УДК 548.4

О ВОЗМОЖНОСТИ ВЫЯВЛЕНИЯ МИКРОНЕСПЛОШНОСТЕЙ ПО ПИКАМ ПЛАЗМОННЫХ ПОТЕРЬ

В. А. Мазунов, Ш. Х. Ханнанов

Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН,
450058, Уфа, проспект Октября 151
e-mail: imcp @ anrb. ru

Теоретически рассмотрена принципиальная возможность экспериментального выявления микронесплошностей в материалах по наличию характеристических пиков плазмонных потерь. На начальной стадии микроразрушения, когда концентрация микронесплошностей мала, характеристические пики должны отвечать частотам локальных плазмонных колебаний (ЛПК) на поверхности одиночных микронесплошностей. В работе получены выражения для частот ЛПК для типичных микронесплошностей. Показано, что частоты ЛПК хорошо отличимы от частот объемных и поверхностных плазмонов.

1. Введение

Исследование реальной, в том числе дефектной, структуры твердых тел требует, как правило, привлечения разнообразных методов. При этом номенклатура используемых методов имеет тенденцию расширяться. В настоящее время в физике прочности и пластичности, наряду с обычными (дифракционными) методами [1,2], находят применение методы, основанные на наблюдении возбуждений электронной подсистемы [3,4]. Плазмоны и близкие к ним поляритоны хорошо зарекомендовали себя в качестве инструмента изучения поверхности и малых частиц [5,6].

Целью настоящей работы является теоретическое рассмотрение принципиальной возможности выявления микронесплошностей путем наблюдения плазмонных потерь. Интерес к данному методу связан со следующими обстоятельствами. Во-первых, метод не обязательно требует изготовления тонких фольг и может быть реализован непосредственным воздействием на поверхность или объем материала (конструкции). Во-вторых, будучи резонансным, метод должен обладать хорошим разрешением. Главное место в нашем теоретическом рассмотрении занимает исследование характерных частот локальных плазмонных колебаний (ЛПК), обусловленных наличием микронесплошности. Как будет показано ниже, частоты этих ЛПК сильно отличаются от частот объемных и поверхностных плазмонных колебаний [6,7], что позволяет говорить о принципиальной возможности выявления микронесплошностей по пикам (частотам) плазмонных потерь.

2. Вывод дисперсионного уравнения

Пусть в материале с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1(\omega)$ содержится отдельная микронесплошность эллипсоидальной формы. В объеме микронесплошности V диэлектрическая проницаемость равна $\varepsilon_2 = 1$ – диэлектрической проницаемости вакуума.

Для упрощения задачи будем предполагать, что ε_1 действительна, а эллипсоид является эллипсоидом вращения с полуосями a, b. Пренебрежение мнимой частью диэлектрической проницаемости ε_1 оправдано в рассматриваемом случае. Будем считать также, что выполняется условие $(a, b) << \lambda_1$ – длины электромагнитной волны частотой ω внутри материала. Последнее условие позволяет использовать квазистатическое приближение, то есть пренебречь запаздыванием [6-10]. В этом случае ЛПК являются чисто продольными (потенциальными) волнами, и электрическое поле **E** удовлетворяет одновременно условиям [6,7]

$$\mathrm{div}\mathbf{E} = 0, \quad \mathrm{rot}\mathbf{E} = 0. \tag{1}$$

Уравнения (1) удовлетворяются, если ввести скалярный потенциал Ψ согласно соотношению $\mathbf{E} = -\,\mathrm{grad}\Psi$, при этом Ψ является решением уравнения Лапласа

$$\Delta\Psi = 0. \tag{2}$$

Решения уравнения (2) внутри Ψ_2 и вне Ψ_1 микронесплошности должны удовлетворять условию непрерывности на поверхности S эллипсоида

$$\Psi_1(S) = \Psi_2(S). \tag{3}$$

На S также непрерывны нормальные компоненты вектора электрического смещения

$$\varepsilon_1\nabla_n\Psi_1(S) = \varepsilon_2\nabla_n\Psi_2(S), \tag{4}$$

где ∇_n – нормальная составляющая вектора градиента.

Решение задачи находится с помощью системы сплюснутых эллипсоидальных координат (ξ, φ, ψ) (см. [8], [11]). Эти координаты выбираются несколько различно в различных изданиях. Согласно [11] три семейства поверхностей $\xi = \mathrm{const}$, $\varphi = \mathrm{const}$, $\psi = \mathrm{const}$ описываются в прямоугольной системе координат x, y, z уравнениями (см. [11])

$$(x^2 + y^2)/a^2\mathrm{ch}^2\xi + z^2/a^2\mathrm{sh}^2\xi = 1, \; (x^2 + y^2)/a^2\cos^2\varphi - z^2/a^2\sin^2\varphi = 1,$$

$$x/y = \mathrm{tg}\psi. \tag{5}$$

Обратные выражения для x, y, z имеют вид

$$x = a\mathrm{ch}\xi\cos\varphi\sin\psi, \; y = a\mathrm{ch}\xi\cos\varphi\cos\psi, \; z = a\mathrm{sh}\xi\sin\varphi.$$

