04,16

Об излучении диэлектрического фрактального кластера

© С.Ш. Рехвиашвили, Д.Ш. Гавашели

Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации
Кабардино-Балкарского научного центра РАН,
Нальчик, Россия

E-mail: rsergo@mail.ru

(Поступила в Редакцию 17 ноября 2010 г.
В окончательной редакции 24 января 2011 г.)

Рассмотрена полуфеноменологическая модель излучения диэлектрического фрактального кластера при воздействии на него лазерного пучка. Фрактальность учитывается при оценке объема кластера; сечение поглощения фотонов рассчитывается с использованием диэлектрической функции Гаврилияка–Негами, которая имеет место для диэлектрических материалов с фрактальной структурой (в частности полимеров). В рамках рассмотренной модели находят объяснение некоторые известные факты.

1. Введение

Изучение оптических свойств диэлектрических материалов представляет значительный теоретический и практический интерес. Многие полимеры и стекла обладают фрактальными свойствами, которые выражаются в самоподобии структуры в различных пространственных масштабах. На рис. 1 в качестве примера приведен построенный нами тетраэдрический фрактальный кластер. Примечательно, что кластер является объемным, но обладает низкой фрактальной размерностью $D = \ln 4/\ln(1+\sqrt{6}/2) \approx 1.734$. В данном контексте любопытно отметить, что в работе [1] экспериментально обнаружены фрактальные образования с размерностью $D \approx 1.75$ в агрегированных гидрозолях. В целом нет сомнений, что фрактальность будет существенно сказываться практически на всех физико-химических свойствах диэлектрических материалов. Материалы с фрактальной структурой, такие как например аморфные углеродные пленки, перспективны для нелинейной оптики и электроники. По этой причине в настоящее время интенсивно развивается новое научное направление — взаимодействие электромагнитных волн с фрактальными средами [2].

Расчеты излучения твердых тел сопряжены с рядом трудностей. На интенсивность излучения могут одновременно оказывать влияние такие факторы, как температура, поляризационное взаимодействие, изменение диэлектрических свойств с частотой падающей электромагнитной волны в области поглощения, разброс частиц по размерам, влияние геометрии, вклад подвижных носителей заряда и фононов. Ясно, что детальный взаимосвязанный расчет здесь невозможен, поэтому для описания наиболее подходящими могут оказаться полуфеноменологические подходы.

В работе [3] предложена теория излучения фрактальных структур. Показано, что фрактальные системы могут обладать достаточно высокой излучательной способностью. Теория базируется на вычислении мощности теплового излучения отдельного малого кластера в длинноволновом случае. Был сделан справедливый вывод о том, что сборка частиц в агрегат приводит к результирующему увеличению мощности излучения. В расчетах, однако, не принималась во внимание частотная зависимость диэлектрической проницаемости, которая может играть значительную роль. В настоящей работе предлагается усовершенствованная модель излучения неполярного диэлектрического фрактального кластера. Интенсивность излучения рассчитывается с использованием закона Кирхгофа, а фрактальность учитывают входящие в формулы объем кластера и полуэмпирические параметры диэлектрической функции Гаврилияка–Негами.

2. Теоретическая модель

Пусть на малый диэлектрический фрактальный кластер объемом $V = M/\rho \sim R^D$, где M, ρ и R — масса, плотность и радиус кластера, падает лазерное излучение, которое задается плоской монохроматической волной. Интенсивность падающего излучения намного ниже порога оптической прочности кластера и помимо этого выполняется условие $\lambda \gg R, r_0$, где λ — длина

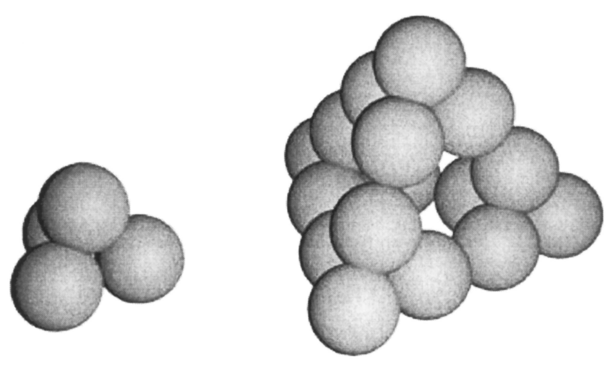

Рис. 1. Модельный фрактальный кластер.

