

УДК 535.36

О.В. МАЧУЛЯНСЬКИЙ, Б.Б. БАБИЧ, В.О. МАЧУЛЯНСЬКИЙ, Н.П. ТАРАСОВСЬКА  
Національний технічний університет України "КПІ"**МОДЕЛЮВАННЯ НАНОСТРУКТУРНИХ МЕТАЛОДІЕЛЕКТРИЧНИХ СИСТЕМ  
ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В ЯКОСТІ ОПТИЧНИХ ФІЛЬТРІВ**

*Розраховані спектральні характеристики електромагнітного відгуку відсікаючих прозорих оптичних фільтрів на основі наноструктурних металодіелектричних систем в спектральному діапазоні 0,2 – 2 мкм. Визначена ефективна діелектрична проникність на основі теорії Бруггемана. Встановлено взаємозв'язок оптичних властивостей таких систем з їх електромагнітними характеристиками та структурними параметрами. Надані рекомендації щодо можливості створення оптичних фільтрів з заданими спектрально-селективними характеристиками на основі наноструктурних металодіелектричних систем.*

*Ключові слова:* прозорі оптичні фільтри, наноструктурні металодіелектричні системи, чисельне моделювання.

А.В. МАЧУЛЯНСКИЙ, Б.Б. БАБЫЧ, В.А. МАЧУЛЯНСКИЙ, Н.П. ТАРАСОВСКАЯ  
Национальный технический университет Украины "КПИ"**МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРНЫХ МЕТАЛЛОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ  
ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КАЧЕСТВЕ ОПТИЧЕСКИХ ФИЛЬТРОВ**

*Рассчитаны спектральные характеристики электромагнитного отклика отсекающих прозрачных оптических фильтров на основе наноструктурных металлодиэлектрических систем в спектральном диапазоне 0,2 – 2 мкм. Определена эффективная диэлектрическая проницаемость на основе теории Бруггемана. Установлена взаимосвязь оптических свойств таких систем с их электромагнитными характеристиками и структурными параметрами. Даны рекомендации по возможности создания оптических фильтров с заданными спектрально-селективными характеристиками на основе наноструктурных металлодиэлектрических систем.*

*Ключевые слова:* прозрачные оптические фильтры, наноструктурные металлодиэлектрические системы, численное моделирование.

А.В. МАЧУЛЯНСЬКИЙ, Б.В. БАБЫЧ, В.А. МАЧУЛЯНСЬКИЙ, Н.П. ТАРАСОВСКАЯ  
National Technical University of Ukraine "KPI"**MODELLING OF NANOSTRUCTURAL METALDIELECTRIC SYSTEMS FOR USE AS  
OPTICAL FILTERS**

*Spectral characteristics of an electromagnetic response of the cutting transparent optical filters on the basis of nanostructural metaldielectric systems in the spectral range of 0,2 – 2 microns are calculated. Effective dielectric permeability on the basis of Bruggeman's theory is defined. The interrelation of optical properties of such systems with their electromagnetic characteristics and structural parameters is established. Recommendations for creation of optical filters with the set spectral and selective characteristics on the basis of nanostructural metaldielectric systems are given whenever possible.*

*Keywords:* transparent optical filters, nanostructural metaldielectric systems, numerical modeling.

**Вступ. Аналіз досліджень та публікацій. Постановка проблеми**

Наноструктурні металодіелектричні системи володіють унікальними електромагнітними властивостями, що представляє їх перспективними для оптоелектроніки та лазерної техніки [1].

Особливий інтерес приділяється прозорим оптичним фільтрам, які використовуються в якості селективних покриттів для фотоелектричних і фототермічних перетворювачів енергії, відсікаючих фільтрів, функціональних енергоефективних покриттів тощо [2].

Аналіз науково-технічної та патентної літератури показав, що в даний час для розробки таких оптичних фільтрів в основному використовуються багатошарові інтерференційні структури. Такі структури складаються з по чергово розміщених тонких шарів високопровідних металів срібла, золота, міді та їх сплавів з іншими металами, а також діелектриків, прозорих у видимому та інфрачервоному діапазоні електромагнітного випромінювання. Шари металів забезпечують високі значення коефіцієнта відбивання електромагнітної енергії в інфрачервоній області спектру, а шари діелектриків – зменшують відбивання і підвищують пропускання фільтра в видимому діапазоні спектру.

Для збільшення селективності інтерференційних фільтрів, як правило, вдаються до збільшення числа металевих і діелектричних шарів.

