К ВОПРОСУ О ПОГЛОЩЕНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

С.О. Гладков

Московский государственный областной университет,
105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а.
Email: sglad@newmail.ru

Аннотация. Показано, что для размеров наночастицы $R << \lambda, l_{ee}$ сечение поглощения следует вычислять с помощью квантово – механических принципов и считать температуру электронов равной нулю. В подобных условиях функцию распределения электронов вводить не правомерно, а сечение поглощения, как показывает чисто квантовый расчет, оказывается довольно сложной функцией от частоты внешнего поля.

Ключевые слова: наночастица, сечение поглощения.

В последнее время направление исследования, связанное с изучением физических свойств нанообъектов, получает все более и более широкое приложение в разнообразных технических целях. Это и понятно, поскольку теоретически предсказанные особенности свойств подобных мелкодисперсных структур оказываются порой чрезвычайно интересными и уникальными. Последнее, в частности, касается металлических частиц, об одном из свойств которых мы сейчас и поговорим.

Задача, которой посвящена настоящая статья, напрямую связана с изучением поглощения энергии внешнего электромагнитного (сокращенно ЭМ) поля металлической наночастицей с диаметром $D = 2R$ (где $R -$ радиус) при произвольным соотношением между ним и главной характеристикой поглощательной способности металла – глубиной скин – слоя ξ, который, как известно [1 – 3], есть $\xi = \dfrac{c}{\sqrt{2\pi\sigma\omega}}$, где $c -$ скорость света в вакууме, $\sigma -$ проводимость металла, $\omega -$ частота внешнего переменного ЭМ поля.

Мы будем подразумевать, что речь идет об ансамбле частиц, но среднее расстояние между ними L удовлетворяет неравенству $D << \lambda << L$, а потому рассеяние и поглощение электромагнитного излучения каждой из них можно рассматривать по отдельности.

Важно также подчеркнуть, что очень существенное влияние на поглощение оказывает геометрия частицы. Именно учет формы частицы позволяет вычислить зависимость сечения поглощения от соотношения между ξ и R в общем случае.

Кроме того, характер поглощения сильно зависит и от соотношения между длиной свободного пробега электрона l_{ee} и линейным размером частицы D.

В настоящей работе мы проанализируем только случай, когда длина свободного пробега электрона велика, то есть $l_{ee} >> D$.

В отсутствии внешних переменных полей мелкодисперсная металлическая частица находится в состоянии термодинамического равновесия с окружающей средой, то, несмотря на то, что время баллистического движения электрона $\tau_b = \dfrac{2R}{u_F}$ значительно меньше времени электрон – электронных столкновений τ_{ee}, они по прошествии некоторого промежутка времени τ (причем $\tau >> \tau_{ee} >> \tau_b$) все равно термолизуются и приобретают равновесную температуру окружающей среды T, которая всегда может считаться термостатом. Однако, для этого электронам необходимо большое количество раз N^* столкнуться с внутренней поверхностью частицы, которая находится в состоянии термодинамического равновесия с окружающей средой.

Поэтому по физическому смыслу время $\tau = N^* \tau_{\tilde{n}}$, где $\tau_{\tilde{n}}$ – время контакта с поверхностью, в течение которого энергия электрона ε чуть – чуть изменяется на величину $\delta\varepsilon << \varepsilon$, а необходимое число столкновений N^* можно найти из условия $\varepsilon \pm N^* \delta\varepsilon \sim k_B T$ (знак $+$ берется, если $\varepsilon < k_B T$, знак –, если $\varepsilon > k_B T$).

Совершенно иная ситуация будет наблюдаться во внешних переменных полях.

Итак, пусть все находится в состоянии термодинамического равновесия, и в какой – то момент времени на систему начинает действовать внешнее переменное электромагнитное поле, которое мгновенно выводит электроны из состояния равновесия. Благодаря своему постоянному периодическому воздействию внешнее ЭМ поле не позволяет (в случае малых частиц) электронам вернуться в состояние равновесия.

Это означает только одно, что при условии $l_{ee} >> R$ мы никогда не сможем ввести в рассмотрение фермиевскую функцию распределения электронов несмотря на то, что сама наночастица под воздействием ЭМ поля нагревается, а электроны, ударяясь о ее поверхность, не успевают термостатироваться (см. [4, 5]).

Последнее позволяет подойти к решению проблемы вычисления сечения поглощения на языке квантовой механики, считая электроны квантовым газом, заключенным в некоторый объем $V = \frac{4\pi}{3} R^3$ и находящимся под внешним воздействием.