волны излучения, r_0 — радиус частиц (атомов или молекул), из которых сформирован кластер.

Нами также предполагается справедливость закона Кирхгофа, согласно которому поглощательная и испускательная способности отдельных частиц должны быть связаны между собой через испускательную способность абсолютно черного тела. Следует обязательно отметить, что при рассеянии, сопровождающемся изменением частоты (флуоресценция, фотолюминесценция и т. п.), закон Кирхгофа имеет место лишь для полных интегралов по направлениям и частотам излучения. При этом температура неравновесного и узконаправленного излучения равна температуре эквивалентного равновесного излучения черного тела для всех направлений, в которых в любой точке пространства имеется распространяющееся излучения [4]. Таким образом, для интенсивности излучения запишем [5]

$$dI = 4\pi c E\sigma d\omega, \tag{1}$$

где c — скорость света в вакууме, $\omega = 2\pi c/\lambda$ — частота излучения, σ — сечение поглощения фотонов, E — спектральная плотность черного излучения, отнесенная к единице объема и единичному интервалу телесного угла. Сечение поглощения диэлектрического тела объемом V дается выражением [6]

$$\sigma = \frac{\int\limits_V \frac{1}{2}\,\omega\varepsilon_0 \mathrm{Im}\varepsilon|\mathbf{E}|^2 dV}{S}, \tag{2}$$

где ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, $\mathbf{E}$ — вектор напряженности электрического поля, S — амплитуда вектора потока плотности мощности падающей волны, $\mathrm{Im}\varepsilon$ — мнимая составляющая диэлектрической функции, которая характеризует поглощение излучения.

Реальные фрактальные кластеры [1], как и их идеальные аналоги (рис. 1), являются рыхлыми образованиями, но отличаются конечностью и стохастичностью структуры. Излучение фрактального кластера зависит от типа материала, структуры и характера взаимодействия между атомами или молекулами, что создает определенные трудности при теоретическом описании [7–11]. Но приближенно можно считать [3], что при $\lambda \gg R, r_0$ граничные условия для электромагнитной волны, рассеиваемой кластером, совпадают с граничными условиями для сплошной сферической частицы, т. е. происходит некоторое усреднение поляризуемости и кластер ведет себя как изотропный с плотностью, зависящей от фрактальной размерности. Если принять $S = c\varepsilon_0|\mathbf{E}|^2/2$ и считать, что подынтегральное выражение в (2) не зависит от объема, то получим

$$\sigma = \frac{V\omega \mathrm{Im}\varepsilon}{c}. \tag{3}$$

Для распределения Планка имеем

$$E = \frac{\hbar}{4\pi^3 c^3}\,\frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T) - 1}, \tag{4}$$

где k_B и $\hbar$ — постоянные Больцмана и Планка, T — абсолютная температура. Подставляя (3) и (4) в (1) и интегрируя по частотам, находим волную интенсивность излучения

$$I = \frac{\hbar V}{\pi^2 c^3}\int\limits_0^\infty \frac{\omega^4 \mathrm{Im}\varepsilon d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T) - 1}. \tag{5}$$

Заметим, что интеграл в (5) расходится, если при низких частотах мнимая составляющая диэлектрической функции имеет степенную асимптотику и стремится к бесконечности быстрее, чем $1/\omega^4$.

