ЖЭТФ, 2017, том 152, вып. 1 (7), стр. 177–188

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТЕНЗОР НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В. П. Курбацкий[*]

Запорожский национальный технический университет
69063, Запорожье, Украина

Поступила в редакцию 5 ноября 2016 г.

На основе теории матрицы плотности в приближении времени релаксации введен диэлектрический тензор низкоразмерных металлических систем. Исследованы его свойства. Доказано, что анизотропия и нелокальность являются определяющими чертами отклика низкоразмерных систем на электромагнитное поле. Получено, в частности, выражение для диэлектрического тензора металлических пленок нанометровой толщины. Показано, что компоненты диэлектрического тензора сводятся к диэлектрической функции Друде для однородного металла, когда толщина пленки намного превышает эффективную длину свободного пробега электронов. При том же условии становится правомерным применение классической функции распределения для описания электронов в пленке.

DOI: 10.7868/S004445101707015X

1. ВВЕДЕНИЕ

У низкоразмерных металлических систем один, два или три размера из трех имеют порядок фермиевской длины волны электронов в бесконечном металле, λ_F^0, которая составляет 0.3–0.9 нм, а остальные размеры намного больше этой величины. К таким системам относятся тонкие металлические пленки, нити и нанометровые частицы. В отклике низкоразмерных металлических систем на электромагнитное поле проявляются анизотропия и нелокальность (пространственная дисперсия).

В работах [1–3] по низкоразмерным металлическим системам в электромагнитном поле использовалось приближение «диагонального отклика», в котором принимается, что фурье-компоненты индукции и напряженности электрического поля в системе пропорциональны друг другу [1]. Другими словами, система рассматривается как однородная среда, хотя и ограниченная. Тем самым не учитываются нелокальность и анизотропия отклика системы на электромагнитное поле. В работе [4], хотя и проводится различие между продольной и поперечной проводимостями тонкой металлической пленки в электромагнитном поле, однако игнорируется нелокальность отклика. Как будет показано ниже, приближение диагонального отклика является грубым даже при размерах системы, на порядок превышающих λ_F^0.

В работе [5] изучались нелокальные эффекты при взаимодействии электромагнитного излучения с металлической пластиной в модели кинетического уравнения Больцмана. В частности, был сделан вывод, что при толщине пластины в несколько нанометров в ее отклике на электромагнитное поле отсутствуют анизотропия и размерная зависимость, и он характеризуется диэлектрической функцией Друде. В связи с этим возникает необходимость проверки правомерности классического способа описания для пленок такой толщины.

В качестве модели низкоразмерных металлических систем в данной работе используется электронный газ, заключенный в пределах бесконечно глубокой потенциальной ямы. Потенциальная энергия электронов определяется выражением

$$V(A) = \begin{cases} 0, & A \in \Omega, \\ \infty, & A \notin \Omega, \end{cases} \tag{1}$$

где Ω — область пространства, ограниченная поверхностями системы. Граничным условием является либо обращение в нуль волновой функции электрона на границе области Ω, либо условие периодичности Борна – Кармана для направления, по которому система имеет большой размер.

[*] E-mail: kurbat@zntu.edu.ua

В разд. 2 применен аппарат матрицы плотности для нахождения отклика системы на высокочастотное электромагнитное поле в линейном по полю приближении. В разд. 3 получено общее выражение для диэлектрического тензора низкоразмерных металлических систем, рассмотрены его свойства и возможные применения. В разд. 4 получена формула диэлектрического тензора металлических пленок. В разд. 5 исследован переход к пленкам большой толщины, когда отклик на электромагнитное поле описывается диэлектрической функцией Друде. В разд. 6 определена граница области применимости классических методов для электронного газа в пленках малой толщины.

2. ФОРМАЛИЗМ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

При изложении в этом разделе используются результаты работы [4]. Гамильтониан электрона при помещении системы в высокочастотное электромагнитное поле имеет вид

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса, e — заряд электрона (с учетом знака), m — масса электрона, $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ — векторный потенциал эффективного поля в системе. Выбрана калибровка, в которой скалярный потенциал равен нулю,

$$\varphi = 0, \qquad (3)$$

так что электрическое и магнитное поля, действующие на электроны, равны

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}. \qquad (4)$$

Будем рассматривать добавку к гамильтониану $\delta\hat{H}$, связанную с полем, как возмущение и оставлять в результатах вычислений только линейные по $\mathbf{A}$ величины, отбрасывая члены более высокого порядка малости. Полагаем

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \delta\hat{H}, \qquad (5)$$

где

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \qquad (6)$$

$$\delta\hat{H} = -\frac{e}{2mc}\left(\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right). \qquad (7)$$

Гамильтониан (6) определяет уровни энергии ε_α системы в невозмущенном состоянии:

$$\hat{H}_0\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha\psi_\alpha, \qquad (8)$$

где $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ — волновые функции электронов в отсутствие поля. Для независящих от времени волновых функций стационарных состояний будем также использовать общепринятое обозначение

$$|\alpha\rangle \equiv \psi_\alpha. \qquad (9)$$

Распределение электронов по энергии описывается матрицей плотности. Матрица плотности, соответствующая равновесному состоянию системы в отсутствие поля, имеет вид

$$\hat{\rho}_0 = \left(\exp\left(\beta\left(\hat{H}_0 - \mu_0\right)\right) + 1\right)^{-1}, \qquad (10)$$

где μ_0 — химический потенциал, $\beta \equiv 1/(k_B T)$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, так что

$$\hat{\rho}_0\psi_\alpha = f_\alpha\psi_\alpha, \qquad (11)$$

где $f_\alpha \equiv \left(\exp\left(\beta(\varepsilon_\alpha - \mu_0)\right) + 1\right)^{-1}$ — функция распределения Ферми.

Введем «квазиравновесную» матрицу плотности $\hat{\rho}_{qe} = \hat{\rho}_{qe}(\hat{H})$. Она коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$,

$$\left\{\hat{H}, \hat{\rho}_{qe}\right\} = 0, \qquad (12)$$

и отличается от равновесной матрицы плотности на величину, линейную по полю:

$$\hat{\rho}_{qe} = \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}_{qe}. \qquad (13)$$

Подставляем формулы (5) и (13) в (12) и оставляем линейные по $\mathbf{A}$ члены:

$$\left\{\hat{H}, \delta\hat{\rho}_{qe}\right\} + \left\{\delta\hat{H}, \hat{\rho}_0\right\} = 0, \qquad (14)$$

откуда, принимая во внимание (8) и (11), получаем, что при $\alpha \neq \beta$

$$\langle\alpha|\delta\hat{\rho}_{qe}|\beta\rangle = \frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\langle\alpha|\delta\hat{H}|\beta\rangle. \qquad (15)$$

Предполагаем, что в системе существует некоторый механизм диссипации энергии. Уравнение для матрицы плотности в присутствии электромагнитного поля с учетом диссипации в приближении времени релаксации записывается как

