

Флуктуационно-электромагнитное взаимодействие движущихся частиц с плоской поверхностью

© Г.В. Дедков, А.А. Кясов

Кабардино-Балкарский государственный университет,
360004 Нальчик, Россия

E-mail: gv_dedkov@rekt.kbsu.ru

(Поступила в окончательном виде 21 апреля 2000 г.)

В рамках флуктуационно-электромагнитной теории впервые получены наиболее общие (нерелятивистские) формулы для силы притяжения к поверхности и торможения параллельно движущегося нерелятивистского атома, а также для латеральных и нормальных сил, действующих на движущуюся дипольную молекулу и заряженную частицу (при параллельном и перпендикулярном движении). Получены зависимости указанных сил от скорости, температуры, расстояния и диэлектрических свойств атома и поверхности. Теоретически обоснованы эффект бездиссипативного резонансного взаимодействия движущегося нейтрального атома с полем поверхностных плазмонов, а также возможность появления положительной (ускоряющей) силы, действующей на атом (нанозонд). Обсуждается роль и возможность экспериментального измерения динамических флуктуационных сил в экспериментах с техникой кварцевого микробаланса, с атомно-силовым микроскопом (в динамическом режиме) и при торможении атомных пучков в открытых нанотрубках. Корректность полученных результатов обосновывается согласием с большинством известных теоретических соотношений других авторов.

Исследование динамического флуктуационно-электромагнитного взаимодействия атомов и молекул с плоской и искривленной поверхностью представляет значительный интерес для анализа экспериментов, связанных с различными операционными режимами сканирующих зондирующих микроскопов [1,2], с техникой кварцевого микробаланса [3–5], а также в связи с возможностью управления пучками частиц с помощью нанотрубок [6].

Насколько нам известно, первые работы в этом направлении появились в начале 80-х годов [7–9]. В них было показано, что наряду с силой ван-дер-ваальсова притяжения к поверхности, которая, вообще говоря, тоже зависит от скорости частицы \mathbf{V} , появляется тормозящая сила типа (1). Ввиду очевидной аналогии с гидродинамикой последняя получила название "силы трения", а коэффициент пропорциональности η — "коэффициента трения"

$$\mathbf{F} = -\eta\mathbf{V}. \quad (1)$$

Так, в работе Шайха и Харриса [7] для взаимодействия нейтральных частиц с металлической поверхностью была получена зависимость $\eta(z) \sim z^{-10}$, где z — расстояние от поверхности. Совершенно иная зависимость ($\eta(z) \sim z^{-5}$) была получена Маханги [8], в наших работах [2,10], а также Томассони и Видомом [11]. В частности, в [11] для взаимодействия дипольной молекулы с металлической поверхностью при перпендикулярной к поверхности ориентации оси диполя \mathbf{d} было получено (σ — электропроводность металла)

$$\eta(z) = \frac{3d^2}{8\pi\sigma z^5}, \quad (2a)$$

а в случае взаимодействия сферического атома с поверхностью соответственно

$$\eta(z) = -\frac{3\hbar}{4\pi z^5} \int_0^\infty \alpha''(\omega) \Delta''(\omega) \frac{d}{d\omega} \frac{1}{(\exp(\omega\hbar/k_B T) - 1)} d\omega, \quad (2b)$$

где $\alpha''(\omega)$ — мнимая часть динамической поляризуемости атома, $\Delta(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)-1}{\varepsilon_2(\omega)+1}$, $\Delta''(\omega)$ — мнимая часть этой величины, $\varepsilon_2(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость среды, \hbar — постоянная Планка, T — температура, k_B — постоянная Больцмана.

Заметим, что из (2b) следует, что $\eta = 0$ при $T = 0$. Этот вывод нам представляется принципиально неверным. Напротив, у Маханги [8], а также в наших работах [2,10] коэффициент η не обращается в нуль и при нулевой температуре. При этом следует отметить, что авторы цитируемых работ использовали различные методы расчета: методы квантовой теории возмущений [7,8], формализм функции Грина и Кубо [11], а также флуктуационно-электромагнитную теорию [2,10].

Недавно близкая проблема рассматривалась Пендри [12], а затем Волокитиным и Перссоном [13], рассмотревшими флуктуационное трение двух полупространств, разделенных плоской щелью с шириной z . Эти авторы также получили нулевой коэффициент трения при $T = 0$, а отличная от нуля составляющая силы трения оказалась пропорциональна кубу скорости.

Столь принципиальные расхождения в получаемых результатах приводят к необходимости более детального рассмотрения круга соответствующих задач в рамках последовательной теории электромагнитных флуктуаций [14]. Соответствующее (нерелятивистское) рассмотрение при $T = 0$ впервые было проведено в наших

работах [10,15] для плоской [10] и цилиндрической [15] поверхностей. В них были получены общие формулы для динамического потенциала притяжения и силы трения, действующих на атом, движущийся параллельно поверхности. Цель настоящей работы — обобщение результатов [2,10] на случай произвольных температур и скоростей при движении нейтральных атомов, полярных молекул и ионов (в случае плоской поверхности). Для атома, движущегося перпендикулярно поверхности, нам пока не удалось получить замкнутых формул, поскольку при решении уравнения Пуассона пространственные и временные переменные не разделяются.

