовать формулу (9) для нахождения закона дисперсии продольных плазмонов:

$$\omega^{2}(k) = \frac{\omega_{p}^{2}}{\lambda} \left[ \frac{k^{2}}{2\kappa^{2}} - K + \lambda K + \sqrt{\left(K - \frac{k^{2}}{2\kappa^{2}}\right)^{2} + \lambda K \frac{k^{2}}{\kappa^{2}}} \right],$$

$$K(k) = 1 + (1 + L_{0})k^{2} / \kappa^{2}$$
(12)

Это выражение довольно громоздко, так что мы приведем и его упрощенный вид для случая, когда имеется лишь нулевая гармоника функции Ландау:

$$\omega(k) = \left(\frac{ev_1}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{a}}\right) \frac{\kappa^2 + (1+L_0)k^2}{\kappa\sqrt{\kappa^2 + (1/2+L_0)k^2}}.$$
(13)

#### 3. Распределение электрического поля в образце

Вычислив диэлектрическую функцию безграничного проводника, мы можем решить граничную задачу для полупространства  $z \ge 0$ . Проникновение ВЧ продольного электрического поля в максвелловскую плазму впервые рассматривалось Ландау [7]; в вырожденную – с подробным анализом граничных условий для электронной функции распределения – в [8]. В нашем случае углы падения электронов на границу заведомо малы ( $\le v_1 / v_F$ ), что существенно упрощает задачу, позволяя принять т. н. «зеркальное» граничное условие. Если поле вне металла (т.е. между обкладками коденсатора, одной

из которых является образец) задано, а именно  $E(z \le 0) = (0, 0, E_0 \exp(-i\omega t))$ , то его распределение в образце дается формулой

$$E(z) = \frac{E_0}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k \in (k, \omega)} \exp(ikz).$$
(14)

Полюс в k = 0 обходится снизу; в соответствии с непрерывностью электрической индукции **D**(*z*) он дает предельное значение поля в глубине проводника

$$E(\infty) = E_0 / \in (0, \omega) \quad ; \quad \in (0, \omega) = 1 - \omega_p^2 / \omega(\tilde{\omega} + iL_1 / \tau), \tag{15}$$

малое по сравнению с  $E_0$ , если  $\omega \ll \omega_p$ . Однако при  $\omega \tau >> 1$  затухание поля до этого значения происходит немонотонным образом: помимо вычетов интеграл (14) содержит осциллирующий вклад точки ветвления  $k_1 = \tilde{\omega}/v_1$ , обусловленный наличием максимальной *Z*-проекции скорости в электронном спектре и равный

$$E_1(z) \simeq -\frac{4E_0F^2}{\pi} \int_1^\infty \frac{dxx\sqrt{x^2 - 1\exp(ik_1xz)}}{(x^2 - 1)[2 + (1 + L_0)F^2x^2]^2 + (2 + L_0F^2x^2)^2}, \quad (16)$$

где  $F \equiv \tilde{\omega} / \omega_p$ . На небольших расстояниях от поверхности  $(z \sim v_1 / |\tilde{\omega}|)$  он не мал по сравнению с «гидродинамическим» вкладом (15). При  $z >> v_1 / |\tilde{\omega}|$  отношение этих значений определяется соответствующей асимптотикой интеграла (16) и равно

$$\frac{E_1(z)}{E(\infty)} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \frac{1 - F^2}{(1 + L_0 F^2 / 2)^2} \left(\frac{v_1}{\tilde{\omega} z}\right)^{3/2} \exp(i z \tilde{\omega} / v_1).$$
(17)

Т.о., полная однородность достигается лишь вне переходного слоя толщиной порядка длины пробега носителей  $l_z = v_1 \tau$ , в котором поле осциллирует с «периодом»  $\approx 2\pi v_1 / \omega$ . В слоистом проводнике оба масштаба уменьшаются по сравнению с изотропным случаем, оставаясь, однако, макроскопическими при не слишком высоких частотах  $\omega$  и  $\tau^{-1}$ . При этом, как видно из (17), роль ФЖВ здесь невелика.