Проте такі оптичні фільтри [3] мають суттєві недоліки, а саме: складність технології виготовлення і прецизійного контролю параметрів багат шарових структур; недостатня механічна міцність; висока собівартість покриттів; деградація параметрів тощо.

Попередні оцінки показали, що наноструктурні металодіелектричні системи, що містять нанорозмірні частинки металу, які розподілені в прозорій діелектричній матриці, за своїми характеристиками перевершують складні традиційні багат шарові системи [3, 4]. Такі двофазні наноструктурні металодіелектричні системи можуть бути реалізовані у вигляді нанорозмірних моношарів металевих частинок або їх багат шарових комбінацій.

В роботі [5] показано, що експлуатаційна стабільність металодіелектричних структур з нанорозмірною металевою компонентою визначається властивостями діелектричної компоненти. У зв'язку з цим особливий інтерес представляють діелектричні матеріали на основі оксинитрида алюмінію, які мають високі захисні властивості та хімічну стійкість. Крім того керуючи технологічними параметрами синтезу можна змінювати їх оптичні параметри [6].

Властивості таких наноструктурних систем залежать від електрофізичних властивостей окремих компонентів, концентрації фаз та їх геометричних розмірів.

Тому при розробці та синтезі таких матеріалів необхідно враховувати їх структуру, дисперсійні та розмірні залежності параметрів їх окремих компонент.

Однак відомі підходи [7] не враховують вищевказаних факторів при прогнозуванні характеристик оптичних фільтрів.

Таким чином, ці проблеми можуть бути вирішені за допомогою моделювання та оптимізації оптично прозорих фільтрів на основі наноструктурних металодіелектричних систем з використанням методів, які враховують електромагнітні параметри і мікроструктуру компонентів таких систем.

#### Мета дослідження

Метою даної роботи є моделювання спектральних характеристик електромагнітного відгуку відсікаючих прозорих оптичних фільтрів на основі наноструктурних металодіелектричних систем з використанням моделі ефективного середовища з урахування електромагнітних параметрів і мікроструктури компонентів наноструктурних систем.

#### Модель наноструктурної металодіелектричної системи

Для моделювання спектральних характеристик електромагнітного відгуку відсікаючих прозорих оптичних фільтрів на основі наноструктурних металодіелектричних систем використовували алгоритм на основі методу матриць переносу [7-9].

Перевагою дано методу є те, що він не накладає жодних обмежень на кількість шарів і може бути використаний для розрахунку як багат шарових, так і одношарових структур.

Розрахунки виконані при наступних обмеженнях:

- нормальне падіння плоскої електромагнітної хвилі;
- шарувата структура складається з  $N$  плоскопаралельних, однорідних, ізотропних шарів;
- кожен шар характеризується ефективною товщиною  $d_i$  ( $i$  – індекс шару), спектральними

комплексними електромагнітними параметрами: комплексна діелектрична проникність  $\varepsilon_i^*$ , комплексна магнітна проникність  $\mu_i^*$ ;

- наноструктурна система розташована між двома напівбезкінечними однорідними та ізотропними середовищами (в нашому випадку – повітря з показником заломлення рівним одиниці);
- нанорозмірна металева компонента випадково розподілена в матеріалі матриці;
- наноструктурна металодіелектрична система характеризується комплексною ефективною діелектричною проникністю:

$$\varepsilon_{\lambda i e f}^* = \varepsilon_{1 \lambda e f} - i \varepsilon_{2 \lambda e f}, \quad (1)$$

де  $\varepsilon_{1 \lambda e f}$ ,  $\varepsilon_{2 \lambda e f}$  – дійсна та уявна частина комплексної ефективною діелектричної проникності.

У оптичному діапазоні спектру електромагнітного випромінювання для металевої компоненти  $\mu_i^* = 1$ .

Для опису та аналізу комплексної діелектричної проникності металодіелектричних систем використовується модель ефективного середовища, зокрема теорія Бруггемана [10].

Використання моделі «ефективного середовища» для наноструктурних металодіелектричних систем виправдане двома обставинами: малими, в порівнянні з довжиною хвилі світла ( $\lambda$ ), розмірами металевих нанорозмірних частинок і хаотичністю розподілу їх в діелектричній матриці.

Згідно цієї теорії ефективна комплексна діелектрична проникність металодіелектричних систем пов'язана з діелектричною проникністю  $\epsilon_{мет}$  і об'ємною концентрацією металевих включень, розподілених в ізотропній матриці з діелектричною проникністю  $\epsilon_{\delta}$ .

