

РАСЧЁТ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК АЛЮМИНИЯ

© 2010 г. *А.В. Мажукин¹, О.Н. Королёва²*

¹Институт математического моделирования РАН,
125047 Москва, Миусская пл. 4А, e-mail: immras@orc.ru.

²Московский гуманитарный университет, 111395 Москва, ул. Юности 5/1

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 09-01-12110-офи-м, № 09-07-00225)

Рассмотрены оптические свойства электронного ферми-газа алюминия при произвольной температуре ($T \geq \varepsilon_F$) и частоте. Из решения квантового кинетического уравнения получены выражения для температурной и частотной зависимостей диэлектрической проницаемости. С помощью формул Френеля определяются частотные и температурные зависимости отражательной способности облучаемой поверхности и объемного коэффициента поглощения.

CALCULATION OF OPTICAL PROPERTIES OF ALUMINUM

A.V. Mazhukin¹, O.N. Koroleva²

¹Institute of Mathematical Modeling, Russian Academy of Sciences, Miusskaya sq. 4A, 125047, Moscow, Russia, e-mail: immras@orc.ru

²Moscow University of Humanities, ul. Yunosti 5/1, 111395 Moscow, Russia

In the present work optical properties of electronic fermi-gas of aluminum are considered at any temperature ($T \geq \varepsilon_F$). From the decision of the quantum kinetic equation expressions for temperature and frequency dependences of inductivity are received. By means of Fennel's formula frequency and temperature dependences of reflectivity of an irradiated surface and volume factor of absorption are defined.

I. Введение

При воздействии концентрированных потоков излучения (КПИ) на сильно поглощающие конденсированные среды часть потока энергии отражается от поверхности, а остальная часть поглощается в тонком приповерхностном слое. В зависимости от режима воздействия (длительность воздействия, длина волны излучения), оптических и теплофизических свойств обрабатываемых материалов выделение энергии носит поверхностный или объёмный характер. Выделившаяся энергия расходуется в дальнейшем на нагрев, плавление и испарение мишени.

Систематическое изучение всех явлений, развивающихся в зоне воздействия КПИ, необходимо для формулировки основных требований к источникам КПИ и определения оптимальных режимов воздействия. Так при лазерной обработке непрозрачных материалов необходимо знать такие оптические характеристики как отражательная способность поверхности R [%] и связанную с ней поглощательную способность $A=1-R$, а если выде-

ление энергии происходит объёмно, то и объёмный коэффициент поглощения α [см⁻¹]. Для широкого класса материалов, в том числе и для металлов, имеется довольно обширная информация по частотной зависимости оптических характеристик [1-3], измеряемых при фиксированной температуре, как правило, комнатной. Температурные зависимости для большинства материалов, даже в области невысоких температур, определены недостаточно точно. Так для большинства металлов при температурах ниже температуры плавления известно, что температурная зависимость поглотительной способности носит линейный характер $A(T)=a+b\cdot T$, где a, b – некоторые коэффициенты. Для температур, близких к точке плавления вещества или превосходящих её, полагают, что отражательная/поглотительная способность не зависит от температуры, и в оценках используют её средние или среднеинтегральные значения по интересующему интервалу температур [4].

Подобный подход мало пригоден для математического моделирования воздействия на металлы ультракоротких и сверхмощных лазерных импульсов. В результате таких воздействий энергия излучения передаётся непосредственно электронам и в твёрдом теле образуется сильно неравновесная область с горячими электронами и холодной решеткой. При этом за малые времена ($t \sim 10^{-12} \div 10^{-15}$ с) возможен разогрев электронной подсистемы до температур T_e , сравнимых с энергией Ферми E_F или превосходящих её. В случае $T_e < E_F$ в горячей области электроны имеют распределение Ферми со своей температурой. При $T_e \cong E_F$ вырождение снимается, и для $T_e > E_F$ электроны приобретают максвелловское распределение. Переход через температуру $T_e \sim E_F$ связан с изменением механизмов электрон-электронных и электрон-фононных взаимодействий, что влечёт за собой качественные изменения оптических и теплофизических характеристик твердого тела [5].

В данной работе предпринята попытка расчета температурной и частотной зависимостей оптических характеристик металлов в широком диапазоне частот ($\hbar\omega = 0.1 \div 10 eV$) и температур ($T_e = 0.024 \div 50 eV$). Для достижения поставленной цели используется продольная диэлектрическая проницаемость $\epsilon^\ell = \epsilon^\ell(\omega, T)$, определяемая из решения квантового кинетического уравнения.

Основным ограничением предлагаемого подхода является описание процессов в рамках модели свободного газа. Электронное возбуждение ионов и увеличение числа свободных электронов, характерных для температур $T_e > E_F$, а также фотопроцессы, характерные для высоких интенсивностей падающего излучения, в данном рассмотрении не учитываются.

I. Теоретический анализ

1. Отражательная способность и объёмный коэффициент поглощения

Все линейные (макроскопические) оптические характеристики плазмы, в том числе вещественные коэффициенты поглощения α , отражения R и комплексный показатель преломления $N = n + ik$, можно выразить через её диэлектрическую проницаемость [6]. По определению комплексный показатель преломления N равен величине

$$N = n + ik = \sqrt{\epsilon^\ell}, \quad (1)$$

где n и κ – оптические постоянные, представляющие собой действительную и мнимую части показателя преломления, ε^ℓ – продольная диэлектрическая проницаемость. С учётом того, что диэлектрическая проницаемость также является комплексной величиной $\varepsilon^\ell = \varepsilon_1^\ell + i\varepsilon_2^\ell$, то, приравняв их действительные и мнимые части, получают систему уравнений

$$\varepsilon_1^\ell = n^2 - \kappa^2, \quad \varepsilon_2^\ell = 2n\kappa. \quad (2)$$