Ради полноты следует рассмотреть и резонансный случай  $\omega \approx \omega_p$ , когда макроскопической величиной является характерная длина  $k^{-1}$ , определяемая дисперсионными соотношениями (12) или (13). При столь высоких частотах непосредственное возбуждение монохроматического поля в образце затруднительно, однако характер пространственного распределения резонансных гармоник может проявиться в импульсном режиме, а также в опытах по прохождению либо отражению электронных пучков<sup>2</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> То есть в процессе электронной спектроскопии [9]. При этом могут быть измерены такие параметры как  $\omega_p$  и **К** (см. (10), (11)), значимые для макроскопических свойств проводника.



**Рис. 1.** Проникновение в образец переменного электрического поля, приложенного к его поверхности, при частотах, близких к плазменной  $\omega_p$ : для кривых *1*, *2*, *3* отношение  $\omega/\omega_p$  равно 0.9, 1.0 и 1.1 соответственно, а параметр 1 +  $L_1/\omega_p \tau$  = 0.05. Глубина *z* отложена в безразмерных единицах, соответствующих фазе в формуле (18)

Вблизи  $\omega_p$  радикалы в диэлектрической функции (см. (12), (13)) можно разложить по малым  $k^2$ . Тогда приближенный расчет по формуле (14) дает:

$$\frac{E(z)}{E_0} \approx \frac{1}{\epsilon(0,\omega)} + \left(1 - \frac{1}{\epsilon(0,\omega)}\right) \exp\left(iz\kappa \sqrt{\frac{2\epsilon(0,\omega)}{3+2L_0}}\right),$$
$$\epsilon(0,\omega) \equiv 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\tilde{\omega} + iL_1/\tau)}, \quad \left|\epsilon(0,\omega)\right| << 1$$
(18)

соответствующие кривые показаны на рис. 1.

#### 4. Спектр коротковолновых плазмонов

Наконец, обратимся к случаю больших *k* (ради краткости – в газовом приближении и в бесстолкновительном пределе). Строго говоря, этот случай нельзя рассматривать на основании квазиклассического выражения для проводимости

$$\sigma(\mathbf{k},\omega) = -ie^2 \left\langle \frac{v_z^2}{\mathbf{k}\mathbf{v} - \tilde{\omega}} \right\rangle$$
(19)

(ср. (8)), поскольку оно не является инвариантным относительно трансляций в обратной решетке,  $k \rightarrow k + 2\pi/a$ . Трансляционно инвариантную диэлектрическую функцию  $\in (k) \equiv 1 + 4\pi i \sigma(k)/\omega$  можно построить, заметив, что величина  $\hbar \mathbf{k} \mathbf{v}$  есть не что иное, как результат разложения по малым  $\mathbf{k}$  стандартной энергетической разности в формулах квантовой теории возмущений (см., напр., [6]). В точности же эта разность – для спектра (2) – равна

$$\varepsilon(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}/2) - \varepsilon(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}/2) = \hbar v_z (2/a) \sin(ka/2),$$

т.е. *k* в (19) следует заменить на  $Q = (2/a)\sin(ka/2)$ . В результате

$$\in (k,\omega) = 1 + \frac{\kappa^2}{Q^2} \left( 1 - \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - Q^2 v_1^2}} \right).$$
(20)

Таким образом, обычное ограничение  $\hbar k \ll p_F$ ,  $\hbar/a$ , накладываемое на квазиклассические расчеты плазмонного спектра (см., напр., [6]), в данном случае можно снять, поскольку электронный закон дисперсии (2) определен во всей зоне Бриллюэна. Для  $\omega(k)$  из (20) получаем:



**Рис. 2.** Закон дисперсии продольных плазмонов при различных значениях параметра  $b = ame^2 / \hbar^2$ : сверху вниз b = 0.33, 1.0, 3.0

$$\omega(k) = \omega_{p1} \sqrt{\frac{2}{b}} \frac{b + \sin^2(ka/2)}{\sqrt{2b + \sin^2(ka/2)}},$$
(21)