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left\{\hat{H}, \hat{\rho}\right\} = -\gamma\left(\hat{\rho} - \hat{\rho}_{qe}\right), \qquad (16)$$

где $\gamma = 1/\tau$ — скорость релаксации. Ищем решение уравнения (16) в виде

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}, \tag{17}$$

где $\delta\hat{\rho}$ — линейная по полю добавка. После подстановки (17), (13) и (5) в уравнение (16) получаем

$$\frac{\partial \delta\hat{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left\{\hat{H}_0, \delta\hat{\rho}\right\} + \frac{i}{\hbar}\left\{\delta\hat{H}, \hat{\rho}_0\right\} = = -\gamma\left(\delta\hat{\rho} - \delta\hat{\rho}_{qe}\right). \tag{18}$$

В силу линейности уравнения (18) по $\delta\hat{\rho}$ и $\mathbf{A}$ достаточно найти результат для одной фурье-компоненты поля. Полагая в (18)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_\omega(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \tag{19}$$

$$\delta\hat{\rho} = \delta\hat{\rho}_\omega e^{-i\omega t}, \tag{20}$$

получаем

$$-i\omega\delta\hat{\rho}_\omega + \frac{i}{\hbar}\left\{\hat{H}_0, \delta\hat{\rho}_\omega\right\} + \frac{i}{\hbar}\left\{\delta\hat{H}_\omega, \hat{\rho}_0\right\} = = -\gamma\left(\delta\hat{\rho}_\omega - \left(\delta\hat{\rho}_{qe}\right)_\omega\right). \tag{21}$$

Индекс ω в дальнейшем будем опускать. После применения формул (8), (11) и (15) получаем окончательный результат:

$$\langle\alpha|\delta\hat{\rho}|\beta\rangle = \frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\,\frac{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i\hbar\gamma}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - \hbar\omega - i\hbar\gamma}\,\langle\alpha|\delta\hat{H}|\beta\rangle, \quad \alpha \neq \beta. \tag{22}$$

Матрица плотности $\hat{\rho}$ позволяет рассчитать среднее значение любой величины g:

$$\overline{g} = \mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}\hat{g}) \equiv \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\hat{\rho}|\beta\rangle\langle\beta|\hat{g}|\alpha\rangle. \tag{23}$$

Правило (23) мы используем в дальнейшем для нахождения плотности тока в системе.

3. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТЕНЗОР

Согласно формуле (23), плотность тока, индуцированного полем в системе, равна

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|\hat{\rho}|\beta\rangle\langle\beta|\hat{\mathbf{j}}|\alpha\rangle. \tag{24}$$

Матричный элемент плотности тока

$$\langle\beta|\hat{\mathbf{j}}|\alpha\rangle = \int \psi_\beta^*(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)\psi_\alpha(\mathbf{r}')\,dV', \tag{25}$$

где оператор плотности тока определяется формулой

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{e}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}_e'\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\hat{\mathbf{p}}_e'\right), \tag{26}$$

$$\hat{\mathbf{p}}_e' \equiv \hat{\mathbf{p}}' - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}', t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}', t). \tag{27}$$

Его можно представить в виде

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_0 + \boldsymbol{\delta}\hat{\mathbf{j}}, \tag{28}$$

где $\hat{\mathbf{j}}_0$ — оператор тока в отсутствие поля,

$$\boldsymbol{\delta}\hat{\mathbf{j}} \equiv -\frac{e^2}{mc}\,\mathbf{A}(\mathbf{r}', t)\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \tag{29}$$

(считаем, что векторный потенциал — действительная величина, $\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$, чтобы оператор плотности тока (26) был эрмитовым).

Сохраняя только линейные по полю члены, получаем

$$\hat{\rho}\hat{\mathbf{j}} = \hat{\rho}_0\boldsymbol{\delta}\hat{\mathbf{j}} + \delta\hat{\rho}\hat{\mathbf{j}}_0. \tag{30}$$

Как и раньше, предполагаем, что поле представлено одной компонентой $\mathbf{A}_\omega(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)$. Соответствующая компонента плотности тока (без временно́го множителя)

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha|\hat{\rho}_0|\beta\rangle\langle\beta|\boldsymbol{\delta}\hat{\mathbf{j}}|\alpha\rangle + \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha|\delta\hat{\rho}|\beta\rangle\langle\beta|\hat{\mathbf{j}}_0|\alpha\rangle = \\ &= -\frac{e^2}{mc}\,\mathbf{A}(\mathbf{r})\sum_\alpha f_\alpha|\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 + \\ &+ \frac{e}{2m}\sum_{\substack{\alpha,\beta\\ \alpha\neq\beta}}\frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\,\frac{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i\hbar\gamma}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - \hbar\omega - i\hbar\gamma} \times \\ &\times \langle\alpha|\delta\hat{H}|\beta\rangle\left(\psi_\beta^*(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}}\psi_\alpha(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}}\psi_\beta^*(\mathbf{r})\right).\end{aligned} \tag{31}$$

Матричные элементы возмущения (7) представим следующим образом:

$$\langle\alpha|\delta\hat{H}|\beta\rangle = -\frac{e}{2mc}\,\langle\alpha|\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}|\beta\rangle = \frac{e}{2mc} \times \times\int\left(\psi_\beta(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{p}}'\psi_\alpha^*(\mathbf{r}') - \psi_\alpha^*(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{p}}'\psi_\beta(\mathbf{r}')\right)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}')\,dV'. \tag{32}$$

Для гармонических компонент связь (4) между потенциалом и напряженностью электрического поля принимает вид

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{ic}{\omega}\mathbf{E}(\mathbf{r}). \tag{33}$$

Подставляя (32) и (33) в (31), получаем соотношение между плотностью тока и напряженностью электрического поля, которое может быть записано в тензорной форме:

$$j_\mu(\mathbf{r}) = \int \sum_\nu \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') E_\nu(\mathbf{r}')\, dV', \tag{34}$$

где введен тензор проводимости

$$\begin{aligned}\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \frac{ie^2}{m\omega} \sum_\alpha f_\alpha |\psi_\alpha(\mathbf{r}')|^2 \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\delta_{\mu\nu} + \\ &+ \frac{ie^2}{4m^2\omega} \sum_{\alpha,\beta} \frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i\hbar\gamma}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - \hbar\omega - i\hbar\gamma} \times \\ &\times \left(\psi^*_\beta(\mathbf{r})\hat{p}_\mu\psi_\alpha(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r})\hat{p}_\mu\psi^*_\beta(\mathbf{r})\right) \times \\ &\times \left(\psi^*_\alpha(\mathbf{r}')\hat{p}'_\nu\psi_\beta(\mathbf{r}') - \psi_\beta(\mathbf{r}')\hat{p}'_\nu\psi^*_\alpha(\mathbf{r}')\right). \end{aligned} \tag{35}$$

