

УДК 535.32

О.В. ПУХЛЕНКО, А.В. ЛЕОНТЬЕВ

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТРИЦ, СОДЕРЖАЩИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ

The program is described and the some examples of calculation of the dielectric functions for heterogeneous structures are presented in the article. The heterogeneous structures consist of the suspended metallic nanoparticles in the dielectric matrix. The program «Nanoparticle» has a database with optical constants of the most widespread microelectronics materials.

В настоящее время огромный интерес исследователей во всем мире привлекают гетерогенные среды, состоящие из ансамбля металлических или полупроводниковых наночастиц, находящихся в оптически прозрачной диэлектрической матрице [1–4]. Методы получения таких структур, включая ионную имплантацию, химическое легирование и другие комплексные методики, интенсивно разрабатываются в ведущих научных центрах. Как показано ранее [2, 3], такие среды могут иметь аномально высокий коэффициент преломления, значительно превосходящий достижимые в настоящее время значения, что позволит создать микроминиатюрные лазеры, нелинейные преобразователи частоты излучения и ряд других устройств. Такие системы также весьма перспективны для разработки нового поколения устройств интегральной оптики и оптоэлектроники [5–7], поскольку для них характерен нелинейный отклик на воздействие фемтосекундного лазера.

Целью данной работы являлось создание программного обеспечения для моделирования оптических свойств гетерогенных сред, состоящих из диэлектрической матрицы и металлических или полупроводниковых наночастиц. Для решения поставленной задачи разработано программное обеспечение на основе подходов Максвелла – Гарнетта, Клаузиуса – Моссотти и теории Ми, а также составлена база данных оптических параметров широкого круга материалов микроэлектроники.

### Методика проведения расчетов

Для проведения расчетов оптических функций гетерогенных сред на языке Matlab написана программа, которая рассчитывает диэлектрическую функцию смеси, показатели преломления и поглощения по формулам Максвелла – Гарнетта и Клаузиуса – Моссотти, а также сечения экстинкции, отражения и поглощения по теории Ми [8]. В программе имеется база данных (БД), содержащая оптические функции  $n(\lambda)$  и  $k(\lambda)$  основных оптических и полупроводниковых материалов (оптическое стекло, синтетический сапфир, фоторезисты,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , GaAs и др.), используемых в микроэлектронике. В БД также имеется информация об оптических функциях ряда практически важных металлов (Au, Ag, Cu, Mo и др.) и сплавов. Интерфейс программы дает возможность выбора диэлектрической матрицы, сорта, радиуса, удельного объема и флуктуационного параметра наночастиц, концентрации собственных атомов матрицы. Для создания базы данных использовались диэлектрические функции из [9, 10]. Рассмотренный алгоритм допускает сферическую и эллиптическую форму наночастиц, последняя характерна для некоторых переходных металлов.

Диэлектрическая функция наночастиц серебра в оптическом стекле достаточно широко исследована в ряде работ [4, 5]. Поэтому в данной статье приводятся результаты моделирования оптических свойств гетерогенной среды на основе матриц сапфира и оптического стекла, содержащих атомы золота и меди.

**Расчет диэлектрических функций смеси по методам Клаузиуса – Моссотти и Максвелла – Гарнетта**

Соотношение Клаузиуса – Моссотти для наночастиц имеет вид [2]

$$\frac{\epsilon_{\text{mix}} - 1}{\epsilon_{\text{mix}} + 2} = \frac{4\pi}{3} \sum_j \alpha_j(\lambda) N_j,$$

где  $\alpha_j(\lambda)$  – поляризуемость частиц сорта  $j$ , составляющих смесь частиц и матрицы, а  $N_j$  – их концентрация.