На основі вищепредставлених підходів розроблений алгоритм розрахунку в програмному середовищі MatLAB для енергетичних коефіцієнтів пропускання і відбивання металодіелектричних систем.

В якості вхідних даних для розрахунку ефективної комплексної діелектричної проникності металодіелектричних систем для металевої компоненти застосовувалися значення оптичних параметрів срібла, наведених в роботі [11], а для діелектричної компоненти значення діелектричної проникності, характерне для оксинітриду алюмінію. Значення показника заломлення плівок оксинітриду алюмінію змінюються в інтервалі від 1,4 до 2,5 в залежності від технологічних параметрів їх синтезу методом реактивного магнетронного розпилення [6].

**Результати моделювання**

Приклади результатів розрахунків спектральних залежностей дійсної та уявної частин діелектричної проникності на основі теорії Бруггемана наноструктурного металодіелектричного шару наведені на рис. 1

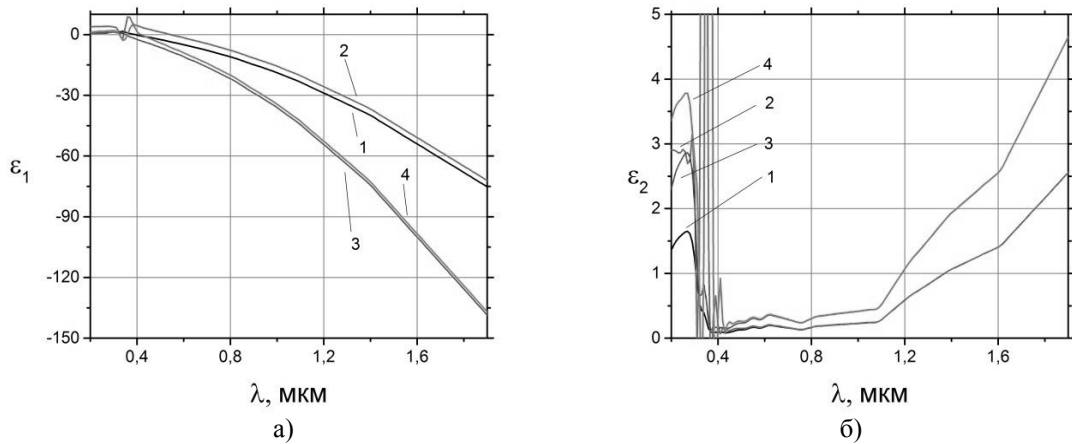


Рис. 1. Спектральні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин діелектричної проникності наноструктурного металодіелектричного шару при різних значеннях фактору заповнення металевих включень  $f$  та діелектричної проникності діелектричної матриці  $\epsilon_{\delta}$ : 1 –  $f = 0,5$ ;  $\epsilon_{\delta} = 1,96$ ; 2 –  $f = 0,5$ ;  $\epsilon_{\delta} = 5,25$ ; 3 –  $f = 0,8$ ;  $\epsilon_{\delta} = 1,96$ ; 4 –  $f = 0,8$ ;  $\epsilon_{\delta} = 5,25$

З рис. 1 видно, що спостерігається дисперсія комплексної діелектричної проникності в досліджуваному спектральному діапазоні для розрахованих модельних структур металодіелектричних систем. При цьому маємо значний ріст абсолютних значень дійсної та уявної частин діелектричної проникності при збільшенні концентрації металевої компоненти.

Результати чисельного моделювання спектральних залежностей коефіцієнтів відбивання R та пропускання T наноструктурних металодіелектричних систем при різних значеннях параметрів їх структури представлені на рис. 2-4.