Индукционный ток связан с появлением в системе переменного дипольного момента $\mathbf{P}$ (отнесенного к единице объема):

$$\mathbf{j} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -i\omega\mathbf{P}. \tag{36}$$

Применяя (36) в формуле для индукции электрического поля,

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}, \tag{37}$$

находим, что

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + \frac{4\pi i}{\omega}\mathbf{j}. \tag{38}$$

Принимая во внимание соотношение (34), получаем, что компоненты индукции определяются выражением

$$D_\mu(\mathbf{r}) = \int \sum_\nu \epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') E_\nu(\mathbf{r}')\, dV', \tag{39}$$

в котором диэлектрический тензор выражается через тензор проводимости

$$\epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\delta_{\mu\nu} + \frac{4\pi i}{\omega}\,\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}'). \tag{40}$$

После подстановки (35) в (40) получаем

$$\begin{aligned}\epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{N\omega^2} \sum_\alpha f_\alpha |\psi_\alpha(\mathbf{r}')|^2\right) \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\delta_{\mu\nu} + \\ &+ \frac{\hbar^2 V\omega_p^2}{4mN\omega^2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i\hbar\gamma}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - \hbar\omega - i\hbar\gamma} \times \\ &\times \left(\psi^*_\beta(\mathbf{r})\nabla_\mu\psi_\alpha(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r})\nabla_\mu\psi^*_\beta(\mathbf{r})\right) \times \\ &\times \left(\psi^*_\alpha(\mathbf{r}')\nabla'_\nu\psi_\beta(\mathbf{r}') - \psi_\beta(\mathbf{r}')\nabla'_\nu\psi^*_\alpha(\mathbf{r}')\right), \end{aligned} \tag{41}$$

где введена плазменная частота

$$\omega_p \equiv \sqrt{4\pi e^2 N/mV} \tag{42}$$

(N — число электронов в системе, V — объем системы) и использовано выражение для оператора импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$.

Таким образом, связь между индукцией и напряженностью электрического поля в низкоразмерных металлических системах нелокальная и тензорная. Непосредственно проверяются два свойства диэлектрического тензора, являющиеся следствием общих физических принципов:

$$\epsilon_{\mu\nu}(\omega,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \epsilon_{\nu\mu}(\omega,\mathbf{r}',\mathbf{r}), \tag{43}$$

$$\epsilon_{\mu\nu}(\omega,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \epsilon^*_{\mu\nu}(-\omega,\mathbf{r},\mathbf{r}') \tag{44}$$

(при проверке учитываем, что перестановка индексов суммирования α и β не меняет суммы в (41), так как пределы суммирования по обоим индексам одинаковы). Свойство (43) находится в согласии с обобщенным принципом симметрии кинетических коэффициентов [6].

Соотношение (44) связано с требованием эрмитовости оператора плотности тока (26), учтенным при выводе формулы (41). Для того чтобы оператор плотности тока был эрмитовым, необходимо, чтобы выражение для векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ было действительным. В таком случае коэффициенты фурье-разложения

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{A}_\omega(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} d\omega \tag{45}$$

удовлетворяют условию $\mathbf{A}_{-\omega} = \mathbf{A}^*_\omega$. Такому же условию, как это следует из формулы (33), удовлетворяют коэффициенты разложения напряженности:

$$\mathbf{E}_{-\omega} = \mathbf{E}^*_\omega. \tag{46}$$

Поскольку выражение для отклика на действительное поле должно быть действительным, имеем также

$$\mathbf{D}_{-\omega} = \mathbf{D}^*_\omega. \tag{47}$$

Переписывая (39) в виде

$$\mathbf{D}_{-\omega\mu}(\mathbf{r}) = \int \sum_\nu \epsilon_{\mu\nu}(-\omega,\mathbf{r},\mathbf{r}') \mathbf{E}_{-\omega\nu}(\mathbf{r}')\, dV'$$

и учитывая (46) и (47), приходим к соотношению (44).

Формулы (39) и (41) могут быть записаны в любой ортогональной системе координат с учетом симметрии системы, т. е. могут быть применены к пленкам, нитям и частицам различной формы. Использование их совместно с уравнением

$$\nabla(\nabla\cdot\mathbf{E})-\Delta\mathbf{E}=\frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{D} \qquad (48)$$

позволяет найти поле и различные характеристики низкоразмерных систем, например, коэффициенты отражения и пропускания тонких пленок, а также диссипацию энергии в системе.

Диссипация энергии электромагнитного поля частоты ω в анизотропной немагнитной ($\mu=1$) среде с дисперсией, временно́й и пространственной, определяется соотношением [6]

$$\begin{aligned}Q&=\frac{i\omega}{16\pi}\int\sum_{\mu}\left(D^*_\mu(\mathbf{r})E_\mu(\mathbf{r})-D_\mu(\mathbf{r})E^*_\mu(\mathbf{r})\right)dV=\\&=\frac{i\omega}{16\pi}\iint\sum_{\mu,\nu}\left(\epsilon^*_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')E_\mu(\mathbf{r})E^*_\nu(\mathbf{r}')-\right.\\&\left.\qquad-\epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')E^*_\mu(\mathbf{r}')E_\nu(\mathbf{r}')\right)dV'dV, \qquad (49)\end{aligned}$$

где Q — среднее по времени количество тепла, выделяющееся в системе за 1 с. Меняя местами переменные и индексы во втором слагаемом под двойным интегралом в (49), с учетом (43) получаем

$$\begin{aligned}Q&=\frac{i\omega}{16\pi}\iint\sum_{\mu,\nu}\left(\epsilon^*_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')-\epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\right)\times\\&\qquad\times E_\mu(\mathbf{r})E^*_\nu(\mathbf{r}')\,dV'dV=\frac{\omega}{8\pi}\times\\&\times\iint\sum_{\mu,\nu}\mathrm{Im}\left(\epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\right)E_\mu(\mathbf{r})E^*_\nu(\mathbf{r}')\,dV'dV. \qquad (50)\end{aligned}$$

Для иллюстрации общей теории получим выражение для диэлектрического тензора металлической пленки толщиной в несколько нанометров.

4. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТЕНЗОР МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ

Пусть поверхности пленки $z=0$ и $z=L$ (ось z направлена перпендикулярно к пленке, оси x,y — параллельно ее поверхностям). Продольные размеры пленки намного больше ее толщины $L_x\gg L$, $L_y\gg L$.

Волновые функции электронов запишем в виде

$$\psi_{k_x,k_y,k_n}(x,y,z)=\\=\begin{cases}\sqrt{2/V}\,\exp(ik_xx)\exp(ik_yy)\sin k_nz,\\ -\infty<x,\quad y<+\infty,\quad 0<z<L;\\ 0,\quad z\le 0,\quad z\ge L,\end{cases} \qquad (51)$$

где

$$k_n=\pi n/L,\quad n=1,2,3,\ldots \qquad (52)$$

Спектр значений k_x и k_y квазинепрерывен.