Несмотря на все допущения, полученный результат в некоторой мере сопоставим с работами [7–11], в которых рассматривались различные вопросы оптики фрактальных агрегатов. В [7,8] было выяснено, что на оптические свойства фрактальных кластеров оказывает влияние электродинамическое взаимодействие частиц, что приводит к уширению спектра поглощения. В [9] предсказаны интерференционные явления при изменении фрактальной размерности: масштабная инвариантность фрактального кластера является причиной медленного спадания парных корреляций в расположении частиц, благодаря чему возможно когерентное рассеяние излучения. Переход от некогерентного к когерентному рассеянию оказывается достаточно резким и, разумеется, определяется фрактальной размерностью кластера. Соотношение радиусов частиц в кластере влияет на собственные частоты, амплитуды дипольных резонансов, поглощаемую мощность и амплитуды действующего поля [10]. Причем это влияние настолько сильно, что может кардинально изменить общий сценарий оптических явлений в кластерах. Вследствие межатомного взаимодействия при определенной структуре кластера может происходить гигантское усиление излучения, которое сопровождается перестройкой спектра [11]. В нашем случае различные „фрактальные особенности“ учитываются при задании той или иной модели комплексной диэлектрической функции, мнимая часть которой содержится в выражении (5). Вполне оправданными здесь, на наш взгляд, представляются полуфеноменологические модели диэлектрических функций, которые позволяют провести все вычисления до конца.

3. Влияние диэлектрических свойств

Измерение оптических свойств является одним из самых распространенных методов исследования твердотельных диэлектрических структур. В частности, интерпретация спектров излучения и поглощения позволяет прогнозировать свойства материалов, что чрезвычайно важно для практических целей. Совокупность имеющихся на сегодня экспериментальных и теоретических результатов (см. работы [2,7–11] и ссылки в них) дает возможность судить о фрактальных кластерах как о средах особого типа, свойства которых принципиально отличаются от газов, жидкостей, твердых тел и плазмы. Выражение (5) позволяет найти интенсивность излучения, если известна частотная зависимость комплексной диэлектрической функции.

Рассмотрим сначала самый простой случай, когда мнимая часть диэлектрической функции не зависит от частоты. Интеграл в (5) при замене переменной $x = \hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T$ выражается через дзета-функцию Римана $\xi(m)$ и выражение для интенсивности излучения приобретает вид

$$I = \frac{24\xi(5)\varepsilon_i V k_{\mathrm{B}}^5 T^5}{\pi^2 c^3 \hbar^4}, \tag{6}$$

где $\xi(5) \approx 1.037$ и $\varepsilon_i = \mathrm{Im}\varepsilon = \mathrm{const}$. Интенсивность излучения пропорциональна объему, т. е. фактически массе частиц, из которых состоит фрактальный кластер. Следовательно, для управления интенсивностью излучения можно изменять массу вещества в объеме кластера. Численные оценки по формуле (6) показывают, что интенсивность излучения даже малых кластеров может достигать значительной величины. Таким образом, самоорганизация атомов или молекул во фрактальный кластер приводит к возрастанию интенсивности излучения, что целиком согласуется с выводом, сделанным в [3].

Специфические свойства, связанные с частотной дисперсией поляризуемости и диэлектрической проницаемости, характерны для полимеров, композитов и стекол, имеющих фрактальную структуру [12]. Для описания комплексной диэлектрической восприимчивости и соответственно комплексной диэлектрической проницаемости в таких материалах принято использовать формулы Коула–Коула, Коула–Дэвидсона и Гаврилияка–Негами [13,14], адекватность которых неоднократно подтверждалась опытами по диэлектрической и емкостной спектроскопии, ядерному магнитному резонансу, рассеянию нейтронов. До недавнего времени считалось, что эти формулы не находят четкого теоретического обоснования. Однако в работах [14–17] показано, что они могут быть получены с применением дробного интегродифференцирования, которое в настоящее время широко используется в теории фракталов [2,14,18].