Из решения системы (2) следуют выражения для n и κ

$$n = 2^{-1/2} \{ \varepsilon_1^\ell + [(\varepsilon_1^\ell)^2 + (\varepsilon_2^\ell)^2]^{1/2} \}^{1/2}, \quad (3)$$

$$\kappa = 2^{-1/2} \{ -\varepsilon_1^\ell + [(\varepsilon_1^\ell)^2 + (\varepsilon_2^\ell)^2]^{1/2} \}^{1/2}. \quad (4)$$

Согласно классическим формулам Френеля [7], отражательная R и поглощательная A способности облучаемой поверхности бесконечно толстого плазменного слоя при нормальном падении выражаются как

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2}, \quad A = 1 - R = \frac{4n}{(n+1) + \kappa^2}. \quad (5)$$

Коэффициент объёмного поглощения α при этом равняется [6]

$$\alpha = \frac{2 \cdot \kappa \cdot \omega}{c} = \frac{4 \cdot \pi \cdot \kappa}{\lambda}, \quad (6)$$

где ω – частота излучения, λ – длина волны, c – скорость света.

Обычно при невысоких температурах значения R , A , u , α определяют по данным измерений, из которых затем находят оптические постоянные n и κ [6-8].

Для электронной плазмы металлов n , κ , ε^ℓ в общем случае являются функциями частоты излучения ω и температуры T

$$n = n(\omega, T), \quad \kappa = \kappa(\omega, T), \quad \varepsilon^\ell = \varepsilon^\ell(\omega, T).$$

Таким образом, все макроскопические оптические свойства металлов и их частотные и температурные зависимости могут быть выражены через одну величину – продольную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon^\ell = \varepsilon^\ell(\omega, T)$.

2. Диэлектрическая проницаемость вырожденной электронной плазмы металла $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$

Согласно теории электромагнитного поля, диэлектрическая проницаемость свободного электронного газа $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ зависит от частоты ω (так называемая временная или частотная дисперсия) и волнового вектора \mathbf{k} (пространственная дисперсия). При наличии пространственной дисперсии, т.е. зависимости от вектора \mathbf{k} , диэлектрическая про-

ницаемость является тензорной величиной $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ даже в изотропной среде. Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ характеризуется двумя скалярными функциями – ϵ^ℓ и ϵ^t , получившими название продольной и поперечной проницаемостей соответственно и зависящими от независимых переменных – частоты ω и абсолютной величины волнового вектора k , $\epsilon^\ell = \epsilon^\ell(\omega, k)$, $\epsilon^t = \epsilon^t(\omega, k)$. При $\mathbf{k} \rightarrow 0$ выделенное направление исчезает и тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ сводится к виду $\epsilon(\omega)\delta_{ij}$, где $\epsilon(\omega)$ – обычная скалярная проницаемость, учитывающая лишь частотную дисперсию. Соответственно предельные значения функций ϵ^ℓ и ϵ^t одинаковы и равны $\epsilon^\ell = \epsilon^\ell(\omega, 0) = \epsilon^t = \epsilon^t(\omega, 0) = \epsilon(\omega)$.

Тензор $\epsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ в общем случае является комплексной функцией действительных переменных ω и \mathbf{k} . Скалярные функции ϵ^ℓ и ϵ^t также являются комплексными функциями частоты ω и абсолютной величины волнового вектора k

$$\epsilon^\ell(\omega, k) = \epsilon_1^\ell(\omega, k) + i\epsilon_2^\ell(\omega, k), \quad \epsilon^t(\omega, k) = \epsilon_1^t(\omega, k) + i\epsilon_2^t(\omega, k). \quad (7)$$

Наличие временной и пространственной дисперсии у продольной диэлектрической проницаемости $\epsilon^\ell(\omega, k)$ позволяет определить её частотную и температурную зависимости, а соответственно и аналогичные зависимости показателей преломления и поглощения.

При определении продольной диэлектрической проницаемости в произвольном температурном диапазоне предполагалось, что переход от случая сильного вырождения $\xi = T_e / E_F \ll 1$ к бoльцмановскому $\xi = T_e / E_F \gg 1$ происходит плавно. Для осуществления плавного перехода использовалась температурная зависимость химического потенциала [6]

$$\mu(T_e) \cong E_F \left(1 - \frac{\pi^2}{3!} \xi^2 + \frac{\pi^4}{3!4!} \xi^4 \right) = E_F D(\xi), \quad (8)$$

$$D(\xi) = \left(1 - \frac{\pi^2}{3!} \xi^2 + \frac{\pi^4}{3!4!} \xi^4 \right).$$

При низких температурах, когда величина $\mu(T_e)$ близка к значению E_F (точное равенство $\mu(T_e) = E_F$ достигается при абсолютном нуле), коллективизированные электроны металла подчиняются статистике Ферми-Дирака $f(E) = (\exp(x - \eta) + 1)^{-1}$, где $x = E/T_e$, $\eta = \mu(T_e)/T_e$, E – энергия электрона. Область функции распределения $f(E)$, соответствующая большим значениям энергии E , когда $x - \eta \gg 1$ практически близка к функции распределения Больцмана $f(E) = \exp(\eta - x)$.

Значение полной продольной диэлектрической проницаемости предлагается определять в виде суммы двух составляющих, обеспечивающих плавный переход от вырожденного электронного газа к максвелловской плазме

$$\epsilon^\ell = \epsilon^\ell(\omega, T) = D(\xi)\epsilon_F^\ell(\omega, T) + (1 - D(\xi))\epsilon_M^\ell(\omega, T). \quad (9)$$

3. Квантовое кинетическое уравнение

В общем случае произвольных значений вектора \mathbf{k} , когда существенную роль играет пространственная дисперсия, вычисление диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ требует применения кинетического уравнения [9], которое для бесстолкновительной плазмы имеет вид

$$\frac{\partial(\delta f)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial(\delta f)}{\partial \mathbf{r}} = e \mathbf{E} \frac{\partial(\delta f_0)}{\partial \bar{p}}, \quad (10)$$

где $f(\mathbf{p}) = f_0 + \delta f(p)$ – функция распределения электронов в импульсном пространстве, f_0 – невозмущенная полем стационарная изотропная и пространственно-однородная функция распределения, δf – изменение функции распределения под влиянием поля.