Области однозначности соответствуют: $0 < \xi < \infty$, $-\pi/2 \le \varphi \le \pi/2$, $0 \le \psi\ 2\pi$. Уравнения Лапласа (2) записываются в виде [11]

$$[1/a^2(\mathrm{ch}^2\xi - \cos^2\varphi)][\partial^2\Psi/\partial\xi^2 + \partial^2\Psi/\partial\varphi^2 + \mathrm{th}\xi(\partial\Psi/\partial\xi) - \mathrm{tg}\varphi(\partial\Psi/\partial\varphi)] +$$

$$+ (1/a^2\mathrm{ch}^2\xi\cos^2\varphi)(\partial^2\Psi/\partial\psi^2) = 0. \tag{6}$$

Решение (6) внутри и вне объема V можно представить через бесконечную сумму мод с различными (n, m), соответственно (см. [11])

$$U_2 = C_2\cos(m\psi)P^m{}_n(\sin\varphi)p^m{}_n(i\,sh\xi)e^{-in\pi/2},$$

$$U_1 = C_1\cos(m\varphi)P^m{}_n(\sin\varphi)q^m{}_n(i\,sh\xi)(ie^{in\pi/2}), \tag{7}$$

где $C_2(n,m)$, $C_1(n,m)$ – коэффициенты, которые определяются условиями (3), (4). Здесь $P^m{}_n(\sin\varphi)$ – присоединенные функции Лежандра первого рода. Присоединенные функции Лежандра второго рода $Q^m{}_n(\sin\varphi)$ не включаются в набор, так как при целых (n, m) эти функции расходятся при $z \to \pm 1$ [11]. Далее, функции $p^m{}_n(z)$, $q^m{}_n(z)$ – представляют собой распространение присоединенных функций Лежандра на комплексные значения z вне интервала $-1 \le |z| \le 1$ и определяются соотношениями [11]:

$$p^m{}_n(z) = (z^2 - 1)^{m/2}[d^m/dz^m P_n(z)],$$

$$q^m{}_n(z) = (z^2 - 1)^{m/2}[d^m/dz^m q_n(z)]. \tag{8}$$

Данные функции таковы, что выражения

$$e^{-n\pi/2}p^m{}_n(iy),\ ie^{in\pi/2}q^m{}_n(iy)$$

являются действительными и при $|z|\to\infty$, то есть при $\xi\to\infty$ имеем $p^m{}_n\to\infty$, $q^m{}_n\to 0$. Здесь $P_n(z)$ – полином Лежандра; $q_n(z)$ – функция Лежандра второго рода.

Подставляя функции U_1, U_2 из (7) в условия (3), (4), получаем два однородных уравнения относительно неизвестных C_1, C_2. Решение этой системы уравнений существует, если обращается в нуль определитель системы, то есть

$$p^m{}_n(i\,sh\xi_0)q'^m{}_n(i\,sh\xi_0)\varepsilon_1(\omega) = p'^m{}_n(i\,sh\xi_0)q^m{}_n(i\,sh\xi_o). \tag{9}$$

Уравнение (9) представляет собой искомое дисперсионное уравнение для определения частоты различных мод ЛПК. Здесь ξ_0 - значение координаты, отвечающее поверхности микронесплошности S, $th^2\xi_0 = (b^2/a^2)$; $q'^m{}_n$, $p'^m{}_n$ – производные от соответствующих функций по аргументу.

3. Конкретизация и анализ решений

В случае микронесплошности типа микропоры, имеющей сферическую форму, решения уравнения (2) при граничных условиях (3), (4) представляются через сферические гармонические функции $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, зависящие от углов θ, φ. Дисперсионное уравнение (9) принимает вид (l = 1, 2, 3...)

$$\varepsilon_1(\omega)[(l + 1)/l] = -1. \tag{10}$$

Микротрещины можно считать сплющенными эллипсоидами вращения, при этом малая ось 2a соответствует толщине (раскрытию), а большая ось 2b – диаметру круглой трещины. Основные дипольные моды ЛПК, поляризованные вдоль указанных осей, имеют частоты ω_1, ω_2, которые являются решениями дисперсионных уравнений (k =1, 2)

$$\varepsilon_1(\omega_k)(1 - 1/f_k) = 1, \tag{11}$$

где f_k – так называемый фактор формы [6], [9, 10]. Фактор f_1 вдоль оси 2a определяется интегралом

$$f_1 = (ab^2/2)\int_0^\infty [(s + a^2)^{3/2}(s = b^2)]^{-1}ds, \qquad (12)$$

а фактор f_2 вдоль оси 2b получается из (12) путем перестановки a, b.

