

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

Радіoeлектроніки і телекомунікацій

(повне найменування інституту, факультету)

Мікро- та нанoeлектроніки

(повне найменування кафедри)

Пояснювальна записка

до дипломної роботи

бакалавр

(ступінь вищої освіти)

на тему Карти поверхневих електромагнітних хвиль для композиту з металевими 1D-включеннями

Виконав: студент IV курсу, групи РТ-318сп
Спеціальності 153 – «Мікро- та наносистемна
техніка»

(код і найменування спеціальності)

Освітня програма (спеціалізація)

«Мікро- та нанoeлектронні прилади і
пристрої»

Манюк М. С.

(прізвище та ініціали)

Керівник Коротун А. В.

(прізвище та ініціали)

Рецензент Сніжної В. Л.

(прізвище та ініціали)

Інститут, факультет Радіoeлектроніки та телекомунікацій
Кафедра Мікро та нанoeлектроніки
Ступінь вищої освіти бакалавр
Спеціальність 153 «Мікро- та наносистемна техніка»
(код і найменування)
Освітня програма (спеціалізація) «Мікро- та нанoeлектронні прилади і пристрої»
(назва освітньої програми (спеціалізації))

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри мікро- та
наноелектроніки
_____ **Г. В. Сніжної**
« » _____ **2021 року**

ЗАВДАННЯ НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ СТУДЕНТА

1. Тема проекту (роботи) Карти поверхневих електромагнітних хвиль для композиту з металевими 1D-включеннями
керівник роботи Коротун Андрій Віталійович, к. ф.-м. н., доцент
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)
затверджені наказом закладу вищої освіти № 186 від «17» травня 2021 року
Строк подання студентом проекту (роботи) 25 травня 2021 року.

3. Вихідні дані до проекту (роботи) параметри металів і діелектриків, з яких виготовляються нанострижні і композити на їх основі, геометричні параметри нанострижнів.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити) Розглянуто електродинамічні й електрофізичні властивості багатокомпонентних середовищ. Одержано частотні залежності ефективної діелектричної функції і хвильового числа поверхневих плазмон-поляритонів та концентраційні залежності частот локалізованих поверхневих плазмонів для випадків малого та великого об'ємного вмісту металевих включень в нанокомпозиті, проведено чисельні розрахунки. Доведено існування

заборонених зон - частотних інтервалів, в яких відсутні поверхневі електромагнітні хвилі.

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень)

6. Консультанти розділів проекту (роботи)

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Прийняв виконане завдання
1-3	Коротун А.В., к.ф.-м.н., доцент каф. МіНЕ		
Нормо-контроль	Коротун А.В., к.ф.-м.н., доцент каф. МіНЕ		

7. Дата видачі завдання «26» квітня 2021 року.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломного проекту (роботи)	Строк виконання етапів проекту (роботи)	Примітка
1	Збір і аналіз інформації стосовно електродинамічних й електрофізичних властивостей багатокомпонентних середовищ.	26.04. – 28.04.	виконано
2	Ознайомлення з методикою розрахунку характеристик електромагнітних хвиль на межі нанокompозиту.	29.04. – 05.05.	виконано
3	Одержання виразів для діелектричних функцій, частот локалізованих поверхневих плазмонів, хвильових чисел поверхневих плазмон-поляритонів.	06.05. – 12.05.	виконано
4	Проведення чисельних експериментів та обробка їх результатів.	13.05. – 20.05.	виконано
5	Оформлення роботи	21.05. – 24.05.	виконано

Студент

(підпис)

Манюк М. С.

(прізвище та ініціали)

Керівник проекту (роботи)

(підпис)

Коротун А. В.

(прізвище та ініціали)

РЕФЕРАТ

ПЗ: 36 стор., 19 рисунків, 2 таблиці, 10 джерел, 1 додаток

Об'єкт дослідження – метал-діелектричні нанокомпозити із 1D-металевими включеннями.

Метод дослідження – аналітичний, розрахунковий.

Розглянуто електродинамічні й електрофізичні властивості нанокомпозитів з хаотично розташованими металевими наноциліндрами. Одержано вирази для діелектричних функцій, частот локалізованих плазмонів, хвильових чисел плазмон-поляритонів на межі композиту з вакуумом. Наведено результати чисельних розрахунків.

МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИЧНИЙ НАНОКОМПОЗИТ, ЕФЕКТИВНА ДІЕЛЕКТРИЧНА ФУНКЦІЯ, ЛОКАЛІЗОВАНІ ПОВЕРХНЕВІ ПЛАЗМОНИ, ПОВЕРХНЕВІ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНИ.

ЗМІСТ

Перелік умовних позначень.....	6
Вступ.....	7
1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	8
1.1 Електродинамічні й електрофізичні властивості багатокомпонентних середовищ.....	8
2. ВПЛИВ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКОМПОЗИТУ НА ЛОКАЛІЗУВАННЯ ПЛАЗМОНІВ І ПОШИРЕННЯ ВЗДОВЖ КОРДОНУ РОЗДІЛУ ПЛАЗМОНІВ–ПОЛЯРИТОНІВ.....	23
2.1 Ефективна діелектрична функція нанокompозита.....	23
2.2 Поверхневий плазмонний резонанс.....	25
2.3 Результати обчислень та їх обговорення.....	28
ВИСНОВКИ.....	34
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ.....	35

ВСТУП

Сучасний рівень розвитку технологій дозволяє створювати мікро- і наноструктури з прогнозованими оптичними властивостями і характерними розмірами порядку декількох десятків і менше нанометрів. Структури на основі композитних матеріалів демонструють незвичайні ефекти у поглинанні і відбиванні світла за рахунок просторової модифікації нановключень. Особливий інтерес представляють локалізовані плазмони і плазмон-поляритони з точки зору їх потенційного застосування в оптоелектронних приладах. Фізичною основою тут виступають фактори збудження плазмон-поляритонів і резонансна частота локалізованих плазмонів у реальному середовищі, де електромагнітне поле збудженого плазмону знаходиться у функціональній залежності з його оточенням.

Застосування подібних структур дозволяє керувати характеристиками оптичного випромінювання на наномасштабі. Підвищення ефективності керування досягається переважно за рахунок мікро- і наноструктурування. Цілеспрямоване керування параметрами таких систем неможливо без детального вивчення явищ, що виникають в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з мікро- і нанооб'єктами та структурами на їх основі. Ключову роль тут відіграє дослідження і розробка теорії взаємодії випромінювання з нановключеннями і архітектоніка фотонних елементів, що визначає їх оптичні властивості.

Особливості поведінки металевих наночастинок у матриці і можливість неконтрольовано змінювати параметри нанокомпозитів (матеріалів матриці і наночастинок) надають можливість створення композитних матеріалів із наперед заданими діелектричними та оптичними властивостями. Основними параметрами включень, що впливають на оптичні характеристики композитів, є їх форма і розміри, розподіл в об'ємі композиту, взаємодія з матрицею і навколишнім середовищем, наявність і властивості оболонки.

При побудові фізичних моделей оптичних властивостей нанокompозитів базовою ідеєю виступає модель ефективного середовища, яку з успіхом застосовують при вивченні оптичних ефектів у нанокompозитах. Існує декілька теорій ефективного середовища, що описують усереднений відгук композиту на зовнішній вплив. Найбільш поширеними з них є модель Максвелл-Гарнетта [154 Жур], що припускає малу частку включень у матриці, і модель Бруггемана [155 Жур], що припускає співмірні об'ємні частки матриці і включень. На жаль, властивості нанокompозитів в області резонансу поверхневих плазмонів моделлю Бруггемана описуються погано, в той час як реальні концентрації наночастинок в композитах можуть далеко не завжди відповідати обмеженням моделі Максвелл-Гарнетта. Межі ефективної діелектричної проникності композитного середовища вперше були визначені Вінером [156 Жур] для дійсних значень діелектричних функцій матриці і включень. Цей підхід був узагальнений для випадку комплексної діелектричної проникності Бергманом [157 Жур]. Подальший розвиток підходів до оцінки меж діелектричної проникності гетерогенного матеріалу представлено в роботах [158, 159 Жур].

Слід зазначити, що всі ці теорії мають низку обмежень, і раніше не застосовувалися до випадку метал-діелектричних композитних середовищ із циліндричними металевими включеннями. Тому метою даної роботи є дослідження метал-діелектричних нанокompозитів із 1D-металевими включеннями за наявності плазмонного резонансу на межі метал – діелектрик.

