



Національний університет «Запорізька політехніка»

Кафедра інформаційної безпеки та наноелектроніки

МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

Оптичні властивості метал-графенових нанострижнів

Виконав:
ст. групи РТ-312м

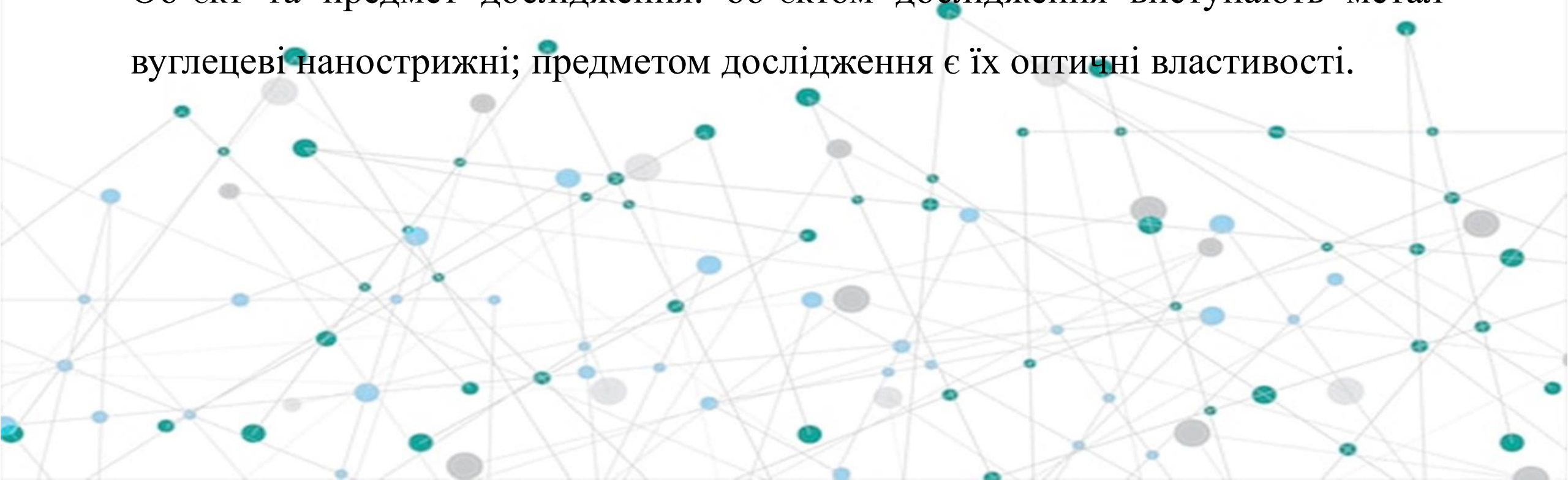
Керівник:
професор, в.о. зав.
кафедри ІБтаН

Олександр СУВОРОВ

Андрій КОРОТУН

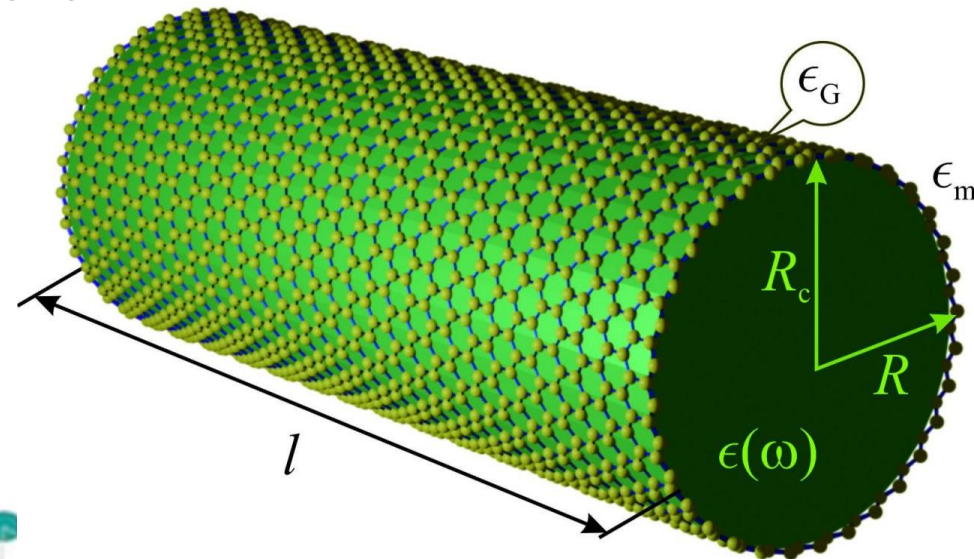
Мета та актуальність дослідження

- Мета роботи: дослідження частотної залежності поляризованості і перерізів поглинання і розсіювання композитних нанострижнів.
- Об'єкт та предмет дослідження: об'єктом дослідження виступають метал-вуглецеві нанострижні; предметом дослідження є їх оптичні властивості.



Постановка задачі

Розглянемо метал-графеновий наночиліндр із довжиною l , товщиною графенової оболонки n , де n – товщина монотомного шару графена; R_m – радіус металевого осердя; R – загальний радіус наночиліндра), що знаходиться в середовищі з діелектричною проникністю ϵ_m



Знаючи компоненти тензора поляризованості, можна розрахувати такі спостережувані характеристики як перерізи поглинання і розсіювання

$$C_{@}^{\text{abs}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_m} \text{Im} \left(\frac{2}{3} \alpha_{@}^{\perp} + \frac{1}{3} \alpha_{@}^{\parallel} \right)$$

$$C_{@}^{\text{sca}} = \frac{1}{6\pi} \frac{\omega^4}{c^4} \epsilon_m^2 \left(\frac{2}{3} |\alpha_{@}^{\perp}|^2 + \frac{1}{3} |\alpha_{@}^{\parallel}|^2 \right)$$

