

01;02

О динамическом ван-дер-ваальсовом взаимодействии атомов с холодной металлической стенкой

© Г.В. Дедков, А.А. Кясов

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
E-mail: gv_dedkov@mail.ru

Поступило в Редакцию 3 февраля 2011 г.

Рассчитывается динамический потенциал ван-дер-ваальсова взаимодействия нейтрального атома натрия с металлической стенкой (золота) при движении атома параллельно поверхности и скоростях порядка 0.5–5 боровских единиц. Результаты расчета свидетельствуют о значительном ослаблении (по модулю) взаимодействия на малых расстояниях атома от стенки (0.3–3 nm) по сравнению со статическим потенциалом Ван-дер-Ваальса. При уменьшении скорости и (или) увеличении расстояния величина потенциала асимптотически стремится к статическим значениям.

До сих пор считалось, что динамическая поправка к потенциалу ван-дер-ваальсова взаимодействия атома со стенкой при движении параллельно к ее поверхности весьма значительна и в первом исчезающем по скорости V приближении пропорциональна V^2 [1–3]. В общем контексте теории флуктуационно-электромагнитного взаимодействия движущихся частиц с поверхностями этот вопрос также рассматривался во многих наших работах, как в нерелятивистском [4], так и в релятивистском [5] приближении. При этом результаты [5] тождественно совпадают с [4] при переходе к нерелятивистскому пределу, а в пределе малых скоростей находятся в полном согласии с [1–3]. В более общем случае, когда скорость атома не мала, но еще остается нерелятивистской, вопрос о величине динамических поправок до сих пор оставался открытым.

Следуя [4], запишем потенциал взаимодействия движущейся малой частицы со стенкой в виде (z_0 — расстояние от поверхности):

$$U(z_0, V) = -\frac{\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y k \exp(-2kz_0) \times \left\{ \coth \frac{\omega \hbar}{2k_B T_1} \alpha''(\omega) [\Delta'(\omega - k_x V) + \Delta'(\omega + k_x V)] + \coth \frac{\omega \hbar}{2k_B T_2} \Delta''(\omega) [\alpha'(\omega - k_x V) + \alpha'(\omega + k_x V)] \right\}. \quad (1)$$

Здесь T_1 и T_2 обозначают температуры частицы и стенки, функции $\alpha'(\omega)$, $\alpha''(\omega)$ обозначают действительную и мнимую части поляризуемости частицы, $\Delta(\omega) = \frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+1}$, $\varepsilon(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость материала стенки, а $\Delta'(\omega)$ и $\Delta''(\omega)$ обозначают вещественную и мнимую части $\Delta(\omega)$. Для дальнейшего преобразуем первый член в фигурных скобках (1), вводя новые переменные $\omega \pm k_x V = \omega'$. Затем, переходя в (1) к пределу $T_1 \rightarrow 0$, $T_2 \rightarrow 0$, с использованием соотношений

$$\lim_{T_2 \rightarrow 0} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T_2} = \text{sign}(\omega),$$

$$\lim_{T_1 \rightarrow 0} \coth \frac{\hbar(\omega \pm k_x V)}{2k_B T_1} = \text{sign}(\omega \pm k_x V)$$

получим

$$U(z_0, V) = -\frac{\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y k \exp(-2kz_0) \times \left\{ \int_0^\infty d\omega [\Delta''(\omega) \alpha'(\omega + k_x V) + \Delta''(\omega) \alpha'(\omega - k_x V) + \Delta'(\omega) \alpha''(\omega + k_x V) + \Delta'(\omega) \alpha''(\omega - k_x V)] - 2 \int_0^{k_x V} d\omega \Delta'(\omega) \alpha''(\omega - k_x V) \right\}. \quad (2)$$

Первое слагаемое в (2) упрощается далее заменой пределов интегрирования $0 \leq k_x, k_y < \infty$ на $-\infty \leq k_x, k_y < \infty$ и последующим поворотом контура интегрирования по частоте в комплексной плоскости на мнимую ось. Тогда из (2) следует

$$\begin{aligned}
 U(z_0, V) &= -\frac{\hbar}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_x \int_{-\infty}^{+\infty} dk_y k \exp(-2kz_0) \cdot \text{Im} \left[i \int_0^{\infty} d\xi \Delta(i\xi) \alpha(i\xi + k_x V) \right] \\
 &+ \frac{2\hbar}{\pi^2} \int_0^{\infty} dk_x \int_0^{\infty} dk_y k \exp(-2kz) \int_0^{k_x V} d\omega \Delta'(\omega) \alpha''(\omega - k_x V) \\
 &= U^{(0)}(z_0, V) + \Delta U(z_0, V). \tag{3}
 \end{aligned}$$