1. Атом, движущийся параллельно плоской поверхности. Общие соотношения

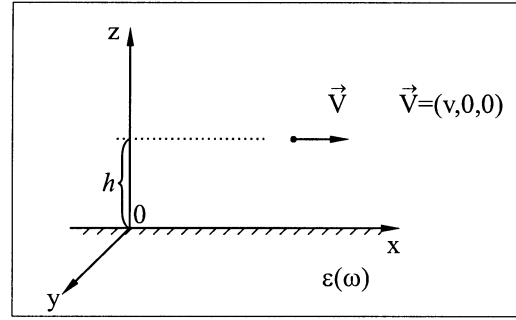
Рассмотрим сферически симметричную атомную частицу с поляризуемостью $\alpha(\omega)$, движущуюся с нерелятивистской скоростью $V \ll c$ параллельно плоской поверхности с заданной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega)$ (см. рисунок). Пусть расстояние h частицы от поверхности значительно превышает характерный размер атомов (r_0): $h \gg r_0$. Чтобы пренебречь запаздыванием, необходимо выполнение условия $\omega_0 h/c \ll 1$, где ω_0 — характерная частота движения атомных электронов. Это условие означает, что время распространения света от атома к поверхности много меньше характерного периода осцилляций атомных электронов. Пространственной дисперсией пренебрегаем. Тогда в области расстояний $r_0 \ll h \ll c/\omega_0$ частицу можно рассматривать как точечный флуктуирующий диполь с нулевым средним значением дипольного момента \mathbf{d}^{sp} и отличным от нуля средним значением квадрата этой величины.

Для расчета динамического потенциала притяжения атома к поверхности и силы трения (1) воспользуемся общими уравнениями нерелятивистской электромагнитной теории в веществе, а также флуктуационно-диссипативными соотношениями. Запишем выражение для вектора поляризации, создаваемой в среде спонтанными флуктуациями дипольного момента \mathbf{d}^{sp} ,

$$\mathbf{P}^{sp}(\mathbf{r}, t) = \delta(x - Vt) \delta(y) \delta(z - h) \mathbf{d}^{sp}. \quad (3)$$

Заметим, что в рамках теории электромагнитных флуктуаций все векторные величины рассматриваются как квантовые операторы в гейзенберговском представлении. Для нахождения электрического поля, созданного поляризацией (3), запишем уравнение Пуассона для скалярного потенциала [16]

$$\Delta \Phi = 4\pi \operatorname{div} \mathbf{P}^{sp}. \quad (4)$$



Геометрия взаимодействия частицы с плоской поверхностью.

Величины, входящие в уравнение (4), разлагаем в интегралы Фурье по переменным x, y, t

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \iiint \frac{dk_x dk_y d\omega}{(2\pi)^3} \Phi_{\omega k}(z) \exp[i(k_x x + k_y y - \omega t)],$$

$$\mathbf{P}^{sp}(\mathbf{r}, t) = \iiint \frac{dk_x dk_y d\omega}{(2\pi)^3} \mathbf{P}_{\omega k}^{sp}(z) \exp[i(k_x x + k_y y - \omega t)],$$

тогда для Фурье-компонент уравнение (4) принимает вид

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - k_x^2 - k_y^2 \right) \Phi_{\omega k}(z) = 4\pi \delta(z - h) \{ ik_x d_y^{sp}(\omega - k_x V) + ik_y d_x^{sp}(\omega - k_x V) + d_z^{sp}(\omega - k_z V) \}. \quad (5)$$

Решение уравнения (5), удовлетворяющее граничным условиям непрерывности потенциала и нормальной составляющей электрической индукции на поверхности $z = 0$, имеет вид [10]

$$\begin{aligned} \Phi_{\omega k}(z) = & \frac{2\pi}{k} e^{-k(z+h)} \Delta(\omega) \{ ik_x d_x^{sp}(\omega - k_x V) \\ & + ik_y d_y^{sp}(\omega - k_x V) + k d_z^{sp}(\omega - k_x V) \} \\ & + \frac{2\pi}{k} e^{-k|z-h|} \{ -ik_x d_x^{sp}(\omega - k_x V) \\ & - ik_y d_y^{sp}(\omega - k_x V) + \operatorname{sign}(z - h) k d_z^{sp}(\omega - k_x V) \}, \quad (6) \end{aligned}$$

где $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, а $\Delta(\omega)$ имеет тот же смысл, что в формуле (3). Первое слагаемое в (6) описывает потенциал поляризации среды, обусловленный флуктуационным электромагнитным полем атома (это вытекает из того, что $\Delta(\omega) = 0$ при $\varepsilon(\omega) = 1$), а второе — собственное поле флуктуирующего диполя.

При $T \neq 0$ свободная энергия (потенциал взаимодействия) частицы с поверхностью в дипольном приближении определяется формулой [17]

$$U_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{d} \mathbf{E} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{d}^{sp} \mathbf{E}^{\text{in}} \rangle - \frac{1}{2} \langle \mathbf{d}^{\text{in}} \mathbf{E}^{sp} \rangle = U_1 + U_2, \quad (7)$$

где угловые скобки означают полное квантово-механическое и статистическое усреднение, причем первое слагаемое обусловлено спонтанными флуктуациями дипольного момента атома $\mathbf{d}^{sp}(t)$, а второе — флуктуациями

электромагнитного поля поверхности $\mathbf{E}^{sp}(\mathbf{r}, t)$ в точке нахождения частицы (\mathbf{r}, t) .