Наиболее общий вид имеет комплексная диэлектрическая функция Гаврилияка–Негами [13]

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\big(1 + (i\omega\tau)^a\big)^b}, \tag{7}$$

$$0 < a,\ b \le 1,$$

где a и b — полуэмпирические параметры, связанные с порядком дробного интегродифференцирования [14–17] и косвенно учитывающие фрактальную структуру кластера, τ — время релаксации, ε_1 и ε_2 — высокочастотная и низкочастотная диэлектрические проницаемости ($\varepsilon_2 > \varepsilon_1$). Выражение (7) описывает в качестве частых случаев процессы диэлектрической релаксации Дебая при $a = b = 1$, Коула–Коула при $b = 1$ и Коула–Дэвидсона при $a = 1$. Мнимая часть функции (7) есть

$$\mathrm{Im}\varepsilon = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\frac{\sin\Big(b\,\mathrm{arctg}\Big[\frac{(\omega\tau)^a \sin(\pi a/2)}{1+(\omega\tau)^a\cos(\pi a/2)}\Big]\Big)}{\big(1 + 2(\omega\tau)^a\cos(\pi a/2) + (\omega\tau)^{2a}\big)^{b/2}}, \tag{8}$$

где учтено, что $\mathrm{Im}\varepsilon > 0$. После подстановки (8) в (5) и замены переменной $x = \hbar\omega/k_{\mathrm{B}}T$ в подынтегральном выражении находим

$$I = \frac{\hbar(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)V}{\pi^2 c^3 \tau^5}\Phi(y), \tag{9}$$

$$\Phi(y) = y^5 \times \int_0^\infty \frac{\sin\Big(b\,\mathrm{arctg}\Big[\frac{(yx)^a \sin(\pi a/2)}{1+(yx)^a\cos(\pi a/2)}\Big]\Big)x^4 dx}{(\exp(x) - 1)\big(1 + 2(yx)^a\cos(\pi a/2) + (yx)^{2a}\big)^{b/2}},$$

где $y = k_{\mathrm{B}}T/\hbar\omega_0$ — безразмерный параметр, характеризующий температуру и релаксационные свойства излучения, $\omega_0 = 1/\tau$ — частота пика диэлектрических потерь. Безразмерная функция $\Phi(y)$ в (9) определяет температурную зависимость излучения фрактального кластера во всем температурном диапазоне.

К сожалению, интеграл, через который выражается функция $\Phi(y)$, не берется. Для его вычисления требуется привлекать численные методы. На рис. 2 показаны графики функции $\Phi(y)$, построенные при различных значениях параметров a и b. Обращает на себя внимание неодинаковый ход кривых при $y > 1$. Физически это связано с тем, что параметры a и b учитывают определенным образом сложное коллективное взаимодействие частиц во фрактальном кластере, а не простую суперпозицию элементарных дебаевских процессов. В целом диэлектрическая релаксация во фрактальных кластерах, по нашему мнению, носит синергетический характер и может быть вызвана вращением, конформационными изменениями и локальными колебаниями элементов кластера в различных пространственных масштабах.

Если параметры a и b близки к единице и при высоких температурах выполняется условие $y \gg 1$, то интеграл в (9) может быть выражен через известные функции

$$\Phi(y) \approx y^m \sin(\pi ab/2)\int_0^\infty \frac{x^{m-1}dx}{\exp(x) - 1}$$

$$= y^m \sin(\pi ab/2)\Gamma(m)\xi(m),$$

где $\Gamma(m)$ — гамма-функция Эйлера, $m = 5 - ab$. Таким образом, для интенсивности получаем

$$I = \frac{\hbar(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\sin(\pi ab/2)\Gamma(m)\xi(m)V}{\pi^2 c^3 \tau^5}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T\tau}{\hbar}\right)^m. \tag{10}$$

При высоких температурах интенсивность излучения кластера становится степенной функцией температуры с нецелым показателем $I \sim T^m$. Такая функция характерна для многих физических процессов при наличии

