

**Прогнозирование оптических свойств
матричных композитов со сферическими включениями
с металлической оболочкой**

И.В. Лавров

*Национальный исследовательский университет «МИЭТ»,
г. Москва, Россия*

iglavr@mail.ru

Изолированные малые частицы с диэлектрическим ядром и металлической оболочкой характеризуются более сложным поведением при воздействии на них электромагнитным излучением, чем сплошные металлические частицы. Поэтому композитная среда, содержащая большое количество таких частиц, будет иметь новые оптические свойства. При условии малости размеров включений по сравнению с длиной волны электромагнитного излучения оптические характеристики неоднородной среды могут быть оценены с помощью эффективной диэлектрической проницаемости данной среды.

На основе обобщенного приближения эффективного поля выведена формула для вычисления эффективных диэлектрических характеристик матричного композита со сферическими включениями с оболочкой. Формулу можно считать обобщением классической формулы Максвелла – Гарнетта для случая матричной среды с неоднородными сферическими включениями, состоящими из анизотропного ядра и изотропной оболочки. С помощью полученной формулы в диапазоне длин волн 0,282–0,855 мкм рассчитаны частотные зависимости действительной и мнимой частей эффективной диэлектрической проницаемости композита, состоящего из альфа-кварца в качестве матрицы и сферических нановключений с ядром из альфа-кварца и серебряной оболочкой. Зависимости получены при различных относительных объемных долях ядер во включениях и включений в композите. В указанном диапазоне длин волн рассчитаны частотные зависимости коэффициентов преломления и экстинкции данного композита и коэффициенты пропускания и отражения тонкой композитной пленки. Показано, что наличие в матричном композите включений с металлической оболочкой приводит к появлению дополнительного плазмонного резонанса по сравнению с композитом с цельнометаллическими включениями.

Для матричного композита дополнительный плазмонный резонанс проявляется в ультрафиолетовом диапазоне при длине волны

0,33–0,34 мкм и по интенсивности он гораздо слабее основного плазмонного резонанса. Наличие дополнительного плазмонного резонанса приводит к появлению узкой полосы очень слабого пропускания композитной пленки в ультрафиолетовом диапазоне. При фиксированной объемной доле включений в композите увеличение объемных долей ядер в них приводит к смещению основного плазмонного резонанса в сторону больших длин волн и уменьшению его интенсивности.

Ключевые слова: композит; тензор эффективной диэлектрической проницаемости; включение с оболочкой; плазмонный резонанс; приближение Максвелла – Гарнетта; обобщенное приближение эффективного поля.

Для цитирования: Лавров И.В. Прогнозирование оптических свойств матричных композитов со сферическими включениями с металлической оболочкой // Изв. вузов. Электроника. – 2018. – Т. 23. – № 2. – С. 113–123. DOI: 10.24151/1561-5405-2018-23-2-113-123

Forecasting of Optical Properties of Matrix Composites with Spherical Inclusions with a Metal Shell

I.V. Lavrov

National Research University of Electronic Technology, Moscow, Russia

iglavr@mail.ru

Isolated small particles with a dielectric nucleus and metal shell are characterized by more complex behavior under effect of electromagnetic radiation upon them, than solid metal particles. Therefore, the composite medium, containing a big number of such particles, will have more interesting optical properties compared to a composite with solid metal inclusions. On condition of small sizes of the inclusions compared to the electromagnetic radiation wave length the optical characteristics of non-homogeneous medium can be estimated using the effective dielectric permeability of the given medium.

Based on the generalized approach of the effective field the formula for calculating the effective dielectric characteristics of the matrix composite with the spherical inclusions with the shell has been derived. The given formula can be considered as a generalization of the classical Maxwell-Garnet formula for a case of the matrix medium with non-homogeneous spherical inclusions, consisting of an anisotropic nucleus and an isotropic shell. Using this formula in the range of wave length 0.282–0.855 μm the frequency dependencies of real and imaginary parts of effective dielectric permeability of the composite, consisting of alpha-quartz as a matrix and spherical nano-inclusions with a nucleus from alpha-quartz and silver shell, at various relative volume parts in the composite have been calculated. In the indicated range of the wave lengths, also, the frequency dependencies of the refraction coefficients and extinction of the given composite and the transmission and refraction coefficients of the composite film have been calculated. It has been shown that presence in the composite of the inclusions with a metal shell results in appearance of an additional plasmon resonance compared to the composite with the whole metal inclusions.

For the given composite an additional plasmon resonance becomes apparent in the ultra-violet region at the wave length of 0.33–0.34 μm and from the

point of intensity is much weaker than the main plasmon resonance. The availability of an additional plasmon resonance leads to appearance of a narrow band of very weak transmission of the composite film in the ultra-violet region. At the fixed volume part of inclusions in the composite and increase of the nuclei volume parts in the inclusions results in the shift of the main Plasmon resonance to the side of big lengths of waves and in its intensity decrease.