Для нахождения U_1 операторы $\mathbf{d}^{sp}(t)$, $\mathbf{E}^{in}(\mathbf{r}, t)$ разлагаем в интегралы Фурье с учетом координат частицы $\mathbf{r} = (Vt, 0, h)$ и выражаем фурье-компоненту $\mathbf{E}_{\omega k}^{in}(h)$ через индуцированный потенциал $\Phi_{\omega k}^{in}(h)$ с помощью (6). Затем подставляем в (7) фурье-компоненты операторов $\mathbf{d}^{sp}(t)$ и $\mathbf{E}^{in}(\mathbf{r}, t)$, а возникающие корреляторы дипольного момента раскрываем с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы [18]

$$\langle d_i^{sp}(\omega) d_k^{sp}(\omega') \rangle = 2\pi \delta_{ik} \delta(\omega + \omega') \hbar \alpha''(\omega) \operatorname{cth}(\omega \hbar / 2k_B T). \quad (8)$$

Наконец, принимая во внимание аналитические свойства функций $\alpha(\omega)$, $\varepsilon(\omega)$, связанные с четностью действительных частей и нечетностью мнимых частей [16], после алгебраических упрощений приводим выражение для U_1 к виду

$$U_1(h, V) = -\frac{\hbar}{\pi^2} \iiint d\omega dk_x dk_y k \exp(-2kh) \operatorname{cth} \frac{\omega \hbar}{2k_B T} \times \alpha''(\omega) [\Delta'(\omega - k_x V) + \Delta'(\omega + k_x V)]. \quad (9)$$

Величины с одним и двумя штрихами соответствуют действительной и мнимой частям соответствующих функций. Здесь и далее подразумевается интегрирование по положительным частотам и проекциям волновых векторов.

Для вычисления U_2 аналогично разлагаем \mathbf{d}^{in} , \mathbf{E}^{sp} в интегралы Фурье и подставляем в (7). Далее, принимая во внимание линейную связь между индуцированным дипольным моментом частицы \mathbf{d}^{in} и флуктуационным электромагнитным полем атома поверхности \mathbf{E}^{sp} , получаем для U_2 выражение, имеющее вид кратного интеграла от спектральной плотности флуктуаций электрического поля \mathbf{E}^{sp} . Данная спектральная плотность в соответствии с общими результатами теории электромагнитных флуктуаций выражается через мнимую часть запаздывающей гриновской функции фотона в среде, удовлетворяющей уравнению [14],

$$\left(\operatorname{rot}_{ik} \operatorname{rot}_{kl} - \frac{\omega^2}{c^2} \delta_{il} \varepsilon(\omega, \mathbf{r}) \right) D_{lm}^R(\omega, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = -4\pi \hbar \delta_{im} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (10)$$

В нерелятивистском пределе ($c \rightarrow \infty$) решение уравнения (10) приводит к следующему выражению для спектральной плотности флуктуационного электромагнитного поля поверхности в точке нахождения частицы ($z = h$):

$$\langle \mathbf{E}_{\omega k}^{sp}(h) \mathbf{E}_{\omega' k'}^{sp}(h) \rangle = 2(2\pi)^4 k \exp(-2kh) \hbar \operatorname{cth} \frac{\omega \hbar}{2k_B T} \Delta''(\omega) \times \delta(\omega + \omega') \delta(k_x + k'_x) \delta(k_y + k'_y). \quad (11)$$

Используя (11), после выполнения интегрирования по переменным ω' , k'_x , k'_y с учетом аналитических свойств

функций $\alpha(\omega)$, $\varepsilon(\omega)$ находим потенциал U_2

$$U_2(h, V) = -\frac{\hbar}{\pi^2} \iiint d\omega dk_x dk_y k \exp(-2kh) \operatorname{cth} \frac{\omega \hbar}{2k_B T} \times \Delta''(\omega) [\alpha'(\omega - k_x V) + \alpha'(\omega + k_x V)]. \quad (12)$$

Складывая (9) и (12), получаем конечную формулу для потенциала взаимодействия движущегося атома с плоской поверхностью [2]

$$U_{\text{int}}(h, V) = -\frac{\hbar}{\pi^2} \iiint d\omega dk_x dk_y k \exp(-2kh) \operatorname{cth} \frac{\omega \hbar}{2k_B T} \times \left\{ \alpha''(\omega) [\Delta'(\omega - k_x V) + \Delta'(\omega + k_x V)] + \Delta''(\omega) [\alpha'(\omega - k_x V) + \alpha'(\omega + k_x V)] \right\}. \quad (13)$$

Формула (13) является обобщением известного выражения для энергии ван-дер-ваальсова взаимодействия нейтральной сферически симметричной частицы с плоской поверхностью на случай конечных скоростей и температур поверхности. Чтобы показать это, положим в (13) $V = 0$, $T = 0$. Тогда получаем

$$U_{\text{int}}(h) = -\frac{2\hbar}{\pi^2} \iiint d\omega dk_x dk_y k \exp(-2kh) \times [\alpha''(\omega) \Delta'(\omega) + \alpha'(\omega) \Delta''(\omega)] = -\frac{2\hbar}{\pi^2} \iiint d\omega dk_x dk_y k \exp(-2kh) \operatorname{Im} \int_0^\infty d\omega \alpha(\omega) \Delta(\omega). \quad (14)$$

Интеграл по волновым векторам k_x , k_y далее вычисляется элементарным переходом к полярным координатам (результат равен $\pi/8h^3$), а интеграл по частотам преобразуется поворотом контура интегрирования на 90° таким образом, чтобы он совпал с верхней мнимой полуосью. Тогда

$$\operatorname{Im} \int_0^\infty d\omega \alpha(\omega) \Delta(\omega) = \int_0^\infty d\omega \alpha(i\omega) \Delta(i\omega). \quad (15)$$