Введем обозначения

$$\epsilon^{(1)}_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\equiv\left(1-\frac{V\omega_p^2}{N\omega^2}\sum_\alpha f_\alpha|\psi_\alpha(\mathbf{r}')|^2\right)\times\\\times\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\delta_{\mu\nu}, \qquad (53)$$

$$\begin{aligned}\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')&\equiv\frac{\hbar^2V\omega_p^2}{4mN\omega^2}\sum_{\alpha,\beta}\frac{f_\alpha-f_\beta}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_\beta}\,\frac{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_\beta-i\hbar\gamma}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_\beta-\hbar\omega-i\hbar\gamma}\times\\&\times\left(\psi^*_\beta(\mathbf{r})\nabla_\mu\psi_\alpha(\mathbf{r})-\psi_\alpha(\mathbf{r})\nabla_\mu\psi^*_\beta(\mathbf{r})\right)\times\\&\times\left(\psi^*_\alpha(\mathbf{r}')\nabla'_\nu\psi_\beta(\mathbf{r}')-\psi_\beta(\mathbf{r}')\nabla'_\nu\psi^*_\alpha(\mathbf{r}')\right), \qquad (54)\end{aligned}$$

так что

$$\epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\epsilon^{(1)}_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')+\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}'). \qquad (55)$$

Рассмотрим вначале второе слагаемое в диэлектрическом тензоре (55). После подстановки (51) в (54) находим, что в полученное выражение входят множители $\exp\left(i(k_{x\beta}-k_{x\alpha})(x'-x)\right)$ и $\exp\left(i(k_{y\beta}-k_{y\alpha})(y'-y)\right)$. Поскольку в случае тонкой пленки поля в (39) не зависят от координат x и y, x' и y', выполним интегрирование по x' и y'. Для проинтегрированного тензора оставим прежнее обозначение:

$$\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(z,z')\equiv\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,dx'dy'. \qquad (56)$$

После интегрирования в выражении для тензора появляются δ-функции, так как

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left[i(k_{x\beta}-k_{x\alpha})(x'-x)\right]dx'=\\=2\pi\delta(k_{x\beta}-k_{x\alpha}), \qquad (57)$$

и аналогично для y'.

Суммирование по $k_{x\beta}$, $k_{y\beta}$ в (54) заменяем интегрированием:

$$\sum_{k_{x\beta},k_{y\beta}}\to\frac{2L_xL_y}{(2\pi)^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dk_{x\beta}\,dk_{y\beta}$$

(множитель 2 учитывает две возможные проекции спина электрона в состоянии $(n_\beta, k_{x\beta}, k_{y\beta})$). В результате получаем

$$\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(z,z') = -\frac{16\omega_p^2}{NL\omega^2} \times \\ \times \sum_{\substack{n_\alpha,n_\beta \\ k_{x\alpha},k_{y\alpha}}} \frac{(f_\alpha - f_\beta) k_{\mu\alpha} k_{\nu\alpha}}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta}} \frac{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta} - ik^2_\gamma}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta} - k^2_\omega - ik^2_\gamma} \times \\ \times \sin k_{n_\alpha} z \sin k_{n_\alpha} z' \sin k_{n_\beta} z \sin k_{n_\beta} z' \\ (\mu = x, y, \quad \nu = x, y), \quad (58)$$

$$\epsilon^{(2)}_{z\nu}(z,z') = \frac{8i\omega_p^2}{NL\omega^2} \times \\ \times \sum_{\substack{n_\alpha,n_\beta \\ k_{x\alpha},k_{y\alpha}}} \frac{(f_\alpha - f_\beta) k_{\nu\alpha}}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta}} \frac{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta} - ik^2_\gamma}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta} - k^2_\omega - ik^2_\gamma} \times \\ \times \left(k_{n_\alpha} \sin k_{n_\beta} z \cos k_{n_\alpha} z - k_{n_\beta} \sin k_{n_\alpha} z \cos k_{n_\beta} z\right) \times \\ \times \sin k_{n_\alpha} z' \sin k_{n_\beta} z' \quad (\nu = x, y), \quad (59)$$

$$\epsilon^{(2)}_{zz}(z,z') = -\frac{4\omega_p^2}{NL\omega^2} \times \\ \times \sum_{\substack{n_\alpha,n_\beta \\ k_{x\alpha},k_{y\alpha}}} \frac{f_\alpha - f_\beta}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta}} \frac{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta} - ik^2_\gamma}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta} - k^2_\omega - ik^2_\gamma} \times \\ \times \left(k_{n_\alpha} \sin k_{n_\beta} z \cos k_{n_\alpha} z - k_{n_\beta} \sin k_{n_\alpha} z \cos k_{n_\beta} z\right) \times \\ \times \left(k_{n_\alpha} \sin k_{n_\beta} z' \cos k_{n_\alpha} z' - \right. \\ \left. - k_{n_\beta} \sin k_{n_\alpha} z' \cos k_{n_\beta} z'\right), \quad (60)$$

где введены обозначения

$$k^2_\omega \equiv \frac{2m\omega}{\hbar}, \quad k^2_\gamma \equiv \frac{2m\gamma}{\hbar}. \quad (61)$$

Выражения под знаком суммы в (58) при $\mu \neq \nu$ и в (59) являются нечетными функциями $k_{\nu\alpha}$, а суммирование выполняется по положительным и отрицательным значениям $k_{\nu\alpha}$ в симметричных пределах, поэтому

$$\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(z,z') = 0, \quad \mu \neq \nu. \quad (62)$$

Таким образом, тензор $\epsilon^{(2)}_{\mu\nu}(z,z')$, а значит, и тензор $\epsilon_{\mu\nu}(z,z')$, являются диагональными в выбранной системе координат.

Суммы (58) и (60) должны оставаться неизменными при перестановке индексов α и β, так как суммирование по α и β выполняется в одних и тех же пределах. Учитывая это, представляем выражения (58) и (60) в симметричном виде:

$$\epsilon^{(2)}_{xx}(z,z') = \epsilon^{(2)}_{yy}(z,z') = -\frac{8\omega_p^2}{NL\omega^2} \times \\ \times \sum_{n_\alpha,n_\beta} \sum_{k_{x\alpha},k_{y\alpha}} \frac{(f_\alpha - f_\beta)(k^2_{x\alpha} + k^2_{y\alpha})}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta}} \times \\ \times \left(1 + \frac{k^2_\omega (k^2_\omega + ik^2_\gamma)}{(k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta})^2 - (k^2_\omega + ik^2_\gamma)^2}\right) \times \\ \times \sin k_{n_\alpha} z \sin k_{n_\alpha} z' \sin k_{n_\beta} z \sin k_{n_\beta} z', \quad (63)$$

$$\epsilon^{(2)}_{zz}(z,z') = -\frac{4\omega_p^2}{NL\omega^2} \times \\ \times \sum_{n_\alpha,n_\beta} \sum_{k_{x\alpha},k_{y\alpha}} \frac{f_\alpha - f_\beta}{k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta}} \times \\ \times \left(1 + \frac{k^2_\omega (k^2_\omega + ik^2_\gamma)}{(k^2_{n_\alpha} - k^2_{n_\beta})^2 - (k^2_\omega + ik^2_\gamma)^2}\right) \times \\ \times \left(k_{n_\alpha} \sin k_{n_\beta} z \cos k_{n_\alpha} z - k_{n_\beta} \sin k_{n_\alpha} z \cos k_{n_\beta} z\right) \times \\ \times \left(k_{n_\alpha} \sin k_{n_\beta} z' \cos k_{n_\alpha} z' - \right. \\ \left. - k_{n_\beta} \sin k_{n_\alpha} z' \cos k_{n_\beta} z'\right). \quad (64)$$