Формула (3) представляет центральный результат данной работы и оказывается весьма удобной для дальнейших приложений. Принципиально новым здесь является представление слагаемого $U^{(0)}(z_0, V)$ в виде интеграла по мнимым частотам при любом (нерелятивистском) значении скорости атома. При $V = 0$, как легко видеть, из (3) вытекает хорошо известный результат для ван-дер-ваальсова взаимодействия в статическом случае:

$$U^{(0)}(z_0, 0) = -\frac{\hbar}{4\pi z_0^3} \int_0^{\infty} \Delta(i\xi) \alpha(i\xi) d\xi. \tag{4}$$

Рассмотрим в качестве примера взаимодействие атома с металлической стенкой, полагая $\varepsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$, $\alpha(\omega) = \alpha(0)\omega_0^2/(\omega_0^2 - \omega^2)$, где ω_p — плазменная частота, $\alpha(0)$ — статическая величина дипольной поляризуемости атома, ω_0 — характерная частота перехода. В этом случае для $U^{(0)}(z_0, V)$ из (3) получим ($\omega_s = \omega_p/\sqrt{2}$)

$$\begin{aligned}
 U^{(0)}(z_0, V) &= -\frac{\hbar\alpha(0)\omega_s}{16\pi z_0^3} \\
 &\times \int_0^{\infty} \left[\frac{(1+\eta)\theta(1-\beta x)}{(1+\eta^2) - \beta^2 x^2} + \frac{\theta(\beta x - 1)}{[1 - (\eta + \beta x)^2]} \right] [K_0(x) + K_2(x)] x^2 dx, \tag{5}
 \end{aligned}$$

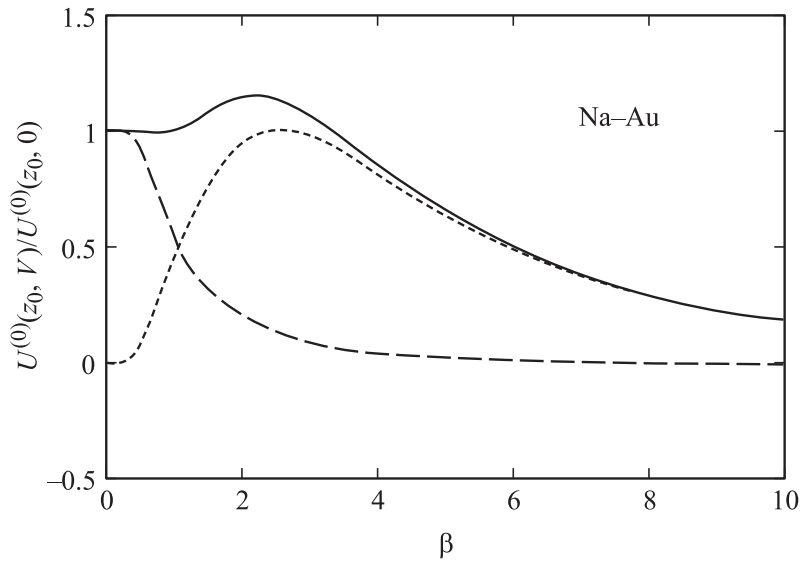


Рис. 1. Величина энергии динамического ван-дер-ваальсова взаимодействия, отнесенная к статическому значению, в зависимости от величины параметра β для атома натрия вблизи стенки золота. Сплошная кривая — сумма формул (5) и (8); пунктирная кривая — (5); точечная кривая — (8).

где $\eta = \omega_s / \omega_0$, $\beta = V / 2\omega_0 z_0$, $K_{0,2}(x)$ — функции Макдональда, $\theta(x)$ — единичная функция Хевисайда. При разложении (5) по малому параметру β получается результат [1–3]:

$$U^{(0)}(z_0, V) = -\frac{\hbar\alpha(0)\omega_s\omega_0}{8z_0^3(\omega_s + \omega_0)} \left[1 + \frac{3V^2}{2z_0^2(\omega_s + \omega_0)^2} \right]. \quad (6)$$

Для вычисления вклада $\Delta U(z_0, V)$ запишем мнимую часть поляризуемости атома в виде

$$\alpha''(\omega) = \frac{\pi\alpha(0)\omega_0}{2} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)]. \quad (7)$$

