

## Отражение и прохождение света в структурированном композитном материале

А.А. Голобородько\*

Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко,  
ул. Владимирская, 64/13, 01601 Киев, Украина

(Получено 10.04.2013; опубликовано online 17.10.2013)

В работе рассматриваются оптические свойства композитного материала, состоящего из диэлектрической пластины с двумерной решеткой серебряных наноразмерных частиц. Проанализирована возможность модели эффективной среды описывать отражение и прохождение когерентной электромагнитной волны в диэлектрической пластине с массивом металлических стержней. Рассчитаны коэффициенты отражения и пропускания такой среды в зависимости от объемной концентрации стержней. Результаты расчета с применением модели эффективной среды, полученной с применением нелокальной теории усреднения, сравнены с данными точного электромагнитного расчета методом  $T$ -матрицы.

**Ключевые слова:** Композитная структура, Эффективная среда, Численное моделирование.

PACS numbers: 78.20.Bh, 41.20.Jb, 77.22. – d

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Металлические частицы с характерными размерами много меньше длины волны электромагнитного излучения, которые распределены периодически или случайно на диэлектрической подложке, имеют интересные оптические свойства [1, 2]. В последнее время расширились возможности по изготовлению таких систем и как показано в [3] они могут быть очень хорошими поглотителями света или фотонными кристаллами [4] в зависимости от размера и распределения рассеивающих центров.

Для анализа подобных структур часто применяют теорию эффективных сред в виде соотношений Максвелла-Гарнета [5], когда один из компонентов может рассматриваться как основной, в который встроены включения другого материала. Они предполагают точное вычисление поля в однородном материале с одиночными сферическими или эллиптическими включениями, и модификацию его с учетом интерференции поля рассеянного на включениях.

В работе [6] было исследовано прохождение ТМ- и ТЕ- поляризованных волн в двумерных массивах серебряных наностержней различного диаметра в желатиновой среде. Авторы провели сравнение метода рекурсивных функций Грина с теорией Максвелла-Гарнета на примере изучения характеристик пропускания периодических и непериодических массивов наностержней. Было показано сильное влияние взаимодействия между наностержнями, вкладов мультиполей и формирования фотонных запрещенных зон на оптические спектры, что не может быть учтено в рамках классической теории эффективных сред. Авторы отметили частичную адекватность теории Максвелла-Гарнета для ТМ – поляризованного света и ее полную непригодность для случая ТЕ – поляризации. При этом была предложена нелокальная модель (НМ) [7] в которой рассматривалась однородная среда с массивом длинных тонких стержней (стержни располагались на периодической квадратной сетке) с отрицательной диэлектрической по-

стоянной. Авторы показали адекватность подхода расчета параметров композитной среды для ТЕ- и ТМ- поляризаций для низких концентраций металлических стержней (менее 1 %) и малого их радиуса (до 12 нм для видимого диапазона).

В данной работе проверяется способность НМ описывать композитные материалы, состоящие из диэлектрической пластины с массивом металлических стержней конечной проводимости.

### 2. МОДЕЛЬ ЭФФЕКТИВНОЙ СРЕДЫ

Для проверки предложенной модели эффективной среды рассмотрим прохождение плоской ТЕ – ( $E_z = 0$ ) и ТМ – ( $H_z = 0$ ) поляризованной волны в диэлектрической пластине (рис. 1). Считается, что структура периодична по осям  $x$  и  $y$ , а по оси является  $z$  бесконечной. Диаметр стержня  $\Delta$ , постоянная решетки  $T$ , диэлектрическая постоянная материала  $\epsilon_D$ , диэлектрическая постоянная стержней  $\epsilon_S$ , волна попадает в материал из среды с диэлектрической постоянной  $\epsilon_E = 1$ .