В результате получим хорошо известный результат для статического потенциала притяжения атома к поверхности [17]

$$U_{\text{int}}(h) = -\frac{\hbar}{4\pi h^3} \int_0^\infty d\omega \alpha(i\omega) \Delta(i\omega). \quad (16)$$

В (14) можно дополнительно провести интегрирование по переменной k_y , используя интегральное представление Зоммерфельда для функции Макдональда [19]

$$K_\nu(z) = \int_0^\infty \exp(-z \operatorname{ch} u) \operatorname{ch}(\nu u) du, \quad \operatorname{Re} z > 0, \quad (17)$$

после чего приходим к более простому виду

$$U_{\text{int}}(h, V) = -\frac{\hbar}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega \int_0^\infty dk_x k_x^2 [K_0(2k_x h) + K_2(2k_x h)] \times \text{cth} \frac{\omega \hbar}{2k_B T} \left\{ \alpha''(\omega) [\Delta'(\omega - k_x V) + \Delta'(\omega + k_x V)] + \Delta''(\omega) [\alpha'(\omega - k_x V) + \alpha'(\omega + k_x V)] \right\}. \quad (18)$$

Теперь перейдем к расчету силы трения F . Для стационарного движения частицы она связана известным соотношением с диссипацией энергии флуктуационного электромагнитного поля в единицу времени

$$-\frac{dW}{dt} = FV = \int \langle \mathbf{j} \mathbf{E} \rangle d^3 \mathbf{r}. \quad (19)$$

Скорость диссипации энергии, как и потенциал взаимодействия, также можно представить в виде суммы двух независимых частей

$$-\frac{dW}{dt} = FV = \int \langle \mathbf{j}^{sp} \mathbf{E}^{in} \rangle d^3 \mathbf{r} + \int \langle \mathbf{j}^{in} \mathbf{E}^{sp} \rangle d^3 \mathbf{r}, \quad (20)$$

обусловленных вкладами флуктуирующего дипольного момента атома и флуктуационного электромагнитного поля поверхности соответственно, причем $\mathbf{j}^{sp} = \frac{\partial \mathbf{P}^{sp}}{\partial t}$, \mathbf{P}^{sp} — определяется формулой (3), а \mathbf{j}^{in} выражается через \mathbf{E}^{sp} линейным интегральным соотношением. Проводя вычисления, аналогичные тем, что были сделаны выше, с учетом флуктуационно-диссипационных соотношений (8), (11) получим [2]

$$F(h, V) = \frac{2\hbar}{\pi^2 V} \int d\omega \iint dk_x dk_y k \exp(-2kh) \text{cth} \left(\frac{\omega \hbar}{2kT} \right) \times \left\{ (\omega + k_x V) [\Delta''(\omega) \alpha''(\omega + k_x V) - \Delta''(\omega + k_x V) \alpha''(\omega)] + (\omega - k_x V) [\Delta''(\omega) \alpha''(\omega - k_x V) - \Delta''(\omega - k_x V) \alpha''(\omega)] \right\}. \quad (21)$$

После вычисления интеграла по k_y (21) приводится к двойному интегралу

$$F(h, V) = \frac{\hbar}{\pi^2 V} \int_0^\infty d\omega \int_0^\infty dk_x k_x^2 [K_0(2k_x h) + K_2(2k_x h)] \times \text{cth} \frac{\omega \hbar}{2k_B T} \left\{ (\omega + k_x V) [\alpha''(\omega + k_x V) \Delta''(\omega) - \Delta''(\omega + k_x V) \alpha''(\omega)] + (\omega - k_x V) [\Delta''(\omega) \alpha''(\omega - k_x V) - \alpha''(\omega) \Delta''(\omega - k_x V)] \right\}. \quad (22)$$

Формулы (21) и (22) обобщают результаты работы [10] на случай конечных температур и дают возможность определять силу трения при любых нерелятивистских скоростях, не ограничиваясь линейным приближением. В пределе $V \rightarrow 0$ (22) допускает дальнейшее упрощение, и после интегрирования по волновым векторам

линейный по скорости вклад в силу трения записывается в виде [2]

$$F = -\eta(h)V = -\frac{3\hbar V}{8\pi h^5} \int_0^\infty d\omega \left\{ 2 \left[\alpha''(\omega) \frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega} - \Delta''(\omega) \frac{d\alpha''(\omega)}{d\omega} \right] + w \left[\alpha''(\omega) \frac{d^2 \Delta''(\omega)}{d\omega^2} - \Delta''(\omega) \frac{d^2 \alpha''(\omega)}{d\omega^2} \right] \right\} \text{cth} \left(\frac{\omega \hbar}{2kT} \right). \quad (23)$$

Несмотря на явное сходство с формулой (2b), формула (23) принципиально отличается от нее. Главное отличие состоит в том, что в (23) под знаком интеграла дифференцируется не распределение Планка, а диэлектрическая часть, поэтому при $T = 0$ коэффициент трения отличен от нуля. В последнем случае после упрощений, связанных с интегрированием по частям, формула (23) записывается в еще более компактной формуле [2]

$$F = -\eta(h)V = -\frac{3\hbar V}{4\pi h^5} \int_0^\infty d\omega \alpha''(\omega) \frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega}. \quad (24)$$