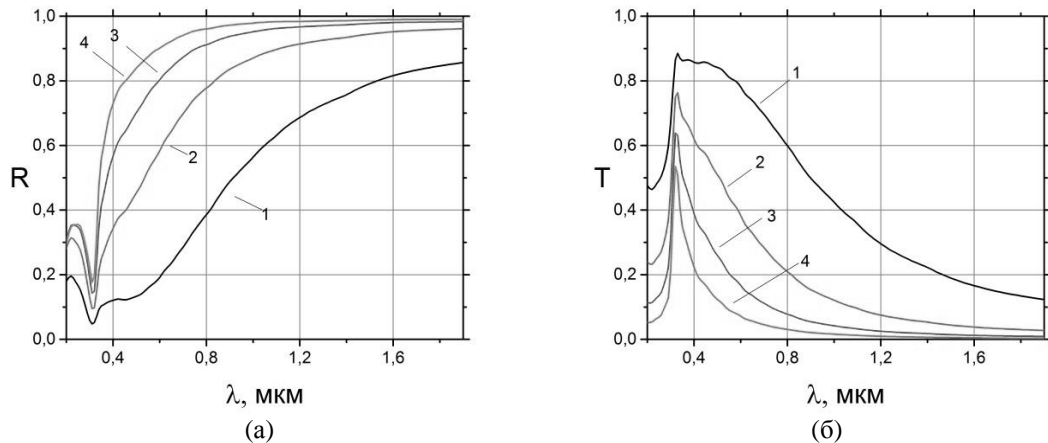


Рис. 2. Спектральні залежності коефіцієнтів відбивання (а) та пропускання (б) оптичних фільтрів при  $\epsilon_{\delta} = 1,96$  для різних товщин наноструктурного металодіелектричного шару  $d_H$ : 1 – 10 нм; 2 – 20 нм; 3 – 30 нм; 4 – 40 нм

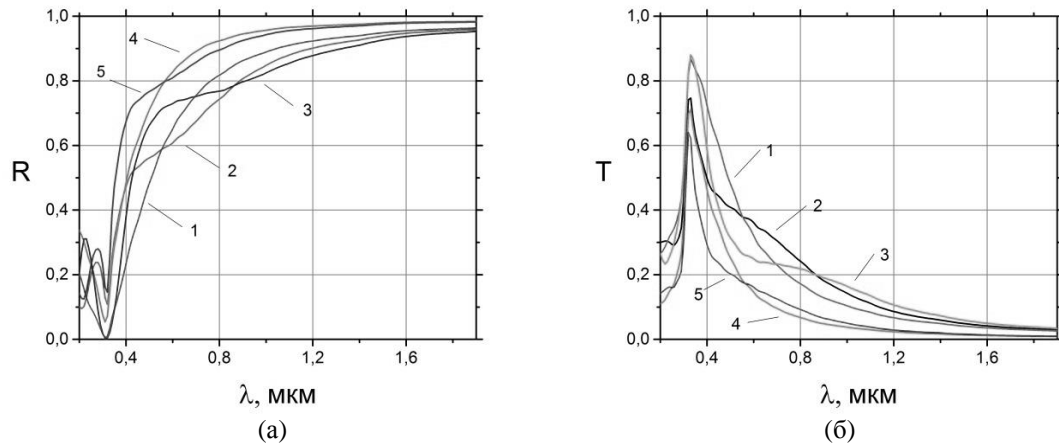


Рис. 3. Спектральні залежності коефіцієнтів відбивання (а) та пропускання (б) оптичних фільтрів при  $\epsilon_D = 1,96$ , для різних товщин  $d_H$  та товщини діелектричного шару  $d_D$ : 1 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 40$  нм; 2 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 100$  нм; 3 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 150$  нм; 4 –  $d_H = 30$  нм;  $d_D = 50$  нм; 5 –  $d_H = 30$  нм;  $d_D = 100$  нм

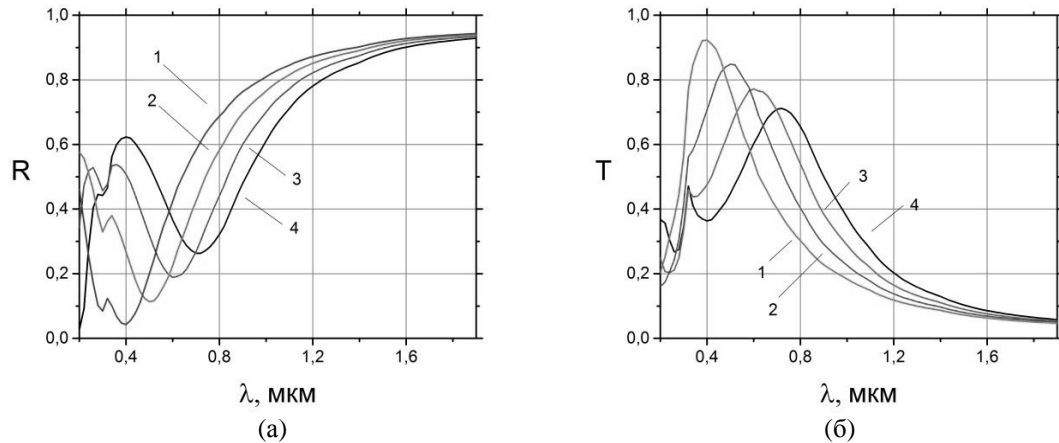


Рис. 4. Спектральні залежності коефіцієнтів відбивання (а) та пропускання (б) оптичних фільтрів при  $\epsilon_D = 5,25$ , для різних товщин  $d_H$  та  $d_D$ : 1 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 20$  нм; 2 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 30$  нм; 3 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 40$  нм; 4 –  $d_H = 20$  нм;  $d_D = 50$  нм

Аналізуючи результати проведеного моделювання було встановлено, що варіюючи структурні та електромагнітні параметри металодіелектричної системи, а саме концентрацію нанорозмірних металевих включень, товщини металодіелектричної структури, діелектричну проникність металеві та діелектричної компонент, можемо задавати необхідні спектрально-селективні характеристики прозорих оптичних фільтрів.