Для решения задачи введем в рассмотрение нерелятивистский квантовый оператор взаимодействия электронов с классическим ЭМ полем в виде

$$H_{\text{int}} = -i\frac{e\hbar}{2mc}\int \left[(\nabla \psi^*)\psi - \psi^* \nabla \psi \right] \vec{A} d^3 x \ , \qquad (1)$$

где операторы $\psi(\psi^*)$ можно представить в виде разложения по плоским волнам, игнорируя амплитуду Блоха $u_p(\vec{r})$, обязанную проявлению действия периодического кристаллического поля $V(\vec{r})$.

Это пренебрежение обязано малости наночастицы и «спасает» нас от чрезмерной громоздкости вычислений.

Благодаря слабости взаимодействия электронов друг с другом их движение является свободным, а потому для нормированных на объем частицы операторов волновых функций имеем:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p c_p e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \ , \qquad (2)$$

$$\psi^*(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p c_p^+ e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \quad ,$$

где $c_p \left(c_p^+\right)-$ операторы уничтожения (рождения) электрона в состоянии p, где под p подразумевается весь набор квантовых чисел электрона.

Поскольку спиновое взаимодействие электрона с переменным магнитным полем для нашей задачи мало, то под p мы будем подразумевать только импульсы свободного электрона $\vec{p}$.

Далее. Разложим векторный потенциал $\vec{A}(\vec{r})$ в ряд Фурье

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \left(\vec{A}_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} + \vec{A}_{\vec{q}}^* e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right) , \tag{3}$$

где

$$\vec{A}_{\vec{q}} = \int \vec{A}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d^3x,$$
$$\vec{A}_{\vec{q}}^* = \int \vec{A}(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} d^3x.$$

Подставив разложения (2) и (3) в гамильтониан взаимодействия (1), найдем

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{2mcV} \sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{q}} (\vec{p} + \vec{p}') \left[c_p^+ c_{p'} A_q^* \Delta(\vec{p} - \vec{p}' + \hbar\vec{q}) + c_p^+ c_{p'} A_q \Delta(\vec{p} - \vec{p}' - \hbar\vec{q}) \right] , \tag{4}$$

где $\Delta(x)-$ ступенчатая функция со свойствами $\Delta(x) = 1$, если $x \geq 0$ и $\Delta(x) = 0$, если $x < 0$. Она получилась в результате интегрирования по объему частицы:

$$\int_V e^{i\left(\vec{q} + \frac{\vec{p}' - \vec{p}}{\hbar}\right)\vec{r}} d^3x = V\Delta(\vec{p}' - \vec{p} + \hbar\vec{q}) \ .$$

С помощью известного определения [6] сечение можно ввести как

$$\sigma_{\text{ïîãë}} = \frac{W_{pp'}}{c} V \ . \tag{5}$$

В результате довольно длинных выкладок, находим:

$$\overline{\sigma}_{\text{ïîãë}}(\omega, R) = \frac{e^2 Z(\omega, R)\sqrt{m}}{2^5 \pi c^3 \hbar^4 \varepsilon_F \sqrt{\varepsilon_F}} (\hbar\omega)^3 g(x) \ , \tag{6}$$

где $x = \dfrac{\varepsilon_F}{\hbar\omega}$, а функция

$$g(x)=\left[(2x+1)^2-1\right]^{\frac{3}{2}}-\left[(2x-1)^2-1\right]^{\frac{3}{2}}-(2x+1)\sqrt{(2x+1)^2-1}-$$
$$-(2x-1)\sqrt{(2x-1)^2-1}+arch(2x+1)-arch(2x-1) \qquad (7)$$

Вводя далее энергию фотона по формуле $\frac{E_0^2V}{4\pi}=\frac{E_0^2R^3}{3}=\hbar\omega$, получаем окончательно:

$$\bar{\sigma}_{\text{ïîãë}}(\omega,R)=\frac{2^7\pi^2e^2S(\omega,R)\omega}{3c\sigma a\hbar}R^3\ , \qquad (8)$$

где функция $S(\omega,R)=g(x)Z(\omega,R)$.