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1. Електродинамічні й електрофізичні властивості багатокомпонентних середовищ

Дослідження властивостей наномасштабних композитних середовищ є важливим завданням сучасної фізики конденсованого стану речовини. Властивості таких середовищ можуть значно відрізнятися від властивостей як об'ємних матеріалів, так і окремих НЧ, що формують композит. Нанокompозитні середовища є тією основою, на якій створюються нові матеріали із заданими структурними, електронними й оптичними властивостями. Нанокompозити розрізняються розміром, формою та впорядкованістю складових НЧ, ступенем заповнення різних середовищ НЧ, а також змінами їх при впливі зовнішніх чинників (тиску, температури, опромінення тощо).

Серед різноманітних наноструктурованих середовищ слід особливо відзначити пористі напівпровідники та діелектрики, утворені шляхом видалення частини матеріалу з об'єму. Пори, що виникають при цьому, і нанокристали, що залишаються, мають розміри та масштаби від одиниць до сотень нанометрів. Фізичні властивості нанокompозитів істотно відрізняються від властивостей складових початкового матеріалу. Можна виділити *наступні основні причини* модифікування їхніх властивостей:

- квантово-розмірні ефекти у нанооб'єктах, розміри яких мають порядок довжини де Бройлевої хвилі електрона;
- поверхневі ефекти, пов'язані з появою нових електронних і фононних станів поверхні, площа якої істотно збільшується після утворення пор або консолідації НЧ;

- локальні поля в нанокompозитному середовищі, які визначаються розмірами, формою та впорядкованістю нанооб'єктів.

Певні успіхи в дослідженні наноструктур пористих середовищ було досягнуто, зокрема, для пористого кремнію, що являє набір нанокристалічних ниток, розділених порами. Коли характерні розміри пор і масштаби нанокристалів набагато менші за довжину падаючої хвилі випромінювання, наноструктурований напівпровідник можна розглядати як однорідне оптичне середовище, що має деякий ефективний показник заломлення, відмінний від показників заломлення речовин, які утворюють наноструктуру; це — так звана модель ефективного середовища, сучасні уявлення про яку найбільш повно описані в [1–4]. Суть цієї моделі полягає в тому, що ансамбль нанокластерів можна розглядати як нове середовище з ефективною діелектричною проникністю. Перевагою даного підходу є те, що в його рамках для аналізу поширення випромінювання в нанокompозитному середовищі немає потреби розв'язувати рівняння Максвелла у кожній точці простору.

Є кілька так званих моделей ефективного середовища, які дають змогу розрахувати ефективну діелектричну проникність ϵ_{eff} такої гетеросистеми. Якщо розмір включень малий ($r_0 \ll \lambda$), тобто для НЧ, таку систему можна вважати однорідною й ізотропною (частинки вважатимемо випадковим чином розподіленими в матриці), а отже, можна ввести для неї ефективну діелектричну проникність ϵ_{eff} . Звідси походить назва «теорія ефективного середовища». При цьому розглядають дві можливі топології гетеросистеми. Перша — матрична (або керметна), яка реалізується у випадку, коли об'ємні фактори заповнення НЧ матриці є достатньо малими. Це відповідає випадку, коли НЧ повністю оточені матрицею. Інша топологія, — статистична (або агрегатна), — реалізується у випадку, коли обидві фази рівноцінні, тобто фактори заповнення для обох фаз є близькими. Надалі розглядатимемо гетеросистеми з матричною топологією.

Зазвичай, для розв'язання оптичних задач в моделі ефективного

середовища користуються електростатичним наближенням, умовою якого є малість як розміру НЧ, так і віддалі між ними порівняно з довжиною оптичної хвилі у середовищі. Інакше неминуче постає задача про розсіяння на НЧ, що утворюють композитне середовище, та інтерференцію розсіяних хвиль.

В рамках моделі ефективного середовища в принципі можна, знаючи оптичні параметри кожного з компонентів композитного середовища, а також їхні концентрації та геометричні форми, визначити ефективні параметри всього середовища як цілого. Для цього треба зв'язати електричну індукцію $\langle \mathcal{D} \rangle$, усереднену за об'ємом V , розміри якого значно перевищують розміри неоднорідностей діелектричної проникності,

$$\langle \mathcal{D} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \mathcal{D}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{\epsilon_0}{V} \int_V \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.1)$$

із величиною напруженості зовнішнього електричного поля $\mathbf{E}_0$, де $\mathcal{D}(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ і $\epsilon(\mathbf{r})$ — локальні (у точці з радіусом-вектором $\mathbf{r}$) значення електричної індукції, напруженості електричного поля та відносної діелектричної проникності (ϵ_0 — діелектрична проникність вакууму). Цей зв'язок і визначає ефективну діелектричну проникність ϵ_{eff} композитного середовища:

$$\langle \mathcal{D} \rangle = \epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} \mathbf{E}_0. \quad (1.2)$$

Локальне поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ залежить від природи та форми НЧ. У найзагальнішому випадку інтегрування (1.1) стикається із труднощами. Точне визначення ϵ_{eff} можливе, зокрема, у випадку ламінарної структури, яка

складається з паралельних шарів діелектриків, що чергуються, із проникностями ϵ_1 , ϵ_2 . Для більшості задач маємо розглядати різні наближення, зважаючи на локальні поля, які визначаються з розв'язку задач електростатики.

Зовнішнє постійне електричне поле спричиняє появу в будь-якому елементі об'єму діелектрика дипольного моменту. Цей стан діелектрика називається поляризацією. Кількісно поляризація діелектрика характеризується векторним дипольним моментом одиниці об'єму (вектором поляризації) $\mathcal{P}$.

Розрізняють два основних види поляризації: пружну та релаксаційну (теплову). Пружну поляризацію зумовлено пружним зсувом (поворотом) сильно зв'язаних заряджених частинок (електронів, йонів) або диполів, причому цей зсув (кут повороту) є пропорційним зовнішньому полю. Релаксаційна поляризація є результатом дії зовнішнього поля на хаотичний тепловий рух слабо зв'язаних заряджених частинок або диполів; при цьому поступово встановлюється деякий переважний зсув або орієнтація диполів.

Залежно від природи та форми НЧ, що зміщуються, пружну поляризацію поділяють на електронну, атомну, йонну та поляризацію пружного зсуву дипольних молекул. Релаксаційна поляризація поділяється на дипольну (орієнтаційну), йонну теплову й електронну теплову.

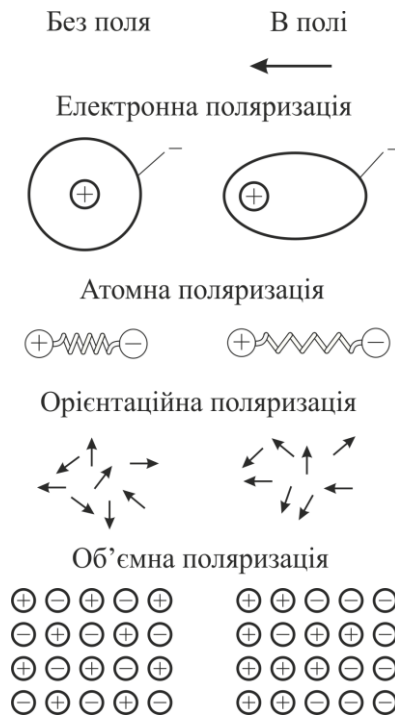


Рисунок 1.1 – Механізми поляризації

Для зручності математичного опису поляризації вводять поняття середнього макроскопічного поля та локального поля в діелектрику. *Середнє макроскопічне поле* $\mathbf{E}$ в об'ємі, що значно перевищує за розмірами елементарну комірку кристалу, не враховує атомно-кристалічну структуру. *Локальне (або діяльне) поле* $\mathbf{E}_{\text{loc}}$ визначається лише в тих точках, де знаходяться атоми, причому враховується вплив усіх атомів, що оточують дану точку, а атом, який відповідає їй, вважають відсутнім.