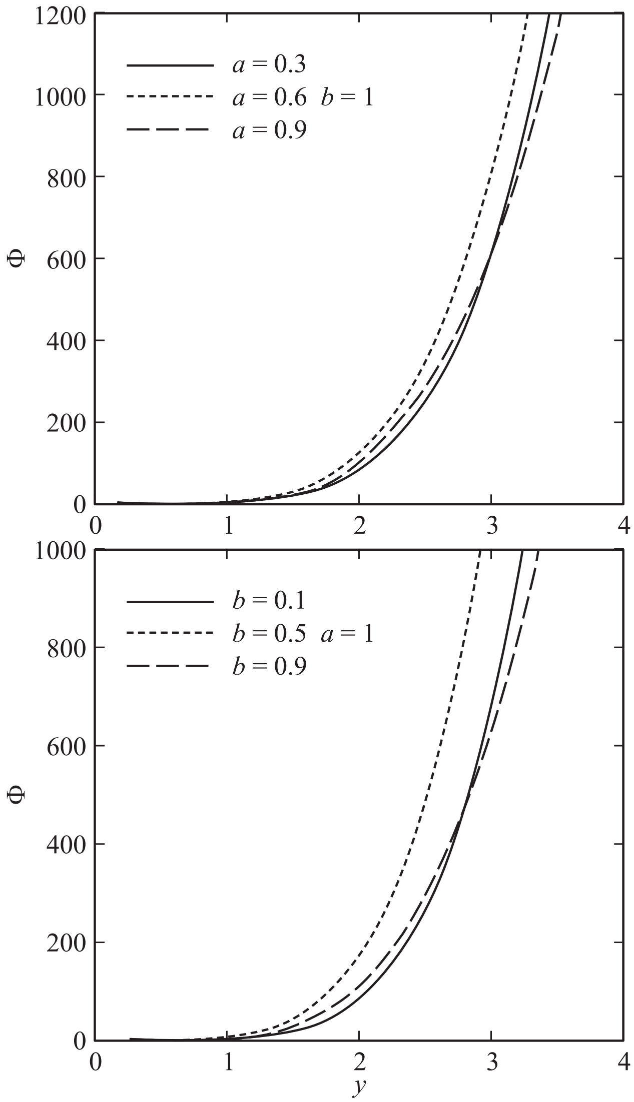

Рис. 2. Функция $\Phi(y)$, определяющая температурную зависимость интенсивнсоти излучения, при различных значениях параметров a и b.

свойств самоподобия и фрактальности [19]. Уместно, кроме того, указать, что степенные температурные зависимости с дробными показателями появляются при фрактальном обобщении теории теплоемкости твердых тел Дебая [20,21]. При высоких температурах релаксация не перестает играть роль, поскольку выражение (10) содержит τ. Для различных диэлектрических материалов τ может изменяться в широких пределах от 10^{-3} до 10^{-11} s. При дебаевской релаксации $a = b = 1$ и $m = 4$, поэтому из (10) имеем

$$I = \frac{\pi^2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)Vk_B^4T^4}{15c^3\hbar^3\tau} = \frac{4(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)V}{c\tau}\sigma T^4, \quad (11)$$

где σ — постоянная Стефана–Больцмана. Из (10) и (11) следует, что интенсивность излучения кластера увеличивается с уменьшением времени диэлектрической релаксации.

Проведенный анализ показывает, что учет частотной дисперсии диэлектрической проницаемости при расчете интенсивности излучения фрактального кластера оказывает весьма существенное влияние. Так, при высоких температурах $(y \gg 1)$ при переходе от частотно независимой диэлектрической проницаемости к комплексной диэлектрической проницаемости, описываемой функцией Гаврилиака–Негами, показатель степени m в температурной зависимости интенсивности излучения меняется от 5 до 4 (см. формулы (6) и (10), (11)). В общем случае при неизменном объеме температурная зависимость интенсивности излучения может быть обусловлена не только функцией $\Phi(y)$, но и, например, температурной зависимостью времени релаксации τ.