Вирази для поперечної (поздовжньої) компонент мають вигляд

$$\alpha_{@}^{\perp(\parallel)}(\omega) = V \frac{\epsilon_{@}^{\perp(\parallel)}(\omega) - \epsilon_m}{\epsilon_m + \mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(2)} [\epsilon_{@}^{\perp(\parallel)}(\omega) - \epsilon_m]}$$

Еквівалентна діелектрична проникність двошарового еліпсоїда

$$\epsilon_{@}^{\perp(\parallel)}(\omega) = \epsilon_G^{\perp(\parallel)} \left\{ 1 + \frac{\beta_c (\epsilon_c^{\perp(\parallel)} - \epsilon_G^{\perp(\parallel)})}{\epsilon_G^{\perp(\parallel)} + (\epsilon_c^{\perp(\parallel)} - \epsilon_G^{\perp(\parallel)}) (\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)} - \beta_c \mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(2)})} \right\}$$

Постановка задачі

Оптичні властивості металевого осердя описуються теорією Друде

$$\epsilon^{\perp(\parallel)}(\omega) = \epsilon^{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_{\text{eff}}^{\perp(\parallel)})}$$

Поперечна (поздовжня) ефективна швидкість релаксації

$$\gamma_{\text{eff}}^{\perp(\parallel)} = \gamma_{\text{bulk}} + \gamma_s^{\perp(\parallel)} + \gamma_{\text{rad}}^{\perp(\parallel)}$$

Швидкість поверхнової релаксації

$$\gamma_s^{\perp(\parallel)} = \frac{9}{16} \frac{\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)}}{\epsilon_m + \mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)}(1 - \epsilon_m)} v_{s,\perp} \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \mathcal{F}_{\perp(\parallel)}(\varrho_{\text{eff}}^{(1)})$$

Швидкість радіоційного загасання

$$\gamma_{\text{rad}}^{\perp(\parallel)} = \frac{V_c}{8\pi} \frac{\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)}}{\sqrt{\epsilon_m \left[\epsilon^{\infty} + \left(\frac{1}{\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)}} - 1 \right) \epsilon_m \right]}} v_{s,\perp} \left(\frac{\omega_p}{c} \right)^3 \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \mathcal{F}_{\perp(\parallel)}(\varrho_{\text{eff}}^{(1)})$$

Розмірно-залежні функції

$$\mathcal{F}_{\perp}(\varrho_{\text{eff}}^{(1)}) = \left(1 - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2} \right)^{-\frac{3}{2}} \times \left\{ \varrho_{\text{eff}}^{(1)} \left(\frac{3}{2} - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2} \right) \sqrt{1 - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2}} + \left(\frac{3}{4} - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2} \right) \ln \left(\varrho_{\text{eff}}^{(1)} + \sqrt{1 - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2}} \right) \right\};$$

$$\mathcal{F}_{\parallel}(\varrho_{\text{eff}}^{(1)}) = \left(1 - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2} \right)^{-\frac{3}{2}} \left\{ \frac{\pi}{2} - \arcsin \varrho_{\text{eff}}^{(1)} + \varrho_{\text{eff}}^{(1)} \left(1 - 2\varrho_{\text{eff}}^{(1)2} \right) \sqrt{1 - \varrho_{\text{eff}}^{(1)2}} \right\}$$

Постановка задачі

Дійсна та уявна частини поздовжньої компоненти діелектричного тензора

$$\text{Re}\epsilon_G^{\parallel}(\omega) = 1 - \frac{R_{(m,n)}}{l} \frac{\omega_{p,G}^2}{\omega^2 + \gamma_G^2}$$

$$\text{Im}\epsilon_G^{\parallel}(\omega) = \frac{R_{(m,n)}}{l} \frac{\omega_{p,G}^2 \gamma_G}{\omega(\omega^2 + \gamma_G^2)} \longrightarrow R_{(m,n)} = b\sqrt{3}\sqrt{m^2 + mn + n^2}/2\pi$$

$$\omega_{p,G}^2 = \frac{2e^2 v_{F,G}}{\pi^2 \epsilon_0 \hbar R_{(m,n)}}$$

Дійсна та уявна частини поперечної компоненти діелектричного тензора

$$\text{Re}\epsilon_G^{\perp}(\omega) = 1 + \frac{R_{(m,n)}\omega_{p,G}^2}{4bv_{F,G}} \left(\frac{1}{\omega^2 + \gamma_G^2} \mathcal{J}_1 + \frac{2}{\hbar} \mathcal{J}_3 \right)$$

$$\text{Im}\epsilon_G^{\perp}(\omega) = -\frac{R_{(m,n)}\omega_{p,G}^2}{4bv_{F,G}} \frac{\gamma_G}{\omega} \left(\frac{1}{\omega^2 + \gamma_G^2} \mathcal{J}_1 + \frac{2\omega^2}{\hbar} \mathcal{J}_2 \right)$$

Постановка задачі

Тип «zigzag»

$$\varepsilon_c(p_z, s) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{3bp_z}{2\hbar} \cos \frac{\pi m}{s} + 4 \cos^2 \frac{\pi m}{s}}$$

$$\mathcal{R}_{cv}(p_z, s) = \frac{b\gamma_0^2}{2\varepsilon_c^2(p_z, s)} \left(1 + \cos \frac{3bp_z}{2\hbar} \cos \frac{\pi m}{s} - 2 \cos^2 \frac{\pi m}{s} \right)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial p_z} = -\frac{3b\gamma_0}{\hbar} \frac{\sin \frac{3bp_z}{2\hbar} \cos \frac{\pi m}{s}}{\sqrt{1 + 4 \cos \frac{3bp_z}{2\hbar} \cos \frac{\pi m}{s} + 4 \cos^2 \frac{\pi m}{s}}}$$

