

金属中声学等离激元的产生条件

任燕如 尹道乐

(北京大学物理系)

1980年8月28日收到

提 要

本文从相互作用布洛赫电子气的介电函数出发,导出了金属中存在确定的声学等离激元的条件,并对 A-15 化合物是否满足这个条件作了讨论,认为在 A-15 化合物中声学等离激元的存在尚缺乏足够的证据。

一、引 言

自从 Pines^[1] 于 1956 年提出在包含两种不同带电粒子的系统中存在一种声学等离激元 (acoustic plasmon, 以下简称 AP) 以来, Fröhlich^[2] 于 1968 年提出了超导的 AP 机制, 认为以 AP 代替声子为媒介, 也可以在电子间产生相互吸引, 从而形成超导电子对。接着, 有些作者试图用 AP 机制来解释过渡金属及化合物的超导电性及有关性质^[3-5]。本文的目的是讨论实际金属中 AP 的形成条件。和前引文献不同的是, 我们将不首先假定金属中存在有两种不同有效质量的电子, 而是从处于周期势场中的相互作用布洛赫电子气的普遍介电函数出发, 得出声学等离激元的色散关系式, 然后通过对费密面结构的分析, 讨论 AP 形成的条件, 最后简单讨论在 A-15 化合物中产生 AP 的可能性。

二、布洛赫电子的介电函数

处于周期势场中的相互作用电子气在随机位相近似 (RPA) 下的普遍介电函数是一个矩阵^[6,7], 其矩阵元满足下列方程组:

$$\sum_{K'} \epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega) U(\mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega) = U^{\text{ex}}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \omega), \quad (1)$$

式中 $\mathbf{K}$ 与 $\mathbf{K}'$ 是倒格矢, $U^{\text{ex}}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \omega)$ 是外电场的势,

$$U^{\text{ex}}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \omega) = \delta_{\mathbf{K}0} U^{\text{ex}}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{cases} U^{\text{ex}}(\mathbf{q}, \omega) & (\mathbf{K} = 0), \\ 0 & (\mathbf{K} \neq 0), \end{cases} \quad (2)$$

$U(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \omega)$ 是晶体中总电场的势, 即外势与感生势的和。矩阵元 $\epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega)$ 的表达式为

$$\epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega) = \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} + \frac{8\pi e^2}{|\mathbf{q} + \mathbf{K}|^2} \sum_{\mathbf{k}l\mathbf{l}'} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{l}'} - n_{\mathbf{k}l}}{\omega - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{l}'} - E_{\mathbf{k}l}) + i\delta} \\ \times \langle \mathbf{k}l | e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{l}' \rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{l}' | e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{k}l \rangle, \quad (3)$$

式中 $|\mathbf{k}l\rangle$ 是波矢为 $\mathbf{k}$ 能带标号为 l 的布洛赫态, $E_{\mathbf{k}l}$ 与 $n_{\mathbf{k}l}$ 分别满足本征方程

$$H_0|\mathbf{k}l\rangle = E_{\mathbf{k}l}|\mathbf{k}l\rangle \quad (4)$$

及

$$\rho_0|\mathbf{k}l\rangle = n_{\mathbf{k}l}|\mathbf{k}l\rangle, \quad (5)$$

式中 H_0 与 ρ_0 分别是无相互作用布洛赫电子气的哈密顿算符(包括动能和晶格周期势)和电子密度算符, $n_{\mathbf{k}l}$ 是费密分布函数. 显然, 等离激元的色散关系由

$$\det \epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 0 \quad (6)$$

得出.

在长波极限 ($q \rightarrow 0$) 下求解方程 (6), 如果忽略倒逆 (umklapp) 过程, 则 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ 只剩下第一个对角元 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$. 把对能带 l' 的求和分成带内 ($l = l'$) 和带间 ($l \neq l'$) 分别考虑, 并对带间项认为 $\omega < \omega_{ll'}(\mathbf{k}) = E_{\mathbf{k}l} - E_{\mathbf{k}l'}$, 就得到 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ 的实部、虚部分别为

$$\epsilon_1(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_0 - \frac{e^2}{\pi^2} \sum_j \int_F ds_j \frac{v_{\mathbf{k}j} \cos^2 \theta_j}{\omega^2 - [\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}]^2}, \quad (7)$$

$$\epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\pi q} \sum_j \int_F ds_j \cos \theta_j \delta(\omega - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}), \quad (8)$$

式中 ϵ_0 是一个与 $\mathbf{q}, \omega$ 无关的常数, $\int_F ds_j$ 是对第 j 带费密面的面积分, $\mathbf{v}_{\mathbf{k}j}$ 是第 j 带波矢 $\mathbf{k}$ 的费密速度, θ_j 是 $\mathbf{q}$ 与费密面法向的夹角, 求和对费密面各带进行.