2. Недиссипативное (резонансное) взаимодействие движущегося атома с поверхностной волной

В отличие от потенциала (и силы) притяжения к поверхности, содержащих перекрестные произведения действительных и мнимых частей функций $\alpha(\omega)$, $\Delta(\omega)$, сила торможения, определяемая формулами (22)–(24), содержит произведения только мнимых частей указанных функций и в итоге определяется интегралом перекрытия спектров поглощения атома и поверхности, сдвинутых относительно друг друга на $\Delta\omega = \pm k_x V$ в силу эффекта Доплера. Таким образом, сама структура выражения для силы трения наглядно демонстрирует ее диссипативный характер. Однако полученные результаты допускают возможность существования и недиссипативных латеральных сил. Для соответствующего анализа воспользуемся известной формулой для поляризуемости атома в основном состоянии [20]

$$\alpha(\omega) = \sum_n \frac{e^2 f_{0n}}{m[\omega_{0n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{0n}]}, \quad (25)$$

где f_{0n} — сила осциллятора для перехода из основного состояния атома (0) в состояние (n) дискретного спектра, ω_{0n} и γ_{0n} — частота перехода и ширина линии поглощения. Предположим, что при $V = 0$ атом и поверхность характеризуются двумя узкими линиями поглощения с частотами ω_{0n} и ω_s (ω_s равна частоте поверхностного плазмона, удовлетворяющей дисперсионному уравнению $\varepsilon(\omega_s) + 1 = 0$, [21]), причем выполнены условия

$\gamma_{0n} \ll \omega_{0n}$, $\gamma_s \ll \omega_s$, $\max(\gamma_{0n}, \gamma_s) \ll |\omega_{0n} - \omega_s|$. Последнее из неравенств означает, что интеграл перекрытия линий поглощения пренебрежимо мал. В этом случае мнимые части функций $\alpha(\omega)$, $\Delta(\omega)$ можно записать в виде

$$\alpha''(\omega) = \frac{\pi e^2 f_{0n}}{2m\omega_{0n}} \delta(\omega - \omega_{0n}), \quad (26)$$

$$\Delta''(\omega) = \frac{2\pi}{\left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_s}} \delta(\omega - \omega_s). \quad (27)$$

Подставляя (25)–(27) в (24) и интегрируя по частотам, получим [11]

$$F(h, V) = -\frac{\hbar e^2 f_{0n}}{Vm\omega_{0n} \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_s}} \int_0^\infty dk_x k_x^3 (K_0(2k_x h) + K_2(2k_x h)) \times \left\{ \delta\left(k_x - \frac{\omega_s - \omega_{0n}}{V}\right) - \delta\left(k_x + \frac{\omega_s - \omega_{0n}}{V}\right) \right\}. \quad (28)$$

Из (28) следует, что при $\omega_s > \omega_{0n}$ вклад в латеральную силу вносит только первая дельта-функция в скобках, поэтому $F < 0$ и частица тормозится, расходуя кинетическую энергию на возбуждение поверхностной волны. В противоположном случае, когда $\omega_s < \omega_{0n}$, вклад в интеграл (28) вносит вторая дельта-функция, и частица ускоряется, забирая энергию у поверхностной волны, а латеральная сила становится недиссипативной. Последующее интегрирование (28) по волновому вектору дает формулу, учитывающую оба случая,

$$F(h, V) = -\frac{\hbar e^2 f_{0n} \text{sign}(\omega_s - \omega_{0n})}{Vm\omega_{0n} \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_s}} \left(\frac{\Delta\omega}{V} \right)^3 \times \left[K_0\left(\frac{2\Delta\omega h}{V}\right) + K_2\left(\frac{2\Delta\omega h}{V}\right) \right], \quad (29)$$

где $\Delta\omega = |\omega_s - \omega_{0n}|$. Анализ формулы (29) показывает, что сила $F(h, V)$ как функция скорости имеет максимум. При этом чем меньше разность $\Delta\omega$, тем более резким является этот максимум. При малых скоростях, когда $\frac{2\Delta\omega h}{V} \gg 1$, можно воспользоваться асимптотическим выражением функций Макдональда при больших значениях аргумента [19]: $K_n(x) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \exp(-x)$. Тогда из (29) следует, что при $\frac{2\Delta\omega h}{V} \gg 1$ сила трения экспоненциально мала. При увеличении скорости величина $F(h, V)$ быстро возрастает и достигает максимума при $V = 0.95\Delta\omega h$. При дальнейшем увеличении скорости функция $F(h, V)$ асимптотически стремится к нулю, но это происходит более плавно. Таким образом, бездиссипативное взаимодействие движущегося атома с поверхностной волной, описываемое формулой (29), имеет резонансный характер, а равенство $V = 0.95\Delta\omega h$ можно рассматривать как условие резонанса. При этом необходимо потребовать выполнения условия $2\Delta\omega h \ll c$, при котором справедливо нерелятивистское рассмотрение. В итоге, разность частот должна удовлетворять соотношению $\gamma_{0,s} \ll \Delta\omega \ll c/2h$.

Интересно отметить, что рассмотренный эффект имеет некоторую аналогию с бесстолкновительным затуханием Ландау в плазме, однако в нашем случае роль пространственной дисперсии и характер распределения частиц по скоростям несущественны. Кроме того, как было показано в [2], эффект ускоряющей силы (в линейном по скорости порядке) может наблюдаться и в том случае, когда диэлектрические функции имеют более общий вид. К этому вопросу мы еще вернемся в п. 4.