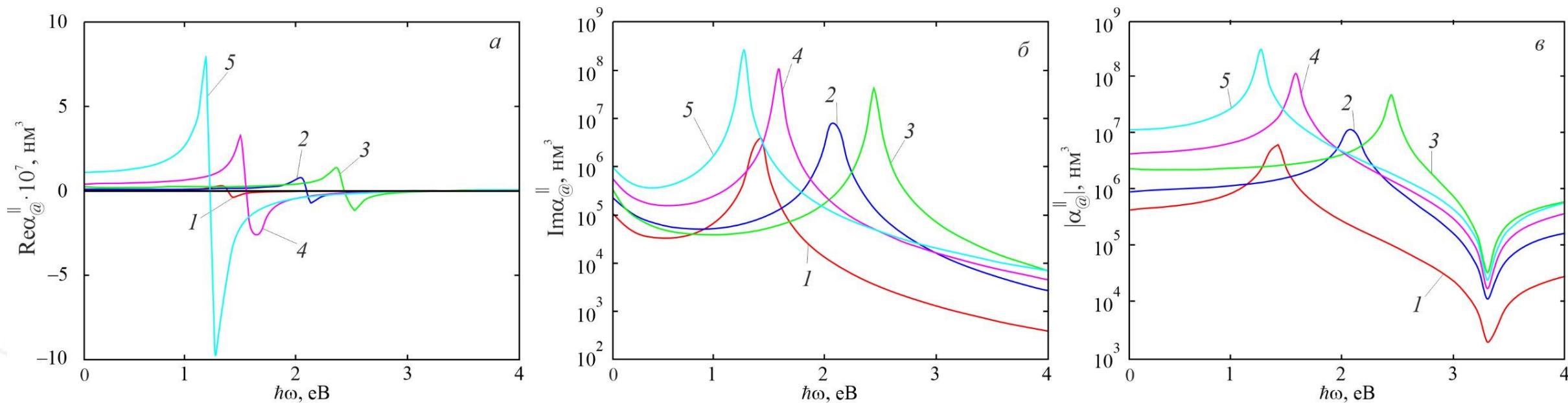
Тип «armchair»

$$\varepsilon_c(p_z, s) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\pi m}{s} \cos \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar} + 4 \cos^2 \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar}}$$

$$\mathcal{R}_{cv}(p_z, s) = \frac{b\gamma_0^2}{2\varepsilon_c^2(p_z, s)} \left(1 + \cos \frac{\pi m}{s} \cos \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar} - 2 \cos^2 \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar} \right)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial p_z} = -\frac{3b\gamma_0}{\hbar} \sin \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar} \frac{\cos \frac{\pi m}{s} + 2 \cos \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar}}{\sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar} \cos \frac{\pi m}{s} + 4 \cos^2 \frac{\sqrt{3}bp_z}{2\hbar}}}$$

Частотні залежності поздовжньої компоненти тензора поляризованості композитних нанострижнів, вкритих ВНТ типу «zigzag»



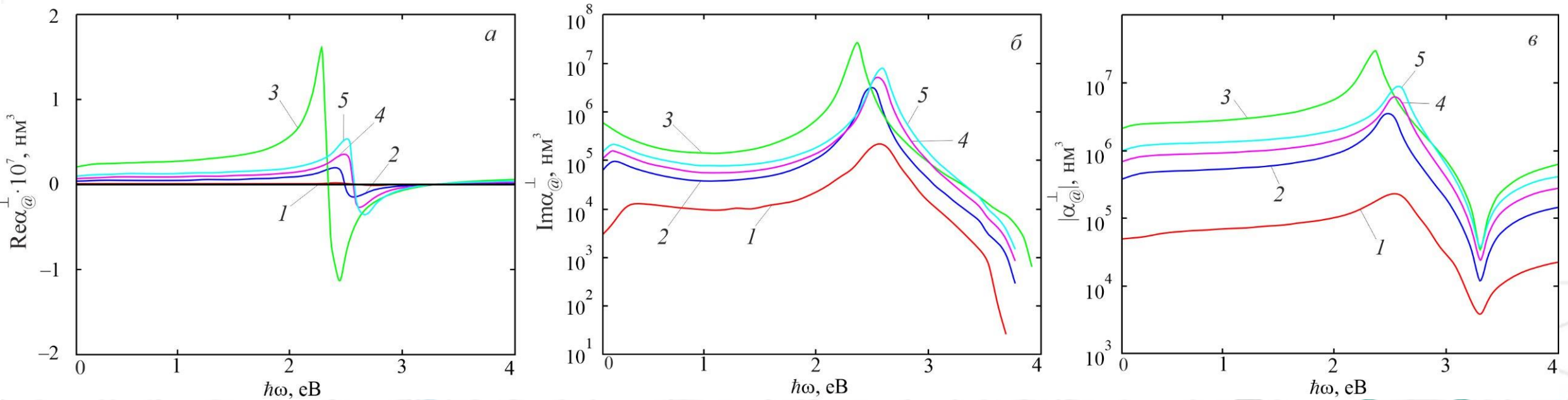
a — дійсна частина; $\rightarrow \rightarrow b$ — уявна частина; $\rightarrow c$ — модуль

1 — $R = 10$ нм, $L = 100$ нм; 2 — $R = 25$ нм, $L = 100$ нм; $\leftarrow$

3 — $R = 50$ нм, $L = 100$ нм; 4 — $R = 10$ нм, $L = 200$ нм; $\leftarrow$

5 — $R = 25$ нм, $L = 200$ нм; 6 — $R = 50$ нм, $L = 100$ нм

Частотні залежності поперечної компоненти тензора поляризованості композитних нанострижнів, вкритих ВНТ типу «zigzag»