三、不衰减 AP 产生的条件

为了得到不衰减的等离激元, 要求 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ 的实部、虚部分别为零.

由 (8) 式的 δ 函数可以看出, 只有在

$$\omega > |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}|_{\max} \quad (9)$$

或

$$0 < \omega < |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}|_{\min} \quad (10)$$

的条件下, 这个带对 $\epsilon_2(\mathbf{q}, \omega)$ 的贡献才是零. 设费密面是连通曲面, 而且只通过一个带, 可以看出, 在 (9) 式限定的区域内, $\epsilon_1(\mathbf{q}, \omega) = 0$ 有一个解, 对应的是光学等离激元 (optical plasmon, 简称 OP); 而由于 $|\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}j}|_{\min} = 0$, 在 (10) 式限定的区域内无解. 于是, 在这种金属中不存在不衰减的 AP 振动模式.

对于两带情形, 要使得 $\epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) = 0$, 可能有三种情形, 即

$$\omega > |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}1}|_{\max} \geq |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}2}|_{\max}, \quad (11)$$

$$|\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}2}|_{\max} < \omega < |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}1}|_{\min} \quad (12)$$

及

$$0 < \omega < |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}2}|_{\min} \leq |\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}1}|_{\min}. \quad (13)$$

分别在这三个条件下求 $\epsilon_1(\mathbf{q}, \omega) = 0$ 的解, 将发现 (11) 式限定的区域内存在 OP, (12) 式限定的区域内可以存在 AP, 而 (13) 式限定的区域内无解 (见图 1).

以上讨论可推广到多带费密面的情形. 由此可见, 我们用相互作用布洛赫电子气的介电函数推出的金属中产生不衰减 AP 的条件比通常引用的两种有效质量电子的 Jellium 模型的 AP 条件^[2,3]

$$qv_d < \omega < qv_s \quad (14)$$

要求严格得多. 它不仅对两个费密速度的大小有一定要求, 而且要求在与 q 垂直方向的某个邻域内至少有一个带的费密面是不连通的. 从实际金属的费密面结构来看, 实现上述条件是很困难的.

四、衰减的 AP

如前所述, 要实现不衰减的 AP 是非常困难的. 文献 [2—6] 用两带 Jellium 模型来讨论, 得到 (14) 式作为 AP 的形成条件, 而没有考虑介电函数的虚部 $\epsilon_2(q, \omega)$ 的影响, 因而所得到的一般说来是衰减的 AP 振荡. 对于有衰减的元激发, 它的频率是一个复数 $\omega = Q + i\gamma$. 要 $|\gamma/Q| \ll 1$, 即衰减相对于能量来说很小, 它才能看成是某种确定的准粒子. 与文献 [8] 中讨论离子与电子相互作用完全类似的办法, 得到这个条件是

$$\left| \frac{\gamma}{Q} \right| \propto \left(\frac{m_1 n_2}{m_2 n_1} \right)^{\frac{1}{2}} \ll 1, \quad (15)$$

式中 m 是电子的有效质量, n 是电子数密度. 对于声子, $|\gamma/Q|$ 大约在 10^{-2} 数量级, 所以声子是一种确定的元激发. 对于过渡金属中的 AP, 早已有人指出^[9], 由于过渡金属中一般 d 电子的数目多于 s 电子的数目, 而 d 电子的有效质量比起 s 电子的有效质量又大得不够多 (这里 $1 = s, 2 = d$), 所以不存在确定的 AP.

至于 A-15 化合物, 我们按照 Ruvalds 等人^[10]的做法, 把 s 和 p 电子作为“轻质电子”

表 1

A_3B	n_l	n_h	G_l	G_h	$\left(\frac{m_l}{m_h} \frac{n_h}{n_l} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{G_l}{G_h} \frac{n_h}{n_l} \right)^{\frac{1}{2}}$
V_3Al	6	9	12.0388	134.2462	0.3678
V_3Ga	6	9	17.8453	215.0216	0.3528
V_3Si	7	9	10.4468	146.6013	0.3027
V_3Ge	7	9	5.2592	86.3057	0.2799
V_3Sn	7	9	5.4387	94.3975	0.2722
Nb_3Al	6	12	14.7507	119.1684	0.4976
Nb_3Ga	6	12	15.8340	113.5738	0.5280
Nb_3Si	7	12	5.2712	52.5107	0.4148
Nb_3Ge	7	12	6.5499	67.3394	0.4083
Nb_3Sn	7	12	10.2121	101.949	0.4144

注: G_l, G_h 分别是“轻质电子”与“重质电子”的分波态密度.