В работе [7] показано, что для такой структуры диэлектрическая постоянная композитной среды для ТЕ- и ТМ- поляризаций может быть записана в следующем виде:

$$\epsilon_{TE} = \epsilon_D + \frac{2\epsilon_D}{\frac{\epsilon_S + \epsilon_D}{\epsilon_S - \epsilon_D} - 1} f, \quad (1)$$

$$\epsilon_{TM}(\omega, k_z) = \epsilon_D + \frac{\epsilon_D}{\frac{\epsilon_D}{\epsilon_S - \epsilon_D} f - \frac{\beta^2 - k_z^2}{\beta_p^2}}, \quad (2)$$

где  $f = \pi\Delta^2/(4T^2)$  – фактор заполнения (объемная концентрация),  $\beta = \omega\sqrt{\epsilon_D\mu_0}$  – волновое число диэлектрической структуры,  $k_z$  –  $z$  компонента волнового вектора,  $\lambda$  – длина волны излучения,  $\beta_p$  – плазменное волновое число для идеальных проводящих стержней [7]:

\* [angol@univ.kiev.ua](mailto:angol@univ.kiev.ua)

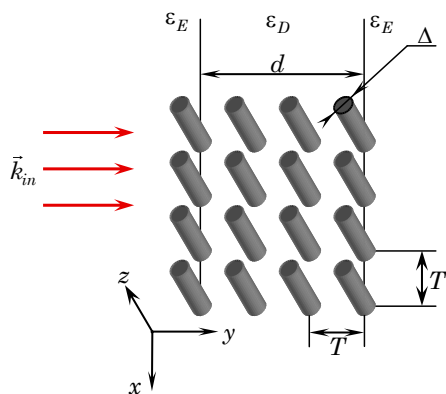


Рис. 1 – Модель распространения света в среде с периодическими рассеивающими центрами

$$\beta_P = \frac{1}{T} \sqrt{\frac{2\pi}{\ln\left(\frac{T}{\pi\Delta}\right) + 0.5275}} \quad (3)$$

Отметим также, что вывод диэлектрических констант  $\epsilon_{TE}$  и  $\epsilon_{TM}$  производился при следующих предположениях:  $\Delta \ll T$  (стержни тонкие),  $f < 0.1$  (концентрация рассеивающих центров достаточно мала),  $T \ll \lambda$  (расстояние между ними мало). При этом из (2) следует, что такая среда обладает пространственной дисперсией (так диэлектрическая постоянная  $\epsilon_{TM}$  зависит не только от длины волны падающего света, но и от компонента волнового вектора  $k_z$ ).

### 3. РЕЗУЛЬТАТ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для теоретических расчетов сначала следует выбрать некоторые фиксированные параметры модели. Для этого сначала рассмотрим прохождение монохроматической волны через пластину материала конечной толщины с комплексной диэлектрической проницаемостью  $\epsilon(y)$ . В этом случае уравнения Максвелла переходят в уравнение Гельмгольца, которое для линейно поляризованной компоненты плоской электромагнитной волны имеет вид [8]:

$$\frac{d^2}{dy^2} E_{x,z} + k^2 \epsilon(y) E_{x,z} = 0, \quad (4)$$

где  $k = \omega / c$  – волновое число в свободном пространстве ( $\epsilon = 1$ ). Решение уравнения (4) следует искать в виде:

$$E_{x,z}(y) = U(y)e^{-iS(y)}, \quad (5)$$

где  $U(y)$  и  $S(y)$  – действительные функции, которые описывают амплитуду и фазу электромагнитной волны. Причем решение в виде (5) позволяет свести уравнение Гельмгольца (4) к системе трех дифференциальных уравнений первого порядка, которые решаются методом Рунге-Кутты с заданием начальных условий на неосвещенной стороне пленки. Именно этим обеспечивается единственность решения граничной задачи, в результате которого определяются коэффициенты отражения, прохождения и поглощения в структуре [9].

В качестве металла выбрано серебро [10] с комплексной диэлектрической проницаемостью

$\epsilon_S = -8.275 + i0.749$  при  $\lambda = 500$  нм [11]. Как показывает анализ (см. рис. 2) с увеличением толщины пленки серебра наблюдается монотонный рост коэффициента отражения до максимального значения  $R_{max} \approx 0.91$  и уменьшения коэффициента прохождения  $T$  до нуля.