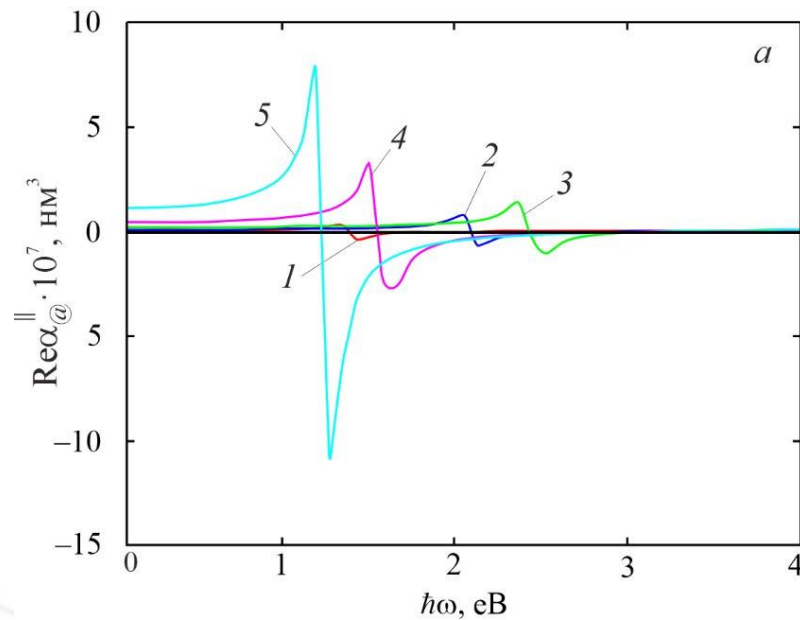


a – дійсна частина;

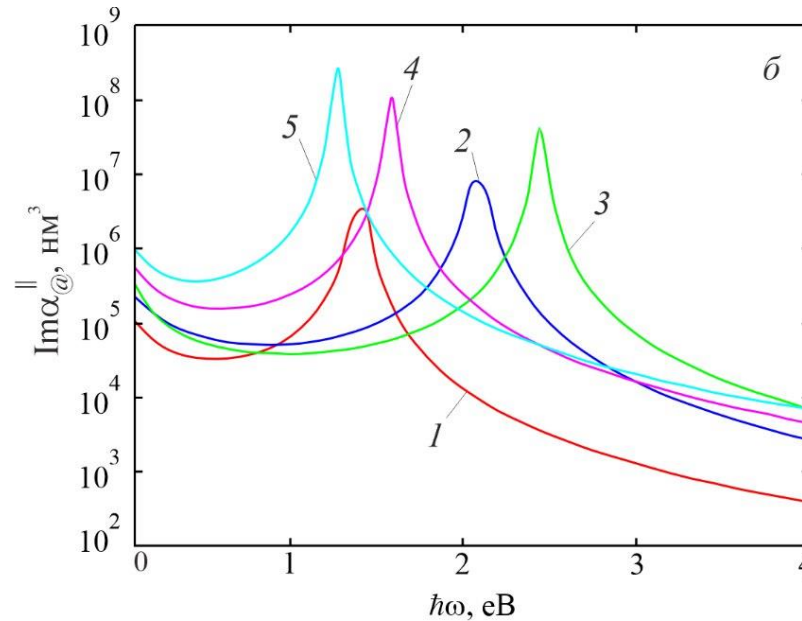
б – уявна частина;

в – модуль

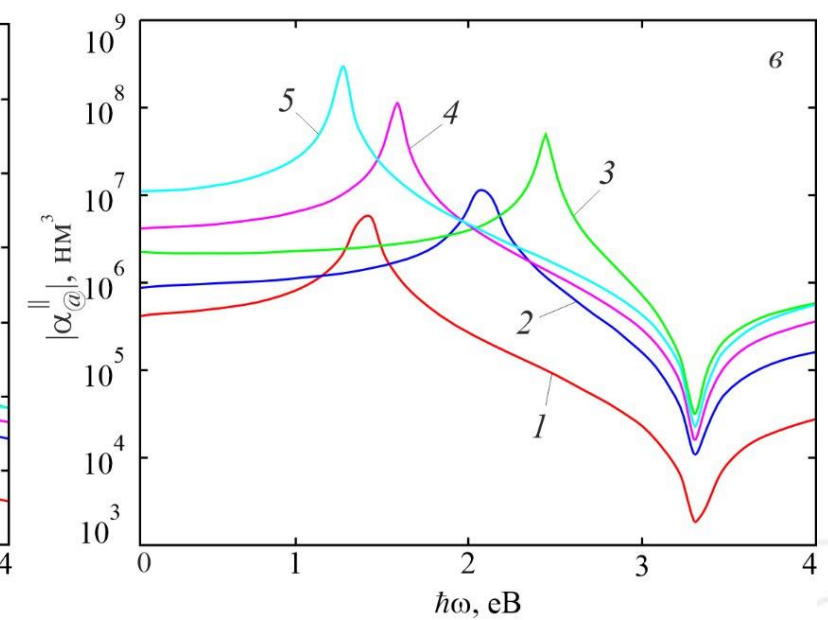
Частотні залежності поздовжньої компоненти тензора поляризованості композитних нанострижнів, вкритих ВНТ типу «armchair»



а) дійсна частина;



б) уявна частина;