3. Взаимодействие с поверхностью полярных молекул и ионов

Общность применяемого нами метода расчета позволяет элементарно получить потенциалы притяжения и силы трения для полярных молекул и ионов. Причем теперь это удастся сделать и для перпендикулярного к поверхности движения. Часть из приводимых далее результатов была получена другими авторами с использованием иных методов [6, 11, 22–25], поэтому появляется возможность дополнительной проверки нашей теории.

В случае нейтральной частицы (полярной молекулы) будем считать, что она обладает перманентным дипольным моментом $\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z)$, не зависящим от времени. Независимо от направления движения диполя для расчета действующей на него силы удобно воспользоваться формулой $\mathbf{F} = (\mathbf{d}\nabla)\mathbf{E}^{ind}$, где Фурье-компонента индуцированного поля выражается через Фурье-компоненту потенциала (6). В результате вычислений для нормальных и латеральных компонент силы будем иметь:

а) латеральное движение

$$F_z(h, V) = -\frac{2}{\pi} \iint dk_x dk_y \Delta'(k_x V) \exp(-2kh) \times (k_x^2 d_x^2 + k_y^2 d_y^2 + k^2 d_z^2), \quad (30a)$$

$$F_x(h, V) = -\frac{2}{\pi} \iint dk_x dk_y \frac{k_x}{k} \Delta''(k_x V) \exp(-2kh) \times (k_x^2 d_x^2 + k_y^2 d_y^2 + k^2 d_z^2); \quad (30b)$$

б) нормальное движение (в этом случае и консервативная и неконсервативная силы взаимодействия перпендикулярны к поверхности)

$$F_z(z, t) = -\frac{d_x^2 + d_y^2 + 2d_z^2}{2} \int_0^\infty dk k^3 \Delta(-ikV) \exp(-2kz), \quad (30c)$$

$$z = Vt.$$

Формула (30a) описывает взаимодействие движущегося диполя со своим изображением. При $V = 0$ после интегрирования по волновым векторам из нее вытекает

известная в электростатике формула для силы притяжения неподвижного диполя к своему изображению [16]

$$F_z(h) = -\frac{3(d_x^2 + d_y^2 + 2d_z^2)}{16h^4} \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \right), \quad (31)$$

где ε — статическая диэлектрическая проницаемость среды.

Интегрирование (30b) в линейном приближении по скорости дает силу трения вида

$$F = -\frac{3(3d_x^2 + d_y^2 + 4d_z^2)V}{32h^5} \left. \frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega=0}, \quad (32)$$

т. е. с такой же зависимостью от расстояния, как и в (24). Для проводящей поверхности, используя низкочастотное приближение для диэлектрической проницаемости [16] (σ — статическая электропроводность)

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma}{\omega}, \quad (33)$$

нетрудно преобразовать (32) к виду

$$F = -\frac{3(3d_x^2 + d_y^2 + 4d_z^2)V}{64\pi\sigma h^5}. \quad (34)$$

Тогда при перпендикулярной к поверхности ориентации дипольного момента имеем $F = -\frac{3d^2V}{16\pi\sigma h^5}$, что находится в полном согласии с результатом работы [11] (см. формулу (2a)).

Аналогично, с учетом (33), в линейном по скорости приближении из (30c) следует

$$F_z(h, V) = -\frac{3(d_x^2 + d_y^2 + 2d_z^2)}{16h^4} - \frac{3(d_x^2 + d_y^2 + 2d_z^2)}{16\pi\sigma h^5} V, \quad (35)$$

поэтому, как и в [10], при перпендикулярном поверхностному движению коэффициент трения вдвое больше, чем при латеральном. Первое слагаемое (35) описывает консервативное притяжение диполя к поверхности.

Для взаимодействия с плоской поверхностью частиц, имеющих заряд Z_1e , формулы, аналогичные (30a), (30b) и (30c), имеют вид [2]:

а) латеральное движение

$$F_z(z, V) = -\frac{2(Z_1e)^2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_0^\infty dk k \exp(-2kz) \Delta'(kV \cos \phi), \quad (36a)$$

$$F_x(z, V) = -\frac{2(Z_1e)^2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\phi \cos \phi \times \int_0^\infty dk \exp(-2kz) \Delta''(kV \cos \phi); \quad (36b)$$

б) нормальное движение

$$F_z(z, V) = -(Z_1e)^2 \int_0^\infty dk k \Delta(-ikV) \exp(-2kz). \quad (36c)$$

Вводя переменную $\omega = kV \cos \phi$, нетрудно привести (36a) и (36b) к более простому виду, совпадающему с результатами работы [23],

$$F_z(z, V) = -\frac{2(Z_1e)^2}{\pi V^2} \int_0^\infty d\omega \omega K_1(2\omega z/V) \Delta'(\omega), \quad (37)$$

$$F_x(z, V) = -\frac{2(Z_1e)^2}{\pi V^2} \int_0^\infty d\omega \omega K_0(2\omega z/V) \Delta''(\omega). \quad (38)$$

В плазменном пределе для диэлектрической проницаемости среды $\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i0^+)}$ из формулы (38) вытекает еще один известный результат [22,25]

$$F_x(z, V) = -\frac{(Z_1e)^2 \omega_s^2}{V^2} K_2\left(\frac{2\omega_s z}{V}\right), \quad (39)$$

где $\omega_s = \omega_p \sqrt{2}$ — частота поверхностного плазмона. В случае же проводящей поверхности, описываемой диэлектрической проницаемостью вида (33) в линейном приближении по скорости из (36b) получаем

$$F_x(z, V) = -\frac{(Z_1e)^2}{16\pi\sigma z^3} V, \quad (40)$$

а при нормальном движении соответственно

$$F_z(z, V) = -\frac{(Z_1e)^2}{8\pi\sigma z^3} V. \quad (41)$$

Формулы (40) и (41) находятся в полном согласии с результатами [11,25], причем, как и при торможении дипольной молекулы (см. (34) и (35)), коэффициент трения для нормального к поверхности движения также оказывается вдвое больше.