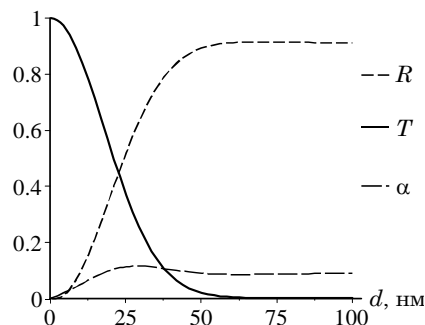


Рис. 2 – Коэффициенты отражения  $R$ , прохождения ( $T$ ) и поглощения ( $\alpha$ ) для пленки серебра в зависимости от ее толщины

Максимальное значение коэффициента отражения соответствует отражательной способности толстых пластин, при этом коэффициент поглощения определяется  $\alpha = 1 - R$ . Интересно, что при  $d = 32.1$  нм коэффициент поглощения достигает своего максимального значения  $\alpha = 0.114$ , а потом уменьшается до 0.088. При этом интересной может оказаться область при  $R = T$   $d = 26.8$  нм, поскольку в этом случае многослойная структура может обладать селективными свойствами при максимальной прозрачности. Отметим также, что глубина скин-слоя серебра  $\delta$  составляет  $\lambda / 30$  [11] или при  $\lambda = 500$  нм  $\delta \approx 16.7$  нм, соответственно максимум поглощения приходится на толщину пленки серебра  $d \sim 2\delta$ .

Таким образом, для теоретических расчетов выбраны следующие фиксированные параметры модели:

- длина волны оптического излучения  $\lambda = 500$  нм;
- толщина диэлектрической пластины 3 мкм;
- диэлектрическая проницаемость материала пластины  $\epsilon_D = 2.15 + i0.004$  (соответствует диэлектрической проницаемости  $\text{SiO}_2$  [13]);
- диаметр стержней  $\Delta_1 = 3$  нм ( $R \ll T$ ),  $\Delta_2 = 30$  нм выбран в области  $R = T$ .

При этом рассматривается только нормальное падение волны ( $k_z = 0$ ). Точные результаты рассчитывались из численных экспериментов моделирования дифракции света на структуре с геометрией, которая изображена на рис. 1 (использован метод  $T$ -матрицы [14]). При этом концентрация стержней  $f$  варьировалась от 0 до 100 % (0 % соответствует полностью диэлектрической пластине, а 100 % – металлической). Следует отметить, что уже при заполнении порядка 80 % стержни начинают перекрываться, поэтому в интервале 80-100 % проводился один эксперимент с  $f = 100$  %.

#### 3.1 TE- поляризация

На рис. 3 и 4 показана зависимость коэффициента отражения и прохождения в диэлектрической пластине с массивом металлических стержней диаметром  $\Delta_1 = 3$  нм и  $\Delta_2 = 30$  нм от фактора заполнения.