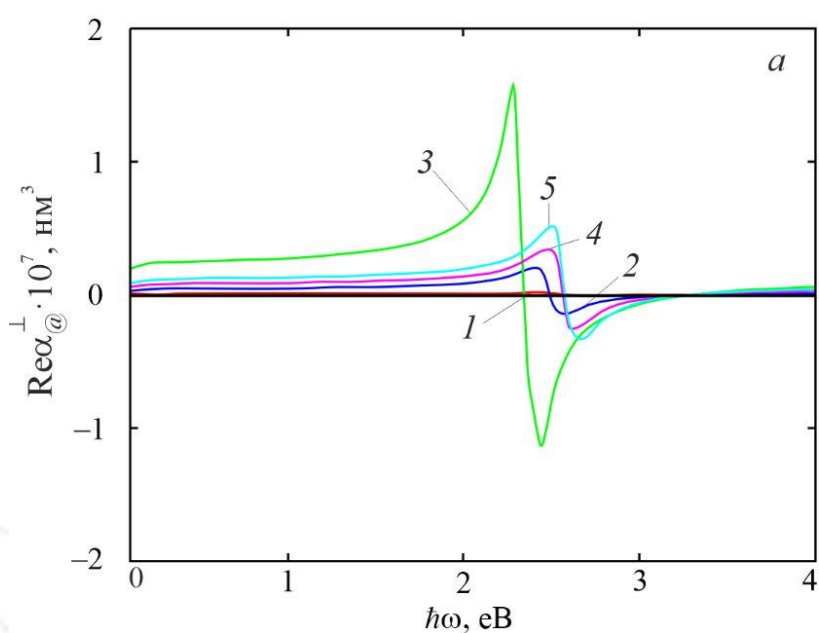
в) модуль

1 — $R = 10$ нм, $L = 100$ нм; 2 — $R = 25$ нм, $L = 100$ нм;

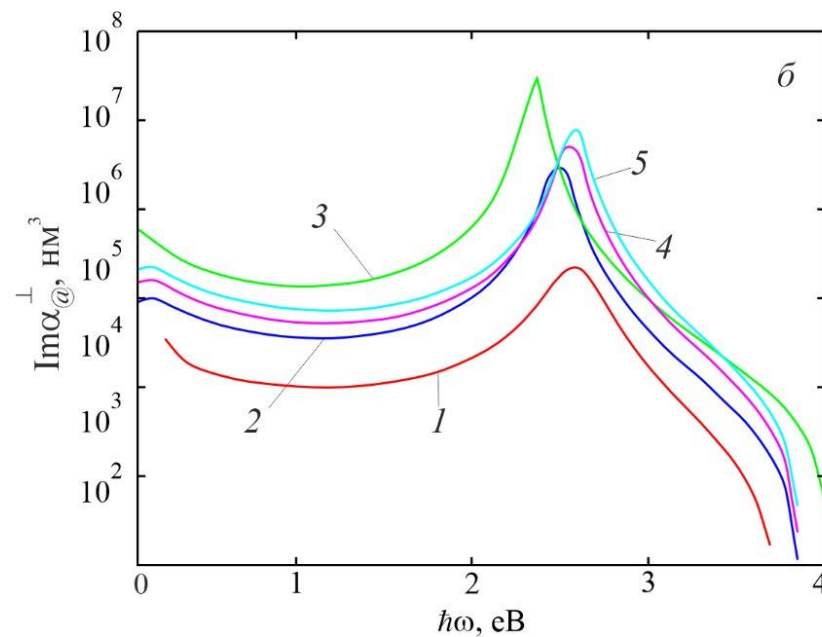
3 — $R = 50$ нм, $L = 100$ нм; 4 — $R = 10$ нм, $L = 200$ нм

5 — $R = 25$ нм, $L = 200$ нм; 6 — $R = 50$ нм, $L = 100$ нм

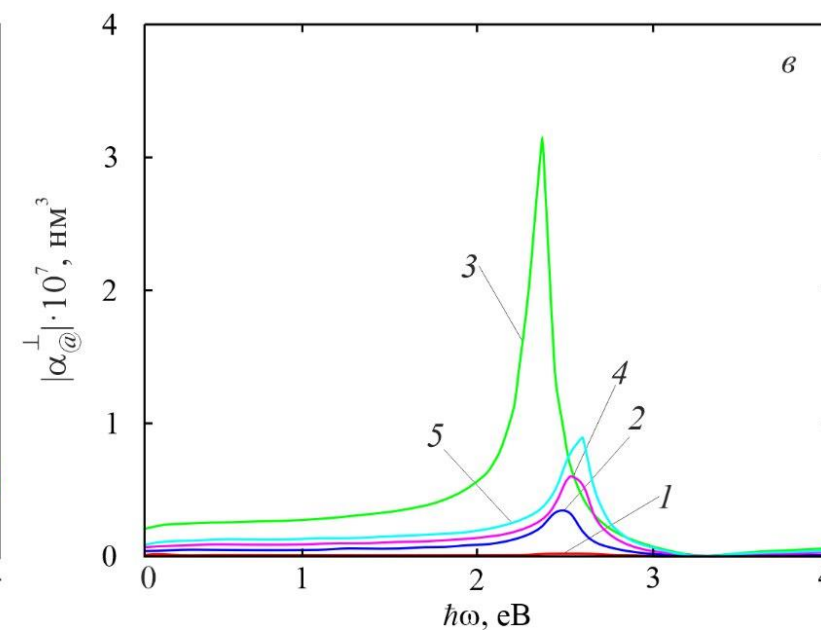
Частотні залежності поперечної компоненти тензора поляризованості композитних нанострижнів, вкритих ВНТ типу «armchair»



а) дійсна частина;