Продольная часть диэлектрической проницаемости $\epsilon^l(\omega, k)$ бесстолкновительной плазмы определяется из решения кинетического уравнения (10) и имеет вид [9]

$$\epsilon^l(\omega, k) = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{k} \frac{\partial f(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{d^3 p}{\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega - i0}. \quad (11)$$

Полученное выражение имеет особую точку (полюс) в нижней полуплоскости комплексной переменной. Особенность $\frac{1}{\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega}$ обычно [9], [10] рассматривают как $\frac{1}{\mathbf{k}\mathbf{v} - (\omega + i0)}$, т.е. величину ω представляют в виде величины $\omega + i0$, обладающей бесконечно малой положительной мнимой частью. Изменив обозначение переменной интегрирования, интеграл (11) можно представить в виде

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z)}{z - i\delta} dz, \quad \delta > 0.$$

В этом интеграле путь интегрирования в плоскости комплексной переменной z проходит под точкой $z = i\delta$, что при $\delta \rightarrow 0$ эквивалентно интегрированию вдоль вещественной оси с обходом полюса $z = 0$ по бесконечно малой полуокружности снизу. Вклад в интеграл от этого обхода определяется полувычетом подынтегрального выражения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z)}{z - i\delta} dz = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z)}{z} dz + i\pi f(0). \quad (12)$$

Интеграл в правой части уравнении (12) представляет собой предельное значение интеграла типа Коши.

Для описания электромагнитных свойств квантовой плазмы, к которой относится электронная плазма металлов, используется квантовый аналог классического кинетического уравнения [10]. Уравнение для квантовой функции распределения $f(\mathbf{p})$, зависящей от кинематического импульса \mathbf{p} , при малом отклонении от равновесного однородного состояния $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = f_0(\mathbf{p}) + \delta f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ [10] имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\delta f)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial(\delta f)}{\partial \mathbf{r}} + e \mathbf{E} \frac{\partial(\delta f_0)}{\partial \mathbf{p}} = \frac{e}{(2\pi)^3} \frac{i}{\hbar} \int e^{i\boldsymbol{\tau}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})} \times f_0(\mathbf{p}') \left\{ \left[\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}} \hbar \boldsymbol{\tau} - \varphi \left(\mathbf{r} + \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}}{2} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \varphi \left(\mathbf{r} - \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}}{2} \right) \right] - \frac{\mathbf{v}'}{c} \left[\left(\hbar \boldsymbol{\tau} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{r}} \right) - \mathbf{A} \left(\mathbf{r} + \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}}{2} \right) + \mathbf{A} \left(\mathbf{r} - \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}}{2} \right) \right] \right\} d\boldsymbol{\tau} d\mathbf{p}', \end{aligned} \quad (13)$$

где f_0 – невозмущённая полем стационарная изотропная и пространственно-однородная функция распределения электронов по импульсам, а δf – её изменение под влиянием поля, $\mathbf{E}, \varphi, \mathbf{A}$ – вектор напряженности электрического поля, скалярный и векторный потенциалы, $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{p}^{-1}$.

В классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ уравнение (13) переходит в кинетическое уравнение (10).

Для вырожденного электронного газа функция $f(\mathbf{p})$ представляет собой функцию распределения Ферми, равную

$$f_F(\mathbf{p}) = \frac{2n(\mathbf{p})}{(2\pi\hbar)^3},$$

где $\frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$ – число состояний, приходящихся на элемент импульсного пространства d^3p

с двумя значениями проекции спина, $n(\mathbf{p})$ – число заполненных квантовых состояний электронов с определенными значениями импульса и проекций спина. В случае полного вырождения ($T=0$) $n(\mathbf{p})=1$, а функция распределения принимает вид

$$f_F(\mathbf{p}) = \begin{cases} \frac{2}{(2\pi\hbar)^3}, & p < p_F = (3\pi^2)^{1/3} \hbar N_e^{1/3}, \\ 0, & p > p_F. \end{cases} \quad (14)$$

Формула для продольной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^\ell(\omega, \mathbf{k})$ полностью вырожденного электронного газа с функцией распределения (14) получена в [11] из решения квантового кинетического уравнения (13):

$$\varepsilon^\ell(\omega, \mathbf{k}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \int \frac{\left[n\left(\mathbf{p} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2}\right) - n\left(\mathbf{p} - \frac{\hbar \mathbf{k}}{2}\right) \right]}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - (\omega + i0)} \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (15)$$

Более общее выражение для диэлектрической проницаемости вырожденной плазмы получают при $T \neq 0$. Элементарное, хотя и громоздкое интегрирование уравнения (15) приводит к результату [12]

$$\varepsilon^\ell(\omega, k) = 1 - \frac{4\pi m e^2 N_e}{\hbar k^3 p_{Te} F_{1/2}(\xi)} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left[\frac{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{p}{p_{Te}} - \frac{\hbar k}{2p_{Te}} \right)^2 \right)}{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{p}{p_{Te}} + \frac{\hbar k}{2p_{Te}} \right)^2 \right)} \right] \frac{dp}{kp/m - (\omega + i0)}, \quad (16)$$

где v_{Te} , p_{Te} – средние значения тепловых скорости и импульса электронов, k – среднее значение абсолютной величины волнового вектора \mathbf{k} .