Keywords: composite; effective permittivity tensor; coated inclusion; Plasmon resonance; Maxwell-Garnett approximation; generalized effective field approximation.

For citation: Lavrov I.V. Forecasting of optical properties of matrix composites with spherical inclusions with a metal shell // Proc. of Universities. Electronics. – 2018. – Vol. 23. – № 2. – P. 113–123. DOI: 10.24151/1561-5405-2018-23-2-113-123

Введение. Малые частицы, представляющие собой диэлектрическое ядро в металлической оболочке, обнаруживают более сложное поведение при воздействии электромагнитным излучением, чем однородные металлические частицы. В работах [1, 2] в квазистатическом приближении исследовано поведение изолированных сферической частицы в оболочке и эллипсоидальной частицы в оболочке при воздействии на них электромагнитным полем. Показано, что у них появляются дополнительные плазмонные резонансы по сравнению с однородными частицами. В [3] исследовано поведение изолированного наносфероида с металлической оболочке в электромагнитном поле, а также коллективное поведение таких частиц, погруженных в диэлектрическую среду. При этом используется приближение, называемое обобщением классической формулы Максвелла – Гарнетта [4] для среды с одинаково ориентированными эллипсоидами. Данное приближение содержит в себе противоречие, поскольку результатом существенным образом зависит от формы репрезентативного объема среды, для которого вычисляется суммарный дипольный момент.

В настоящей работе на основе обобщенного приближения эффективного поля [5] выводится формула для оценки эффективных диэлектрических характеристик матричного композита со сферическими включениями с оболочкой. Формула используется для прогнозирования оптических свойств композита с матрицей из альфа-кварца и нановключениями с ядрами из альфа-кварца и серебряной оболочкой. Вычисляются частотные зависимости коэффициентов пропускания, отражения и поглощения тонкой композитной пленки.

Постановка задачи и ее решение в обобщенном приближении эффективного поля. Рассмотрим образец статистически однородного композиционного материала объемом V , к границе S которого приложено постоянное электрическое поле напряженностью \mathbf{E}_0 . Композит считается состоящим из однородной диэлектрической матрицы с погруженными в нее неоднородными включениями, представляющими собой однородные шары (ядра) в однородных оболочках, внешние и внутренние границы которых – сферы. Тензоры диэлектрической проницаемости материалов, составляющих матрицу, оболочки и ядра включений, считаются известными и равными соответственно $\epsilon_m \mathbf{I}$, $\epsilon_1 \mathbf{I}$ и ϵ_2 . Предполагается, что по материальным свойствам все включения одинаковы, а матрица и оболочки всех включений изотропны. Тензор ϵ^* эффективных диэлектрических характеристик образца данного композита определяется как оператор, связывающий средние по объему образца векторы электрической индукции и напряженности электрического поля:

$$\langle \mathbf{D} \rangle = \boldsymbol{\varepsilon}^* \langle \mathbf{E} \rangle. \quad (1)$$

Для вычисления $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ рассматривается краевая задача для электростатического потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ в данной среде ($\mathbf{E} = -\nabla\varphi$):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r}) = 0, \quad \varphi|_S = -(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$ – локальный тензор диэлектрической проницаемости композита, являющийся случайной кусочно-постоянной функцией точки.

Аналогичная задача рассматривается для однородного тела сравнения, имеющего такие же размеры и форму, как и у образца неоднородной среды [6–9]:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^c(\mathbf{r}) \nabla \varphi^c(\mathbf{r}) = 0, \quad \varphi^c|_S = -(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}). \quad (3)$$

Здесь индексом «с» отмечены величины, относящиеся к телу сравнения.

Введем обозначения для разностей между величинами, относящихся к задачам (2) и (3):

$$\varphi'(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \varphi^c(\mathbf{r}), \quad \boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^c.$$

Тогда, вычитая (3) из (2), получаем краевую задачу:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^c \nabla \varphi'(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r}), \quad \varphi'|_S = 0. \quad (4)$$

Введем функцию Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ следующими условиями:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^c \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1), \quad G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)|_{\mathbf{r}_1 \in S} = 0.$$

Тогда решение задачи (4) в пределе при $V \rightarrow \infty$ можно записать в виде [9]

$$\varphi'(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) (\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r}_1) \nabla \varphi(\mathbf{r}_1)) d\mathbf{r}_1. \quad (5)$$

Преобразуя (5), получаем выражение для локальной напряженности поля:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^c + \mathbf{Q}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^c)\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ – интегральный оператор, действие которого определяется формулой

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r})\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \int \nabla^1 \otimes \nabla^1 G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \mathbf{f}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1.$$

Здесь $\nabla^1 \otimes \nabla^1 G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})$ – тензор вторых производных функции Грина. Верхний индекс «1» у дифференциального оператора Гамильтона означает дифференцирование по \mathbf{r}_1 .