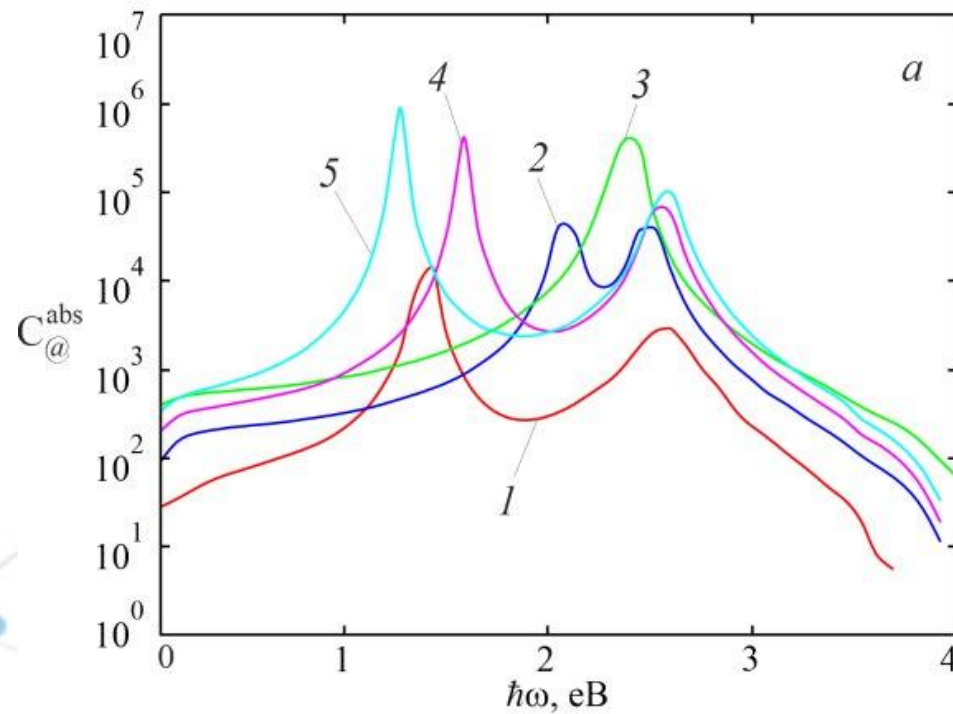


б) уявна частина;

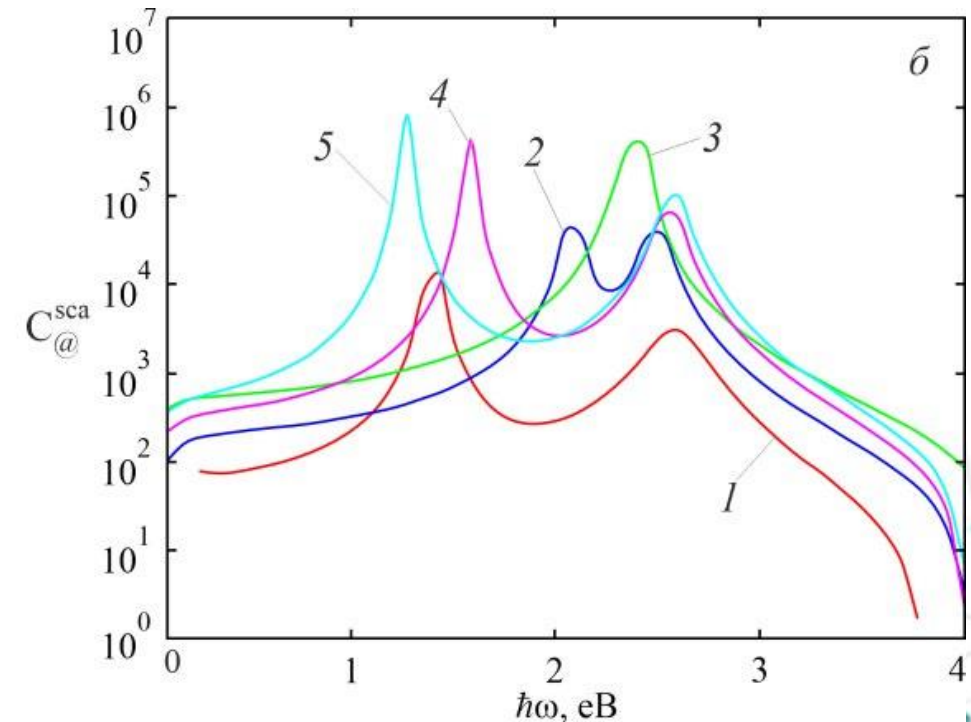


в) модуль

Частотні залежності перерізів композитних нанострижнів, вкритих ВНТ типу «zigzag»

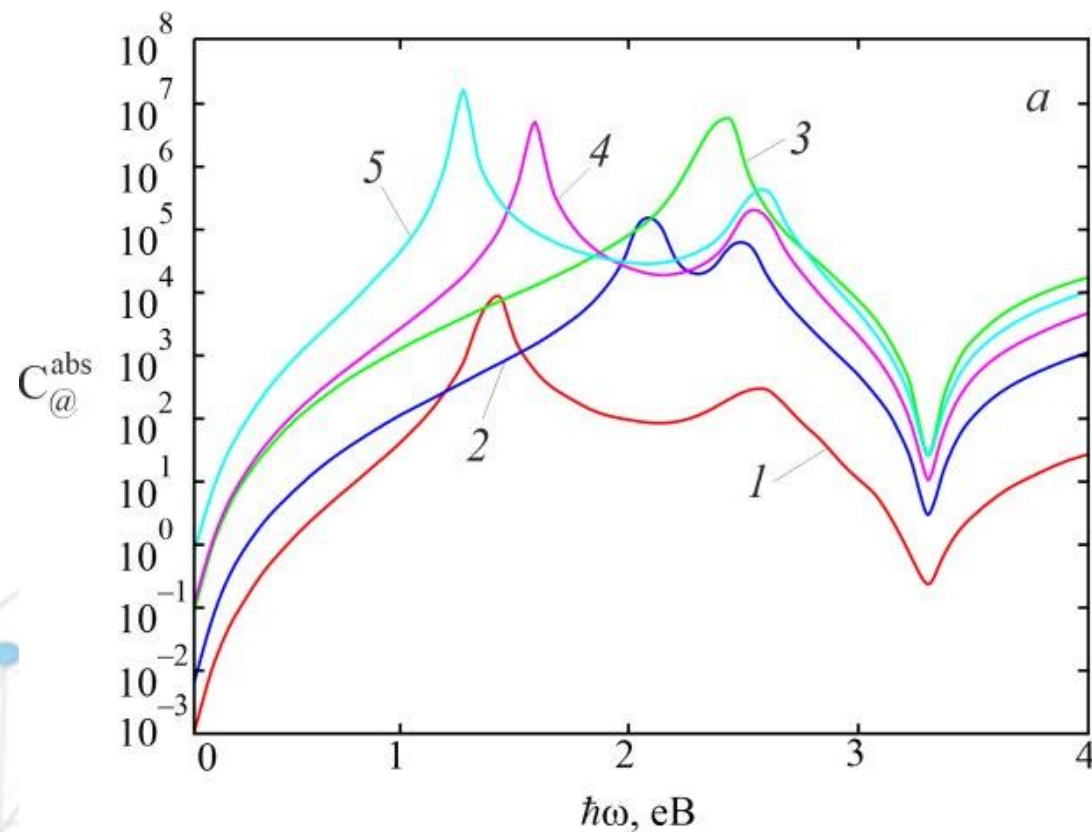


а) переріз поглинання;