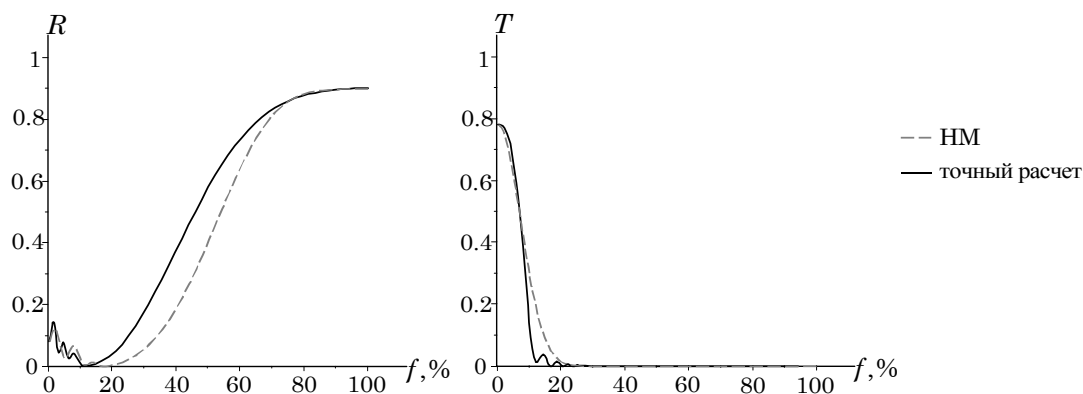


Рис. 3 – Коэффициенты отражения ( $R$ ) и пропускания ( $T$ ) для  $TE$ - поляризованной волны в зависимости от фактора заполнения металлическими стержнями диаметром 3 нм

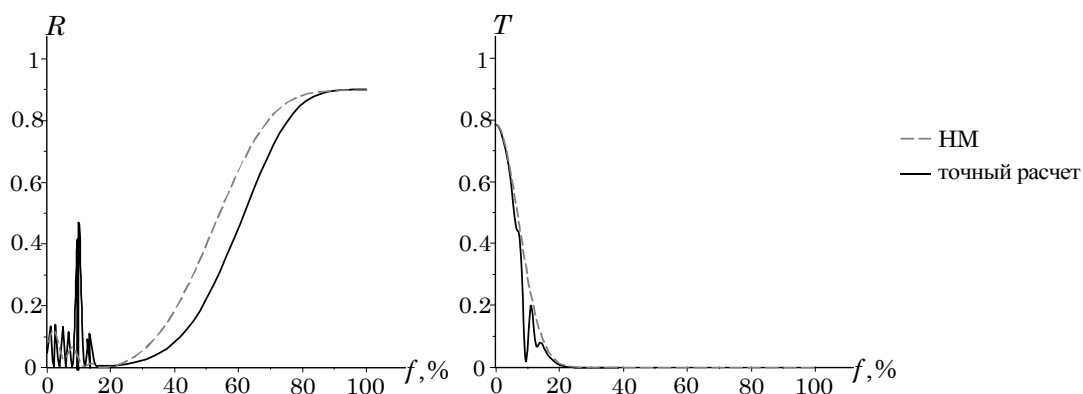


Рис. 4 – Коэффициенты отражения ( $R$ ) и пропускания ( $T$ ) для  $TE$ - поляризованной волны в зависимости от фактора заполнения металлическими стержнями диаметром 30 нм.

Отметим существование зоны с высоким поглощением и малым отражением при  $f \sim 20\%$  (рис. 3). В этом случае действительная часть комплексной эффективной диэлектрической проницаемости становится близкой к диэлектрической проницаемости окружающей среды, что минимизирует дифракцию на такой структурированной пленке, при этом мнимая часть диэлектрической проницаемости отлична от нуля – это приводит к поглощению, понятно, что коэффициент поглощения зависит от толщины композитной структуры. Некоторые осцилляции коэффициента отражения в области  $f < 20\%$  видимо соответствуют интерференции электромагнитных волн, отраженных от двух границ раздела: композитная структура – воздух.

В диэлектрической структуре с металлическими стержнями диаметром 30 нм наблюдается более выраженные интерференционные явления для коэффициента отражения в области  $f < 20\%$  в отличие от 3 нм стержней. Интересно, что при  $f = 2.66\%$  период сетки для металлических стержней составляет  $T \approx 162$  нм, что порядка половины длины волны электромагнитного излучения в диэлектрической среде ( $\lambda \approx 340$  нм). Предполагается, что именно некое резонансное свойства массива стержней и вызывает резкий минимум зависимости коэффициента отражения (рис. 4а). Модель эффективной среды не предполагает такой интерференции парциальных волн отраженных от цепочек стержней, и, соответственно, исключает существование особенности в зависимости коэффициента отражения.

Точный электромагнитный расчет полей в такой композитной структуре для стержней диаметром 30 нм и концентрациями 2.66 %, 9.61 % показан на рис. 5.