Поскольку наночастицы имеют радиус, не превышающий несколько нанометров, то можно записать следующее выражение для поляризуемости наночастиц [2]:

$$\alpha_m = r_m^3 \frac{\epsilon_m(\lambda) - 1}{\epsilon_m(\lambda) + 2}, \tag{1}$$

где  $\epsilon_m(\lambda) = \epsilon_m'(\lambda) + i\epsilon_m''(\lambda)$  – диэлектрическая функция объемного материала, из которого изготовлены наночастицы. Тогда, введя обозначение

$$\eta = \frac{4\pi}{3} r_m^3 N_m,$$

где  $\eta$  – удельный объем наночастиц,  $N_m$  – концентрация наночастиц, а объем матрицы составляет  $(1 - \eta)$  от общего объема смеси, то, как следует из (1), диэлектрическая проницаемость предложенной гетерогенной среды определяется следующим соотношением:

$$\frac{\epsilon_{\text{mix}}(\lambda) - 1}{\epsilon_{\text{mix}}(\lambda) + 2} = \eta \frac{\epsilon_m(\lambda) - 1}{\epsilon_m(\lambda) + 2} + (1 - \eta) \frac{\epsilon_1(\lambda) - 1}{\epsilon_1(\lambda) + 2},$$

где  $\epsilon_1(\lambda)$  – диэлектрическая функция материала матрицы. Данное выражение представляет собой формулу Клаузиуса – Моссотти для матрицы, содержащей наночастицы одного типа.

Формула Клаузиуса – Моссотти не единственная для такого рода расчетов, особенно учитывая приближенное описание полей от частиц, окружающих сферу. Выражение Максвелла – Гарнетта является наиболее распространенной альтернативой указанной формуле для расчетов диэлектрической функции смеси. Для матрицы, содержащей один сорт наночастиц, выражение имеет вид [8]

$$\frac{\epsilon_{\text{mix}}(\lambda) - \epsilon_1(\lambda)}{\epsilon_{\text{mix}}(\lambda) + 2\epsilon_1(\lambda)} = \eta \frac{\epsilon_m(\lambda) - \epsilon_1(\lambda)}{\epsilon_m(\lambda) + 2\epsilon_1(\lambda)}.$$

Несмотря на некоторое количественное различие результатов, эти формулы предсказывают качественно одинаковые эффекты и могут быть использованы при прогнозировании.

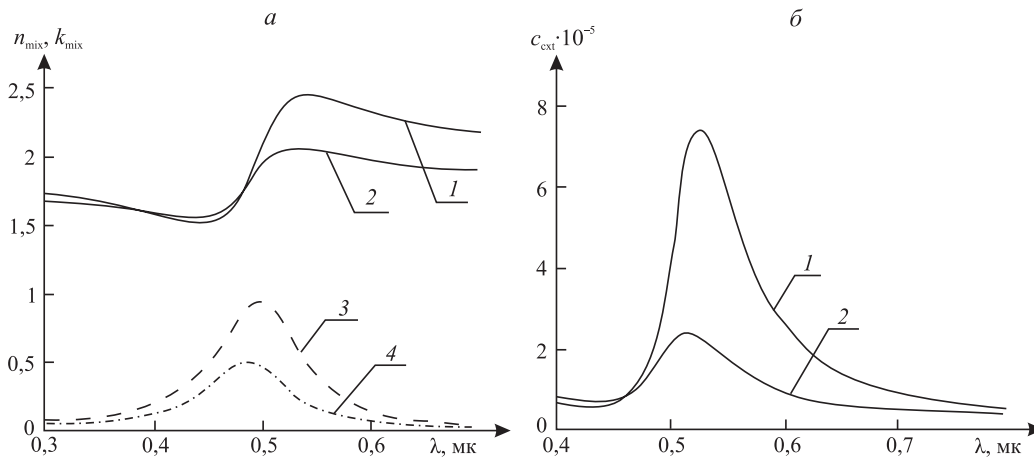


Рис. 1. Коэффициент преломления (а – 1, 2), поглощения (а – 3, 4) и экстинкции (б) матрицы из оптического стекла, содержащего атомы Au, рассчитанные по формуле Клаузиуса – Моссотти для различных удельных объемов: 1, 3 – 0,25, 2, 4 – 0,15

На рис. 1 и 2 представлены графики показателей преломления матрицы оптического стекла с наночастицами золота и сапфировой матрицы с атомами меди. Видно, что показатель преломления в матрице, содержащей медные частицы, выше на длине волны плазмонного резонанса, однако при

выборе материала надо учитывать, что коэффициент экстинкции  $c_{ext}$  медных частиц в сапфире ( $10^{-3} \div 10^{-2}$ ) на два порядка выше, чем тот же коэффициент для оптического стекла, содержащего золотые наночастицы ( $10^{-5} \div 10^{-4}$ ). Видно также, что положение плазмонного резонанса на частотной оси и его значение, а следовательно величина показателей преломления и поглощения, различаются в зависимости от сорта наночастиц.