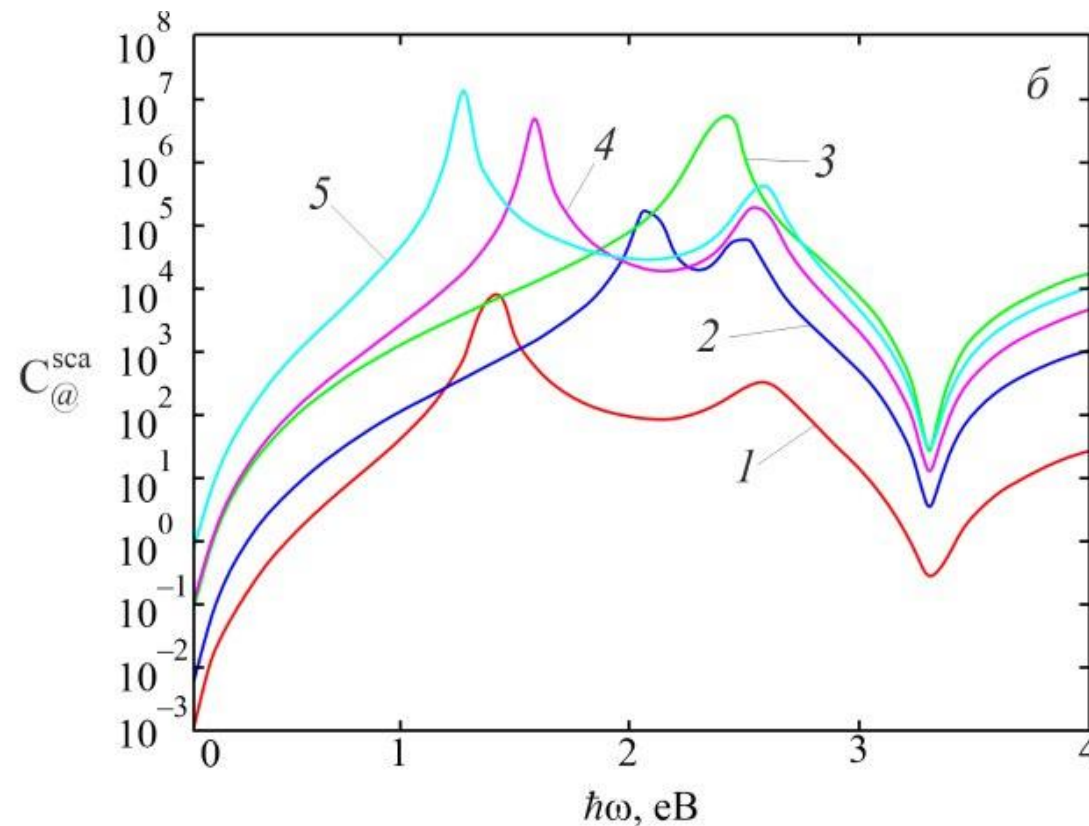


б) переріз розсіювання

Частотні залежності перерізів композитних нанострижнів, вкритих ВНТ типу «armchair»