Якщо зразок діелектрика у формі еліпсоїда поміщено в однорідне електричне поле, причому вісь a є паралельною вектору поля, $\mathbf{E}_{\text{loc}}$ можна представити у вигляді суми

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{loc}} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}_2 + \boldsymbol{\varepsilon}_3, \quad (1.3)$$

де $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ — напруженість поля, створена зовнішніми джерелами; $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ — напруженість деполяризувального поля, створена зв'язаними зарядами, що з'явилися на зовнішній поверхні зразка в результаті поляризації, тобто

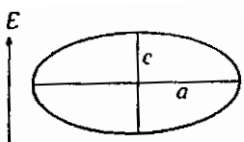
$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = -\frac{1}{\epsilon_0}(\mathcal{L}_a \boldsymbol{\mathcal{P}}_a + \mathcal{L}_b \boldsymbol{\mathcal{P}}_b + \mathcal{L}_c \boldsymbol{\mathcal{P}}_c), \quad (1.4)$$

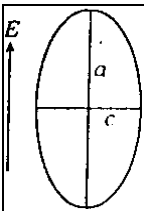
де $\mathcal{L}_a, \mathcal{L}_b, \mathcal{L}_c$ — деполяризувальні фактори вздовж напрямків осей a, b, c еліпсоїда в однорідному полі ($\mathcal{L}_a + \mathcal{L}_b + \mathcal{L}_c = 1$), $\boldsymbol{\mathcal{P}}_a, \boldsymbol{\mathcal{P}}_b, \boldsymbol{\mathcal{P}}_c$ — компоненти $\boldsymbol{\mathcal{P}}$ вздовж осей еліпсоїда. Значення коефіцієнтів деполяризації, залежно від форми частинок і орієнтації їх щодо вектора напруженості електричного поля, наведено в табл. 1.1.

Напруженість поля, створену атомами, що оточують дану точку, представляють у вигляді двох доданків — $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ та $\boldsymbol{\varepsilon}_3$. Сенс такого розділення полягає у наступному.

При розрахунку напруженості поля, створеної всіма атомами (йонами), що оточують дану точку, виділяють діелектричну сферу з центром у даній точці А (див. рис. 1.2). Усередині сфери враховують реальну кристалічну структуру діелектрика, а поза сферою діелектрик вважають суцільним середовищем, що володіє макроскопічними діелектричними властивостями зразка (метод сфери Лорентца).

Таблиця 1.1 – Коефіцієнти деполяризації ϵ (за А. Р. фон Гіппелем)

Форма тіла	Коефіцієнт деполяризації ϵ
I	II
Сфера ($a = b = c$)	$\frac{1}{3}$
Еліпсоїд обертання а) поле $\parallel c$ (сплюснутий сфероїд із $a = b > c$, $c = a\sqrt{1 - \xi^2}$, $\xi = \sqrt{1 - \frac{c^2}{a^2}}$) 	$\frac{b^2 c}{2} \frac{2}{(a^2 - c^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{c} - \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{c} \right\} =$ $= \frac{1}{\xi^2} - \frac{\sqrt{1 - \xi^2}}{\xi^3} \arcsin \xi = 1$ для $c \rightarrow 0$, тобто якщо $\xi \rightarrow 1$
б) поле $\parallel a$ (втягнутий сфероїд із $b = c > a$, $c = a\sqrt{1 - \xi^2}$, $\xi = \sqrt{1 - \frac{c^2}{a^2}}$)	$\frac{1 - \xi^2}{\xi^2} \left\{ \frac{1}{2\xi} \ln \frac{1 + \xi}{1 - \xi} - 1 \right\};$ $= 0$ для $\xi \rightarrow 1$, тобто $a \rightarrow \infty$

	
Узагальнений еліпсоїд ($a \neq b \neq c$) поле $\parallel a$	$\frac{abc}{2} A$ (A — табличне значення еліптичного інтеграла)
дуже довгий циліндричний стрижень $\epsilon \parallel$	0
дуже короткий циліндричний стрижень (диск) $\epsilon \parallel$	1
циліндричний стрижень $\epsilon \parallel$	$\frac{1}{2}$

Виділена сферична область мається на увазі достатньо малою, так що поле в ній можна вважати однорідним. Напруженість поля в центрі сфери, спричинена поляризацією діелектрика поза сферою, дорівнює

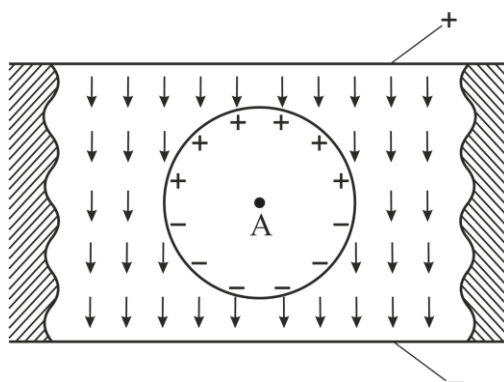


Рисунок 1.2 – Модель для розрахунку внутрішнього поля

$$\mathbf{\epsilon}_2 = \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}, \quad (1.5)$$

де ϵ_0 — діелектрична проникність вакууму.

Напруженість поля $\mathbf{\epsilon}_3$ у центрі сфери, викликана поляризацією діелектрика у виділеній області, залежить від його структури. У діелектриках із хаотичним розташуванням атомів або молекул та й у кубічних одно- і двоатомових кристалах $\mathbf{\epsilon}_3 = 0$, тобто дії окремих частинок у даній точці взаємно компенсуються (припущення за О.-Ф. Моссотті). Якщо ж $\mathbf{\epsilon}_3 \neq 0$, для опису такого поля застосовуються так звані структурні коефіцієнти.

Для діелектрика, що знаходиться в однорідному зовнішньому полі, слухними є рівності $\mathbf{\epsilon}_3 = 0$ і $\mathbf{\epsilon} = \mathbf{\epsilon}_1 + \mathbf{\epsilon}_2$. Тоді

$$\mathbf{\epsilon}_{\text{loc}} = \mathbf{\epsilon} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}. \quad (1.6)$$

Поле в діелектрику зумовлене двома різнорідними явищами: стороннім полем і поляризацією середовища. Тому для характеристики цього поля вводять дві величини: поле $\mathbf{\epsilon}$ і електричну індукцію

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{\epsilon} + \mathbf{P}. \quad (1.7)$$

Особливості поляризації діелектриків у змінному полі пов'язані зі співвідношенням між періодом T коливань поля та періодом власних коливань НЧ (при пружній поляризації) або часом зсуву (орієнтації) НЧ — часом релаксації (при релаксаційній поляризації). Якщо характерні часи, що відповідають цим видам поляризації в даному діелектрику, набагато менші за T , то поляризація відбувається так само, як в постійному полі. При оберненому співвідношенні поляризація відсутня, оскільки НЧ не встигають слідувати за полем. У проміжному випадку поляризація розвивається не повністю; НЧ, що беруть участь у відносно повільних видах поляризації, відстають у своєму русі від електричного поля. Це приводить до появи різниці фаз між напруженістю поля $\mathbf{E}$ та поляризацією $\mathbf{P}$; при цьому помітна частина потужності поля витрачається на подолання сил, що перешкоджають зсуву НЧ, — з'являються діелектричні втрати. Таким чином, діелектричні втрати виявляються в тій області частот, у якій відбувається помітне «виключення» різних видів поляризації, тобто зменшення ϵ . Залежність ϵ від частоти називається *часовою дисперсією* діелектричної проникності.

Зсув фаз між $\mathbf{E}$ та $\mathbf{P}$ приводить до зсуву фаз $\mathbf{D}$ та $\mathbf{E}$. Цю обставину зручно описувати, вважаючи комплексною діелектричну проникність:

$$\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon'' . \quad (1.8)$$

Ємність конденсатора є пропорційною ϵ' , а діелектричні втрати пропорційні ϵ'' . Для характеристики діелектричних втрат використовують тангенс діелектричних втрат, тобто кут між $\mathbf{D}$ та $\mathbf{E}$:

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'}. \quad (1.9)$$

Якщо частота зовнішнього електромагнітного поля близька до власної частоти якого-небудь механізму пружної поляризації, амплітуда коливань НЧ значно зростає, тобто виникає резонансна поляризація. Зростання амплітуди коливань НЧ призводить, відповідно, до зростання діелектричних втрат.

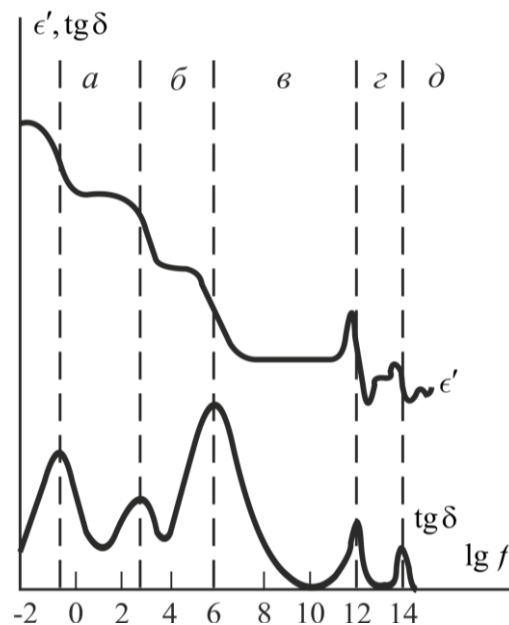


Рисунок 1.3 – Повний діелектричний спектр гіпотетичного матеріалу

Області дисперсії ϵ' і збільшення $\operatorname{tg} \delta$ зумовлені «виключенням» різних видів поляризації: *a* — об'ємної, *б*, *в* — релаксаційної, *г* — пружної, *д* — електронної

Якісний хід залежностей ϵ' і $\operatorname{tg}\delta$ від частоти, наприклад, для гіпотетичного матеріалу з п'ятьма різними механізмами поляризації, наведено на рис. 1.3. Збільшення ϵ' зі зростанням частоти при резонансній поляризації називається нормальною дисперсією. Спад ϵ' у вузькій смузі частот поблизу резонансу називається аномальною дисперсією. Такий специфічний характер часової дисперсії ϵ' пояснюється тим, що реакція частинок діелектрика, що коливаються, на дію зовнішнього електромагнітного поля змінює фазу під час переходу частоти поля через резонансне значення.