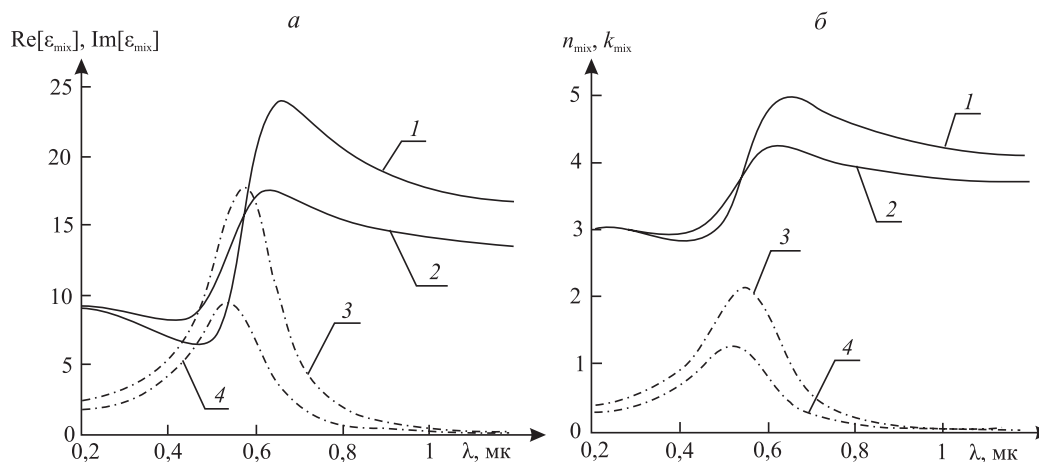


Рис. 2. Диэлектрические функции матрицы сапфира – *a* (1, 2 – действительная часть; 3, 4 – мнимая часть), содержащей атомы Cu, рассчитанные по формуле Клаузиуса – Моссотти для различных удельных объемов: 1, 3 –  $\rightarrow 0,35$ , 2, 4 –  $\rightarrow 0,25$ . Показатель преломления – *b* (1, 2) и абсорбции (3, 4) для различных удельных объемов  $\eta$ : 1, 3 –  $\rightarrow 0,35$ , 2, 4 –  $\rightarrow 0,25$

### Расчет сечений рассеяния, поглощения и экстинкции смеси по теории Ми

Теория Ми представляет собой формальное решение уравнений Максвелла с соответствующими граничными условиями для задачи рассеяния электромагнитной волны на шаре произвольного размера. Поскольку полная выкладка названной теории [11, 12] не входит в нашу задачу, то приведем лишь основные конечные формулы, использованные непосредственно в расчете.

Сечения рассеяния  $Q_s$ , поглощения  $Q_a$ , экстинкции  $Q_c$  плоской ЭМ-волны рассчитываются по выражениям

$$Q_s = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2), \quad Q_a = \frac{1}{x^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(-1)^n (a_n - b_n) \right|^2,$$

$$Q_e = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(a_n + b_n),$$

где коэффициенты  $a_n, b_n$  задаются следующими формулами:

$$a_n = \frac{\psi'_n(\tilde{m}x)\psi_n(x) - \tilde{m}\psi_n(\tilde{m}x)\psi'_n(x)}{\psi'_n(\tilde{m}x)\zeta_n(x) - \tilde{m}\psi_n(\tilde{m}x)\zeta'_n(x)}, \quad b_n = \frac{\tilde{m}\psi'_n(\tilde{m}x)\psi_n(x) - \psi_n(\tilde{m}x)\psi'_n(x)}{\tilde{m}\psi'_n(\tilde{m}x)\zeta_n(x) - \psi_n(\tilde{m}x)\zeta'_n(x)},$$