Поскольку матрицу можно разбить на отдельные однородные зерна, то весь образец композита будем считать состоящим из конечного числа включений двух видов. К первому виду относятся зерна, составляющие матрицу, ко второму – собственно неоднородные включения, окруженные включениями первого вида. Пусть текущая точка \mathbf{r} лежит внутри k -го включения. Разложим оператор $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ на внешнюю и внутреннюю составляющие по отношению к k -му включению:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_k^{ext}(\mathbf{r}) + \mathbf{Q}_k^{int}(\mathbf{r}).$$

Тогда (6) примет вид

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^c + \mathbf{Q}_k^{ext}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^c)\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{Q}_k^{int}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^c)\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in V_k, \quad (7)$$

где V_k – объем k -го включения.

Первые два члена в (7) можно назвать напряженностью эффективного поля в данной точке k -го включения, которое формируется в результате приложения к образцу композита внешнего поля и наличия в образце других включений:

$$\mathbf{E}_k^{eff}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^c + \mathbf{Q}_k^{ext}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^c)\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in V_k.$$

В качестве первого предположения примем, что в силу статистической однородности материала и малости каждого включения по сравнению со всем образцом среднее эффективное поле в каждом включении и среднее эффективное поле в образце примерно равны:

$$\langle \mathbf{E}^{eff} \rangle_{V_k} \approx \langle \mathbf{E}^{eff} \rangle. \quad (8)$$

После вычисления на основе (7) средних напряженностей электрического поля в оболочке и ядре k -го включения и ряда дальнейших преобразований с учетом (8) для тензора эффективной диэлектрической проницаемости образца композита получим выражение [5]

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \langle (f_1 \boldsymbol{\varepsilon}_1 \boldsymbol{\lambda}_{12} + f_2 \boldsymbol{\varepsilon}_2) \boldsymbol{\lambda}_{20} \rangle \langle (f_1 \boldsymbol{\lambda}_{12} + f_2 \mathbf{I}) \boldsymbol{\lambda}_{20} \rangle^{-1}, \quad (9)$$

где f_1, f_2 – относительные объемные доли оболочки и ядра в конкретном включении; $\boldsymbol{\lambda}_{20}$ – тензорный оператор, имеющий для k -го включения вид

$$\boldsymbol{\lambda}_{20,k} = [f_{1k}(\mathbf{I} - \mathbf{g}_{1k}(\boldsymbol{\varepsilon}_{1k} - \boldsymbol{\varepsilon}^c))\boldsymbol{\lambda}_{12,k} + f_{2k}(\mathbf{I} - \mathbf{g}_{1k}(\boldsymbol{\varepsilon}_{2k} - \boldsymbol{\varepsilon}^c))]^{-1}. \quad (10)$$

Здесь $\boldsymbol{\varepsilon}_{1k}, \boldsymbol{\varepsilon}_{2k}$ – тензоры диэлектрической проницаемости оболочки и ядра k -го включения соответственно;

$$\mathbf{g}_{1k} = \int_{V_k} \nabla^1 \otimes \nabla^1 G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{V_k} \nabla \otimes \nabla G(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_1 \in V_k, -$$

тензор, не зависящий от выбора точки \mathbf{r}_1 внутри включения [10]; $\boldsymbol{\lambda}_{12,k}$ – тензорный оператор, связывающий средние напряженности поля в оболочке и ядре k -го включения: $\langle \mathbf{E} \rangle_{1k} = \boldsymbol{\lambda}_{12,k} \langle \mathbf{E} \rangle_{2k}$.

Усреднение в (9) проводится по всем включениям образца, в том числе по частицам, составляющим матрицу. Для практического вычисления $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ по формуле (9) требуется знание вида оператора $\boldsymbol{\lambda}_{12}$ для каждого из включений образца, что представляет собой значительную сложность ввиду огромного количества включений и их взаимного влияния.

В качестве второго предположения примем, что средние напряженности поля в оболочке и ядре каждого включения связаны между собой так же, как и в изолированном включении с такими же параметрами в бесконечной среде сравнения с однородным приложенным полем. Применим полученный результат к рассматриваемому ком-

позиту, взяв в качестве среды сравнения матрицу: $\boldsymbol{\varepsilon}^c = \varepsilon_m \mathbf{I}$. Тогда тензорные операторы $\boldsymbol{\lambda}_{12}$, $\boldsymbol{\lambda}_{20}$ и тензор \mathbf{g}_1 для каждого включения с оболочкой будут иметь вид [5]

$$\boldsymbol{\lambda}_{12,k} = (3\varepsilon_1)^{-1}(2\varepsilon_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_2), \quad \mathbf{g}_{1,k} = -(3\varepsilon_m)^{-1} \mathbf{I}, \quad (11)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_{20,k} = 9\varepsilon_m \varepsilon_1 [(2\varepsilon_m + \varepsilon_1)(2\varepsilon_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_2) + 2f_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)(\boldsymbol{\varepsilon}_2 - \varepsilon_1 \mathbf{I})]^{-1}. \quad (12)$$

