Теория экранирования Линдхарда

Выполнил:
студент 4 курса
группы 23Ф181
Евдокимов Андрей

Теория Линдхарда

— это метод расчета эффекта экранирования электрического поля электронами в твердом теле. Он базируется на квантовой механике.

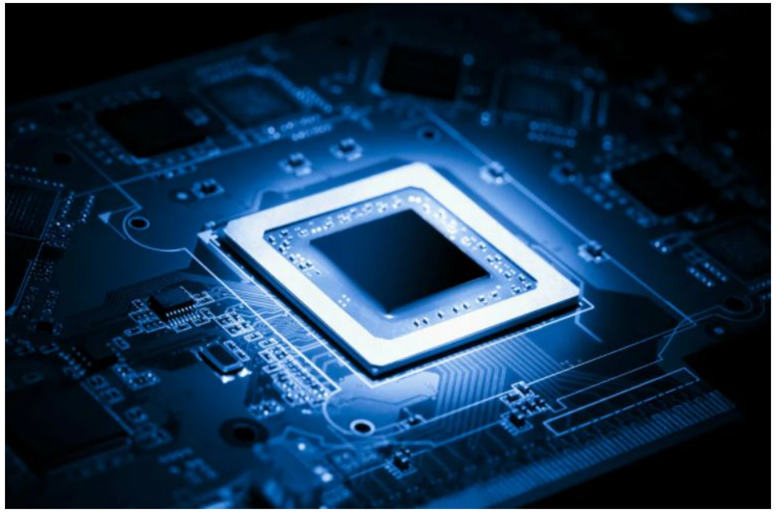
Экранированием называется локализация электромагнитного поля в определенном пространстве путем ограничения его распространения всеми возможными способами.

Эффект экранирования в твердом теле

Каждый электрон обладает отрицательным зарядом. Согласно взаимодействию Кулона, отрицательные заряды отталкиваются друг от друга. Следовательно, этот электрон будет отталкивать другие электроны, создавая вокруг себя небольшую область, в которой электронов меньше. Эту область можно рассматривать как положительно заряженную дырку. Это экранирующее отверстие имеет эффект наложенного положительного заряда, который гасит электрическое поле, создаваемое электроном.

Почему изучение этого эффекта важно?

Электронные свойства полупроводников составляют основу новейшей и современной технологической революции.



Полупроводники очень чувствительны к добавлению носителей, которые могут быть введены в систему путем легирования кристалла атомами из другой группы периодической системы, электронной инжекции или оптического возбуждения.

Математическая постановка задачи

Формула Линдхарда позволяет оценить вклад эффекта экранирования на диэлектрическую проницаемость.

Вывод формулы:

6.1 Пространственная и временная дисперсия.

При приложении к твердому телу внешнего электрического поля появляется электрический ток$\mathbf{j}$ или вектор смещения $\mathbf{D}$. Эти величины связаны между собой соотношением$\mathbf{j} = \frac{1}{4\pi}\frac{\partial(\mathbf{D}-\mathbf{E})}{\partial t}$, следующим из уравнений Максвелла, поэтому одни и те же рассуждения можно применять и к току, и к смещению. В линейном приближении по полю связь между током (или вектором смещения) и приложенным электрическим полем называется линейным откликом. В случае однородной и стационарной среды линейный отклик в общем виде может быть записан как

$$D_\alpha(\mathbf{r},t) = \int d^3\mathbf{r}' \int\limits_{-\infty}^{t} dt'\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t')E_\beta(\mathbf{r},t), \tag{6.1}$$

то есть $\mathbf{D}$ (или $\mathbf{j}$) определяется не только локальным в пространстве и времени полем, но и полем в предыдущие моменты времени и полем в соседних точках. Такая нелокальная в пространстве и/или во времени зависимость называется, соответственно, пространственной и временной дисперсией.

Соотношение (6.1) приобретает более простой и привычный вид, если к нему применить преобразование Фурье по координатам и по времени:

$$D_\alpha(\mathbf{k},\omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)E_\beta(\mathbf{k},\omega), \quad D_\alpha(\mathbf{r},t) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}D_\alpha(\mathbf{k},\omega), \tag{6.2}$$

где $E_\beta(\mathbf{k},\omega)$ и $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)$ также связаны с $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t)$ и $E_\beta(\mathbf{r},t)$ формулой обращения Фурье. Зависимостьε от $\mathbf{k}$ и ω отражает наличие, соответственно, пространственной и временной дисперсии. Задание комплексного ε эквивалентно заданию комплексной проводимостиσ:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{\alpha\beta}. \tag{6.3}$$

Так что можно описывать линейный отклик твердого тела на электрическое поле либо на языке комплексной диэлектрической проницаемости, либо на эквивалентном языке комплексной проводимости.