Далее воспользуемся «ступенчатой» аппроксимацией функции Ферми: $f_{\alpha,\beta} = 1$ в пределах полусферы Ферми ($k_n > 0$), $f_{\alpha,\beta} = 0$ вне полусферы Ферми. Область суммирования по n_α и n_β делим на участки:

1) $1 \le n_\alpha \le n_F$, $1 \le n_\beta \le n_F$; $n_F \equiv [Lk_F/\pi]$, где $[a]$ — целая часть a;

2) $1 \le n_\alpha \le n_F$, $n_F + 1 \le n_\beta \le \infty$;

3) $n_F + 1 \le n_\alpha \le \infty$, $1 \le n_\beta \le n_F$;

4) $n_F + 1 \le n_\alpha \le \infty$, $n_F + 1 \le n_\beta \le \infty$.

Суммирование по $k_{x\alpha}$, $k_{y\alpha}$ заменяем интегрированием в полярных координатах (ρ, φ), $\rho = \sqrt{k^2_{x\alpha} + k^2_{y\alpha}}$. Область интегрирования по участкам:

1) $\sqrt{k^2_F - k^2_{n_\beta}} < \rho < \sqrt{k^2_F - k^2_{n_\alpha}}$ ($f_\alpha = 1$, $f_\beta = 0$), если $n_\alpha < n_\beta$; $\sqrt{k^2_F - k^2_{n_\alpha}} < \rho < \sqrt{k^2_F - k^2_{n_\beta}}$ ($f_\alpha = 0$, $f_\beta = 1$), если $n_\alpha > n_\beta$;

2) $\rho < \sqrt{k^2_F - k^2_{n_\alpha}}$ ($f_\alpha = 1$, $f_\beta = 0$);

3) $\rho < \sqrt{k^2_F - k^2_{n_\beta}}$ ($f_\alpha = 0$, $f_\beta = 1$);

4) $f_\alpha = 0$, $f_\beta = 0$ для всех значений ρ.

Плотность состояний равна $2L_xL_y/(2\pi)^2$.

Результат интегрирования умножаем на $1/2$, так как между двукратно вырожденными состояниями α и β ($f_\alpha = 1$, $f_\beta = 0$) возможны только два, а не четыре перехода: один электрон переходит из состояния α в одно из двух состояний β, различающихся проекцией спина, другой — в оставшееся свободным состояние. В результате получаем

$$\epsilon^{(2)}_{xx}(z,z') = \epsilon^{(2)}_{yy}(z,z') = \frac{V\omega_p^2}{\pi N L^2 \omega^2} \times \sum_{n_\alpha=1}^{n_F} \sum_{n_\beta=1}^{n_F} \frac{(k_F^2 - k_{n_\alpha}^2)^2 - (k_F^2 - k_{n_\beta}^2)^2}{k_{n_\beta}^2 - k_{n_\alpha}^2} \times \left(1 + \frac{k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_{n_\alpha}^2 - k_{n_\beta}^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2}\right) \times \sin k_{n_\alpha} z \sin k_{n_\alpha} z' \sin k_{n_\beta} z \sin k_{n_\beta} z' + \frac{2V\omega_p^2}{\pi N L^2 \omega^2} \sum_{n_\alpha=1}^{n_F} \sum_{n_\beta=n_F+1}^{\infty} \frac{(k_F^2 - k_{n_\alpha}^2)^2}{k_{n_\beta}^2 - k_{n_\alpha}^2} \times \left(1 + \frac{k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_{n_\alpha}^2 - k_{n_\beta}^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2}\right) \times \sin k_{n_\alpha} z \sin k_{n_\alpha} z' \sin k_{n_\beta} z \sin k_{n_\beta} z' = \frac{2V\omega_p^2}{\pi N L^2 \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(k_F^2 - k_n^2)^2}{k_m^2 - k_n^2} \times \left(1 + \frac{k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_n^2 - k_m^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2}\right) \times \sin k_n z \sin k_n z' \sin k_m z \sin k_m z', \quad (65)$$

$$\epsilon^{(2)}_{zz}(z,z') = \frac{2V\omega_p^2}{\pi N L^2 \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{k_F^2 - k_n^2}{k_m^2 - k_n^2} \times \left(1 + \frac{k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_n^2 - k_m^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2}\right) \times (k_n \sin k_m z \cos k_n z - k_m \sin k_n z \cos k_m z) \times (k_n \sin k_m z' \cos k_n z' - k_m \sin k_n z' \cos k_m z'). \quad (66)$$

Перейдем к компоненте $\epsilon^{(1)}_{\mu\mu}$. После подстановки волновых функций (51) в (53) и интегрирования по x', y', $k_{x\alpha}$ и $k_{y\alpha}$ получаем

$$\epsilon^{(1)}_{\mu\mu}(z,z') = \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{\pi N L \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} (k_F^2 - k_n^2) \sin^2 k_n z'\right) \times \delta(z' - z). \quad (67)$$

Рассмотрим важный предельный случай пленок большой толщины.

5. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ ОДНОРОДНОЙ ПЛЕНКИ

Поведение однородных металлических систем (в которых присутствие границ не проявляет себя) в высокочастотном электромагнитном поле описывается диэлектрической функцией Друде [7]:

$$\epsilon_D = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (68)$$

Уточним интервал значений толщины пленки. Имеется естественное ограничение для применимости предлагаемой теории к металлическим пленкам очень малой толщины. Контроль состояния пленки по мере роста ее толщины показывает, что фазовый переход пленки в кристаллическое (металлическое) состояние завершается при толщине 1–2 нм. Поэтому нижней границей интервала значений толщины пленки положим $L = 2$ нм. Оценим число заполненных уровней размерного квантования:

$$n_F \approx [2L/\lambda_F^0] \quad (69)$$

(a^0 обозначает значение величины a в неограниченном металле). Для Pb фермиевская длина волны $\lambda_F^0 \equiv 2\pi/k_F^0 = 0.40$ нм [7], следовательно, для пленок толщины $L \geq 2$ нм имеем $n_F \geq 10$.