Загальним для згаданих механізмів поляризації є те, що вони умикаються внаслідок зсуву або орієнтації зв'язаних носіїв заряду, але можливі ситуації, коли поле є значно спотвореним за рахунок накопичення об'ємних зарядів або зарядів на поверхнях поділу діелектриків.

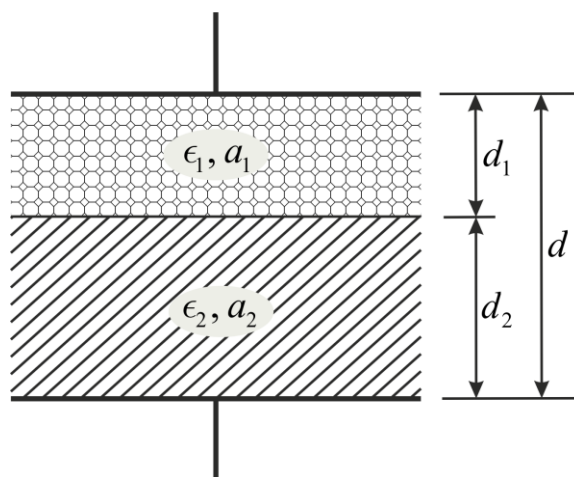


Рисунок 1.4 – Двошаровий конденсатор Максвелла–Вагнера

Класичним прикладом поверхневої поляризації є двошаровий конденсатор Максвелла–Вагнера (Дж. К. Максвелл, К. В. Вагнер; рис. 1.4).

Діелектрик складається з двох паралельних шарів матеріалів (I) і (II), що характеризуються діелектричною проникністю, провідністю та товщиною.

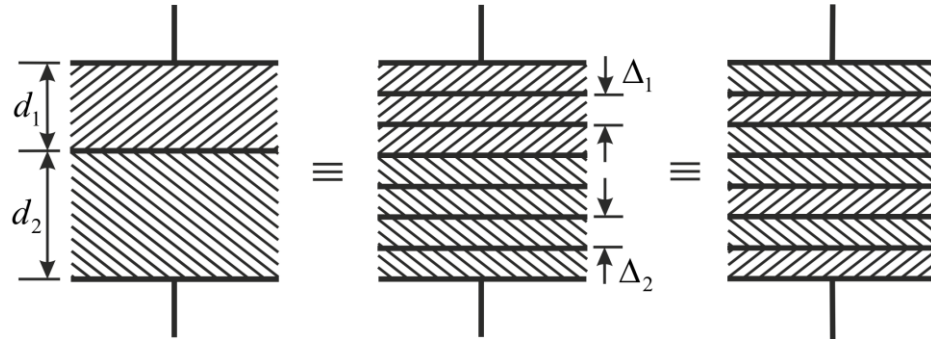


Рисунок 1.5 – Електрична тотожність двошарового та багатошарового конденсаторів (відносна величина та форма двох середовищ є незмінними)

При поділі кожного з шарів на n підшарів рівної товщини, поки геометрична форма й орієнтація поля залишаються постійними, а відносний розмір середовищ не змінюється, комплексна діелектрична проникність такого складного діелектрика також залишається без зміни.

Можна змінювати геометрію середовища II, зберігаючи його масу та розпорошуючи його в середовищі I у формі сфер, еліпсоїдів або стрижнів, настільки рідко розкиданих, що взаємодією між цими НЧ можна нехтувати.

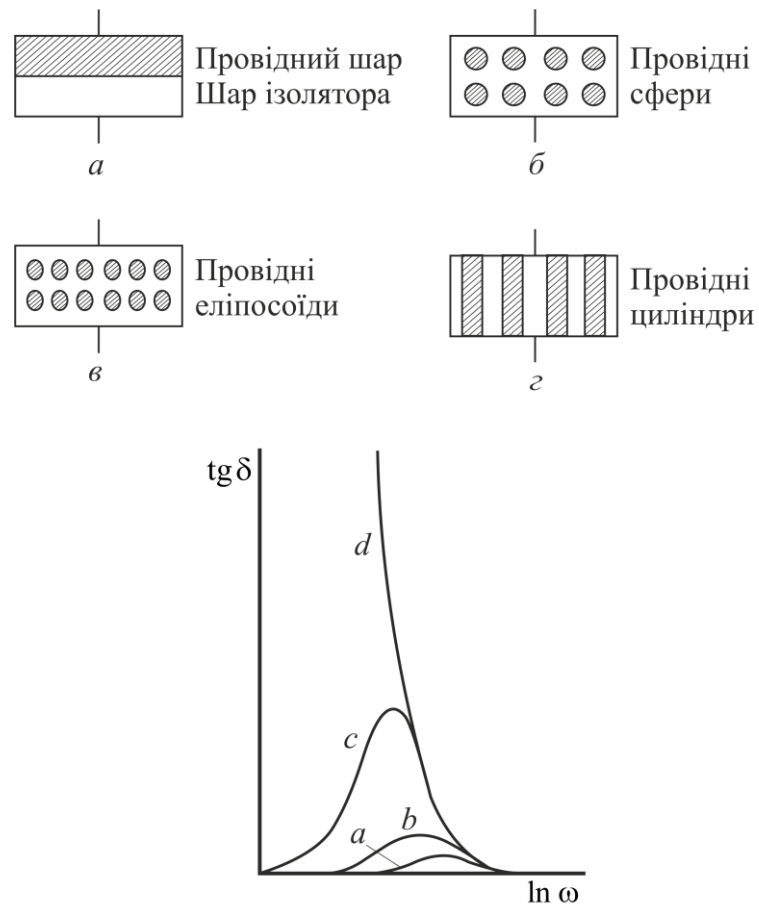


Рисунок 1.6 – Залежність діелектрика від частоти за різних форм і орієнтацій частинок середовища II

Оскільки спотворення поля, викликане поляризованими частинками, залежить від їхніх форми й орієнтації щодо прикладеного поля, то залежатиме від форми й орієнтації частинок середовища II (рис. 1.6).

2. ВПЛИВ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКОМПОЗИТУ НА ЛОКАЛІЗОВАНІ ПОВЕРХНЕВІ ПЛАЗМОНІВ І ПОШИРЕННЯ ВЗДОВЖ МЕЖІ РОЗДІЛУ ПЛАЗМОН–ПОЛЯРИТОНІВ.

2.1 Ефективна діелектрична функція нанокompозиту з малою концентрацією включень.

Розглянемо композит, що представляє собою діелектричну середу з проникністю ϵ_m , заповнену випадково орієнтованими циліндричними металевими включеннями радіусом R . При цьому композит знаходиться в полі електромагнітної хвилі напруженістю $\mathcal{E}$, вектор якої перпендикулярний плоскій границі розділу композиту з вакуумом.

У разі, коли концентрація металевих включень мала, ефективна діелектрична функція композиту має вигляд [Гречко-93]:

$$\epsilon_{\text{eff}}(\omega) = \epsilon_m + \frac{\beta(\epsilon(\omega) + 5\epsilon_m)(\epsilon(\omega) - \epsilon_m)}{3(\epsilon(\omega) + \epsilon_m) - 2\beta(\epsilon(\omega) - \epsilon_m)}, \quad (2.1)$$

де $\epsilon(\omega)$ – діелектрична функція металевих наноциліндрів; β – їх відносна концентрація ($\beta \ll 1$).

Для визначення діелектричної функції металевих включень скористаємося моделлю Друде

$$\epsilon(\omega) = \epsilon^\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} + i \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}, \quad (2.2)$$

де ϵ^∞ – внесок іонного остову в діелектричну функцію металу; $\omega_p = \sqrt{e^2 n_e / \epsilon_0 m^*}$ – частота об'ємних плазмонів, e , n_e та m^* – заряд, концентрація і ефективна маса електрона ($n_e^{-1} = 4\pi r_s^3 / 3$, r_s – середня відстань

між електронами провідності).