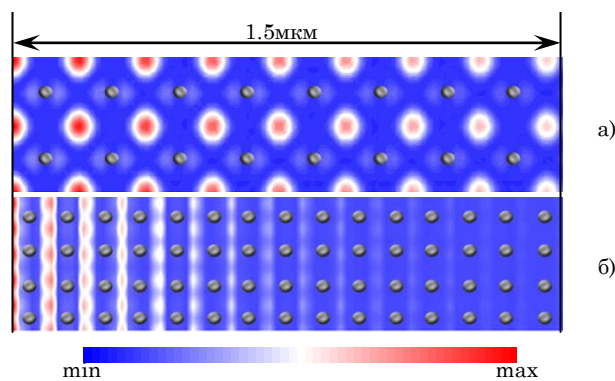


Рис. 5 – Распределение поля в композитном материале (диэлектрическая пластина с металлическими стержнями). (а)  $f = 2.66\%$ , (б)  $f = 9.61\%$

Как видно из рис. 5 при малых концентрациях металлических стержней излучение формирует некие резонансные структуры. Последующее увеличение объемной концентрации стержней приводит к увеличению поглощения, помимо этого поле становится более однородным по объему композитной структуры.

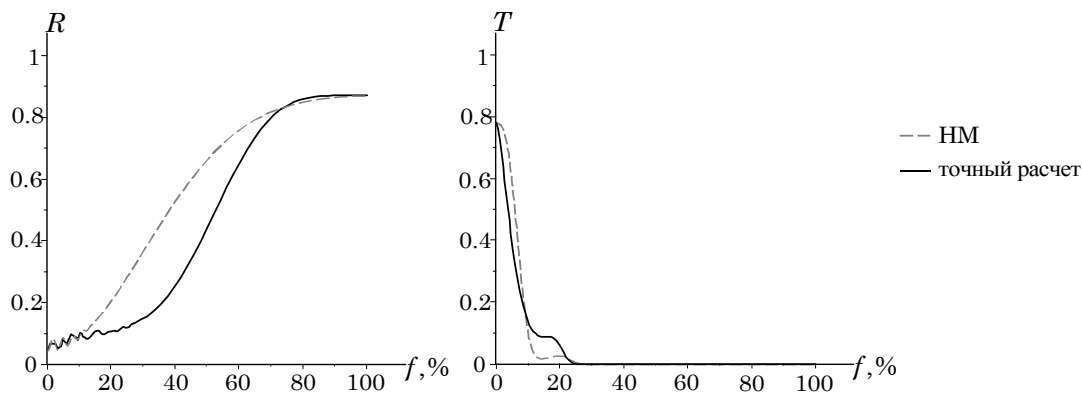


Рис. 6 – Коэффициенты отражения ( $R$ ) и пропускания ( $T$ ) для  $TM$ - поляризованной волны в зависимости от фактора заполнения металлическими стержнями диаметром 3 нм

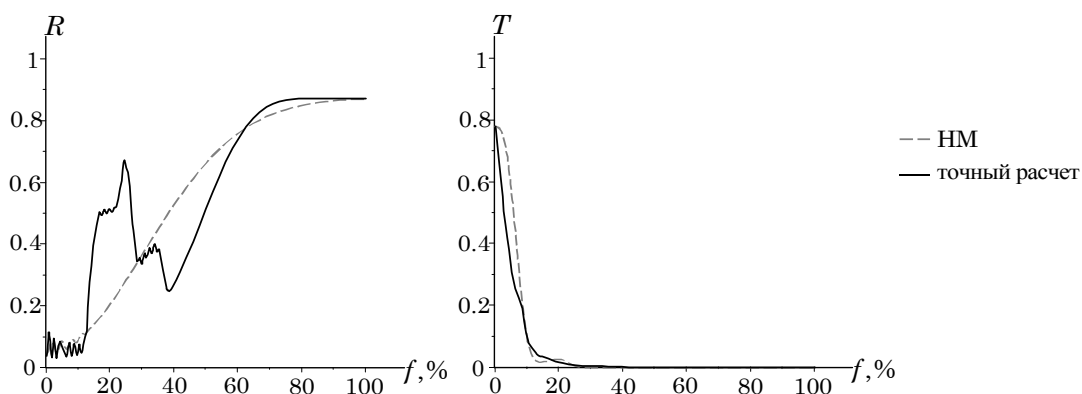


Рис. 7 – Коэффициенты отражения ( $R$ ) и пропускания ( $T$ ) для  $TM$ - поляризованной волны в зависимости от фактора заполнения металлическими стержнями диаметром 30 нм