Матрицу также можно считать состоящей из включений, но без оболочки. Операторы $\boldsymbol{\lambda}_{12}$ и $\boldsymbol{\lambda}_{20}$ для матрицы имеют вид единичного тензора:

$$\boldsymbol{\lambda}_{12,m} = \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\lambda}_{20,m} = \mathbf{I}. \quad (13)$$

Подставляя (11), (12), (13) в (10), получаем искомое выражение:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}^* = & \left[3^{-1}(1-f) \mathbf{I} + f \left\langle \varepsilon_1 (2\varepsilon_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_2 + 2f_2(\boldsymbol{\varepsilon}_2 - \varepsilon_1 \mathbf{I})) \times \right. \right. \\ & \times \left. \left. [(2\varepsilon_m + \varepsilon_1)(2\varepsilon_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_2) + 2f_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)(\boldsymbol{\varepsilon}_2 - \varepsilon_1 \mathbf{I})]^{-1} \right\rangle \right] \times \\ & \times \left[(3\varepsilon_m)^{-1}(1-f) \mathbf{I} + f \left\langle (2\varepsilon_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_2 - f_2(\boldsymbol{\varepsilon}_2 - \varepsilon_1 \mathbf{I})) \times \right. \right. \\ & \times \left. \left. [(2\varepsilon_m + \varepsilon_1)(2\varepsilon_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_2) + 2f_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)(\boldsymbol{\varepsilon}_2 - \varepsilon_1 \mathbf{I})]^{-1} \right\rangle \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (14)$$

где f – полная объемная доля всех включений с оболочкой в среде. Угловые скобки означают усреднение по всем включениям с оболочкой. Если все включения однотипные по размеру, структуре и свойствам материалов, то усреднение проводится по ориентациям кристаллографических осей их ядер.

Применение полученного результата для прогнозирования оптических свойств матричного композита с включениями с металлической оболочкой. Для оценки оптических характеристик матричного композита с металлическими включениями при условии, что размеры включений и среднее расстояние между соседними из них намного меньше длины волны электромагнитного излучения, успешно применяются классическое приближение Максвелла – Гарнетта [4] для композита со сферическими изотропными включениями и его обобщения при более сложной структуре материала. В [11] данный подход обобщается на среду с одинаково ориентированными эллипсоидальными включениями, в [12] – на матричную среду с осевой текстурой с анизотропными одноосными сферическими включениями, в [13, 14] – на матричные композиты с осевой текстурой, включения в которых сфероидальные изотропные или сферические двuosные анизотропные. В [15] предложено обобщение приближения Максвелла – Гарнетта для матричного композита с эллипсоидальными включениями с произвольным вероятностным распределением их ориентаций, в [16, 17] – для композита с вероятностным распределением ориентаций и форм эллипсоидальных включений. В [7] показано, что классическая формула Максвелла – Гарнетта представляет как частный случай обобщенного сингулярного приближения для матричной среды со сферическими изотропными включениями, если матрицу взять в качестве среды сравнения. Более общий результат получен в [9], где обобщение приближения Максвелла – Гарнетта на текстурированный композит с эллипсоидальными включениями также представляется как частный случай обобщенного сингулярного приближения при параметре среды сравнения, равном параметру матрицы. Результат, получаемый в обоб-

щенном сингулярном приближении для эффективных диэлектрических характеристик, совпадает с результатом, получаемым в обобщенном приближении эффективного поля для частного случая включений без оболочки. Поэтому логично принять частный случай обобщенного приближения эффективного поля с матрицей в качестве среды сравнения за обобщение приближения Максвелла – Гарнетта на матричную среду с включениями с оболочкой. Выражение (14) можно считать обобщением классической формулы Максвелла – Гарнетта на случай композита с изотропной матрицей и сферическими включениями с изотропной оболочкой и анизотропным ядром.

Применим выражение (14) для оценки оптических характеристик композита с диэлектрической матрицей и сферическими включениями с диэлектрическим ядром в серебряной оболочке в диапазоне длин волн 0,282–0,855 мкм при различных относительных объемных долях ядер во включениях и включений в композите. В качестве материала, составляющего матрицу и ядра всех включений, используется альфа-кварц. В данном оптическом диапазоне его коэффициент поглощения равен нулю, показатели преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей очень близки, поэтому он рассматривается как изотропный. Зависимость коэффициента преломления от частоты и значения диэлектрической проницаемости серебра в зависимости от длины волны взяты из [18, 19]. Радиус включений равен 10 нм. Размерная поправка к диэлектрической проницаемости серебра для массивного образца вследствие ограничения на длину свободного пробега электронов в частице рассчитывается по формуле [20]

$$\varepsilon(\omega, \langle l \rangle) = \varepsilon_b(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_0)} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)},$$

где ω – частота электромагнитной волны; ω_p – плазменная частота; ε_b – диэлектрическая проницаемость массивного образца; $\gamma = \gamma_0 + v_F / \langle l \rangle$ – измененная с учетом размерного эффекта скорость релаксации электронов в частице; γ_0 – скорость релаксации электронов в объеме металла; v_F – средняя скорость электронов на поверхности Ферми; $\langle l \rangle$ – средняя длина свободного пробега электрона в частице.