Значения параметров ω_p и γ для нанометровых пленок находят по экспериментальным данным, интерпретируя эти данные в рамках модели Друде. По этой причине вряд ли можно определить компоненты диэлектрического тензора с погрешностью меньшей, чем несколько процентов. Поэтому допустимо принять, что $n_F \gg 1$, и использовать это условие для упрощения формул (65)–(67):

$$\epsilon_{xx}(z,z') = \epsilon_{yy}(z,z') \approx \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{\pi N L \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} (k_F^2 - k_n^2) \sin^2 k_n z'\right) \delta(z' - z) + \frac{V\omega_p^2}{\pi N L^2 \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} \sum_{\substack{m=1 \\ m\neq n}}^{\infty} \frac{(k_F^2 - k_n^2)^2 - (k_F^2 - k_m^2)^2}{k_m^2 - k_n^2} \times \left(1 + \frac{k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_n^2 - k_m^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2}\right) \times \sin k_n z \sin k_n z' \sin k_m z \sin k_m z' = \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{\pi N L \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} (k_F^2 - k_n^2) \sin^2 k_n z'\right) \delta(z' - z) + \frac{2V\omega_p^2}{\pi N L^2 \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} \sum_{\substack{m=1 \\ m\neq n}}^{\infty} (k_F^2 - k_n^2) \times \left(1 + \frac{k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_n^2 - k_m^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2}\right) \times \sin k_n z \sin k_n z' \sin k_m z \sin k_m z', \quad (70)$$

$$
\begin{aligned}
&\epsilon_{zz}(z,z') \approx \\
&\approx \left(1-\frac{V\omega_p^2}{\pi NL\omega^2}\sum_{n=1}^{n_F}(k_F^2-k_n^2)\sin^2 k_n z'\right)\delta(z'-z) + \\
&+\frac{2V\omega_p^2}{\pi NL^2\omega^2}\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(k_F^2-k_n^2)-(k_F^2-k_m^2)}{k_m^2-k_n^2}\times \\
&\times\left(1+\frac{k_\omega^2(k_\omega^2+ik_\gamma^2)}{(k_n^2-k_m^2)^2-(k_\omega^2+ik_\gamma^2)^2}\right)\times \\
&\times\left(k_n^2\sin k_m z\sin k_m z'\cos k_n z\cos k_n z' - \right.\\
&\left.- k_m k_n\cos k_m z\sin k_m z'\sin k_n z\cos k_n z'\right) = \\
&= \left(1-\frac{V\omega_p^2}{\pi NL\omega^2}\sum_{n=1}^{n_F}(k_F^2-k_n^2)\sin^2 k_n z'\right)\delta(z'-z) + \\
&+\frac{2V\omega_p^2}{\pi NL^2\omega^2}\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}\left(1+\frac{k_\omega^2(k_\omega^2+ik_\gamma^2)}{(k_n^2-k_m^2)^2-(k_\omega^2+ik_\gamma^2)^2}\right)\times \\
&\times\left(k_n^2\sin k_m z\sin k_m z'\cos k_n z\cos k_n z' - \right.\\
&\left.- k_m k_n\cos k_m z\sin k_m z'\sin k_n z\cos k_n z'\right). \quad (71)
\end{aligned}
$$

Для ортонормированного набора волновых функций имеет место соотношение [8]

$$
\frac{2}{L}\sum_{m=1}^{\infty}\sin k_m z\sin k_m z' = \delta(z'-z), \quad (72)
$$

используя которое, приводим соотношение (70) к виду

$$
\begin{aligned}
&\epsilon_{xx}(z,z') = \epsilon_{yy}(z,z') = \delta(z'-z)+\frac{2V\omega_p^2 k_\omega^2(k_\omega^2+ik_\gamma^2)}{\pi NL^2\omega^2}\times \\
&\times\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}}^{\infty}\frac{k_F^2-k_n^2}{(k_n^2-k_m^2)^2-(k_\omega^2+ik_\gamma^2)^2}\times \\
&\times\sin k_n z\sin k_n z'\sin k_m z\sin k_m z', \quad (73)
\end{aligned}
$$

а также получаем, что

$$
\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}k_n^2\sin k_m z\sin k_m z'\cos k_n z\cos k_n z' = \\
&= \frac{L}{2}\,\delta(z'-z)\sum_{n=1}^{n_F}k_n^2\cos^2 k_n z'. \quad (74)
\end{aligned}
$$

Далее замечаем, что

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{\infty}k_m\cos k_m z\sin k_m z' = \\
&= -\frac{\partial}{\partial z'}\sum_{m=1}^{\infty}\cos k_m z\cos k_m z' = -\frac{L}{2}\,\frac{\partial\delta(z'-z)}{\partial z'}. \quad (75)
\end{aligned}
$$

Смысл символической записи (75) становится понятным, если выполнить интегрирование (39) поля вместе с суммой

$$
\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}k_m k_n\cos k_m z\sin k_m z'\sin k_n z\cos k_n z'.
$$

Имеем

$$
\begin{aligned}
&-\frac{L}{2}\int_0^L\sum_{n=1}^{n_F}k_n\sin k_n z\cos k_n z'\frac{\partial\delta(z'-z)}{\partial z'}E_z(z')\,dz' = \\
&= -\frac{L}{2}\sum_{n=1}^{n_F}k_n\sin k_n z\cos k_n z'\delta(z'-z)E_z(z')\Big|_{z'=0}^{z'=L} + \\
&+\frac{L}{2}\int_0^L\delta(z'-z)\frac{\partial}{\partial z'}\left(E_z(z')\sum_{n=1}^{n_F}k_n\sin k_n z\cos k_n z'\right)dz' \approx \\
&\approx \frac{L}{2}\int_0^L\delta(z'-z)\frac{\partial}{\partial z'}\left(\sum_{n=1}^{n_F}k_n\sin k_n z\cos k_n z'\right)\times \\
&\times E_z(z')\,dz', \quad (76)
\end{aligned}
$$

так как сумма $\sum_{n=1}^{n_F}k_n\sin k_n z\cos k_n z'$ — это быстро осциллирующая функция z'. Таким образом,

$$
\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}k_m k_n\cos k_m z\sin k_m z'\sin k_n z\cos k_n z' = \\
&= \frac{L}{2}\,\delta(z'-z)\frac{\partial}{\partial z'}\left(\sum_{n=1}^{n_F}k_n\sin k_n z\cos k_n z'\right) = \\
&= -\frac{L}{2}\,\delta(z'-z)\sum_{n=1}^{n_F}k_n^2\sin^2 k_n z'. \quad (77)
\end{aligned}
$$