Из-за наличия особенности $\frac{1}{\mathbf{k}\mathbf{v} - (\omega + i0)}$ интеграл в уравнении (16) представляет собой предельное значение интеграла типа Коши. Интегрирование производится в плоскости комплексной переменной $(\omega + i0)$ вдоль вещественной оси, с обходом точки $p = m\omega/k$ снизу.

4. Мнимая часть продольной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2^\ell(\omega, \mathbf{k})$

Мнимая часть $\varepsilon_2^\ell(\omega, k)$ продольной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^\ell(\omega, \mathbf{k})$ определяется в (16) полувыветом в точке $p = m\omega/k$. Отделив её с помощью формулы (12), получим

$$\varepsilon_2^\ell(\omega, k) = \frac{4\pi^2 e^2 m N_e}{\hbar k^3 p_T F_{1/2}(\xi)} \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{p}{p_{Te}} - \frac{\hbar k}{2p_{Te}} \right)^2 \right)}{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{p}{p_{Te}} + \frac{\hbar k}{2p_{Te}} \right)^2 \right)} \right\}. \quad (17)$$

Мнимая часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{2,F}^\ell(\omega, k)$ в случае вырожденного электронного ферми-газа, с учётом выражений для основных величин: $p = m\omega/k$, $k_F = p_F/\hbar$, $p_F = m v_F = (2m\varepsilon_F)^{1/2}$, $v_F = (2\varepsilon_F/m)^{1/2}$ имеет вид

$$\varepsilon_{2,F}^\ell(\omega, k) = 3\pi \frac{T_e (\hbar\omega_{Le})^2}{(\hbar\omega)^3} \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{\omega}{k_F v_{Te}} - \frac{\hbar k_F}{2m v_{Te}} \right)^2 \right)}{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{\omega}{k_F v_{Te}} + \frac{\hbar k_F}{2m v_{Te}} \right)^2 \right)} \right\}, \quad (18)$$

где $\omega_{Le} = \frac{v_{Te}}{d_e} = \left(\frac{4\pi e^2 N_e}{m} \right)^{1/2}$, $d_e = \left(\frac{T_e}{4\pi e^2 N_e} \right)^{1/2}$ – плазменная, или ленгмюровская час-

тота и дебаевский радиус для электронов соответственно, $F_{k+1/2} = \int_0^\infty \frac{x^{k+1/2}}{\exp(x - \eta) + 1} dx$ –

интеграл Ферми. Интеграл $F_{1/2}$ и величина $\eta(\xi)$ аппроксимировались выражениями [5]:

$$F_{1/2} \cong \frac{2}{3} \xi^{-3/2}, \quad \eta(\xi) = \xi^{-1} + \ln \frac{4/3 \pi^{1/2}}{\xi^{3/2} + 4/3 \pi^{1/2}}.$$

Для максвелловской плазмы с учётом $k_{Te} = p_{Te} / \hbar = \hbar^{-1} (2mT_e)^{1/2}$, $p_{Te} = m v_{Te} = (2mT_e)^{1/2}$, $v_{Te} = (2T_e / m)^{1/2}$ мнимая часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{2,M}^{\ell}(\omega, k)$ имеет вид

$$\varepsilon_{2,M}^{\ell}(\omega, k) = 2\pi \frac{T_e (\hbar \omega_{Le})^2}{(\hbar \omega)^3} \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{\omega}{k_{Te} v_{Te}} - \frac{\hbar k_{Te}}{2m v_{Te}} \right)^2 \right)}{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \left(\frac{\omega}{k_{Te} v_{Te}} + \frac{\hbar k_{Te}}{2m v_{Te}} \right)^2 \right)} \right\}. \quad (19)$$

Выражения (18), (19) в двух предельных случаях низких $T_e \rightarrow 0$ и высоких $T_e \gg \varepsilon_F$ температур переходят в два хорошо известных соотношения. При $T_e \rightarrow 0$ выражение (18) переходит в формулу, полученную в [13] для мнимой части диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2^{\ell}(\omega, k)$ вырожденного электронного ферми-газа:

$$\varepsilon_{2,F}^{\ell}(\omega, k) = \frac{3\pi}{2} \frac{\omega_{Le}^2 \omega}{(k v_F)^3} \quad \text{при } |\omega| < k v_F.$$

В другом предельном случае высоких температур $\xi \gg 1$, достаточных для снятия вырождения и $\hbar \rightarrow 0$, соотношение (19) совпадает с известным выражением для $\varepsilon_{2,M}^{\ell}(\omega, k)$ классической электронной плазмы [9]:

$$\varepsilon_2^{\ell}(\omega, k) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \frac{\omega \omega_{Le}^2}{(k v_{Te})^3} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{k v_{Te}} \right)^2 \right).$$

Окончательно мнимая часть диэлектрической проницаемости вырожденного электронного газа $\varepsilon_{2,F}^{\ell}(\omega, k)$ и максвелловской плазмы $\varepsilon_{2,M}^{\ell}(\omega, k)$ может быть представлена в виде частотной и температурной зависимости

$$\varepsilon_{2,F}^{\ell}(\omega, T_e) = 3\pi T_e \frac{(\hbar \omega_{Le})^2}{(\hbar \omega)^3} \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \frac{E_F}{4T_e} \left(\frac{\hbar \omega}{E_F} - 1 \right)^2 \right)}{1 + \exp \left(\eta(\xi) - \frac{E_F}{4T_e} \left(\frac{\hbar \omega}{E_F} + 1 \right)^2 \right)} \right\},$$

$$\varepsilon_{2,M}^{\ell}(\omega, T_e) = 2\pi T_e \frac{(\hbar\omega_{Le})^2}{(\hbar\omega)^3} \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \exp\left(\eta(\xi) - \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar\omega}{T_e} - 1\right)^2\right)}{1 + \exp\left(\eta(\xi) - \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar\omega}{T_e} + 1\right)^2\right)} \right\}.$$