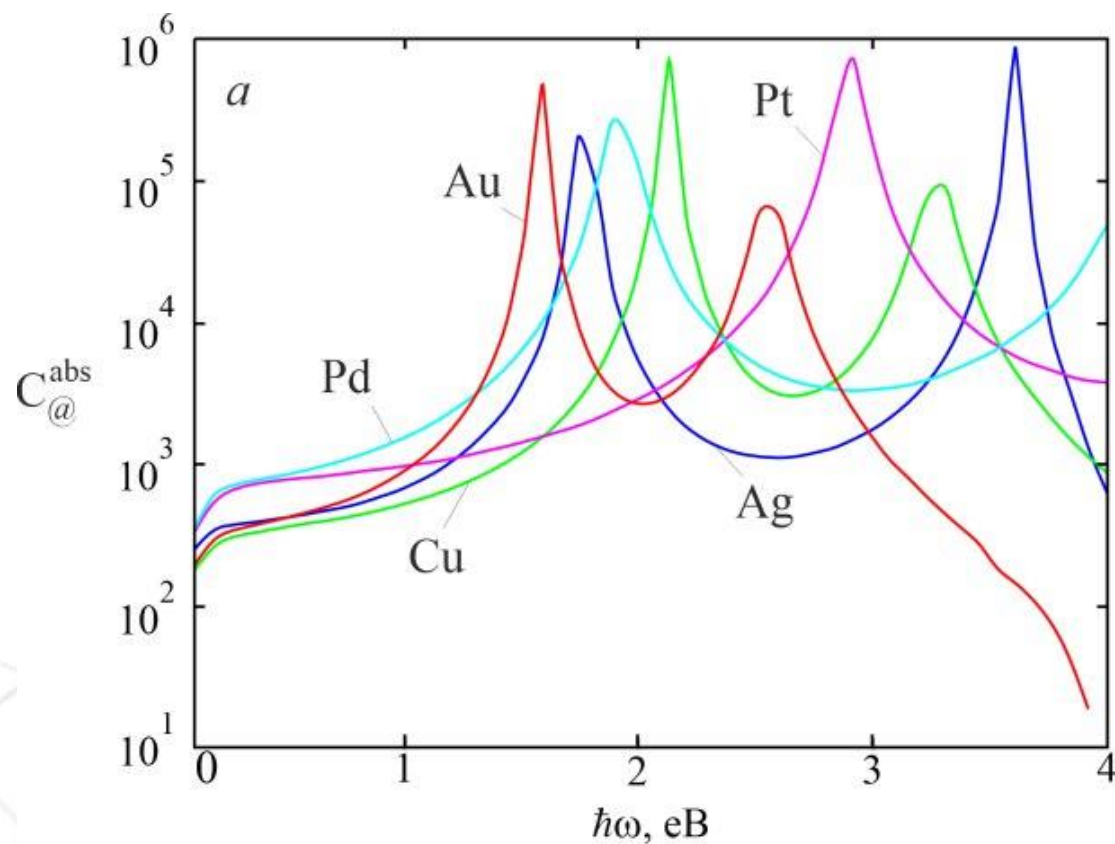


а) переріз поглинання;

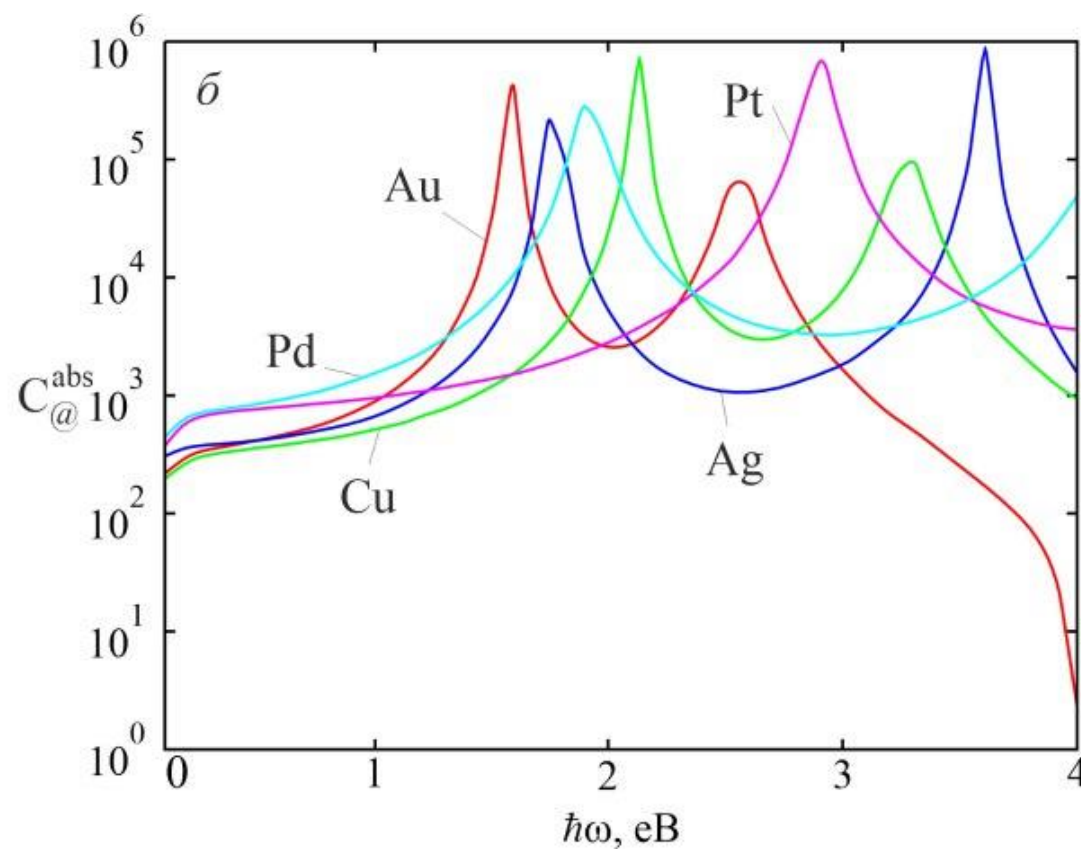


б) переріз розсіювання

Частотні залежності перерізів композитних нанострижнів, вкритих ВНТ різного типу



а) ВНТ типу «zigzag»



б) ВНТ типу «armchair»

Висновки

- Одержано вирази для частотних залежностей діагональних компонент тензора поляризованості та перерізів поглинання і розсіювання для металевих стрижнів із оболонкою, що являє собою одностінну вуглецеву нанотрубку типу «zigzag» або «armchair».
- Встановлено, що максимуми уявної частини поздовжньої компоненти поляризованості за будь-якого типу оболонки можуть знаходитися в широкому спектральному інтервалі в залежності від діаметра і довжини нанострижня (аспектного відношення), тоді як зсуви максимумів уявної частини поперечної компоненти при зміні аспектного відношення є незначними. Така поведінка максимумів подібна випадку монометалевих стрижнів і пов'язана з металевим типом провідності ахіральних ВНТ.

Висновки

- Можливість легкого налаштування частоти поздовжнього поверхневого плазмонного резонансу має наслідком можливість його попадання за деяких значень аспектного відношень у біологічне вікно прозорості, а, отже, робить композитні нанострижні з такими аспектними відношеннями застосовними в біології та медицині.
- Продемонстровано, що криві частотних залежностей перерізів поглинання та розсіювання якісно схожі на відповідні криві для монометалевих стрижнів і мають два максимуми, окрім випадку стрижнів із однаковими діаметром і довжиною.
- Показано, що за деяких аспектних відношень переріз розсіювання на порядок більший за переріз поглинання, що вказує на можливість застосування таких нанострижнів у фотовольтаїці для підвищення радіаційної ефективності та ККД сонячних батарей.