Розглянемо випадки, коли загасання мале і їм можна знехтувати і коли загасання є істотним і їм нехтувати не можна.

Нехай загасання мале ($\gamma \rightarrow 0$). В цьому випадку з формули (2.2) отримаємо

$$\epsilon(\omega) = \epsilon^\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (2.3)$$

Підставляючи співвідношення (2.3) в (2.1) і вводячи безрозмірну змінну $\Omega = \omega/\omega_p$, матимемо

$$\epsilon_{\text{eff}}(\Omega) = \frac{1}{\Omega^2 [\chi_\beta^{(-)} \phi(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \Omega^2]} \left\{ \beta \phi^2(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \Omega^2 \phi(\Omega) + (\chi_\beta^{(-)} - \beta) \epsilon_m^2 \Omega^4 \right\}, \quad (2.4)$$

де введено позначення

$$\phi(\Omega) = \epsilon^\infty \Omega^2 - 1; \quad (2.5)$$

$$\chi_\beta^{(\pm)} = (3 \pm 2\beta). \quad (2.6)$$

У разі, коли загасанням знехтувати не можна, після поділу дійсної і уявної частин отримаємо

$$\begin{aligned} \text{Re} \epsilon_{\text{eff}}(\Omega) = & \frac{1}{[\chi_\beta^{(-)} \epsilon_1(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m]^2 + \chi_\beta^{(-)2} \epsilon_2^2(\Omega)} \times \left\{ \left[\beta (\epsilon_1^2(\Omega) - \epsilon_2^2(\Omega)) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \epsilon_1(\Omega) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (\chi_\beta^{(-)} - \beta) \epsilon_m^2 \right] [\chi_\beta^{(-)} \epsilon_1(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m] + \chi_\beta^{(-)} \epsilon_2^2(\Omega) [2\beta \epsilon_1(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m] \right\}; \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} \epsilon_{\text{eff}}(\Omega) = & \frac{\epsilon_2(\Omega)}{\left[\chi_{\beta}^{(-)} \epsilon_1(\Omega) + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m \right]^2 + \chi_{\beta}^{(-2)} \epsilon_2^2(\Omega)} \times \left\{ -\chi_{\beta}^{(-)} \left[\beta \left(\epsilon_1^2(\Omega) - \epsilon_2^2(\Omega) \right) + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m \epsilon_1(\Omega) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(\chi_{\beta}^{(-)} - \beta \right) \epsilon_m^2 \right] + \left[2\beta \epsilon_1(\Omega) + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m \right] \times \left[\chi_{\beta}^{(-)} \epsilon_1(\Omega) + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

де з урахуванням позначень $\Gamma = \gamma/\omega_p$

$$\epsilon_1(\Omega) = \epsilon^{\infty} - \frac{1}{\Omega^2 + \Gamma^2}, \quad \epsilon_2(\Omega) = \frac{\Gamma}{\Omega(\Omega^2 + \Gamma^2)}. \quad (2.9)$$

Надалі співвідношення (2.4), (2.7) і (2.8) використовуються для вивчення властивостей поверхневих електромагнітних хвиль на межі розділу «композит - повітря».

2.2 Поверхневий плазмонний резонанс

Частоту локалізованих поверхневих плазмонів на межі розділу композит - повітря, коли загасанням можна знехтувати, знайдемо з умови

$$\epsilon_{\text{eff}}(\Omega_{sp}) = -1, \quad (2.10)$$

де $\Omega_{sp} = \omega_{sp}/\omega_p$.

Підставляючи співвідношення (2.4) в умову (2.10), отримаємо біквдратне рівняння для визначення частот локалізованих поверхневих плазмонів

$$\begin{aligned} & \left\{ \beta \epsilon^{\infty 2} + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m \epsilon^{\infty} + \left(\chi_{\beta}^{(-)} - \beta \right) \epsilon_m^2 + \chi_{\beta}^{(-)} \epsilon^{\infty} + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m \right\} \Omega_{sp}^4 - \\ & - \left\{ 2\beta \epsilon^{\infty} + \chi_{\beta}^{(+)} \epsilon_m - \chi_{\beta}^{(-)} \right\} \Omega_{sp}^2 + \beta = 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Розв'язки цього рівня, які мають фізичний зміст можна представити у вигляді

$$\Omega_{sp}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^\infty + \epsilon_m}} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \beta \frac{\epsilon_m^2}{(\epsilon_m + 1)(\epsilon^\infty + \epsilon_m)} \right\}, \quad (2.12)$$

$$\Omega_{sp}^{(-)} = \sqrt{\frac{\beta}{3(\epsilon_m + 1)}}. \quad (2.13)$$

Тоді розщеплення ППР

$$\begin{aligned} \Delta\Omega_{sp} = \Omega_{sp}^{(+)} - \Omega_{sp}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^\infty + \epsilon_m}} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \beta \frac{\epsilon_m^2}{(\epsilon_m + 1)(\epsilon^\infty + \epsilon_m)} \right\} - \\ - \sqrt{\frac{\beta}{3(\epsilon_m + 1)}}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

З формули (2.13) випливає, що нижня гілка плазмонних резонансів зникає при $\beta = 0$.

Аналогічно, з умови поверхневого плазмонного резонансу в разі, коли загасання враховується

$$\text{Re}\epsilon_{\text{eff}}(\Omega_{sp}) = -1, \quad (2.15)$$

матимемо рівняння для визначення частоти ППР

$$\begin{aligned}
& \left[\beta \left(\epsilon_1^2(\Omega_{sp}) - \epsilon_2^2(\Omega_{sp}) \right) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \epsilon_1(\Omega_{sp}) + \left(\chi_\beta^{(-)} - \beta \right) \epsilon_m^2 \right] \times \\
& \times \left[\chi_\beta^{(-)} \epsilon_1(\Omega_{sp}) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \right] + \chi_\beta^{(-)} \epsilon_2^2(\Omega_{sp}) \times \\
& \times \left[2\beta \epsilon_1(\Omega_{sp}) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \right] + \chi_\beta^{(-)2} \left(\epsilon_1^2(\Omega_{sp}) + \epsilon_2^2(\Omega_{sp}) \right) + \\
& + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m^2 + \chi_\beta^{(-)} \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \epsilon_1(\Omega_{sp}) = 0.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Вирази (2.12) - (2.14) і (2.16) використовуються для отримання залежностей частоти ППР від відносної концентрації металевих включень.

2.3 Поверхневі плазмон-поляритони

Хвильове число поверхневих плазмон-поляритонів, що розповсюджуються на межі розділу нанокompозиту з вакуумом при $\gamma = 0$ визначається співвідношенням

$$k_{sp} = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_{\text{eff}}(\omega)}{\epsilon_{\text{eff}}(\omega) + 1}}, \tag{2.17}$$

де k_0 - хвильове число падаючої електромагнітної хвилі.

Тоді, вводячи безрозмірне хвильове число $\kappa_{sp} = k_{sp}/k_0$, замість (2.17) отримаємо наступне співвідношення

$$\begin{aligned}
& \kappa_{sp}(\Omega) = \\
& \left\{ 1 + \frac{\Omega^2 \left[\chi_\beta^{(-)} \phi(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \Omega^2 \right]}{\beta \phi^2(\Omega) + \chi_\beta^{(+)} \epsilon_m \Omega^2 \phi(\Omega) - \left(\chi_\beta^{(-)} - \beta \right) \epsilon_m^2 \Omega^4} \right\}^{-\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Безрозмірне хвильове число поверхневих плазмон-поляритонів при

$$\gamma \neq 0$$

$$\kappa_{sp}(\Omega) = \sqrt{\frac{|\epsilon_{\text{eff}}(\Omega)|}{1 + |\epsilon_{\text{eff}}(\Omega)|}}, \quad (2.19)$$

де

$$|\epsilon_{\text{eff}}(\Omega)| = \sqrt{(\text{Re} \epsilon_{\text{eff}}(\Omega))^2 + (\text{Im} \epsilon_{\text{eff}}(\Omega))^2}, \quad (2.20)$$

а $\text{Re} \epsilon_{\text{eff}}(\Omega)$ и $\text{Im} \epsilon_{\text{eff}}(\Omega)$ визначаються співвідношеннями (2.7) та (2.8).

2.5 Результати обчислень та їх обговорення

Розрахунки були проведені для нанокompозиту на основі 1D-включень різних металів в тефлоні ($\epsilon_m = 2.3$). Параметри металів приведені в табл. 1.1.