Принималось, что рассеяние электронов от границы оболочки происходит по закону Ламберта, т.е. интенсивность рассеяния с малой площадки поверхности в данном направлении пропорциональна косинусу угла между направлением и нормалью к площадке. В этом случае для длины свободного пробега в оболочке включения справедлива формула [21]

$$\langle l \rangle = 4V_1 / (S_1 + S_2),$$

где V_1 – объем оболочки; S_1, S_2 – соответственно площади поверхностей внешней и внутренней границ оболочки.

В случае изотропных материальных свойств ядер включений по формуле (14) получаем скалярное значение эффективной диэлектрической проницаемости, т.е. композит макроскопически изотропен. Наряду с действительной и мнимой частями ε^* вычислялись частотные зависимости коэффициентов преломления $n = \text{Re} \sqrt{\varepsilon^*}$ и экстинкции $k = \text{Im} \sqrt{\varepsilon^*}$, а также коэффициентов пропускания T , отражения R и поглощения пленки из матричного композита с включениями в виде диэлектрических шаров с серебряной оболочкой при нормальном падении электромагнитного излучения. Объемная доля включений $f = 0,2$. Некоторые результаты расчета приведены на рис. 1–3.

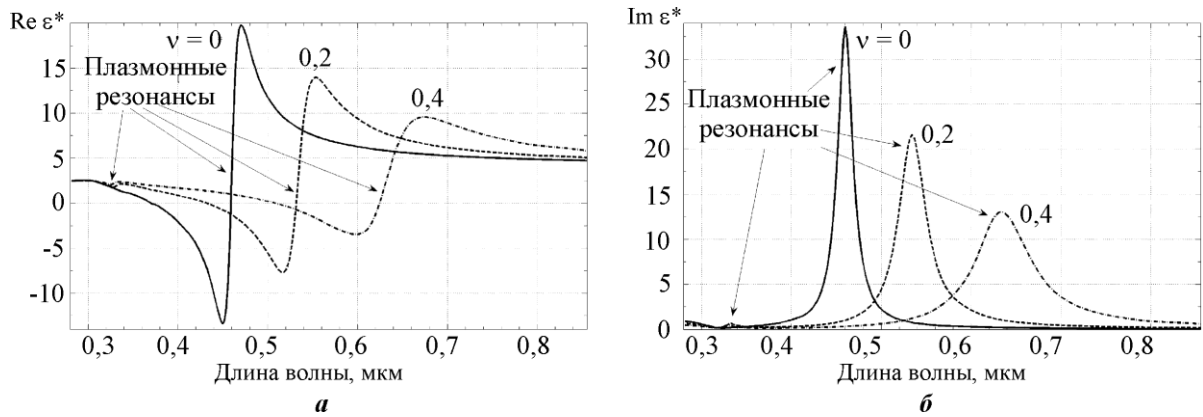


Рис.1. Частотные зависимости действительной (а) и мнимой (б) частей эффективной диэлектрической проницаемости композита со сферическими включениями с серебряной оболочкой при различных объемных долях v ядер включений

Fig.1. Frequency dependences of the real (a) and imaginary (b) parts of the effective dielectric permittivity of a composite with inclusions in the form of dielectric spheres with a silver shell at various volume fractions v of cores of inclusions. Volume fraction of inclusions $f = 0,2$

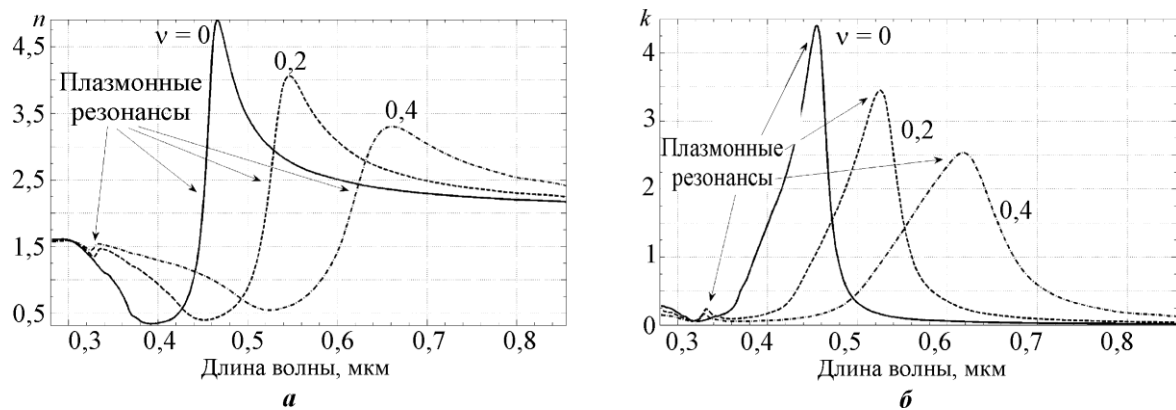


Рис.2. Частотные зависимости коэффициентов преломления (а) и экстинкции (б) композита со сферическими включениями с серебряной оболочкой при различных объемных долях v ядер включений