Используя (74) и (77), переписываем соотношение (71) в виде

$$
\begin{aligned}
&\epsilon_{zz}(z,z') = \\
&= \left(1-\frac{V\omega_p^2}{\pi NL\omega^2}\sum_{n=1}^{n_F}\left((k_F^2-k_n^2)\sin^2 k_n z' - k_n^2\right)\right)\times \\
&\times\delta(z'-z)+\frac{2V\omega_p^2 k_\omega^2(k_\omega^2+ik_\gamma^2)}{\pi NL^2\omega^2}\times \\
&\times\sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(k_n^2-k_m^2)^2-(k_\omega^2+ik_\gamma^2)^2}\times \\
&\times\left(k_n^2\sin k_m z\sin k_m z'\cos k_n z\cos k_n z' - \right.\\
&\left.- k_m k_n\cos k_m z\sin k_m z'\sin k_n z\cos k_n z'\right). \quad (78)
\end{aligned}
$$

Продолжая преобразование соотношения (78), рассмотрим его локальную часть

$$\epsilon_{zz}^{loc}(z,z') \equiv \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{\pi N L\omega^2} \times \right.$$
$$\left. \times \sum_{n=1}^{n_F} \left((k_F^2 - k_n^2)\sin^2 k_n z' - k_n^2\right)\right) \delta(z'-z) =$$
$$= \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{\pi N L\omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} \left(\frac{1}{2}(k_F^2 - k_n^2) \times \right.\right.$$
$$\left.\left. \times\ (1 - \cos 2k_n z') - k_n^2\right)\right) \delta(z'-z). \quad (79)$$

Записываем

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{n_F}(k_F^2 - k_n^2)\cos 2k_n z' =$$
$$= \frac{1}{2}\left(k_F^2 + \frac{1}{4}\frac{d^2}{dz'^2}\right)\sum_{n=1}^{n_F}\cos(2\pi n z'/L) \quad (80)$$

и применяем формулу

$$\sum_{n=1}^{n_F}\cos(2\pi n z'/L) = \frac{\sin\left((2n_F+1)\pi z'/L\right)}{2\sin(\pi z'/L)} - \frac{1}{2} \quad (81)$$

(см., например, [9]). При $n_F \gg 1$ функция в числителе правой части (81) изменяется намного быстрее, чем функция в знаменателе, так что

$$\frac{d}{dz'}\,\frac{\sin\left((2n_F+1)\pi z'/L\right)}{2\sin(\pi z'/L)} \approx$$
$$\approx \frac{2\pi n_F}{L}\,\frac{\cos\left((2n_F+1)\pi z'/L\right)}{2\sin(\pi z'/L)} =$$
$$= 2k_F\frac{\cos\left((2n_F+1)\pi z'/L\right)}{2\sin(\pi z'/L)}. \quad (82)$$

Учитывая это обстоятельство в (80), получаем

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{n_F}(k_F^2 - k_n^2)\cos 2k_n z' = -\frac{k_F^2}{4}. \quad (83)$$

При толщине пленки $L \gg \lambda_F^0$ расстояние между соседними уровнями k_n и k_{n+1} мало,

$$\pi/L \ll k_F^0 \approx k_F. \quad (84)$$

Поэтому суммирование в (79) можно заменить интегрированием в k-пространстве. В результате получаем

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{n_F}(k_F^2 - k_n^2) = \frac{L}{2\pi}\int_0^{k_F}(k_F^2 - k^2)\,dk = \frac{LV_F}{2\pi^2}, \quad (85)$$

$$\sum_{n=1}^{n_F}k_n^2 = \frac{L}{\pi}\int_0^{k_F}k^2 dk = \frac{LV_F}{2\pi^2}, \quad (86)$$

где V_F — объем полусферы Ферми. Умножив его на плотность состояний, получим число электронов в пленке:

$$\frac{2V}{4\pi^3}\,V_F = N. \quad (87)$$

Подставляя выражения (83), (85) и (86) в локальную часть (79) компоненты тензора $\epsilon_{zz}(z,z')$, обнаруживаем, что последние два их них сокращаются, так что

$$\epsilon_{zz}(z,z') = \left(1 - \frac{V\omega_p^2 k_F^2}{4\pi N L\omega^2}\right)\delta(z'-z) +$$
$$+ \frac{2V\omega_p^2 k_\omega^2(k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{\pi N L^2\omega^2} \times$$
$$\times \sum_{n=1}^{n_F}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(k_n^2 - k_m^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2} \times$$
$$\times \left(k_n^2 \sin k_m z \sin k_m z' \cos k_n z \cos k_n z' - \right.$$
$$\left. - k_m k_n \cos k_m z \sin k_m z' \sin k_n z \cos k_n z'\right). \quad (88)$$

Формулы (73) и (88) определяют компоненты диэлектрического тензора нанометровой металлической пленки с установленной нами точностью. Несмотря на то что толщина пленки $L \gg \lambda_F^0$, компоненты тензора имеют значительную нелокальную часть.

Переход к однородной пленке осуществляется, когда слагаемые, удовлетворяющие условию

$$|k_n^2 - k_m^2| \ll k_\omega^2, k_\gamma^2, \quad (89)$$

дают основной вклад в суммы (73) и (88). Условие (89) будет детально рассмотрено в следующем разделе. Используя определения (61), формулы (72) и (77), в результате имеем

$$\epsilon_{xx}(z,z') = \epsilon_{yy}(z,z') = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)}\,\frac{V}{\pi N L} \times \right.$$
$$\left. \times \sum_{n=1}^{n_F}(k_F^2 - k_n^2)\sin^2 k_n z'\right)\delta(z'-z), \quad (90)$$

$$\epsilon_{zz}(z,z') = \left(1 - \frac{V\omega_p^2 k_F^2}{4\pi N L\omega^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)} \times \right.$$
$$\left. \times \frac{V}{\pi N L}\sum_{n=1}^{n_F}k_n^2\right)\delta(z'-z). \quad (91)$$

Применяя формулы (83), (85)–(87) и пренебрегая членами, пропорциональными k_F^2, как малыми добавками, окончательно получаем

$$\epsilon_{\mu\mu} = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)}\right)\delta(z'-z), \quad \mu = x,y,z. \quad (92)$$

Таким образом, в металлических пленках, для которых удовлетворяется условие (89), исчезают нелокальность и анизотропия, и все три компоненты диэлектрического тензора сводятся к диэлектрической функции Друде.

6. ПЕРЕХОД К КЛАССИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ

Вернемся к рассмотрению условия (89) перехода к однородной пленке. Довольно сложно определить толщину пленки, для которой выполняется это условие при заданных значениях ω и γ. Для оценки предположим, что условие (89) будет удовлетворено, если

$$\varepsilon_F^0/n_F \ll \hbar\omega, \hbar\gamma. \tag{93}$$

Вводя величину

$$l_\omega \equiv v_F^0/(\gamma - i\omega), \tag{94}$$

имеющую смысл эффективной длины свободного пробега электронов, и используя формулу $n_F \approx \approx k_F^0 L/\pi$, переписываем (93) в виде

$$L \gg |l_\omega|. \tag{95}$$

В области частот $\omega \cong \gamma$, используя значения величин для Pb $\gamma = 1.04 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$ (550 см$^{-1}$), $v_F^0 = 1.83 \times \times 10^6$ м/с, имеем

$$L \gg 10 \text{ нм}. \tag{96}$$

Условие (89) можно интерпретировать следующим образом. Неопределенность энергии электрона $\Delta\varepsilon$, возникающая вследствие его взаимодействия с высокочастотным полем и процессов диссипации, при достаточно больших значениях L перекрывает большое число уровней стационарных состояний на всех участках энергетического спектра, так что

$$\Delta\varepsilon = \frac{\hbar v_F}{|l_\omega|} \gg \frac{\hbar^2 |k_n^2 - k_m^2|}{2m} \tag{97}$$

для достаточно большого числа значений n и m. В результате волновые функции электронов приобретают вид волнового пакета с волновыми числами в определенном интервале Δk и локализацией в некоторой области пространства с размерами Δr.