В случае проводящих материалов в области плазмонных частот выражение для $\varepsilon_1(\omega)$ записывается в виде [6, 7]

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_1' + i\varepsilon_2'' = 1 - \omega_p^2/(\omega^2 - i\omega/\tau), \qquad (13)$$

где ε_1', ε_2'' – действительная и мнимая части комплексной ε_1; τ_0 – время релаксации; ω_p – частота объемных плазмонов

$$\omega_p^2 = 4\pi Ne^2/m^*. \qquad (14)$$

Здесь N, e, m^* – концентрация, заряд и эффективная масса свободных электронов. При $\omega\tau_0 >> 1$, что выполняется в области плазмонных частот, имеем согласно (13)

$$\varepsilon_1' = 1 - \omega_p^2/\omega^2, \qquad \varepsilon_1'' = \omega_p^2/\omega^3\tau_0, \qquad (15)$$

причем $\varepsilon_1' >> \varepsilon_1''$. Последнее неравенство позволяет в первом приближении пренебречь мнимой частью ε_1'' при нахождении частот ЛПК из дисперсионных уравнений (9), (10), (11). Подставляя выражение для ε_1' из (15) в уравнения (10), (11), находим частоты ЛПК

$$\omega^2 = [(l + 1)/(2l + 1)]\omega_p^2 \qquad (16)$$

в случае микронесплошностей типа пор и

$$\omega_k^2 = (1 - f_k)\omega_p^2 \qquad (17)$$

в случае микронесплошностей типа трещин. Согласно (16) при $l = 1$ (основная дипольная мода ЛПК) имеем

$$\omega = (2/3)^{1/2}\omega_p. \qquad (18)$$

Частота (18) существенно отличается от частоты объемных ω_p и поверхностных $\omega_s = \omega_p/\sqrt{2}$ плазмонов. Для случая сильно сплюснутого (a << b) эллипсоида находим из (17), (12)

$$\omega_1 = [1 - (\pi/8)(a/b)]\omega_p, \qquad \omega_2 = (\pi/8)(a/b)\omega_p. \qquad (19)$$

Как видно из (19), частота ω_1 отличается от частоты объемных ω_p и поверхностных ω_s плазмонов. Однако, чтобы отличие ω_1 от ω_p было существенным,отношение (a/b) не должно быть слишком малым. Это условие вполне может выполняться в пластичных материалах, в которых микротрещины затупляются путем пластической релаксации [1]. Таким образом, проведенное рассмотрение позволяет заключить о принципиальной возможности выявления микронесплошностей по наличию характерных пиков плазмонных потерь.

На конечной стадии микроразрушения, когда концентрация микронесплошностей высокая, будут проявляться коллективные эффекты взаимодействия микронесплошностей. При этом проще всего определять интегральную характеристику (меру) микроразрушения ζ – суммарный объем микронесплошностей, приходящийся на единицу объема материала. Используя простое правило усреднения, можно записать соотношение, определяющее ζ через величину сдвига частоты объемных плазмонов $\Delta\omega_p$

$$\zeta = -2(\Delta\omega_p/\omega_p).$$

Концентрация микронесплошностей, как известно [3], может сильно отличаться в объеме и вблизи поверхности материала. Поэтому имеет смысл вводить дополнительно ζ_s – меру микроразрушения вблизи поверхности. При этом ζ_s будет определяться через величину сдвига частот поверхностных плазмонов $\Delta\omega_s$ соотношением

$$\zeta_s = -2(\Delta\omega_s/\omega_s).$$

Данная формула получена в предположении, что микронесплошности имеют размеры меньше длины волны поверхностных плазмонов. Это предположение должно легче выполняться в случае полупроводников с малой концентрацией носителей.

Экспериментальные методы возбуждения плазмонных колебаний достаточно известны (см., например, [5-7]), поэтому мы не станем останавливаться особо на обсуждении этих вопросов. Результаты намечаемых экспериментальных исследований будут представлены в последующих публикациях.

Список литературы

1. Новиков И. И., Ермишкин В. А. Микромеханизмы разрушения металлов. М.: Наука, 1991. 366 с.
2. Прямые методы исследования дефектов в кристаллах / Под ред. А. М. Елистратова. М.: Мир, 1965. 352 с.
3. Регель В. Р., Слуцкер А. И., Томашевский Э.И. Кинетическая природа прочности твёрдых тел. М.: Наука, 1974. 560 с.
4. Корсуков В. Е., Лукьяненко А. С., Обидов Б. А., Светлов В. Н. Изменение атомной структуры поверхностных слоев Ge(111) и Mo при механическом растяжении // Современные вопросы физики и механики материалов / Ред. З. П. Каменцева. СПб, 1997. С.316-321.
5. Поверхностные поляритоны / Под ред. В. М. Аграновича, Д. Л. Милса. М.: Наука, 1985. 526 с.
6. Петров Ю. И. Физика малых частиц. М.: Наука, 1982. 360 с.
7. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967. 382 с.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
9. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 664 с.
10. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами. М.: ИЛ, 1961. 600 с.
11. Анго А. Математика для электро- и радиоинженеров . М.: Наука, 1964. 772 с.