где  $\omega_{p1} = (ev_1/\hbar)\sqrt{2m/a}$ ;  $b = \kappa^2 a^2/4 \equiv ame^2/\hbar^2$ , т.е. отношение периода решетки к «боровскому радиусу». Поскольку последний (при  $m \sim m_0$ ) порядка  $10^{-8}$  см, параметр *b* может оказаться большим, в особенности в искусственных сверхрешетках с большим расстоянием между проводящими слоями. В таком случае спектр (21) представляет собой узкую, а при малых эффективных массах – сравнительно широкую зону (рис. 2):

$$\omega_p^{\max} / \omega_{p0} - 1 = (b+1) / \sqrt{b^2 + b/2} - 1 \approx \begin{cases} 3/4b & (b >> 1) \\ \sqrt{2/b} & (b << 1) \end{cases}$$
(22)

Декремент статического экранирования к заменяется на

$$\kappa = (2/a) \operatorname{arsh}(\sqrt{b}). \tag{23}$$

#### 5. Двухзонная модель

До сих пор мы предполагали односвязную ФП. Однако электронная структура слоистых «синтетических металлов» довольно сложна, так что вполне вероятно наличие двух (например, электронной и дырочной) долин типа (2) с различными значениями  $(v_z)_{max}$  :  $v_{12} = Bv_{11}$  ( $B \ge 1$ ). Как было показано для изотропного металла [10], в двухдолинном случае ФЖВ (уже в простейшей его форме  $L(\mathbf{p}, \mathbf{p'}) = L_{\alpha\beta}$ ;  $\alpha, \beta = 1, 2$ ) делает возможным существование продольной коллективной моды типа электронного нуль-звука при сравнительно низких частотах,  $\tau^{-1} << \omega << \omega_p$ . Ее фазовая скорость  $V = uv_{12}$  удовлетворяет характеристическому уравнению

$$D(k) \equiv \sum \eta_{\alpha} W_{\alpha} + L W_1 W_2 = \eta_1 W(Bu) + \eta_2 W(u) + L W(Bu) W(u) = 0, \quad (24)$$

где

$$\eta_{\alpha} \equiv m_{\alpha} / (m_1 + m_2); \quad L \equiv \eta_1 \eta_2 (L_{11} + L_{22} - L_{12} - L_{21}), \tag{25}$$

а функциональный вид  $W(u) \equiv W(\tilde{\omega}/kv_{12})$  в нашем случае дается формулой (8). Уравнение (24) имеет вещественный корень (u > 0) только при достаточной интенсивности ФЖВ, именно при



**Рис. 3.** Пороговые значения параметра ФЖВ  $L_{\min}$  в зависимости от отношения скоростей *В* для квазидвумерного (нижняя кривая) и изотропного спектров (в этом случае  $W(B) = = 1 + \frac{B}{2} \ln \left( \frac{B-1}{B+1} \right)$ , см. (8));  $\eta_2$  принято равным 0.5.

$$L \ge L_{\min}(B) = -\eta_2 / W(B) \tag{26}$$

Как видно на рис. 3, в квазидвумерном металле пороговые значения  $L_{\min}$  оказываются значительно меньшими, чем в изотропном металле при тех же B, особенно вблизи B = 1.

В этом – вырожденном – случае  $L_{\min} = 0$ , а решение уравнения (24) есть

$$u(L) = (1+L)/\sqrt{1+2L} .$$
(27)

Рассматриваемая волна представляет собой антифазные парциальные колебания электронных плотностей в обеих долинах. Ввиду (приближенной) электронейтральности металла такую волну затруднительно наблюдать в электрических экспериментах. Однако упругая сила, порождаемая неравновесным распределением носителей, дает возможность детектировать электронный нуль-звук по сопутствующей ему упругой волне с фазовой скоростью  $\approx V$ . Этот эффект наблюдался в ряде обычных металлов (W, Al, Ga; см. [11]). Его можно описать, решая совместно электронное кинетическое уравнение и уравнение теории упругости для полупространства с заданными колебаниями границы  $u_0 \exp(-i\omega t)$ .