Fig.2. Frequency dependences of the refractive index (a) and extinction ratio (b) of a composite with inclusions in the form of dielectric spheres with a silver shell at various volume fractions v of cores of inclusions. Volume fraction of inclusions $f = 0,2$

Анализ зависимостей, приведенных на рис.1 и 2, показывает, что в композите со сферическими включениями с металлической оболочкой появляется дополнительный плазмонный резонанс ($v = 0,2, v = 0,4$), отсутствующий в случае сплошных металлических включений ($v = 0$). Этот дополнительный плазмонный резонанс находится в ультрафиолетовой области примерно при длине волны $0,33-0,34$ мкм и он гораздо слабее, чем основной. При повышении объемной доли ядер во включениях основной плазмонный резонанс смещается в сторону более длинных волн, а дополнительный – очень слабо смещается в сторону более коротких волн. При этом интенсивность обоих уменьшается. Плазмонные резонансы приводят к появлению полос непропускания (слабого пропускания в результате дополнительного плазмонного резонанса) в оптических характеристиках пленки из композита (см. рис.3). При этом интенсивности отражения и поглощения в пределах полос непропускания сравнимы между собой.

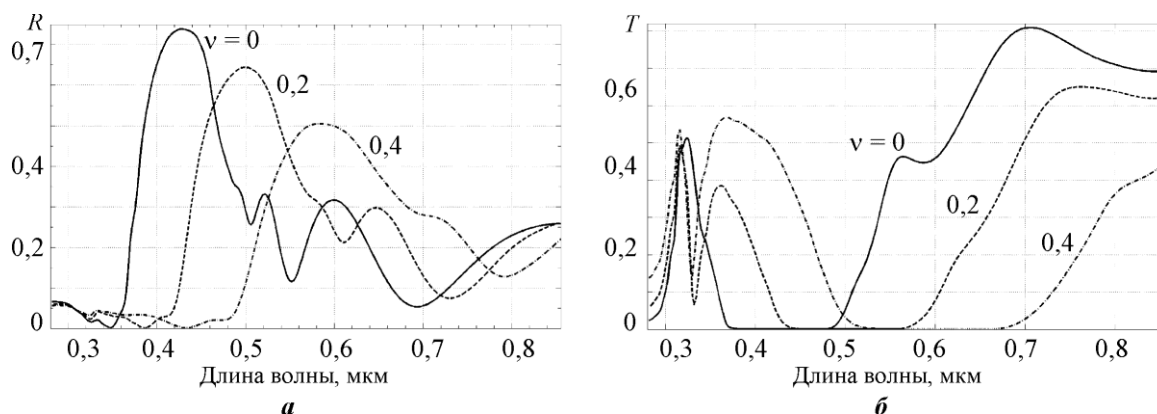


Рис.3. Частотные зависимости коэффициентов отражения (а) и пропускания (б) пленки толщиной 0,3 мкм со сферическими включениями с серебряной оболочкой при различных объемных долях v ядер включений

Fig.3. Frequency dependences of the reflection (a) and transmission (b) coefficients of the composite thin film at various volume fractions v of cores of inclusions. Volume fraction of inclusions $f = 0,2$; film thick is 0,3 micron

Вычисления эффективных характеристик композита показывают, что при увеличении объемной доли включений в материале и при фиксированной объемной доле ядер во включениях оба плазмонных резонанса смещаются в область более длинных волн (данные зависимости в работе не приведены).

Закключение. Полученную в настоящей работе на основе обобщенного приближения эффективного поля формулу (14) для вычисления эффективных диэлектрических характеристик матричного композита со сферическими включениями с металлической оболочкой можно считать обобщением формулы Максвелла – Гарнетта для данной среды. Формула применена для построения частотных зависимостей действительной и мнимой частей диэлектрической функции, коэффициентов преломления и экстинкции матричного композита со сферическими включениями с металлической оболочкой в диапазоне длин волн 0,282–0,855 мкм. Композитная среда со сферическими включениями с металлической оболочкой имеет дополнительный плазмонный резонанс по сравнению с композитом с однородными металлическими включениями. Увеличение объемных долей ядер включений и доли включений в композите приводит к смещению основного плазмонного резонанса в сторону больших длин волн и к уменьшению его интенсивности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-08-00262-а).