6.2 Вычисление диэлектрической проницаемости с помощью теории возмущений.

Найдем, какие возникают возмущения плотности заряда $\delta\rho$ и потенциала U при приложении стороннего возмущающего потенциала V. Внешний потенциал вызовет перераспределение электронов с плотностью $\delta\rho$, которая, в свою очередь, создаст дополнительный электрический потенциал Φ. При этом электроны будут чувствовать полный потенциал

$$U = \Phi + V. \tag{6.4}$$

При вычислении линейного отклика можно воспользоваться преобразованием Фурье. В результате мы вычислим отклик на гармоническое электрическое поле. А отклик на возмущение с произвольной зависимостью от $\mathbf{r}$ и t может быть вычислен как сумма откликов на гармоники $\exp(i\mathbf{kr} - i\omega t)$, на которые он разложен по Фурье. Итак, ищем отклик на внешний потенциал $V_q \exp(i\mathbf{qr} + i\omega t - 0t)$, где $-i0$ – бесконечно малая добавка к частоте, учитывающая, что поле когда-нибудь затухнет, и позволяющая в последующих расчетах формально правильно выполнять интегрирование.

Пусть в отсутствие внешнего потенциала V электроны описываются полным набором блоховских волновых функций $\Psi_{n\mathbf{k}} \equiv |\mathbf{k}\rangle$ в состояниях с энергией $E_{\mathbf{k}}$ (в схеме расширенных зон можно не писать номер зоны, поскольку номера различных зон можно задавать различными векторами обратной решетки). Из теории возмущений для потенциала, периодически зависящего от времени волновая функция под действием возмущения принимает вид:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = |\mathbf{k}\rangle + eU_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\langle \mathbf{k}' | e^{i\mathbf{qr}} | \mathbf{k} \rangle}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} - \hbar(\omega - i0)} |\mathbf{k}'\rangle, \tag{6.5}$$

где используется тот факт, что электроны чувствуют полный потенциал U.

Возмущение плотности заряда $\delta\rho = \rho - \rho(V = 0)$

$$\delta\rho = -e \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})[|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 - 1].$$

В линейном приближении по $U_{\mathbf{q}}$:

$$\delta\rho_{\mathbf{q}} = -e \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[|\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle|^2 + 2U_{\mathbf{q}} e \frac{f(\mathbf{k}) \left|\langle\mathbf{k}'|e^{i\mathbf{qr}}|\mathbf{k}\rangle\right|^2}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} - \hbar(\omega - i0)} - 1 + o(U_{\mathbf{q}}) \right]. \tag{6.6}$$

В матричном элементе при суммировании по $\mathbf{k}'$ сохранятся лишь компоненты с $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}$

$$\delta\rho_{\mathbf{q}} = -2e^2 U_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{G}} \frac{f(\mathbf{k}) \left|\langle\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}|e^{i\mathbf{qr}}|\mathbf{k}\rangle\right|^2}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}} - \hbar(\omega - i0)}. \tag{6.7}$$

Воспользуемся теперь свойством преобразования Фурье для действительной величины $\rho(\mathbf{q}, \omega) = \rho^*(-\mathbf{q}, -\omega)$. Получим:

$$\delta\rho_{\mathbf{q}} = -2e^2 U_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{G}} \frac{f(\mathbf{k}) \left|\langle\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|e^{i\mathbf{qr}}|\mathbf{k}\rangle\right|^2}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{G}} + \hbar(\omega - i0)} = -2e^2 U_{\mathbf{q}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}},\mathbf{G}} \frac{f(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{q} + \mathbf{G}) \left|\langle\tilde{\mathbf{k}}|e^{i\mathbf{qr}}|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{q} + \mathbf{G}\rangle\right|^2}{E_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{q}+\mathbf{G}} - E_{\tilde{\mathbf{k}}} + \hbar(\omega - i0)}, \tag{6.8}$$

где во втором равенстве (6.8) мы сделали замену переменных$\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{G}=\tilde{\mathbf{k}}$; $\mathbf{G}\to-\mathbf{G}$ Возьмем в качестве $\delta\rho_{\mathbf{q}}$ полусумму уравнений (6.7) и (6.8):

$$\delta\rho_{\mathbf{q}} = -e^2 U_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{G}} \frac{[f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G})] \left|\langle\mathbf{k}|e^{i\mathbf{qr}}|\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}\rangle\right|^2}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}} - \hbar(\omega - i0)}. \tag{6.9}$$