Не вдаваясь в детали расчета, выпишем результат в *k*-представлении:

$$U(k) = \frac{2U_0}{ik} \left[ 1 + \frac{\omega^2}{s^2 k^2 (1+R) - \omega^2} \right], R(k) = \frac{\omega \Lambda^2 \langle 1 \rangle}{\tilde{\omega} \rho s^2} \eta_1 \eta_2 (1+L) \left( 1 - W_1 W_2 \frac{1+L}{D(k)} \right), (28)$$

где  $\rho$  – массовая плотность образца, *s* – продольная скорость звука. Мы предполагаем, что *s* << *v*<sub>1</sub>. При этом *U*(*k*) имеет два существенно различных полюса: первый,  $k_S \approx \omega/s$ , относится к обычному звуку; второй же,  $k_{IS}$ , близок к корню уравнения (24) и описывает добавочную упругую волну. Простая оценка ее относительной величины может быть получена из (28) в вырожденном случае ( $v_{11} \approx v_{12} \equiv v_1$ ):

$$U_{0S}(z) \cong U_0 \frac{\omega \Lambda^2 \langle 1 \rangle}{\tilde{\omega} \rho v_1^2} \eta_1 \eta_2 \frac{2L}{1+L} \exp\left(\frac{i\tilde{\omega} z}{v_1} \frac{\sqrt{1+2L}}{1+L}\right).$$
(29)

53

Это выражение пропорционально  $v_1^{-2}$  – вместо  $v_F^{-2}$  в обычном металле. Мы можем предположить, что  $\Lambda$ , разность между константами деформационного потенциала в долинах 1 и 2, не имеет специфической малости в слоистых проводниках. В них, в таком случае, данный эффект (на небольших расстояниях от границы,  $z \leq v_1 \tau$ ) был бы значительно более интенсивным. Однако для его наблюдения необходимы достаточно чистые образцы и низкие температуры.

#### 6. Выводы

Приведенный модельный расчет электродинамических характеристик слоистого проводника показывает отличие таковых от случая изотропного металла с той же плотностью носителей заряда, в частности, существенное понижение активационной частоты и скорости продольных плазменных колебаний, распространяющихся по нормали к слоям. Кроме того, случай квазидвумерного спектра носителей может быть более благоприятным для наблюдения электронного нуль-звука.

В заключение укажем на стойкий интерес исследователей к электродинамическим свойствам проводящих модификаций углерода (см., например, [12]). Электромагнитное облучение может применяться и в чисто практических целях, в том числе в процессе дегазации каменного угля [13, 14].

Автор признателен Э. П. Фельдману за обсуждение работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. А.И. Буздин, Л.Н. Булаевский. УФН 144, №3 (1984).
- 2. J. Vosnitza. Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors. Vol. **134** in Springer Tracts in Modern Physics, Springer (1996).
- 3. J. Singleton. Studies of Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors Based on BEDT-TTF Using High Magnetic Fields in Reports on Progress in Physics **116** (2000).
- 4. Л.Д. Ландау. ЖЭТФ. 1957. Т.**32**. С. 59.
- 5. В.М. Гохфельд, В.Г. Песчанский. УФЖ 37, №10 (1992).
- D. Pines and Ph. Nozieres. The Theory of Quantum Liquids. Vol.1. W.A. Benjamin, Inc., New York - Amsterdam. 1966.
- 7. Л.Д. Ландау. ЖЭТФ. 1946. Т.16. С. 574.
- 8. В.М. Гохфельд, М.И. Каганов, Г.Я. Любарский. ЖЭТФ. 1987. Т. 92, № 2. С. 523.
- 9. И.К. Козлов. Современные проблемы электронной спектроскопии. М., 1978.
- 10. Dunin S. Z. and Fetisov T. P. Fiz. Tekh. Poluprovodn. 1972. V. 14, #1, P. 270.
- E.V. Bezugly, N.G. Burma, E.Yu. Deineka and V.D. Fil'. Sverkhprovodimost'. 1991. V.4, #4. P. 661.
- 12. А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов. Фуллерены. УФН, 1993, т. 163, №2.
- Mingju Liu and Xueqiu He. Electromagnetic Response of outburst-prone Coal // Intern. Journal of Coal Geology. 2001. – Vol. 45. – P. 155 – 162.
- А.Д. Алексеев, А.К. Кириллов, А.Г. Мнухин, А.М. Брюханов. Электромагнитное воздействие на угольный пласт для активации процесса дегазации // Физико–технические проблемы горного производства. 2006. – № 9. – С. 5–19.