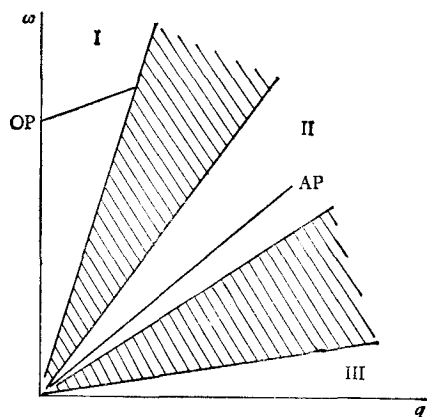


图 1 用相互作用布洛赫电子气的介电函数导出的不衰减 AP 的产生条件. 阴影表示 $\epsilon_2(q, \omega) \neq 0$ 的区域; I, II, III 分别对应于 (11), (12), (13) 式所限定的区域

(用下标 l 表示), 把 d 电子作为“重质电子” (用下标 h 表示), 按照文献 [5] 中的数据, $n_h = 12$, $n_l = 7$, $m_l \doteq m_e$, $m_h \doteq 5m_e$ (m_e 是电子静质量), 于是 $\left(\frac{m_l}{m_h} \frac{n_h}{n_l}\right)^{\frac{1}{2}} = 0.585$. 另外, 我们又采用 Klein 等人^[10]对若干种 A-15 化合物能带的计算数据, 推算了上述比值, 见表 1. 由表 1 中看出, 最大的是 0.5280(Nb₃Ga), 最小的是 0.2722(V₃Sn). 从这些数据来看, 我们认为, 说 A-15 化合物中存在着确定的 AP, 还缺乏足够的证据.

五、结 论

1. 从更为接近实际情况的相互作用布洛赫电子气的介电函数推导出来的不衰减 AP 产生条件 (13) 远比从两种有效质量电子的 Jellium 模型推导出来的条件 (14) 苛刻, 因而很难实现. 2. 从两带 Jellium 模型出发, 按 (14) 式的条件得到的 AP 是衰减的, 还必须满足条件 (15) 才能使这种 AP 具有确定的准粒子性质. 3. 按照最近关于 A-15 化合物能带计算的资料验证, 发现条件 (15) 不能得到很好的满足. 因此, 认为 A-15 化合物中存在着有明确意义的 AP 振动模式并引起超导, 尚缺乏充分的证据.

参 考 文 献

- [1] D. Pines, *Can. J. Phys.*, **34**(1956), 1379.
- [2] H. Fröhlich, *J. Phys.*, **C1**(1968), 544.
- [3] A. Rothwarf, *Phys. Rev.*, **B2**(1970), 3560.
- [4] B. N. Ganguly, R. F. Wood, *Phys. Rev. Lett.*, **28**(1972), 681.
- [5] J. Ruvalds, L. M. Kahn, *Phys. Lett.*, **70A**(1979), 477.
- [6] S. L. Adler, *Phys. Rev.*, **126**(1962), 413.
- [7] N. Wiser, *Phys. Rev.*, **129**(1963), 62.
- [8] R. Brout, P. Carruthers, *Lectures on the Many-electron Problem*, Interscience, New York, (1963).
- [9] H. Gutfeund, Y. Unna, *J. Phys. Chem. Solids*, **34**(1973), 1523.
- [10] B. M. Klein *et al.*, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 6411.

CONDITION FOR THE FORMATION OF ACOUSTIC PLASMONS IN METALS

REN YAN-RU YIN DAO-LE

(Department of Physics, Peking University)

ABSTRACT

By analysing the dielectric function of an interacting Bloch electron gas, the condition for the formation of acoustic plasmons (AP) as well-defined quasiparticles in metals has been derived. Discussions are given on whether this condition is satisfied for A-15 compounds, with the conclusion that the evidence for the existence of AP as a kind of quasiparticle in these compounds is insufficient until now.