Наприклад, з наведених на рис. 2-4 спектральних залежностей слідує, що варіюючи діелектричну проникність діелектричної компоненти з 1,96 до 5,25 або її товщину, можемо регулювати спектральну селективність оптичного фільтра (порогові значення довжини хвилі) в інтервалі від 0,4 до 0,9 мкм, при цьому мінімальне та максимальне значення коефіцієнтів відбивання та пропускання змінюються від 0,2 до 0,9.

### Висновки

Чисельне моделювання електромагнітного відгуку в спектральному діапазоні 0,2 – 2 мкм прозорих оптичних фільтрів на основі наноструктурних металодіелектричних систем з використанням теорії ефективного середовища Бруггемана встановило взаємозв'язок між оптичними характеристиками фільтрів та їх структурними і електромагнітними параметрами металодіелектричних компонент.

Використання для діелектричної компоненти діелектричної проникності, що відповідає реальним значенням оксинітриду алюмінію, синтезованого та дослідженого авторами в роботі [6], дозволяє проводити оптимізацію технологічних процесів формування наноструктурних металодіелектричних систем для прозорих оптичних фільтрів з заданими характеристиками у видимому і ближньому інфрачервоному діапазоні.

Таким чином, варіюючи структурні та електромагнітні параметри металодіелектричної системи, зокрема товщини металодіелектричної структури, концентрацію нанорозмірних металевих включень, діелектричну проникність металевої та діелектричної компонент, можемо змінювати порогові значення довжини хвилі фільтра в інтервалі від 0,4 до 0,9 мкм, що дає можливість створювати оптичні фільтри з заданими спектрально-селективними характеристиками.

#### Список використаної літератури

1. Moulin E., Sukmanowski J., Luo P. et al. Improved light absorption in thin-film silicon solar cells by integration of silver nanoparticles // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2008. V. 354. P. 2488-2491.
2. О.Н. Гадомский, К.К. Алтунин, Н.М. Ушаков, И.Д. Кособудский, В.Я. Подвигалкин, Д.М. Кульбацкий. Высокоэффективные просветляющие наноструктурные оптические покрытия для солнечных элементов // *ЖТФ* – 2010, Т 80, №6. – с. 83-89.
3. Агнихотри О., Гунта Б. Селективные поверхности солнечных установок М., 1984, 273 с.
4. L.V. Maksimov, A.V. Anan'ev, V.N. Bogdanov, T.S. Markova, S.N. Smerdin, O.V. Yanush Optical losses of multi component glasses for fibers and methods of their reduction // *Optics and Optoelectronics. Proc. SPIE. Warsaw. Poland*. 2006. – Vol. 5. P. 55-59.
5. Золотухин И.В., Калинин Ю.В., Ситников А.В. Нанокompозитные структуры на пути в наноэлектронику // *Природа* – 2006, № 1. – с.11-19.
6. A. Borisova, A. Machulyansky, M. Rodionov, Y. Yakimenko, B. Babych “Properties of Aluminum Oxynitride Films Prepared by Reactive Magnetron Sputtering” – *IEEE XXXIV International Scientific Conference “Electronics and Nanotechnology”* (Ahril, 16-19th, 2014) – p.122-125.
7. Теллен, О. Конструирование многослойных интерференционных светофильтров [Текст] / О. Теллен // *Физика тонких пленок*. – 1972. – Т. 5. – С. 46-83.
8. Розенберг, Г. В. Оптика тонкослойных покрытий [Текст] / Г. В. Розенберг. – М.: Наука, 1958. – 570 с.
9. Борн, М. Основы оптики [Текст] / М. Борн, Д. Вольф. – М.: Наука, 1973. – 719 с.
10. Виноградов А. П. Электродинамика композитных материалов / Под ред. Б. З. Каценеленбаума. М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 208 с.
11. P. B. Johnson and R. W. Christy, “Optical constants of transition metals” *Phys. Rev. B* 9, 5056–5069 (1974).