Литература

1. *Sihvola A.* Character of surface plasmons in layered spherical structures // PIER. – 2006. – Vol. 62. – P. 317–331.
2. *Лерман Л.Б.* Возникновение дополнительных плазмонных резонансов в малых частицах с оболочкой // Химия, физика и технология поверхности. – 2008. – Вып. 14. – С. 91–100.
3. *Гузатов Д.В., Ораевский А.А., Ораевский А.Н.* Плазмонный резонанс в эллипсоидальных наночастицах с оболочкой // Квантовая электроника. – 2003. – Т. 33. – № 9. – С. 817–822.
4. *Garnett J.C.M.* Colours in metal glasses and in metallic films // Phil. Trans. R. Soc. – 1904. – Vol. 203. – P. 385–420.
5. Обобщенное приближение эффективного поля для неоднородной среды с включениями в оболочке / *В.И. Колесников, В.В. Бардушкин, И.В. Лавров и др.* // Доклады Академии наук. – 2017. – Т. 476. – №3. – С. 280–284.

6. **Фокин А.Г.** Диэлектрическая проницаемость смесей // ЖТФ. – 1971. – Т. 41, Вып. 6. – С. 1073–1079.
7. **Фокин А.Г.** Макроскопическая проводимость случайно-неоднородных сред. Методы расчета // УФН. – 1996. – Т. 166. – № 10. – С. 1069–1093.
8. **Yakovlev V.V., Bardushkin V.V., Lavrov I.V., Yakovleva E.N.** Simulation of the frequency dispersion of effective dielectric characteristics of composite materials // Semiconductors. – 2014. – Vol.48. – No. 13. – P. 1710–1715.
9. Об объединении методов оценки эффективных диэлектрических характеристик гетерогенных сред на основе обобщенного сингулярного приближения / **В.И. Колесников, В.Б. Яковлев, В.В. Бардушкин и др.** // Доклады Академии наук. – 2013. – Т. 448. – № 1. – С. 27–31.
10. **Де Гроот С.Р., Саммон Л.Г.** Электродинамика. – М.: Наука, 1982. – 560 с.
11. **Bragg W.L., Pippard A.B.** The form birefringence of macromolecules // Acta Cryst. – 1953. – Vol. 6. – No. 11–12. – P. 865–867.
12. **Levy O., Stroud D.** Maxwell Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers // Phys. Rev. B. – 1997. – Vol.56. – No. 13. – P. 8035–8046.
13. **Giordano S.** Order and disorder in heterogeneous material microstructure: Electric and elastic characterization of dispersions of pseudo-oriented spheroids // Int. J. Eng. Sci. – 2005. – Vol. 43. – P. 1033–1058.
14. **Giordano S.** Equivalent permittivity tensor in anisotropic random media // J. Electrostat. – 2006. – Vol. 64. – P. 655–663.
15. **Иванов Е.Н., Лавров И.В.** Теория диэлектрической проницаемости композиционных материалов с текстурой. Ч.1 // Оборонный комплекс – научно-техническому прогрессу России. – 2007. – №1. – С. 73–78.
16. **Zavgorodnyaya M.I., Lavrov I.V., Fokin A.G.** Analytical approach to calculating the effective dielectric characteristics of heterogeneous textured materials with randomly shaped inclusions // Semiconductors. – 2015. – Vol.49. – No.13. – P. 1718–1726.
17. **Zavgorodnyaya M.I., Lavrov I.V.** Methods of accounting for inclusion-shape randomness in calculating the effective dielectric characteristics of heterogeneous textured materials // Semiconductors. – 2016. – Vol. 50. – No.13. – P. 1708–1715.
18. **Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В.** Оптические постоянные природных и технических сред: справочник. – Л.: Химия, 1984. – 216 с.
19. **Palik E.D.** Handbook of optical constants of solids. – Orlando: Acad. Press, 1985.
20. **Хлебцов Н.Г.** Оптика и биофотоника наночастиц с плазмонным резонансом // Квантовая электроника. – 2008. – Т. 38. – № 6. – С. 504–529.
21. **Moroz A.** Electron mean-free path in metal-coated nanowires // J. Opt. Soc. Am. B. – 2011. – Vol. 28. – No. 5. – P. 1130–1138.

Поступила 03.10.2017 г.; принята к публикации 16.01.2018 г.

Лавров Игорь Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики № 2 Национального исследовательского университета «МИЭТ» (124498, г. Москва, г. Зеленоград, пл. Шокина, д. 1), iglavr@mail.ru

References

1. Sihvola A. Character of surface plasmons in layered spherical structures. *PIER*, 2006, vol. 62, pp. 317–331.
2. Lerman L.B. Voznikoveniye dopolnitel'nyh plazmonnyh rezonansov v malyyh chastitsah s obolochkoy [Emergence of the additional plasmon resonances in small particles with a cover]. *Khimiya, fizika i tekhnologiya poverhnosti – Chemistry, physics and technology of surface*, 2008, no. 14, pp. 91–100. (in Russian).
3. Guzatov D.V., Oraevskij A.A., Oraevskij A.N. Plazmonnyj rezonans v ellipsoidal'nyh nanochastichah s obolochkoy [Plasmon resonance in ellipsoidal nanoparticles with shells]. *Kvantovaya elektronika – Quantum electronics*, 2003, vol. 33, no. 9, pp. 817–822. (in Russian).
4. Garnett J.C.M., Colours in metal glasses and in metallic films. *Phil. Trans. R. Soc.*, 1904, vol. 203, pp. 385–420.
5. Kolesnikov V.I., Bardushkin V.V., Lavrov I.V., Sychyov A.P., Yakovlev V.B. Obobshchennoe priblizhenie effektivnogo polya dlya neodnorodnoy sredy s vklyucheniymi v obolochke [A generalized effective field approximation for a medium with inclusions in a shell]

tive-field approximation for an inhomogeneous medium with coated inclusions]. *Doklady Akademii Nauk*, 2017, vol. 62, no. 9, pp. 415–419. (in Russian).