Окончательно выражение для полной мнимой части диэлектрической проницаемости ε_2^{ℓ} , согласно (9), представляется в виде соотношения, явно зависящего от частоты излучения ω и температуры электронов T_e :

$$\varepsilon_2^{\ell}(\omega, T_e) = D(\xi)\varepsilon_{2,F}^{\ell}(\omega, T_e) + (1 - D(\xi))\varepsilon_{2,M}^{\ell}(\omega, T_e) = \left(C \frac{T_e (\hbar\omega_{Le})^2}{(\hbar\omega)^3} \right) \times$$

$$\times \left\{ D(\xi) \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\eta(\xi) - \frac{1}{4\xi}\left(\frac{\hbar\omega}{E_F} - 1\right)^2\right)}{1 + \exp\left(\eta(\xi) - \frac{1}{4\xi}\left(\frac{\hbar\omega}{E_F} + 1\right)^2\right)} \right] + (1 - D(\xi)) \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\eta(\xi) - \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar\omega}{T_e} - 1\right)^2\right)}{1 + \exp\left(\eta(\xi) - \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar\omega}{T_e} + 1\right)^2\right)} \right] \right\}, \quad (20)$$

где $D(\xi) = \left(1 - \frac{\pi^2}{3!}\xi^2 + \frac{\pi^4}{3!4!}\xi^4 \right)$, $C = C(\hbar\omega)$ – медленно меняющаяся с частотой величина, $C = 1 + 2\pi$ в диапазоне частот $\hbar\omega = 0.1 \div 100$ эВ.

5. Действительная часть продольной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1^{\ell}(\omega, \mathbf{k})$

Определение действительной части диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1^{\ell} = \varepsilon_1^{\ell}(\omega, \mathbf{k})$ с помощью уравнения (16) в аналитическом виде возможно лишь для двух предельных случаев [12]: для высоких $\omega/kv_{Te} \gg 1$ и низких частот $\omega/kv_{Te} \ll 1$.

5.1. Высокочастотное приближение $\varepsilon_1^{\ell,h}(\omega, k)$. При высоких частотах $\omega/kv_{Te} \gg 1$ подынтегральное выражение (16) можно разложить по степеням k/ω и после интегрирования получить приближение для действительной части диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1^{\ell,h}(\omega, k)$:

$$\varepsilon_1^{\ell,h}(\omega, k) = 1 - \frac{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot N_e}{k p_{Te}} \frac{1}{\omega \cdot F_{1/2}} \sum_{j=0}^{\infty} \left[\left(\frac{kv_{Te}}{\omega} \right)^{2j+1} F_{(2j+1)/2} \right]. \quad (21)$$

Сохраняя в (21) первые три члена разложения, получим

$$\varepsilon_1^{\ell,h}(\omega, T_e) = 1 - \frac{\omega_{Le}^2}{k v_{Te}} \frac{1}{\omega} \left(\left(\frac{k v_{Te}}{\omega} \right) + \left(\frac{k v_{Te}}{\omega} \right)^3 \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}} + \left(\frac{k v_{Te}}{\omega} \right)^5 \frac{F_{5/2}}{F_{1/2}} + \dots \right).$$

Для ферми-компоненты

$$\varepsilon_{1,F}^{\ell,h}(\omega, T_e) = 1 - \left(\frac{\omega_{Le}}{\omega} \right)^2 \left(1 + \left(\frac{k_F v_{Te}}{\omega} \right)^2 \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}} + \left(\frac{k_F v_{Te}}{\omega} \right)^4 \frac{F_{5/2}}{F_{1/2}} + \dots \right).$$

С учетом значений интегралов Ферми $F_{k+1/2}$ и средней энергии электронов $\langle E \rangle = T_e \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}}$ приближение для $\varepsilon_{1,F}^{\ell,h}$ запишется в виде

$$\varepsilon_{1,F}^{\ell,h} \approx 1 - \left(\frac{\hbar \omega_{Le}}{\hbar \omega} \right)^2 \left[1 + \frac{4E_F \langle E \rangle}{(\hbar \omega)^2} + \frac{(4E_F)^2 \langle E \rangle^2}{(\hbar \omega)^4} \right]. \quad (22)$$

Для максвелловской плазмы $\xi > 1$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,M}^{\ell,h}(\omega, T_e) &= 1 - \left(\frac{\hbar \omega_{Le}}{\hbar \omega} \right)^2 \left(1 + \left(\frac{k_T v_{Te}}{\omega} \right)^2 + \left(\frac{k_T v_{Te}}{\omega} \right)^4 \right) = \\ &= 1 - \left(\frac{\hbar \omega_{Le}}{\hbar \omega} \right)^2 \left(1 + \left(\frac{2T_e^2}{\hbar \omega} \right)^2 + \left(\frac{2T_e^2}{\hbar \omega} \right)^4 \right). \end{aligned} \quad (23)$$

5.2. Низкочастотное приближение $\varepsilon_1^{\ell,s}$. Для низких частот $\omega/kv_T \ll 1$ в интеграле (16) необходимо выполнить замену переменных $y = x + \omega/kv_T$, разложить подынтегральное выражение в ряд по ω/kv_{Te} и после интегрирования по x получить

$$\varepsilon_1^{\ell,s} = 1 - \frac{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot N_e}{k^2 p_{Te}^2} \frac{m}{F_{1/2}} \left(F_{-1/2} + \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{2^{2j+1} \cdot j! \cdot 2+j}{(2j+1)! \cdot 1+j} \left(\frac{\omega}{k v_T} \right)^{2(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{f^{(j)}(x)}{\sqrt{x}} dx \right), \quad (24)$$