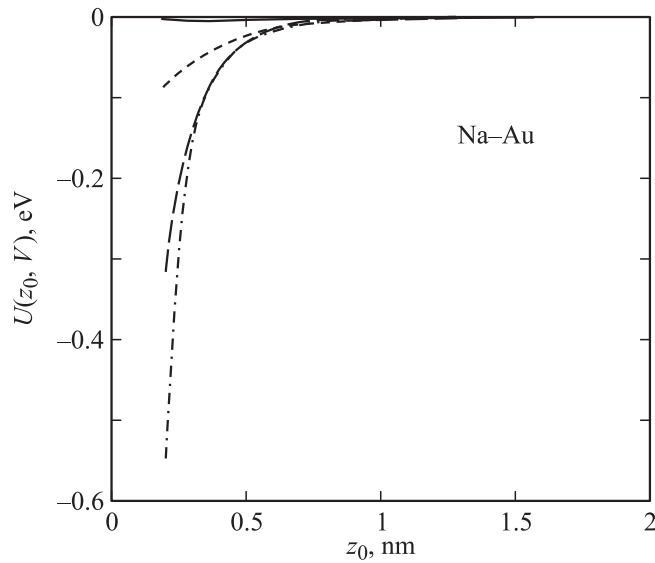


Рис. 2. Результирующая величина энергии взаимодействия для атома натрия вблизи стенки золота в зависимости от расстояния и скорости, выраженной в борзовских единицах. Сплошная линия — $V = 5$; точечная линия — $V = 2$; штриховая линия — $V = 1$; штрих-пунктирная линия — $V = 0.5$. Зависимость для $V = 0$, не показанная на рисунке, при $z_0 > 0.8$ nm совпадает с линией для $V = 0.5$.

С учетом (3), (7) и $\Delta'(\omega) = \omega_s^2 / (\omega_s^2 - \omega^2)$ находим

$$\begin{aligned} \Delta U(z_0, V) &= \frac{2\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y k \exp(-2kz) \int_0^{k_x V} d\omega \Delta'(\omega) \alpha''(\omega - k_x V) \\ &= -\frac{\hbar \alpha(0) \omega_0 \eta^2}{16\pi z^3} \int_{1/\beta}^\infty \frac{x^2 (K_0(x) + K_2(x))}{\eta^2 - (1 - \beta x)^2} dx. \end{aligned} \quad (8)$$

Заметим, что наличие особой точки в знаменателе (8) не влияет на сходимость интеграла. Очевидно, что при $\beta \ll 1$ интеграл (8) экспоненциально мал, поэтому формулы (5) и (6) описывают основной

вклад во взаимодействие. Более сложная ситуация возникает при $\beta \geq 1$, поскольку подинтегральные функции в (5) и (8) могут стать отрицательными, а результирующий потенциал взаимодействия может изменить знак. Численные расчеты, однако, не подтверждают эти ожидания. На рис. 1 показаны по отдельности и в сумме значения $U^{(0)}(z_0, V)$ и $\Delta U(z_0, V)$, взятые по отношению к величине статического взаимодействия $U^{(0)}(z_0, 0)$ (формула (6) при $V = 0$), в зависимости от величины β для взаимодействия атома Na ($\alpha(0) = 24.8 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3$, $\omega_0 = 1.55 \text{ eV}$ [6]) с золотой стенкой ($\omega_p = 9 \text{ eV}$). На рис. 2 показаны суммарные значения потенциала (в eV) при различных скоростях атома Na в зависимости от расстояния z_0 . Как следует из расчетов, изменение знака потенциала взаимодействия на малых расстояниях атома от стенки наблюдается только для вклада $U^{(0)}(z_0, V)$, а величина $\Delta U(z_0, V)$ всегда остается знакопостоянной и отвечает протяжению. В итоге результирующий потенциал взаимодействия является протягивающим, значительно уменьшаясь (по модулю) по сравнению со статическим потенциалом Ван-дер-Ваальса на малых расстояниях от стенки, и асимптотически стремится к нему при увеличении расстояния и (или) уменьшения скорости атома. Полученные выводы справедливы для случая $\eta > 1$. При $\eta < 1$ ситуация для результирующего потенциала не изменяется, но теперь знакопеременной является величина вклада $\Delta U(z_0, V)$. Случай релятивистских скоростей может быть проанализирован на основе наших результатов [5] и требует дополнительного анализа.

Список литературы

- [1] Ferrell T.L., Ritchie R.H. // Phys. Rev. 1980. V. A21. P. 1305.
- [2] Annett J.F., Echenique P.M. // Phys. Rev. 1986. V. B34. P. 6853.
- [3] Barton G. // New J. Phys. 2010. V. 12. P. 113 045.
- [4] Куасов А.А., Дедков Г.В. // Surface Sci. 2000. V. 463. P. 11; Дедков Г.В., Кясов А.А. // ФТТ. 2002. Т. 44(10). С. 1729; Phys. Low-Dim. Struct. 2003. V. 1/2. P. 1.
- [5] Куасов А.А., Дедков Г.В. // Nucl. Instr. Meth. 2002. V. B195. P. 247; Дедков Г.В., Кясов А.А. // ФТТ. 2003. Т. 45(10). С. 1729; Наноструктуры. Математическая физика. Моделирование. 2009. Т. 1. № 2. С. 5; J. Phys.: Condens. Matter. 2008. V. 20. P. 350 301; ФТТ. 2010. Т. 52(2). С. 382; Surface Sci. 2010. V. 604. P. 561.
- [6] Радциг А.А., Смирнов Б.М. // Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.