Таблиця 1.1 – Таблиця металів

Значення	Метали		
	Cu	Au	Ag
r_s / a_0	2.11	3.01	3.02
m^* / m_e	1.49	0.99	0.96
ϵ^∞	12.03	9.84	3.70
$\gamma_{\text{bulk}}, 10^{14} \text{ s}^{-1}$	0.37	0.35	0.25

На рис. 2.1 наведені частотні залежності ефективної діелектричної

функції композиту з хаотично орієнтованими срібними наноциліндрами з різним об'ємним вмістом. Слід зазначити, що існує два частотних інтервали, в яких поверхневі електромагнітні хвилі поширюватися не можуть - заборонені зони. Перша з них спостерігається при малих Ω , а друга – при $\Omega \approx 0.4$. При цьому, чим більше значення величини β , тим ширше ці інтервали.

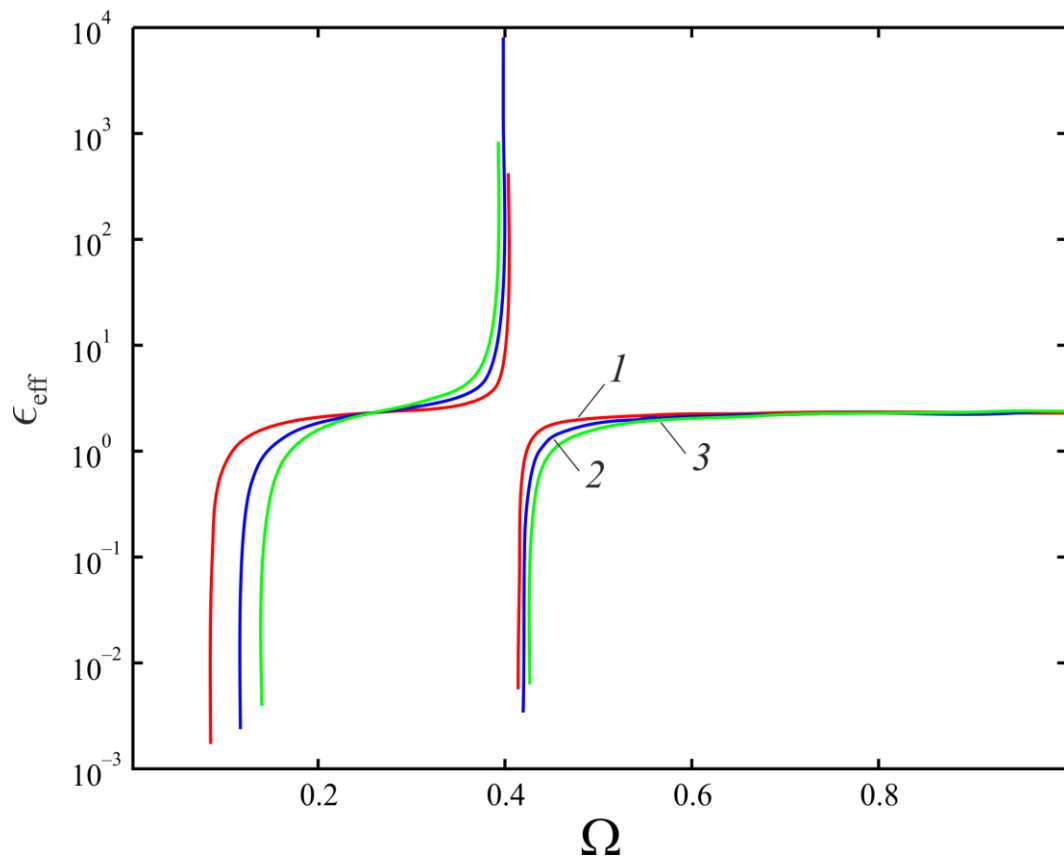


Рисунок 2.1 – Частотні залежності ефективної діелектричної функції композиту з наноциліндрами Ag без урахування загасання

На рис. 2.2 представлені залежності частоти поверхневого плазмонного резонансу на кордоні «композит - повітря» від відносної концентрації металевої фракції. Як видно з малюнка, існують дві гілки локалізованих поверхневих плазмонів. Причому, якщо $\Omega_{sp}^{(+)}(\beta)$ дуже слабо зменшується з ростом β , то $\Omega_{sp}^{(-)}(\beta)$ росте таким чином, що розщеплення плазмонних резонансів $\Delta\Omega_{sp}(\beta)$ зменшується.

Залежність хвильового числа поширюються на кордоні розділу «композит - повітря» поверхневих квант-поляритонів від частоти зображена на рис. 3. Відзначимо, що для квант-поляритонів також є заборонені зони як в області малих Ω , так і при $\Omega \approx 0.6$. Зазначені заборонені зони тим ширше, чим більше відносна концентрація металевої фракції β (рис. 2.3, а). Крім того, заборонена зона розширюється в ряду металів $\text{Cu} \rightarrow \text{Au} \rightarrow \text{Ag}$ (рис. 3, b), що визначається значеннями ϵ^∞ і ω_p для цих металів.

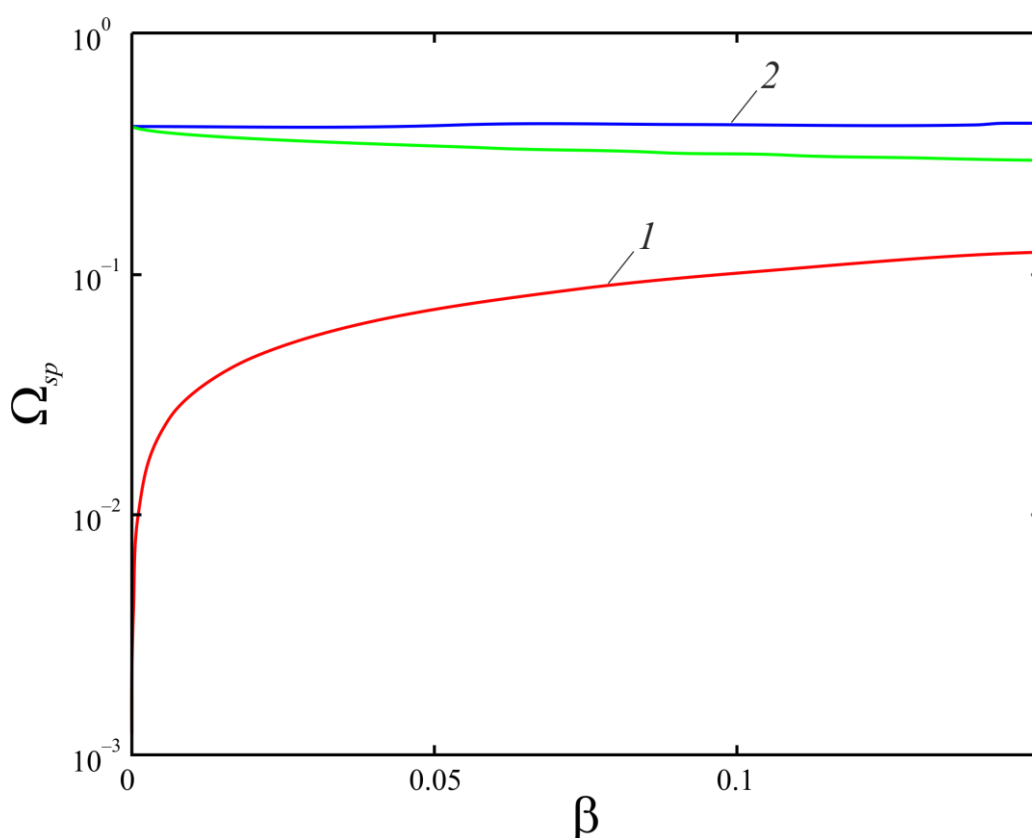


Рисунок 2.2 – Залежність частоти ППР на кордоні «повітря - композит з наночілндрами Ag» від об'ємного вмісту металевої фракції: 1 - верхня гілка; 2 - нижня гілка; 3 - розщеплення ППР