3.2  $TM$ - поляризация

Зависимости коэффициентов отражения и прохождения для диэлектрической пластины с периодическим массивом стержней диаметром  $\Delta_1 = 3$  нм и  $\Delta_2 = 30$  нм от объемной концентрации стержней  $f$  показаны на рис. 6 и 7.

Как и в случае  $TE$ - поляризации тут тоже можно выделить область с осцилляцией коэффициента отражения. Можно предположить, что такие осцилляции вызваны причинами схожими с предыдущим случаем. При этом в модели эффективной среды осцилляции пропадают уже при  $f = 20\%$  (точный электромагнитный расчет показывает 35%). Предполагается, что усредненная диэлектрическая проницаемость, рассчитанная по формуле (2), не предполагает интерференции парциальных волн, отраженных от металлических стержней.

Отметим также существенное различие коэффициентов отражения в случае 30 нм стержней, рассчитанных методом эффективной среды (2) и численным моделированием [14]. Как говорилось ранее (рис. 2) коэффициенты отражения и пропускания для такого размера стержней приблизительно равны. При этом вклад парциальных волн, отраженных от стержней, в суммарную амплитуду отраженной волны становится существенен. Возможно, именно интерференция таких парциальных волн влияет на отличие в зависимостях коэффициента отражения от фактора заполнения (рис. 7).

Здесь можно выделить область с фактором заполнения от 20 до 30%. Тут наблюдается достаточно высокий коэффициент отражения, при этом расстояние между центрами металлических стержней составляет от 50 до 60 нм  $\sim \lambda/6$ . Такая композитная структура, в данном диапазоне, представляет собой двумерный фотонный кристалл.

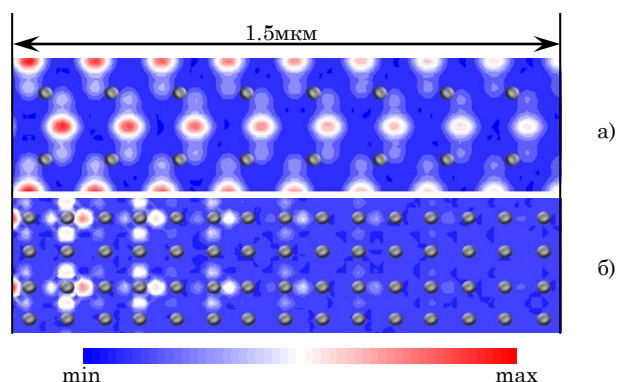


Рис. 8 – Распределение поля  $TM$ - поляризованной волны в композитном материале (диэлектрическая пластина с металлическими стержнями). (а)  $f=2.66\%$ , (б)  $f=9.61\%$ .

Точный электромагнитный расчет поля  $TM$ - поляризованной волны в такой композитной структуре для 30 нм стержней показан на рис. 8 (объемные концентрации 2.66%, 9.61%).

Видно, что при малых концентрациях формируются некие резонансные структуры, как и в  $TE$ -случае. Однако такие же резонансные структуры наблюдаются и при увеличении концентрации стержней (в случае  $TE$ -поляризации наблюдалось некое усреднение поля по глубине). Возможно, что именно отсутствие такого усреднения поля с увеличением объемной концентрации стержней приводит к уменьшению поглощения структуры и материал приобретает свойства фотонных кристаллов [15] (такого уменьшения коэффициента поглощения  $\alpha$  не наблюдается для  $TE$ -поляризованной волны).