функции Рикатти – Бесселя  $\psi_n(x), \zeta_n(x)$  имеют вид

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\pi x}{2}\right)^{1/2} J_{n+1/2}(x); \quad \zeta_n(x) = \left(\frac{\pi x}{2}\right)^{1/2} H_{n+1/2}(x).$$

Здесь  $J_{n+1/2}$  и  $H_{n+1/2}$  – функции Бесселя первого и второго рода. Остальные параметры задаются как  $x = \frac{2\pi a}{\lambda}$ , где  $a$  – радиус шара,  $\lambda$  – длина волны;  $\tilde{m} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon - \frac{4\pi i \sigma}{\omega}}}$  – параметр, обратный комплексному

показателю преломления среды.

На рис. 3 приведен пример зависимости сечения экстинкции от параметра  $x = \frac{2\pi a}{\lambda}$  волны, падающей на сапфировую матрицу с медными наночастицами, из которого видно, что с увеличением размера частицы сечение экстинкции тоже увеличивается.

Таким образом, разработано программное обеспечение, позволяющее рассчитывать оптические свойства гетерогенных пленок на основе металлических наночастиц, взвешенных в диэлектрических матрицах. Оптические материалы, представленные в расчете, могут применяться для создания функциональных устройств, управляющих параметрами электромагнитного излучения. Типичная среда состоит из матрицы, усиливающей электромагнитное излучение, содержащей частицы, размер которых меньше длины волны. Подбирая определенную комбинацию «матрица – наночастица», можно управлять положением резонанса коэффициента преломления.

Работа частично поддержана БРФФИ (проект T07-239).

1. Займидорога О.А., Самойлов В.Н. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2002. Т. 33. Вып. 1. С. 101.
2. Ораевский А.Н., Проценко И.Е. // Письма в ЖЭТФ. 2000. Т. 72. Вып. 9. С. 641.
3. Ораевский А.Н., Проценко И.Е. // Квантовая электроника. 2001. Т. 31. Вып. 3. С. 252.
4. Степанов А.Л. Синтез наночастиц меди в сапфире методом ионной имплантации // Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 28. Вып. 20. С. 58.
5. Kishimoto N., Takeda Y., Umeda N. et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2003. В 206. Р. 634.
6. Takeda Y., Kishimoto N. // Ibid. Р. 620.
7. Степанов А.Л. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2005. Т. 31. Вып. 16. С. 59.
8. Петров Ю.И. Физика малых частиц // М., 1982. С. 359.
9. Boyd G.T., Rasing Th., Liete J.R.R., Shen I.R. // Physical Review. 1984. Vol. 30. № 2. Р. 519.
10. Bass M. et al. // McGraw Hill Inn. 1995. Р. 1187.
11. Г. Ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами. М., 1961.
12. Bohren C.F., Huffman D.R. Absorption and scattering of light by small particles. New York, 1983.

Поступила в редакцию 27.03.08.

**Ольга Владимировна Рухленко** – аспирант кафедры физической электроники факультета радиофизики и электроники. Научный руководитель – А.В. Леонтьев.

**Александр Викторович Леонтьев** – доцент кафедры физической электроники.

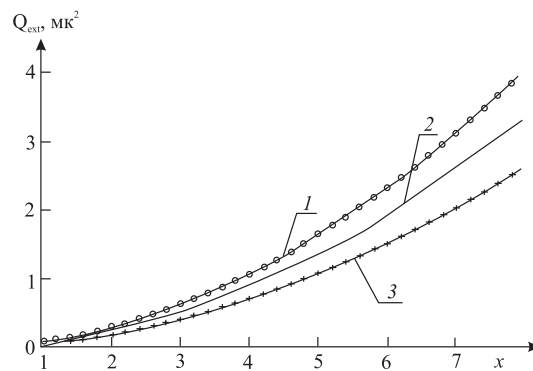


Рис. 3. Сечение экстинкции в сапфировой матрице с медными наночастицами в зависимости от параметра  $x = 2\pi a/\lambda$ : 1 –  $\lambda = 0,48$ , 2 –  $\lambda = 0,54$ , 3 –  $\lambda = 0,60$  мк