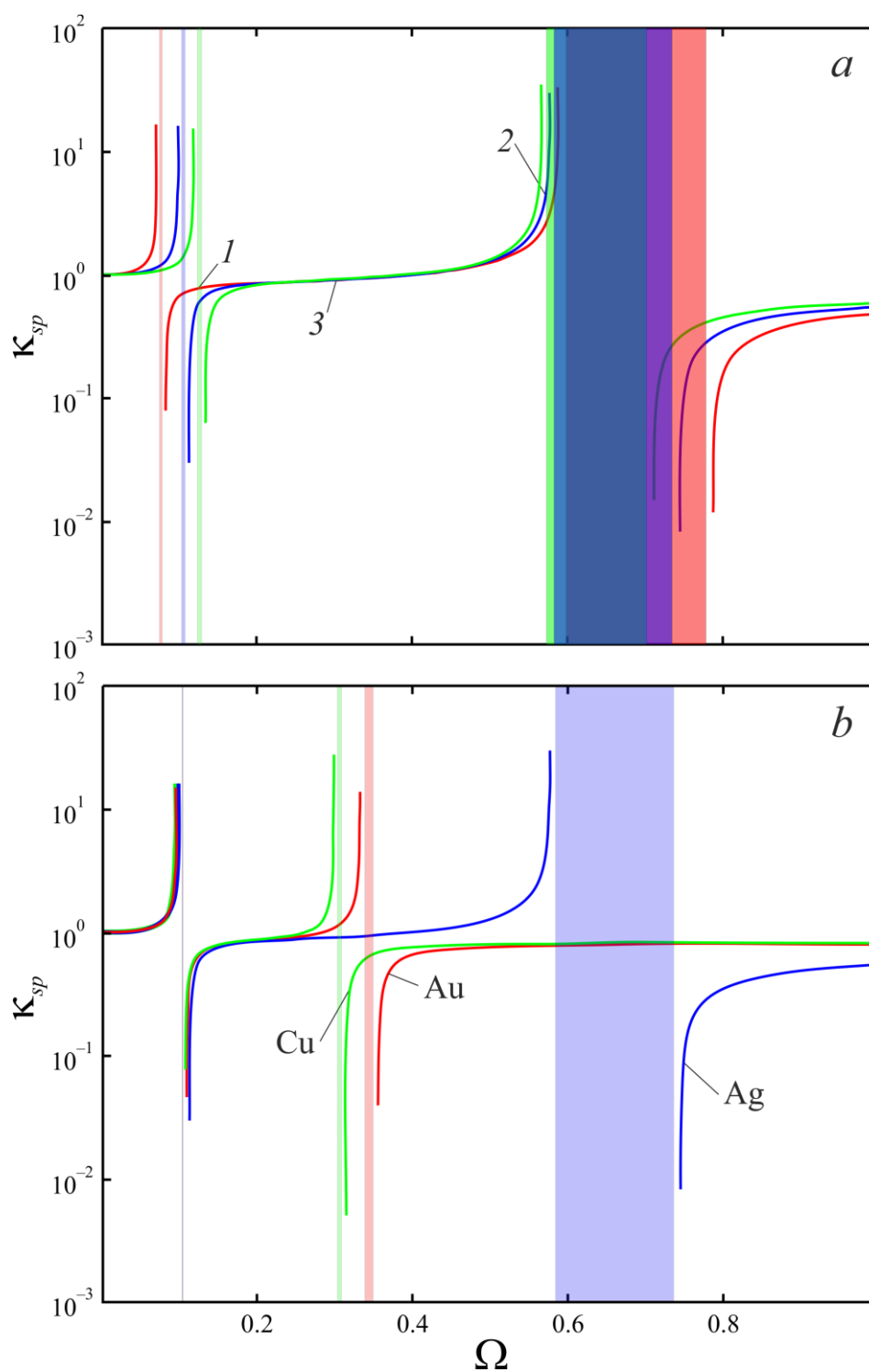


Рисунок 2.3 – Частотні залежності хвильового числа розповсюджуються вздовж кордонів розділу композиту і повітря квант-поляритонів:

a - наноциліндри Ag при різній відносній концентracji: 1 -;

b - наноциліндри різних металів ($\beta = 0.1$).

На рис. 2.4 продемонстровані частотні залежності ефективної діелектричної функції композиту в разі, коли процесами релаксації знехтувати не можна. Криві $\text{Re}\epsilon_{\text{eff}}(\Omega)$ мають близько розташовані максимуми і мінімуми при $\Omega \simeq 0.4$, а $\text{Im}\epsilon_{\text{eff}}(\Omega)$ при цьому ж значенні Ω досягає максимуму. З ростом змісту β має місце збільшення значень $\text{Im}\epsilon_{\text{eff}}$ у всьому розглянутому інтервалу частот. Це можна пояснити посиленням поглинання електромагнітного випромінювання композитом з ростом відносної концентрації циліндричних включень.

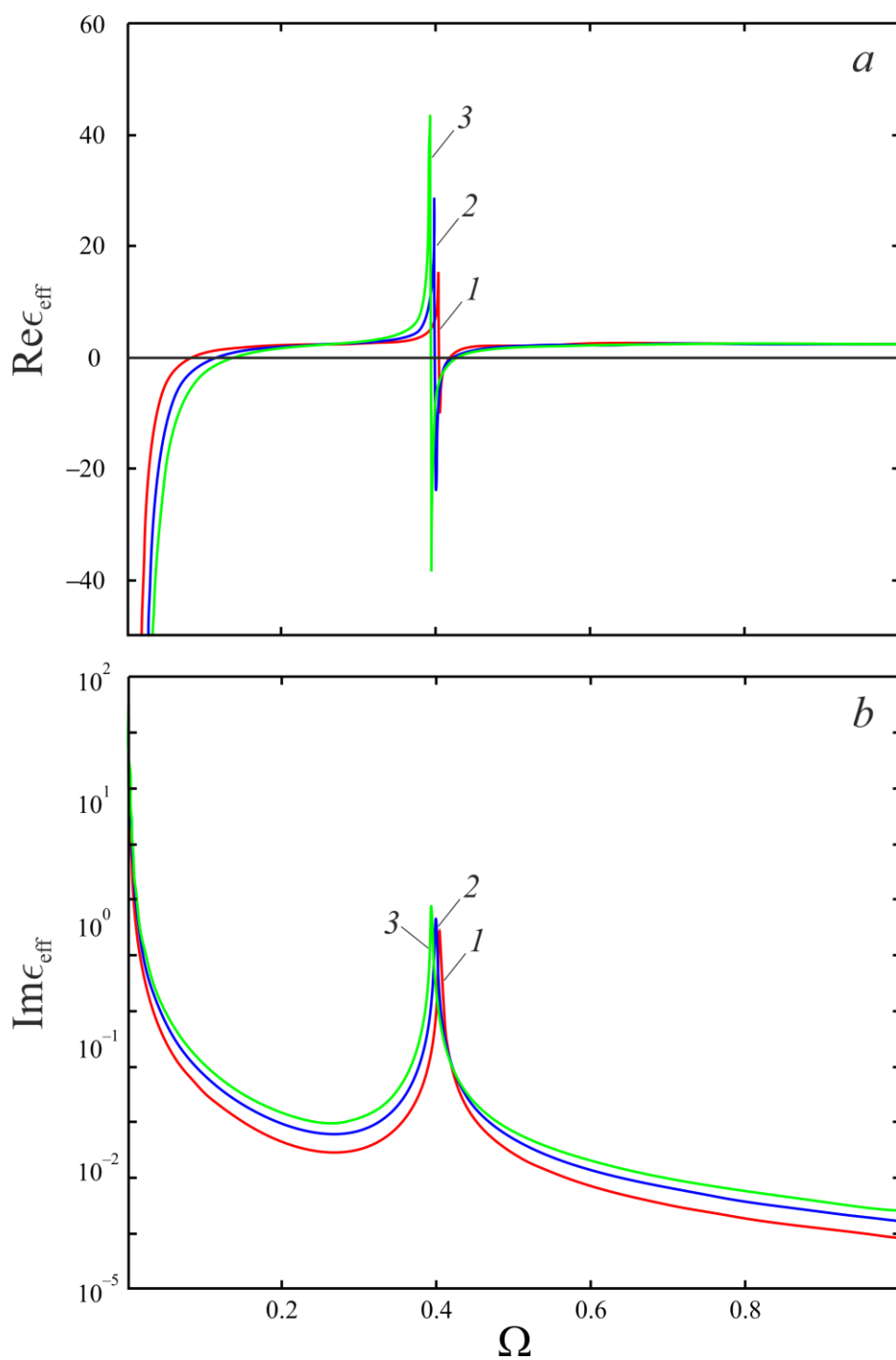


Рисунок 2.4 – Частотні залежності дійсної (а) і уявної (b) частин ефективної діелектричної функції композиту з наноціліндрами Ag при обліку загасання