#### 4. ВЫВОДЫ

Рассмотрено модель эффективной среды для описания прохождения света в композитном материале. Показано, что структурированные массивы металлических стержней в диэлектрическом материале могут иметь нетривиальные оптические свойства, которые тяжело описать с помощью модели эффективной среды и для моделирования прохождения света, в таких структурах, нужно использовать точные электромагнитные методы – это несмотря на малые размеры стержней (по сравнению с длиной волны).

Методом численного моделирования установлены ограничения модели эффективной среды для описания рассеивания  $TE$ - и  $TM$ -поляризованного света структурированными композитными материалами.

### Відбивання і проходження світла у структурованому композитному матеріалі

А.О. Голобородько

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
вул. Володимирська, 64/13, 01601 Київ, Україна

У роботі розглянуті оптичні властивості композитного матеріалу, що складається з діелектричної пластини з двовимірною ґраткою срібних нанорозмірних частинок. Проаналізовано можливість моделі ефективного середовища описувати відбивання і проходження когерентної електромагнітної хвилі в діелектричній пластині з масивом металевих стрижнів. Розраховані коефіцієнти відбиття і пропускання такого середовища в залежності від об'ємної концентрації стрижнів. Результати розрахунку із застосуванням моделі ефективного середовища, отриманої з використанням нелокальної теорії усереднення, порівняні з даними точного електромагнітного розрахунку методом  $T$ -матриці.

**Ключові слова:** Композитна структура, Ефективне середовище, Числове моделювання.

### Light Reflection and Transmission in Structured Composite Material

A.A. Goloborodko

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska Str., 01601 Kyiv, Ukraine

The paper deals with the optical properties of composite material which consist of dielectric plate with a 2D array of silver nanoparticles. The possibility of describing the reflection and transmission of coherent electromagnetic radiation in a dielectric slab with an array of metal rods by effective medium model was analyzed. The coefficients of reflection and transmission depending on rods filling factor for such medium were calculated. The results of calculations by nonlocal homogenization model were compared with the data of the exact  $T$ -matrix method calculations.

**Keywords:** Composite structure, Effective medium, Numerical simulation.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. D.R. Smith, W. Padilla, D. C. Vier, S.C. Nemat-Nasser, S. Schultz, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4184 (2000).
2. L. Wu, S. He, L. Chen, *Opt. Exp.* **11**, 1283 (2003).
3. A. Taleb, V. Russier, A. Courty, M.P. Pileni, *Phys. Rev. B* **59**, 13350 (1999)
4. A. Mekis, J.C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P.R. Villeneuve, J.D. Joannopoulos, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3787 (1996).
5. Л.А. Головань, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров, *УФН* **177**, 619 (2007).
6. M.G. Silveirinha, *Phys. Rev. E* **73**, 46612 (2006).
7. M.G. Silveirinha, P.A. Belov, C.R. Simovski, *Phys. Rev. B* **75**, 35108 (2007).
8. В.И. Балакший, В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков, *Физические основы акустооптики* (Москва: Радио и связь. 1985).
9. D.V. Podanchuk, V.N. Kurashov, A.A. Goloborodko, M.M. Kotov, V.P. Dan'ko, O.O. Parhomenko, *Proc. SPIE* **8338**, 83380F (2011).
10. R.A. Shelby, D.R. Smith, S. Schultz, *Science* **292**, 77 (2001).
11. E.D. Palik Ed., *Handbook of Optical Constants of Solids* (New York: Academic Press: 1998).
12. E. Popov, S. Enoch, *Opt. Lett.* **32**, 3441 (2007).
13. K.S. Onoprienko, A.A. Goloborodko, L.Y. Robur, T.V. Rodionova, *VIII International Conference "Electronics and Applied Physics"*, art. no. 12, 31 (Kyiv: 2012).
14. D.W. Mackowski, M.I. Mishchenko, *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 2266 (1996).
15. A.A. Gorbatsevich, V.S. Gorelik, A.V. Friman, *Bulletin of the Lebedev Physics Institute* **40** No2, 44 (2013).