где $f^{(j)}(x)$ – j -я производная функции распределения Ферми. Удерживая в (24) первые два члена разложения $j=0,1$, запишем

$$\varepsilon_1^{\ell,s}(\omega, k) = 1 - \frac{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot N_e}{k^2 p_{Te}^2} \frac{m}{F_{1/2}} \left(F_{-1/2} + 4 \left(\frac{\omega}{k v_T} \right)^2 \int_0^{\infty} \frac{f^{(0)}(x)}{\sqrt{x}} dx - 2 \left(\frac{\omega}{k v_T} \right)^4 \int_0^{\infty} \frac{f^{(1)}(x)}{\sqrt{x}} dx \right).$$

При $\xi < 1$ для распределения Ферми получим

$$\varepsilon_{1,F}^{\ell,s}(\omega, k) \approx 1 - \frac{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot N_e}{k_F^2 p_{Te}^2} \frac{F_{-1/2}}{F_{1/2}} \left[1 + 4 \left(\frac{\omega}{k_F v_T} \right)^2 + 2 \left(\frac{\omega}{k_F v_T} \right)^4 \right].$$

С учётом $\int_0^{\infty} \frac{f^{(0)}(x)}{\sqrt{x}} dx = \int_0^{\infty} \frac{x^{-1/2} dx}{\exp(x-\eta)+1} = F_{-1/2}$ и $\frac{F_{-1/2}}{F_{1/2}} = \frac{2\xi}{(\xi^2 + (2/3)^2)^{1/2}}$ низкочастотное приближение для ферми-компоненты принимает вид

$$\varepsilon_{1,F}^{\ell,s}(\omega, k) \approx 1 - \frac{(\hbar\omega_{Le})^2}{E_F^2} \frac{2}{(\xi^2 + (4/9))^{1/2}} \left(1 + \frac{(\hbar\omega)^2}{E_F T_e} + \frac{1}{8} \frac{(\hbar\omega)^4}{(E_F T_e)^2} \right). \quad (25)$$

Для максвелловской компоненты $\xi > 1$ соответствующая компонента имеет вид

$$\varepsilon_{1,M}^{\ell,s}(\omega, k) \approx 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega_{Le}}{T_e} \right)^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar\omega}{T_e} \right)^2 + \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar\omega}{T_e} \right)^4 \right]. \quad (26)$$

С учётом выражений (22), (25) действительную часть диэлектрической проницаемости для вырожденного электронного газа $\varepsilon_{1,F}^{\ell}$ можно представить в виде сшивки высокочастотного $\varepsilon_{1,F}^{\ell,h}(\omega, T_e)$ и низкочастотного $\varepsilon_{1,F}^{\ell,s}(\omega, T_e)$ приближений.

Высокочастотное приближение $\varepsilon_{1,F}^{\ell,h}(\omega, T_e)$, удовлетворяющее условию $\omega/kv_{Te} \gg 1$, используется в низкотемпературной области, низкочастотное $\varepsilon_{1,F}^{\ell,s}(\omega, T_e)$, удовлетворяющее условию $\omega/kv_{Te} \ll 1$, применяется для высоких температур. Сшивка осуществляется в точке пересечения кривых $\varepsilon_{1,F}^{\ell,h}(\omega, T_e)$ и $\varepsilon_{1,F}^{\ell,s}(\omega, T_e)$. В этой точке при движении по температурной шкале происходит переход с кривой $\varepsilon_{1,F}^{\ell,h}(\omega, T_e)$ на кривую $\varepsilon_{1,F}^{\ell,s}(\omega, T_e)$.

Аналогичным образом производится сшивка высокочастотного $\varepsilon_{1,M}^{\ell,h}(\omega, T_e)$ и низкочастотного $\varepsilon_{1,M}^{\ell,s}(\omega, T_e)$ приближений для максвелловской плазмы и определяется её действительная часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{1,M}^{\ell}(\omega, T_e)$.

Используя полученные выражения для $\varepsilon_{1,F}^{\ell}$ и $\varepsilon_{1,M}^{\ell}(\omega, T_e)$, действительную часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1^{\ell,h}(\omega, k)$ в окончательном виде можно представить как

$$\varepsilon_1^{\ell}(\omega, T) = D(\xi) \varepsilon_{1,F}^{\ell}(\omega, T) + (1 - D(\xi)) \varepsilon_{1,M}^{\ell}(\omega, T). \quad (27)$$

II. Расчёт отражательной способности $R(\omega, T_e)$ и объёмного коэффициента поглощения $\alpha(\omega, T_e)$ алюминия

Результаты проведенного выше теоретического анализа можно использовать для определения частотных и температурных зависимостей объёмного коэффициента поглощения $\alpha(\omega, T_e)$ и отражательной способности поверхности $R(\omega, T_e)$ металлических мишеней. В данной работе в качестве металлической мишени рассматривался алюминий, который является трёхвалентным металлом и характеризуется следующими параметрами [14]:

$$N_e = z \frac{\rho}{AM} = 1.806 \times 10^{23} \text{ см}^{-3}, \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 N_e)^{2/3} = 11.637 \text{ эВ},$$

$$\hbar \omega_{Le} = (4\pi e^2 N_e)^{1/2} = 15.780 \text{ эВ},$$

где z – валентность, A – атомный вес, M – атомная единица массы.

Как уже отмечалось, в литературе имеется довольно обширная информация по частотной зависимости оптических характеристик металлов [2], [3], [15], измеряемых, как правило, при комнатной температуре. Поэтому вначале с целью сравнения расчетных данных со справочными с помощью соотношений (20) и (27) рассчитывались частотные зависимости мнимой $\epsilon_2^{\ell}(\omega)$ и действительной $\epsilon_1^{\ell}(\omega)$ частей диэлектрической проницаемости при фиксированной температуре ($T_e=293$ К), рис.1. Результаты расчетов, приведенные на рис.1, свидетельствуют о том, что характерные особенности частотных зависимостей $\epsilon_1^{\ell}(\omega)$ и $\epsilon_2^{\ell}(\omega)$ соответствуют общепринятым представлениям о поведении диэлектрической проницаемости электронной плазмы. Так действительная и мнимая части с ростом частоты проявляют асимптотическое стремление к единице и нулю соответственно, рис.1. Кроме того, при переходе через точку $\hbar\omega = \hbar\omega_{Le}$ действительная часть $\epsilon_1^{\ell}(\omega)$ меняет свой знак, что отмечено на рис.1 пересечением двух перпендикулярных пунктирных прямых.