Так как

$$\Delta\varepsilon = |(d\varepsilon/d\mathbf{k})\Delta\mathbf{k}|, \tag{98}$$

то, используя известные соотношения для волнового пакета

$$d\varepsilon/d\mathbf{k} = \hbar\mathbf{v}, \tag{99}$$

где $\mathbf{v}$ — групповая скорость пакета, и

$$\Delta k \cong 1/\Delta r, \tag{100}$$

получаем

$$v_F/|l_\omega| \cong v/\Delta r. \tag{101}$$

Интерпретируя v как среднюю скорость электронов,

$$v \cong v_F, \tag{102}$$

находим, что

$$\Delta r \cong |l_\omega|, \tag{103}$$

т. е. в среднем область локализации электронов имеет размеры порядка эффективной длины свободного пробега. Поскольку для описания электронов в пленке при помощи классической функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ во всяком случае должно быть

$$\Delta r < L, \tag{104}$$

мы возвращаемся к соотношению (95).

Таким образом, условие (89) перехода от диэлектрического тензора к диэлектрической функции Друде является в то же время критерием допустимости классического описания.

В работе [5], в которой исследуется взаимодействие металлической пластины с электромагнитным излучением на основе классического уравнения Больцмана, получены соотношения для индуцированного полем тока:

$$j(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(z - z') E(z')\, dz', \tag{105}$$

$$\sigma(z - z') = \frac{3\sigma_D}{4l_\omega} \times \int_0^1 \frac{1 - n_z^2}{n_z} \exp\left(-\frac{|z - z'|}{l_\omega n_z}\right) dn_z, \tag{106}$$

где (с использованием принятых нами обозначений и системы координат) n_z — проекция орта скорости электрона на направление, перпендикулярное к пластине,

$$\sigma_D \equiv \frac{i\omega_p^2}{4\pi(\omega + i\gamma)} \tag{107}$$

— проводимость по теории Друде.

Формулы (105) и (106) по своему виду полностью совпадают с соответствующими формулами для однородной среды. Этот факт становится понятным, если принять во внимание ключевое предположение авторов о периодичности поля в пластине. Другими словами, предполагается, что компонента поля **E**, параллельная поверхностям пластины, может быть представлена в виде суммы (ряда Фурье) гармонических функций с областью определения $-\infty < z < \infty$ и частотами, кратными $1/2L$, т. е. с волновыми числами

$$k_s \equiv \pi s/L, \quad s = 0, \pm 1, \ldots \tag{108}$$

Однако такое предположение для пластин малой толщины является некорректным (см. формулы (34) и (35)). Волновые функции электронов (51) за пределами пластины тождественно равны нулю, поэтому выражение для тока (34) не может быть разложено в ряд Фурье. То же самое относится к полю, поскольку между током и полем в пластине существует связь в виде линейного дифференциального уравнения.

Предположение авторов получает физическое содержание в случае больших толщин пластины, когда волновые функции $\psi \propto \exp(ik_z z)$ с квазинепрерывным спектром k_z, т. е. в том случае, если пластину можно считать однородной средой. Условием перехода к однородной среде и допустимости классического описания является соотношение (95). Поэтому сразу ясно, что согласие наших результатов с результатами работы [5] будет наблюдаться при значениях толщины, удовлетворяющих условию (95).

Результат интегрирования (105) зависит от соотношения между волновыми числами (108) фурье-компонент поля и скоростью изменения $1/|l_\omega|$ экспоненты в выражении (106) для проводимости. Если

$$k_s |l_\omega| \ll 1 \tag{109}$$

для достаточно больших значений s, то поле можно вынести за знак интеграла (105) как относительно медленно меняющуюся функцию z', и тогда получаем, что

$$j = E \int\limits_{-\infty}^{\infty} \sigma(z - z')\, dz' = \sigma_D E. \tag{110}$$

Соотношение (95) является необходимым для выполнения условия (109), и результат (110) совпадает с тем, который получается в этом случае при использовании диэлектрического тензора.

В области малых значений толщины пластины формулы (105), (106) и предположение о периодичности поля приводят к некорректным результатам. Так, при $L \to 0$ получаем то же соотношение (110). Оно справедливо для однородной среды, когда вообще отсутствует зависимость от L, но не пластины малой толщины. Очевидно, что в пластине $j \to 0$, если $L \to 0$.

7. ВЫВОДЫ

Модель электронного газа в потенциальной яме учитывает главную черту низкоразмерных систем — ограничение движения электронов в определенных направлениях в пределах, сравнимых с характерной длиной изменения волновых функций. В этом случае распределение электронного заряда существенно неоднородно и в полной мере проявляет себя нелокальность оператора тока. Адекватным способом описания отклика низкоразмерных систем на электромагнитное поле является диэлектрический тензор. Он оказывается нелокальным по форме. Расчет компонент диэлектрического тензора металлических пленок нанометровой толщины демонстрирует существенную роль анизотропии и нелокальности (пространственной дисперсии). Использованное ранее упрощенное описание в виде приближения диагонального отклика оказывается неудовлетворительным. При увеличении толщины пленка приобретает черты однородной среды, и компоненты диэлектрического тензора сводятся к диэлектрической функции Друде, когда толщина пленки намного превышает эффективную длину свободного пробега электронов. При том же условии становится допустимым описание электронов в пленке при помощи классической функции распределения.

Автор благодарит В. В. Погосова за его интерес к работе и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. M. Wood and N. W. Ashcroft, Phys. Rev. B **25**, 6255 (1982).

2. В. П. Курбацкий, А. В. Коротун, В. В. Погосов и др., ФТТ **50**, 909 (2008).

3. V. P. Kurbatsky and V. V. Pogosov, Phys. Rev. B **81**, 155404 (2010).

4. N. Trivedi and N. W. Ashcroft, Phys. Rev. B **38**, 12298 (1988).

5. А. Падерес-Хуарес, Ф. Диас-Монхе, Н. М. Макаров и др., Письма в ЖЭТФ **90**, 687 (2009).

6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).

7. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, т. 1, Мир, Москва (1979).

8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).

9. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, Наука, Москва (1981).