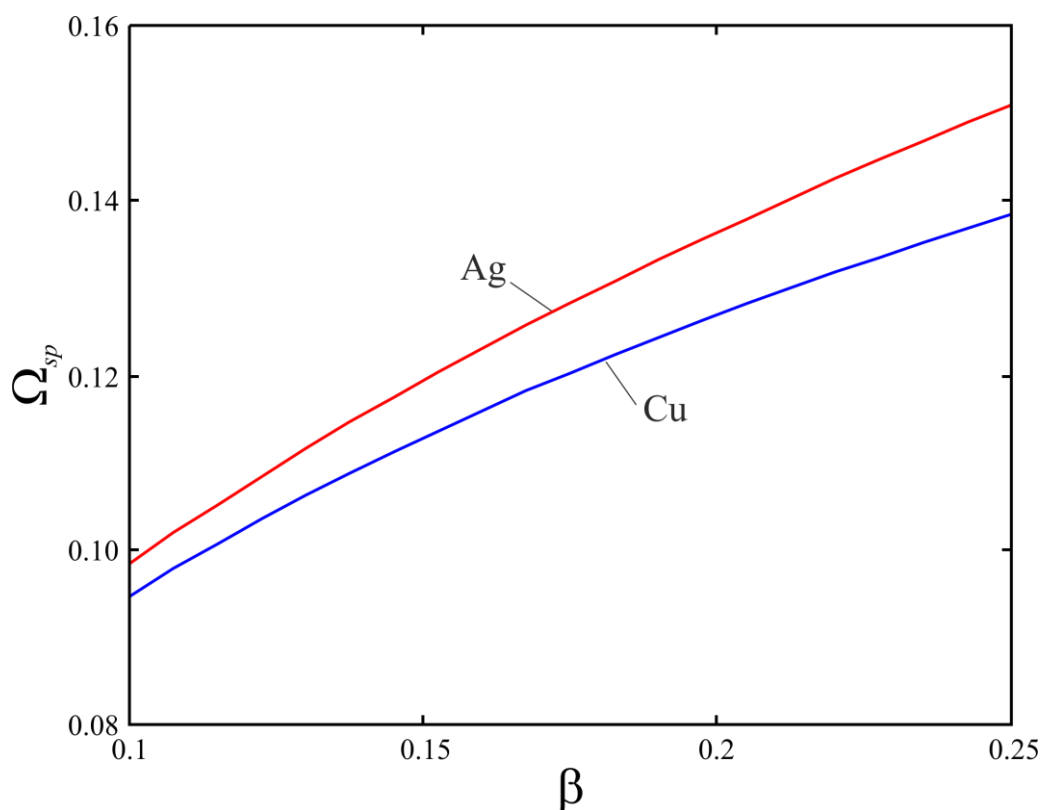


Рисунок 2.5 – Залежність частоти ППР на кордоні «повітря - композит» від об'ємного вмісту металевої фракції при наявності загасання для різних металів

Для випадку враховуючи загасання залежності частоти ППР від відносної концентрації металевої фракції наведені на рис. 2.5. На відміну від випадку відсутності загасання, де є дві гілки локалізованих плазмонних резонансів, тут спостерігається одна гілка, причому частота ППР зростає зі збільшенням об'ємного вмісту включень. Для будь-якого частота ППР для композиту з циліндрами Ag більше, оскільки частота об'ємних плазмонів для Ag більше, ніж для Cu.

Висновки

Отримано частотні залежності ефективної діелектричної функції нанокompозиту з хаотично орієнтованими металевими циліндрами в разі малої концентрації включень. Досліджено поширюються квант-поляритони і локалізовані плазмони на кордоні розділу «нанокompозит - повітря», виведені співвідношення для частот ППР і хвильових чисел квант-поляритонів.

Встановлено факт існування заборонених зон - частотних інтервалів, в яких відсутні поширюються по поверхні композиту електромагнітні хвилі. Ці заборонені зони розширюються зі збільшенням вмісту металевої фракції. Крім того, ширина заборонених зон істотно залежить від матеріалу циліндричних включень і визначається частотою об'ємних плазмонів і внеском кристалічної решітки в діелектричну функцію конкретних металевих матеріалів.

Продемонстровано істотна відмінність в локалізації енергії електромагнітного поля на кордоні «нанокompозит - повітря» при відсутності і наявності загасання. Так, у разі, коли загасанням можна знехтувати, є дві гілки ППР з істотно різними частотами, причому друга гілка зникає, коли об'ємний вміст металевої фракції прагне до нуля. У разі ж враховуючи загасання теорія передбачає існування тільки однієї гілки.

Зі збільшенням вмісту металевої фракції збільшується уявна частина ефективної діелектричної функції, що пов'язано з посиленням поглинання електромагнітного випромінювання в даному випадку.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. **Ning, H.** Composites and Their Properties [Text] / H. Ning. – Chiba, Japan: Chiba University, 2012. – 520 p.
2. **Pelton, M.** Introduction to Metal-Nanoparticle Plasmonics [Text] / M. Pelton, G. W. Bryant. – A Valley, ScienceWise Publishing Co-Publication, 2013. – 295p.
3. **Sancho-Parramon, J.** On the dielectric function tuning of random metal-dielectric nanocomposites for metamaterial applications [Text] / J. Sancho-Parramon, V. Janicki, H. Zorc. // Optics Express. – 2010. – V. 18. – No 26. – P. 26915–26928.
4. **Tuncer, E.** Dielectric mixtures-importance and theoretical approaches, IEEE Electrical [Text] / E. Tuncer. // Insulation Magazine. – 2013. – V. 29. – P. 49–58.
5. **Campione, S.** Effective medium representation and complex modes in 3D periodic metamaterials made of cubic resonators with large permittivity at mid-infrared frequencies [Text] / S. Campione, M. B. Sinclair, F. Capolino. – Photon. Nanostr. Fundam. Appl, 2003. – V. 11. – No. 4. – P. 423-435.
6. **Tyboroski, M.** An effective medium study of surface plasmon polaritons in nanostructured gratings using attenuated total reflection [Text] / M. Tyboroski, N. Anderson, R. Camley. // J. Appl. Phys. – 2014. – V. 106. – P. 124314.
7. **Markel, V. A.** Introduction to the Maxwell Garnett approximation: tutorial [Text] / V. A. Markel. // Journal of the Optical Society of America A. – 2016. – V. 33. – No 7. – P. 1244-1256.
8. **Korotun, A.V.** Optical Absorption of a Composite Based on Bimetallic Nanoparticles. Classical Approach [Text] / A.V. Korotun, A.A. Koval', V.I. Reva, I.N. Titov. // Physics of Metals and Metallography. – 2019. – V. 120. – No 11. – P 1040–1046.

9. **Krishchenko, M.** Resonant optical phenomena in heterogeneous plasmon nanostructures of noble metals: a review [Text] / M. Krishchenko, É. G. Manoïlov, S. A. Kravchenko, B. A. Snopok. // Theoretical and Experimental Chemistry. – May 2020. – v. 56. – No 2. – p. 67–110.
10. **Prokopchuk, I.** Dielectric Permittivity Model for Polymer–Filler Composite Materials by the Example of Ni- and Graphite-Filled Composites for High-Frequency Absorbing Coatings [Text] / Prokopchuk, I. Zozulia, Y. Didenko, D. Tatarchuk, H. Heuer, Y. Poplavko. // Surface Engineering for Energy Harvesting, Conversion, and Storage. – 2021. – V. 11. – P. 172.
11. **Shabaninezhad, M.** Theoretical investigation of optical properties of embedded plasmonic nanoparticles [Text] / M. Shabaninezhad, A. Kayani G. Ramakrishna. // Chemical Physics. – 2021. – V. 541. – P. 111044.
12. **Garnett, J.C.M.** Colours in metal glasses and in metallic films [Text] / J.C.M. Garnett. – Philos. Trans. R. Soc. Lond, 1904. – V. 203. – P. 385–420.
13. **Bruggeman, D.A.G.** The calculation of various physical constants of heterogeneous substances. The dielectric constants and conductivities of mixtures composed of isotropic substances [Text] / D.A.G. Bruggeman. – Ann. Phys. (Leipzig), 1935. – V. 24. – No. 2. – P. 636–664.
14. **Wiener, O.** Die theorie des mischkorpers fur das feld der stationaren stromung [Text] / O. Wiener. – Abh. Math. Phys. Kl. Saechs. Akad. Wiss. Leipzig, 1912. – V. 32. – P. 509–604.
15. **Bergman, D. J.** Bounds for the complex dielectric constant of a two-component composite material [Text] / D. J. Bergman. – Phys. Rev. B, 1981. – V. 23. – P. 3058–3065.
16. **Hashin, Z.** A variation approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials [Text] / Z. Hashin S. Shtrikman. // JAP. – 1962. – V. 33. – No 10. – P. 3125–3131.
17. **Milton G. W.** Bounds on the complex permittivity of a two-component composite material [Text] / G. W. Milton. // JAP. – 1981. – V. 52. – P. 5286–5293.