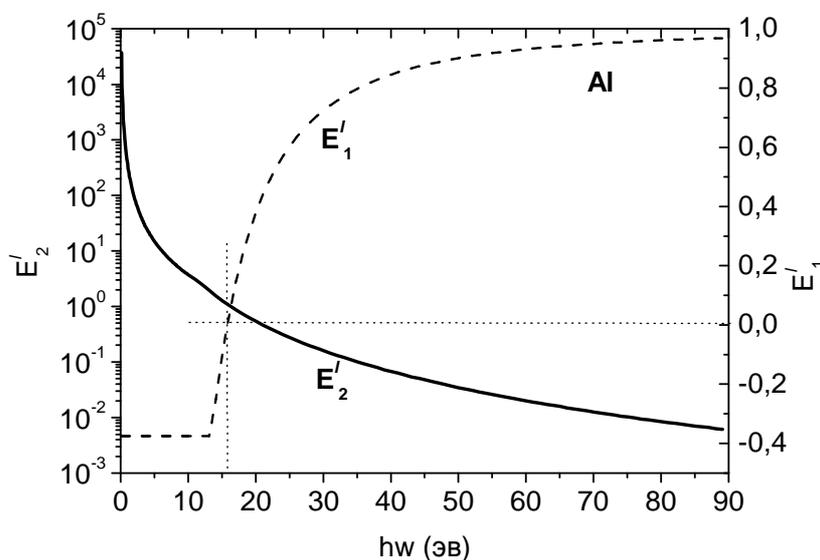


Рис.1. Частотная зависимость действительной $E_1^{\ell}(\omega)$ и мнимой частей $E_2^{\ell}(\omega)$ продольной диэлектрической проницаемости при температуре $T=290$ К.

Полученные зависимости $\epsilon_1^{\ell}(\omega)$ и $\epsilon_2^{\ell}(\omega)$ использовались для определения дисперсии действительной n и мнимой частей k показателя преломления N , с помощью которых по соотношениям (5) и (6) проводился расчет частотных зависимостей объёмного коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ и отражательной способности поверхности $R(\omega)$, рис.2. Сравнение полученных зависимостей $\alpha(\omega)$ и $R(\omega)$ (сплошные линии) со справочными

данными [3] (пунктирные линии), рис.2, показало достаточно неплохое количественное совпадение в лазерном диапазоне частот $\hbar\omega \in [0.1 \div 10]$ эВ. В области высоких частот $\hbar\omega > 10$ эВ и интенсивностей излучения $G > 10^{13}$ Вт/см² существенным становится вклад туннельного и фотоэффектов, который не учтен в данном подходе. В этих областях коэффициент объёмного поглощения должен представляться в виде суммы коэффициентов

$$\alpha_{\Sigma} = \alpha + \alpha_{ph},$$

где α_{ph} – коэффициент фотопоглощения.

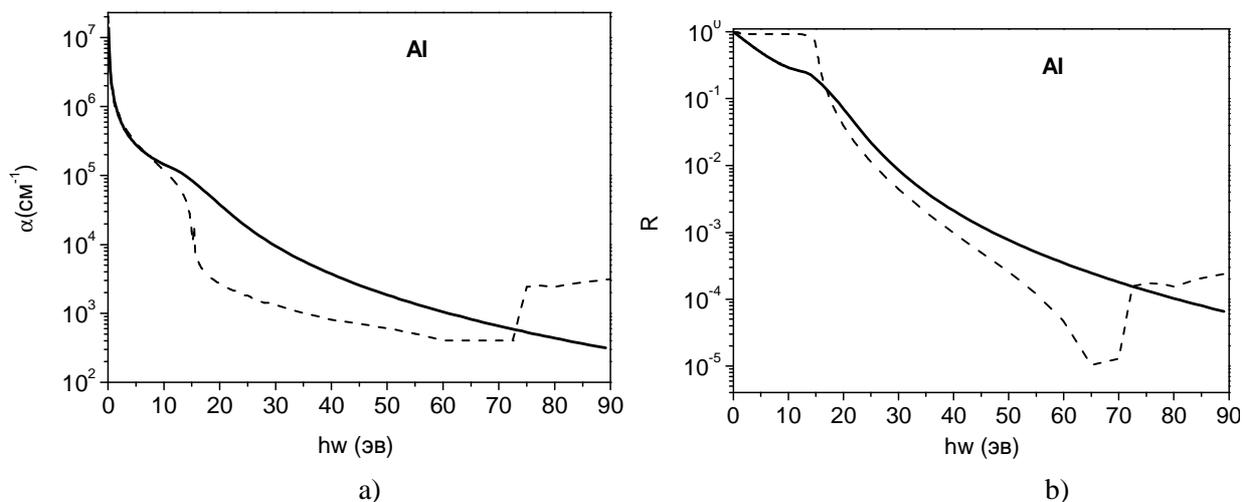


Рис.2а,б. Частотная зависимость а) коэффициента объёмного поглощения $\alpha(\omega)$ и б) коэффициента поверхностного отражения $R(\omega)$ при температуре $T=290$ К. Сплошные линии – расчетные кривые, пунктирные – справочные данные.