4. Заключение

Идеальные фракталы обладают своеобразными свойствами — длины, площади и объемы одних фракталов равны нулю, а других обращаются в бесконечность. Фрактальная размерность может принимать как целые, так и дробные значения. Иногда для описания фракталов приходится использовать не одну размерность, а набор размерностей. Такие объекты называются мультифракталами. Уже стало ясно, что принципы фрактальной геометрии пригодны для описания не только статичных объектов, но и сложных динамических систем. Материалы с фрактальной структурой отличаются разнообразием физико-химических свойств, что делает их перспективными с практической точки зрения. В настоящей работе рассмотрен полуфеноменологический подход к анализу оптических свойств диэлектрических фрактальных кластеров. При этом делаются следующие выводы: 1) в длинноволновом случае получено выражение для интенсивности излучения кластера, на который падает лазерный пучок, задаваемый в виде плоской монохроматической волны; 2) на температурную зависимость и величину интенсивности излучения оказывает влияние частотная дисперсия диэлектрической функции, которая учитывает фрактальные свойства кластера через экспериментально определяемые параметры; 3) при заданной температуре интенсивность излучения диэлектрического фрактального кластера в зависимости от времени релаксации может достигать высоких значений, сопоставимых с излучением абсолютно черного тела. Наконец отметим, что представляет интерес экспериментально установить связь между параметрами a и b в формуле (7) и фрактальной размерностью кластера D.

Авторы признательны А.П. Савинцеву за ценные советы по настоящей работе.

Список литературы

[1] D.A. Weitz, M. Oliveria. Phys. Rev. Lett. **52**, 1433 (1984).
[2] А.А. Потапов. Фракталы в радиофизике и радиолокации: топология выборки. Университетская книга, М. (2005). 848 с.

[3] Б.М. Смирнов. УФН **163**, 51 (1993).
[4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1982). Ч. 1. 584 с.
[5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинака сплошных сред. Наука, М. (1982). 620 с.
[6] А. Исимару. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. Мир, М. (1981). Т. 1. 280 с.
[7] В.М. Шалаев, М.И. Штокман. ЖЭТФ **92**, 509 (1987).
[8] А.В. Бутенко, В.М. Шалаев, М.И. Штокман. ЖЭТФ **94**, 107 (1988).
[9] В.В. Максименко, А.А. Лушников. Письма в ЖЭТФ **57**, 204 (1993).
[10] С.В. Пермионов, С.Г. Раутиан, В.П. Сафонов. ЖЭТФ **125**, 789 (2004).
[11] О.Н. Гадомский, И.В. Гадомская, К.К. Алтунин. Письма в ЖЭТФ. **90**, 26 (2009).
[12] А.И. Олемской, А.Я. Флат. УФН **163**, 1 (1993).
[13] Э.Р. Блайт, Д. Бур. Электрические свойства полимеров. Физматлит, М. (2008). 378 с.
[14] В.В. Учайкин. Метод дробных производных. Артишок, Ульяновск (2008). 512 с.
[15] Р.Р. Нигматулин, Я.Е. Рябов. ФТТ **39**, 101 (1997).
[16] В.В. Новиков, О.А. Комкова. Технол. и констр. в электрон. аппаратуре *5*, 61 (2004).
[17] В.В. Новиков, О.А. Комкова, О.В. Жарова. Технол. и констр. в электрон. аппаратуре *2*, 62 (2005).
[18] А.М. Нахушев. Дробное исчисление и его применение. Физматлит, М. (2003). 272 с.
[19] М. Шредер. Фракталы, хаос, степенные законы. Миниатюры из бесконечного рая. НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, Ижевск (2001). 528 с.
[20] Т.С. Якубов. ДАН СССР **310**, 145 (1990).
[21] С.Ш. Рехвиашвили. ЖТФ **78**, *12*, 54 (2008).