Таким образом, полученные в этом разделе формулы согласуются со всеми аналогичными результатами других авторов. Формулы (30) и (36), насколько нам известно, ранее в литературе не приводились, и в данном виде представляются наиболее общими, поскольку могут быть использованы для расчетов с диэлектрическими функциями произвольного типа.

4. Оценки роли флуктуационно-электромагнитных сил в экспериментах

Интересно оценить тормозящие силы, действующие на движущийся вблизи проводящей поверхности адсорбируемый атом, в связи с интерпретацией экспериментов, выполненных с техникой кварцевого микробаланса [3–5].

Пусть наиболее сильная линия в спектре поглощения атома имеет частоту ω_{0n} . Тогда, полагая коэффициент затухания линии равным нулю, для мнимой части атомной поляризуемости можно использовать формулу (26), а диэлектрическую функцию проводящей среды записать в приближении Друде (ω_p — плазменная частота, τ — время релаксации, $\varepsilon(0) = 1$ в случае металлов)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(0) - \frac{(\omega_p \tau)^2}{1 + (\omega \tau)^2} + \frac{i(\omega_p \tau)^2}{\omega \tau [1 + (\omega \tau)^2]}. \quad (42)$$

Подставляя (26) и (42) в формулу (24), после элементарного интегрирования получим

$$F = \frac{3\hbar e^2 f_0 \tau^2 V}{4mz^5} \frac{y^2(12x^4 - 4x^2y^2 + 4x^2 - y^4)}{x(4x^4 - 4x^2y^2 + 4x^2 + y^4)^2}, \quad (43)$$

где $x = \omega_{0n}\tau$, $y = \omega_p\tau$. Анализ формулы (43) показывает, что знак силы F зависит от соотношения частоты поглощения атома и плазменной частоты. Сила является тормозящей при $\omega_p > \sqrt{2}\omega_{0n}$. При типичных для металлов параметрах $\tau = 10^{-14} - 10^{-15}$ с, $\omega_p = 5 - 15$ eV это условие выполняется, но для высокочастотных линий поглощения атома возможна и обратная ситуация, и латеральная сила становится ускоряющей. Следует, однако, отметить, что абсолютные значения интеграла перекрытия спектров, определяемого зависящим от x , y множителем в (43), быстро убывают с увеличением ω_{0n} , поэтому для корректной оценки суммарной силы F необходим детальный учет спектра поглощения атома в узкой области частот вблизи $\omega_p/\sqrt{2}$. Расчеты показывают, что для типичных экспериментов [3–5] при адсорбции атома криптона на золоте величина интеграла перекрытия близка к -0.1 , тогда при $z = 0.4$ nm время затухания движения равно $\Delta t = MV/F = 0.6$ ns (M — масса атомов криптона), что близко к экспериментальному значению [26].

В случае атомно-силового микроскопа с зондом параболической формы, имеющим радиус кривизны R и уравнение поверхности $z = (x^2 + y^2)/2R$, используя формулу (23) аддитивное приближение и выражая поляризуемость через диэлектрическую проницаемость с помощью формулы Клаузиуса–Моссотти, для коэффициента трения при латеральном движении получим [2]

$$\eta(h) = \frac{3}{32\pi} \frac{\hbar R J}{h^3}, \quad (44)$$

где частотный интеграл J аналогичен частотному интегралу в (23) с заменой $\alpha''(\omega)$ на $\text{Im} \frac{\varepsilon_1(\omega) - 1}{\varepsilon_1(\omega) + 2}$, $\varepsilon_1(\omega)$ — диэлектрическая функция материала зонда, h — расстояние апекса зонда от поверхности. Более корректное вычисление силы трения требует определения спектра электромагнитных волн для данной геометрии (параболический зонд–плоская поверхность), и может привести к изменению численного коэффициента в (44).

При типичных скоростях сканирования $10^{-4} - 10^{-2}$ cm/s величина флуктуационных электромаг-

нитных сил оказывается на 3–6 порядков меньше сил статического адгезионного трения [1,2,26], но в динамическом режиме при частотах колебаний нанозондов порядка 1–10 MHz и амплитудах 1–10 nm они могут вносить ощутимый вклад в коэффициенты затухания, поэтому проведение соответствующих измерений для различного сочетания материалов зонда и образца, при разных температурах и других физических параметрах представляет значительный интерес для диагностики поверхности и проверки теории флуктуационных сил. Уже появились и первые экспериментальные результаты [27,28].