6. Fokin A.G. Dielektricheskaya pronicaemost' smesey [Permittivity of mixtures]. *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki – Technical Physics*, 1971, vol. 41, iss. 6, pp. 1073–1079. (in Russian).

7. Fokin A.G. Makroskopicheskaya provodimost' sluchajno-neodnorodnyh sred. Metody rascheta [Macroscopic conductivity of random inhomogeneous media. Calculation methods]. *Physics-Uspekhi – Advances in Physical Sciences*, 1996, vol. 166, no.10, pp. 1009–1032. (in Russian).

8. Yakovlev V.V., Bardushkin V.V., Lavrov I.V., Yakovleva E.N. Simulation of the Frequency Dispersion of Effective Dielectric Characteristics of Composite Materials. *Semiconductors*, 2014, vol.48, no. 13, pp. 1710–1715.

9. Kolesnikov V.I., YAKovlev V.B., Bardushkin V.V., Lavrov I.V., Sychev A.P., Yakovleva E.N. Ob ob"edinenii metodov ocenki effektivnyh dielektricheskikh harakteristik geterogennyh sred na osnove obobshchennogo singulyarnogo priblizheniya. *Doklady Akademii nauk*, 2013, vol. 452, no. 1, pp. 27–31. (in Russian).

10. De Groot S.R., Suttrop L.G. *Foundations of Electrodynamics*. Amsterdam, North-Holland Publishing Company, 1972. 535 p. (Russ. ed.: De Groot S.R., Sattorp L.G. *Elektrodinamika*. Moscow, Nauka Publ., 1982. 560 p.).

11. Bragg W.L., Pippard A.B. The Form Birefringence of Macromolecules. *Acta Cryst.*, 1953, vol. 6, no. 11–12, pp. 865–867.

12. Levy O., Stroud D. Maxwell Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers. *Phys. Rev. B*, 1997, vol.56, no. 13, pp. 8035–8046.

13. Giordano S. Order and disorder in heterogeneous material microstructure: Electric and elastic characterization of dispersions of pseudo-oriented spheroids. *Int. J. Eng. Sci.*, 2005, vol.43, pp. 1033–1058.

14. Giordano S. Equivalent permittivity tensor in anisotropic random media. *J. Electrostat.*, 2006, vol.64, pp. 655–663.

15. Ivanov E.N., Lavrov I.V. Teoriya dielektricheskoy pronitsaemosti kompozitsionnyh materialov s teksturoy. Chast' 1 [Theory of permittivity of composites with texture]. *Oboronnij kompleks - nauchno-tehnicheskomu progressu Rossii – Defense Industry Achievements – Russian Scientific and Technical Progress*, 2007, no.1, pp. 73–78. (in Russian).

16. Zavgorodnyaya M I., Lavrov I.V., Fokin A.G. Analytical Approach to Calculating the Effective Dielectric Characteristics of Heterogeneous Textured Materials with Randomly Shaped Inclusions. *Semiconductors*, 2015, vol.49, no13, pp. 1718–1726.

17. Zavgorodnyaya M.I., Lavrov I.V. Methods of Accounting for Inclusion-Shape Randomness in Calculating the Effective Dielectric Characteristics of Heterogeneous Textured Materials. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no.13, pp. 1708–1715.

18. Zolotaryov V.M., Morozov V.N., Smirnova E.V. *Opticheskie postoyannye prirodnyh i tekhnicheskikh sred. Spravochnik* [Optical constants of nature and technical media. Handbook]. Leningrad, Khimia Publ., 1984. 216 p. (in Russian).

19. Palik E.D. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Orlando, Acad. Press, 1985.

20. Hlebcov N.G. Optika i biofotonika nanochastic s plazmonnym rezonansom [Optics and biophotonics of nanoparticles with a plasmon resonance]. *Kvantovaya elektronika – Quantum electronics*, 2008, vol. 38, no. 6, pp. 504–529. (in Russian).

21. Moroz A. Electron mean-free path in metal-coated nanowires. *J. Opt. Soc. Am. B*, 2011, vol. 28, no. 5, pp. 1130–1138.

Submitted 03.10.2017; accepted 16.01.2018.

Lavrov Igor V. – Cand. Sci. (Phys.-Math.), senior lecturer of the High Mathematics N 2 Department, National Research University of Electronic Technology (124498, Russia, Moscow, Zelenograd, Shokin sq., 1), iglavr@mail.ru