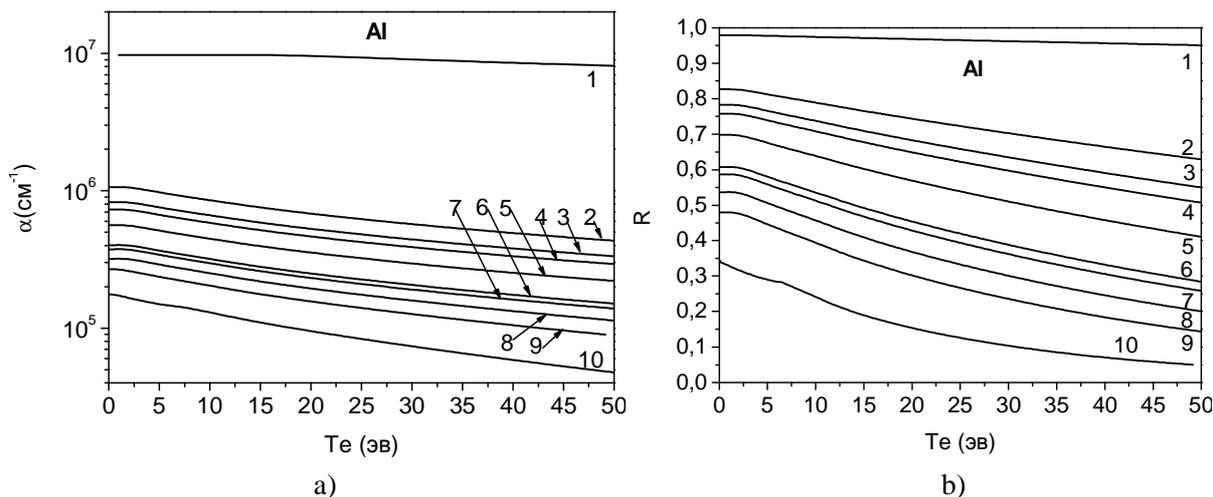


Рис.3а,б. Температурные зависимости а) коэффициента объёмного поглощения, б) отражательной способности поверхности при фиксированных частотах: 1. $\hbar\omega=0.117$ эВ ($\lambda=10.6$ мкм); 2. $\hbar\omega=1.17$ эВ ($\lambda=1.06$ мкм); 3. $\hbar\omega=1.55$ эВ ($\lambda=0.8$ мкм); 4. $\hbar\omega=1.79$ эВ ($\lambda=0.694$ мкм); 5. $\hbar\omega=2.43$ эВ ($\lambda=0.51$ мкм); 6. $\hbar\omega=3.68$ эВ ($\lambda=0.337$ мкм); 7. $\hbar\omega=4.025$ эВ ($\lambda=0.308$ мкм); 8. $\hbar\omega=4.999$ эВ ($\lambda=0.248$ мкм); 9. $\hbar\omega=6.42$ эВ ($\lambda=0.193$ мкм); 10. $\hbar\omega=12.4$ эВ ($\lambda=0.1$ мкм).

Температурные зависимости $\alpha(\omega, T_e)$ и $R(\omega, T_e)$ были рассчитаны для ряда фиксированных частот, соответствующих длинам волн излучения наиболее широко используемых лазеров. В лазерном диапазоне $\lambda \in (0.1 \div 10.6)$ мкм, начиная от инфракрасного и заканчивая ультрафиолетовым излучением, обе характеристики (рис.3) с ростом температуры электронного газа имеют тенденцию к уменьшению.

Заключение

Воздействие ультракоротких и сверхмощных лазерных импульсов сопровождается возникновением сильно неравновесных областей в твёрдом теле с горячими электронами и холодной решёткой. Электронная подсистема может при этом разогреваться до температур, сравнимых с энергией Ферми или превосходящих их. Постановка вычислительных экспериментов с целью исследования подобных режимов воздействия требует определения оптических, теплофизических и других характеристик облучаемых мишеней в широком температурном и частотном диапазонах. В данной работе на примере расчета коэффициентов объёмного поглощения и отражательной способности поверхности алюминия предложен подход к определению оптических характеристик металлов при произвольных температурах и частотах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дьюли У. Лазерная технология и анализ материалов. – М.: Мир, 1986.
2. Золотарёв В.Н., Морозов В.И., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. – Л.: Химия, Ленинградское отделение, 1984.
3. Handbook of Optical Constants of Solid II. Ed. E.D. Palik. Academic Press. – Boston, San Diego, New York: 1991.
4. Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Зувев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка металлов. – М.: Машиностроение, 1985.
5. Мартыненко Ю.В., Явлинский Ю.Н. Охлаждение электронного газа металла при высокой температуре // ДАН СССР, Сер. Физ., 1983, т.270, №1, с.88-91.
6. Займан Дж. Принципы теории твёрдого тела. – М.: Мир, 1966.
7. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1973.
8. Handbook of Optical Constants of Solids II. Ed. Edward D. Palik, Academic Press, INC. Publishers Boston, San Diego, New York, 1991, p.1086.
9. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. – М.: Наука, ГРФМЛ, 1979.
10. Силин В.П., Рухадзе А.А. Электромагнитные свойства плазмы и плазмopodobных сред. – М.: Госатомиздат, 1961.
11. Климонтович Ю.Л., Силин В.П. О спектрах систем взаимодействующих частиц // ЖЭТФ, 1952, т.23, с.151.
12. Мартыненко Ю.В., Явлинский Ю.Н. Электронный Ферми-газ при произвольной температуре. – М.: 1983, препринт ИАЭ – 3773/1.
13. Lindhard J. On the properties of gas of charged particles. Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Matematisk-fysiske Meddelelser, 1954, v.28, № 8, p.1-57.
14. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: ГРФМЛИ «Наука», 1978, 792 с.
15. Аллен Л.У. Астрофизические величины. – М.: Мир, 1977, с.445.