В работе [6] было показано, что нанотрубки с открытыми концами могут эффективно использоваться в качестве микроманипуляторов различного рода излучений, в том числе для транспортировки и фокусировки нейтральных атомных пучков. При вхождении пучка в нанотрубку под малым углом к ее оси может быть реализован режим канализования, аналогичный тому, что имеет место в кристалле. Существенным преимуществом нанотрубок является наличие радиальной симметрии непрерывного потенциала, имеющего малый радиус действия (0.1–0.2 nm) в непосредственной близости от стенок. Поэтому для нанотрубок с радиусом несколько nm основная часть пучка будет двигаться вдали от стенок, не испытывая рассеяния. Если взять за основу приведенную выше оценку времени торможения одиночного атома (за счет флуктуационных сил) — 1 ns, то 80 и 90% пучка атомов, имеющих начальную скорость 1000 m/s и захваченных в цилиндрический канал, окажутся способны пройти нанотрубки длиной 100 μ m и с радиусами 5 и 10 nm соответственно. Таким образом, с помощью нанотрубок можно проводить модификацию поверхности твердых тел низкоэнергетичными (тепловыми) атомными пучками. Это можно реализовать в режиме сканирования зондового микроскопа, прикрепляя нанотрубки к его кронштейну [6].

Таким образом, развитая теория динамических флуктуационных электромагнитных сил позволяет проводить их расчет для широкого спектра прикладных задач, связанных с движением нейтральных атомных, ионных, молекулярных пучков и нанозондов вблизи плоской поверхности. Очевидным показателем ее аргументированности является возможность воспроизведения всех основных известных результатов для статического и динамического флуктуационного взаимодействия с поверхностью. Однако полученные формулы (для сил торможения нейтральных атомов) существенно отличаются от известных в литературе [11–13], предсказывая наличие конечных сил трения (линейных по скорости) при нулевой температуре. Этот вывод отражает естественную специфику электромагнитных сил флуктуационной природы.

Впервые обоснована возможность изменения знака латеральных сил, действующих на движущийся вблизи поверхности атом (нанозонд) и приводящих к его ускорению полем поверхностных плазмонов, проанализированы необходимые для этого условия. В случае движущегося атома этот эффект носит резонансный характер.

Показано, что динамические флуктуационно-электромагнитные силы могут обеспечивать наблюдаемые в экспериментах с кварцевым микробалансом времена затухания адсорбированных частиц. Измерение подобных сил, а также декрементов затухания нанозондов в динамическом режиме сканирующих зондовых микроскопов может быть положено в основу диагностических методов изучения диэлектрических свойств тонких поверхностных слоев, а также для проверки динамических механизмов трения. Экспериментальное измерение динамических сил трения имеет также реальную основу при исследовании прохождения атомных пучков в открытых углеродных нанотрубках.

Список литературы

- [1] G.V. Dedkov. *Materials Lett.* **38**, 360 (1999); G.V. Dedkov. *Wear* **232**, 2, 145 (1999).
- [2] G.V. Dedkov, A.A. Kyasov. *Phys. Lett.* **A259**, 38 (1999); *Surf. Sci.*, in press; Г.В. Дедков, А.А. Кясов. *Письма в ЖТФ* **25**, 12, 10 (1999).
- [3] M. Cieplak, E. Smith, M.O. Robbins. *Science* **265**, 1209 (1994).
- [4] E.T. Watts, J. Krim, A. Widom. *Phys. Rev.* **B41**, 3466 (1990).
- [5] J. Krim, D.H. Solina, R. Chiarello. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 181 (1991).
- [6] G.V. Dedkov. *Nucl. Instr. Meth.* **B143**, 584 (1998).
- [7] W.L. Schaich, A. Harris. *J. Phys. F: Met. Phys.* **11**, 65 (1981).
- [8] J. Mahanti. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13**, 4396 (1980).
- [9] F. Sols, F. Flores. *Sol. Stat. Commun.* **42**, 687 (1982).
- [10] А.А. Кясов. В сб. научн. тр. / Под ред. В.Е. Фортгова, Е.А. Кузьменкова. ИФВТАН, М. (1991). С. 122.
- [11] M.S. Tomassone, A. Widom. *Phys. Rev.* **B56**, 4938 (1997).
- [12] J.B. Pendry. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **9**, 10 301 (1997).
- [13] A.I. Volokitin, B.N.J. Persson. *J. Phys. C: Condensed Matter* **11**, 345 (1999).
- [14] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Статистическая физика. Ч. 2.* Наука, М. (1978).
- [15] А.А. Кясов. Деп. ВИНТИ № 1407-В91 (1991).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред.* Наука, М. (1982).
- [17] Ю.С. Бараш. *Силы Ван-дер-Ваальса.* Наука, М. (1988).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика. Ч. 1.* Наука, М. (1976).
- [19] А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров. *Специальные функции математической физики.* Наука, М. (1978).
- [20] А.С. Давыдов. *Квантовая механика.* Наука, М. (1973).
- [21] R.H. Ritchie. *Phys. Rev.* **106**, 874 (1957).
- [22] F. Sols, P. Mirango, F. Flores. *Surf. Sci.* **161**, 33 (1985).
- [23] R. Garcia-Molina, A. Gras-Marti, A. Howie, R. Ritchie. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18**, 5335 (1985).
- [24] D.L. Mills. *Phys. Rev.* **B15**, 763 (1977).
- [25] R. Nunez, P.M. Echenique, R.H. Ritchie. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13**, 4229 (1980).
- [26] Г.В. Дедков. УФН, в печати.
- [27] B. Gotsmann, C. Seidel, B. Anczykowski, H. Fuchs. *Phys. Rev.* **B60**, 11 051 (1999).
- [28] I. Dorofeyev, H. Fuchs, G. Wenning, B. Gotsmann. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 12, 2402 (1999).