Оценим величину $\bar{\sigma}_{\text{ïîãë}}$. Положим, например, что радиус частицы $R=10^{-5}\,\text{ñì}$, частота $\omega=10^{12}\,\text{ñ}^{-1}$, межатомное расстояние $a=10^{-8}\,\text{ñì}$, скорость Ферми $u_F=3\cdot10^7\,\frac{\text{ñì}}{\text{ñ}}$, заряд электрона $e=4.48\cdot10^{-10}\,SGS$, масса электрона $m=10^{-27}\,\text{ã}$ и скорость света $\tilde{n}=3\cdot10^{10}\,\frac{\text{ñì}}{\text{ñ}}$.

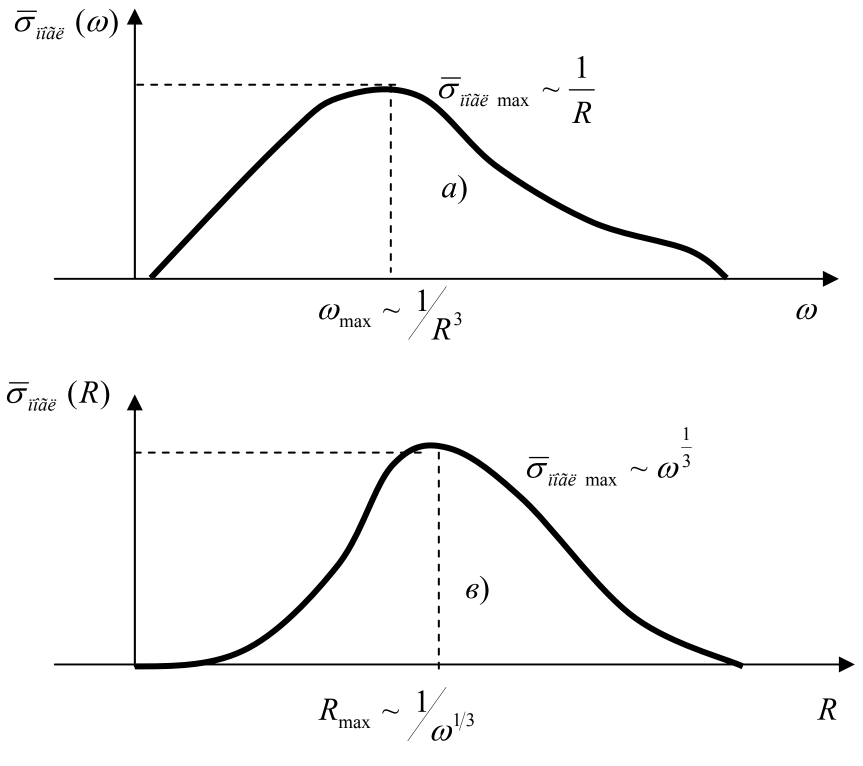

Рис. 1. Сечение поглощения наночастицей электромагнитного излучения в случае, если ее размер мал по сравнению с длиной свободного пробега ($R \ll l_{ee}$) в виде функции частоты (а) и размера частицы (б).

В результате оказывается, что $\varsigma=8.64$, показатель экспоненты мал и в итоге сечение будет примерно равно $\bar{\sigma}_{\text{ïîãë}} = 3.5 \cdot 10^{-11}\,\text{ñì}^{2}$. Приведенная оценка прекрасно согласуется с результатами экспериментов.

Качественные зависимости сечения поглощения от частоты и от радиуса иллюстрируются в этом случае рис. 1*а*, *б*.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Абрикосов А.А.* Введение в теорию нормальных металлов. М.: Наука, 1969. 240 с.
2. *Лифшиц И.М., Азбель М.Я., Каганов М.И.* Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971. 415 с.
3. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. 472 с.
4. *Gladkov S.O.* The kinetics of nuclear magnetically ordered systems. Physics Reports, 1989. V. 182. N4, 5. P. 211 – 364.
5. *Gladkov S.O.* Dielectric properties of porous media. Springer. 2003. 261 p.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Т. 3. М.: Наука, 1974. 750 с.

ON QUESTION OF ELECTROMAGNETIC RADIATION'S ABSORPTION BY METALLIC NANOPARTICLES

S. GLADKOV

Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia

Abstract. It' s shown at size of nanoparticles $R << \lambda, l_{ee}$, where $\lambda -$ a wave length of radiation and $l_{ee} -$ electron's free length, the section of absorption due to principles of quantum mechanics one should calculate. In this case the temperature of electrons is equal to zero and the function of distribution are keep out. A section of absorption (as quantum calculations are showed) is very complex function of external field's frequency.

Keywords: nanoparticles, section of absorption.

УДК 532.783:534.6