Подставим (6.9) в уравнение Пуассона $-\nabla^2\Phi = 4\pi\delta\rho$ (которое после преобразования Фурье имеет вид $q^2\Phi_{\mathbf{q}} = 4\pi\delta\rho_{\mathbf{q}}$) и подставим из (6.4) $\Phi_{\mathbf{q}}$ в виде $\Phi_{\mathbf{q}} = U_{\mathbf{q}} - V_{\mathbf{q}}$. В результате получим

$$U_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}} + U_{\mathbf{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{G}} \frac{[f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G})] \left|\langle\mathbf{k}|e^{i\mathbf{qr}}|\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}\rangle\right|^2}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}} - \hbar(\omega - i0)}. \tag{6.10}$$

По определению диэлектрической проницаемости она описывает ослабление потенциала средой$U_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}}/\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$. Таким образом из (6.10) следует

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{G}} \frac{[f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G})] \left|\langle\mathbf{k}|e^{i\mathbf{qr}}|\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}\rangle\right|^2}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}} - E_{\mathbf{k}} + \hbar(\omega - i0)}. \tag{6.11}$$

Это и есть формула Линдхарда для диэлектрической проницаемости. Видно, что вклад в диэлектрическую проницаемость дают виртуальные переходы электронов между состояниями$|\mathbf{k}\rangle$ и $|\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}\rangle$.

Используем теперь формулу Линдхарда для вывода нескольких фундаментальных свойств металлов и полупроводников.

6.3 Экранирование статического ($\omega = 0$) поля в проводниках.

Рассмотрим сначала диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(0, \mathbf{q})$ в длинноволновом пределе $q \to 0$, т.е. отклик на плавный потенциал. В пределе $q \to 0$ можно упростить формулу Линдхарда (6.11). Эта формула содержит вклады, относящиеся к разным зонам ($\mathbf{G} \neq 0$) и от состояний в одной зоне $\mathbf{G} = 0$). Причем, вклад от состояний ($|\mathbf{k}\rangle$ и $|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle$, относящихся к одной зоне, возможен только, если $f(\mathbf{k}) \neq f(\mathbf{k}+\mathbf{q})$, то есть если в зоне имеются как пустые, так и занятые состояния. Рассмотрим вклад в ε от состояний одной зоны, иными словами, вклад электронов проводимости. Обозначим сумму слагаемых с $\mathbf{G}$ (а она в пределе $q \to 0$, как мы сможем убедиться позднее, стремится к константе) как $\kappa - 1$. Разложим теперь все величины в (6.11) в ряд по малым q с точностью до первых неисчезающих членов:

$$E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}) \approx \mathbf{q}\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}); \quad f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \approx -q\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} E(\mathbf{k}); \quad \langle \mathbf{k}|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle \approx \langle \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle;$$

Получим:

$$\varepsilon(0, q) \simeq \kappa + \frac{4\pi e^2}{q^2}\int\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) d^3\mathbf{k} = \kappa + \frac{4\pi e^2}{q^2}\int\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) N(E) dE \equiv \kappa\left(1 + \frac{\lambda^2}{q^2}\right), \tag{6.12}$$

где введено обозначение λ^2 для интеграла с сомножителем $4\pi e^2$. Подобный интеграл мы вычисляли в предыдущей лекции. В металле, где f близка к ступеньке (вырожденный газ) $\dfrac{\partial f}{\partial E} \sim \delta(E - E_F)$ и $\lambda^2 = \dfrac{4\pi e^2}{\kappa} N(E_F)$, что при спектре $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ дает плотность состояний $N(E) = \dfrac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2}\sqrt{E}}{2\pi^2\hbar^3}$, учитывая, что $n = \dfrac{2\cdot(\frac{4}{3}\pi k_F^3)}{(2\pi)^3}$, мы получим

$$\lambda^2 = \frac{4\pi e^2}{\kappa}\frac{3}{2}\frac{n}{E_F} \equiv \frac{4me^2 n^{1/3}}{\hbar^2\kappa}. \tag{6.13a}$$

Литература

- Haug, Hartmut. Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors (4th ed.) (англ.). — World Scientific Publishing Co. Pt e. Ltd., 2004. — ISBN 981-238-609-2. (129-137);
- Кафедра твердотельной электроники и радиофизики МФТИ Курс лекций для студентов IV курса ФФКЭ – “Электронные свойства твердых тел”, профессор С.Н.Артеменко. (32-45).