

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Владимирский государственный университет  
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»  
(ВлГУ)**

## **ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

Студент       Ефремов Илья Михайлович

Институт       прикладной математики, физики и информатики

Направление 28.03.01 – нанотехнологии и микросистемная техника

**Тема выпускной квалификационной работы:**

### **ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГИБРИДНЫХ НАНОДИМЕРОВ Au/Si**

Руководитель ВКР: \_\_\_\_\_Кузнецова Е.Г.

Студент: \_\_\_\_\_Ефремов И.М.

**Допустить выпускную квалификационную работу к защите  
в государственной экзаменационной комиссии**

Заведующий кафедрой: \_\_\_\_\_ Аракелян С.М.  
«08» июня 2020 г.

ВЛАДИМИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ: \_\_\_\_\_

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

ЗАДАНИЕ  
НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ

Студенту Ефремову Илье Михайловичу

1. Тема работы Исследование оптических свойств гибридных нанодимеров Au/Si утверждена приказом по университету № 388/4 от 14.05.2020 года.
2. Срок сдачи студентом законченной работы 06.06.2020 года.
3. Исходные данные к работе Программное обеспечение для мультифизического моделирования COMSOL Multiphysics, матрицы когерентности и параметры Стокса для численных расчётов.
4. Содержание расчетно-пояснительной записки (перечень подлежащих разработке вопросов):
  - 1) Изучение теоретических принципов взаимодействия электромагнитного поля с гибридными наноструктурами.
  - 2) Разработка модели взаимодействия оптического поля с нанодимерами состава Au/Si средствами COMSOL Multiphysics.
  - 3) Получение распределения интенсивности ближнего поля, построение графиков сечений поглощения, рассеяния и экстинкции в модели COMSOL Multiphysics.
  - 4) Анализ полученных результатов.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей):
  - 1) Название работы.
  - 2) Постановка задачи.
  - 3) Графики зависимости сечений рассеяния, поглощения и экстинкции от расстояния до подложки, расстояния между сферами и от длины волны для нанодимеров состава Au/Si
  - 4) Результаты моделирования.
  - 5) Выводы.
6. Консультанты Жирнова С.В. (нормоконтроль)

Дата выдачи задания 06.12.2019 года

Руководитель \_\_\_\_\_

(подпись)

Задание принял к исполнению \_\_\_\_\_

(подпись студента)

## АННОТАЦИЯ

Целью выпускной квалификационной работы является исследование и компьютерное моделирование взаимодействия оптических полей с нанодимерами. Произведено моделирование взаимодействия оптических полей с нанодимерами с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics. В работе получены графики сечений рассеяния, поглощения и экстинкции и диаграммы направленности дальнего поля для нанодимеров при наличии и отсутствии подложки, а также при различных расстояниях между сферами.

Пояснительная записка содержит 62 с., 21 рис., 14 табл., 20 источников, 1 прил.

## SUMMURY

The purpose of this written graduation work is to investigate and computer simulation of the interaction of optical fields with nanodimers. The interaction of optical fields with nanodimers was simulated using the “COMSOL Multiphysics” software package. As a result of the work, plots of scattering cross sections, absorption and extinction and radiation patterns of the far-field for nanodimers in free space and presence of a dielectric substrate, as well as at different distances between the nanoparticles were obtained.

The graduation diploma project contains 62 pages, 21 pictures, 14 tables, 20 sources, 1 app.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	5
1 РАССЕЯНИЕ СВЕТА. ТЕОРИЯ МИ ДЛЯ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НА НИХ ИЗЛУЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ДИАПАЗОНА .....	7
1.1 Теория Ми .....	7
1.2 Оптические свойства дипольных наночастиц.....	15
1.3 Резонансы Ми .....	21
1.3.1 Оптические резонансы в сферических частицах произвольных размеров .....	21
1.4 Проблемы рассеяния.....	29
1.5 Плазмонные, диэлектрические и гибридные наночастицы.....	32
2 РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИБРИДНЫХ НАНОДИМЕРОВ Au/Si С ОПТИЧЕСКИМ ПОЛЕМ .....	37
2.1. Выбор среды моделирования.....	37
2.2 Разработка модели гибридного нанодимера Au/Si средствами COMSOL Multiphysics .....	38
2.3. Результаты моделирования. Диаграммы направленности дальнего поля ....	44
2.4 Анализ графиков сечений рассеяния, поглощения и экстинкции .....	53
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	56
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	57
ПРИЛОЖЕНИЕ А .....	59

					<i>ВлГУ.02.03.02.НТ-116.03.00 ПЗ</i>				
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>	<i>Исследование оптических свойств гибридных нанодимеров Au/Si</i>	<i>Литера</i>		<i>Лист</i>	<i>Листов</i>
<i>Разраб.</i>		<i>Ефремов И.М.</i>		<i>06.06.19</i>		<i>У</i>		4	64
<i>Пров.</i>		<i>Кузнецова Е.Г.</i>		<i>06.06.19</i>					
<i>Н. контр.</i>		<i>Жирнова С.В</i>		<i>06.06.19</i>					
<i>Утв.</i>		<i>Аракелян С.М.</i>		<i>06.06.19</i>		<i>Пояснительная записка</i>			
					<i>НТ-116</i>				

## ВВЕДЕНИЕ

В исследованиях по ряду направлений нанооптики в последнее время все чаще рассматриваются гибридные нанообъекты, что обусловлено наличием у них свойств, не присущих гомогенным наноструктурам. В гибридных системах более выраженными являются эффекты гигантского комбинационного рассеяния, изменения скорости спонтанного радиационного распада, аномально высокого квантового выхода флуоресценции молекул, фотоиндуцированных химических реакций вблизи металлической поверхности и другие.

Вид резонансов оптического поля зависит от материала и формы частиц, а также от параметров самого действующего на частицу электромагнитного поля. Варьирование исходных характеристик позволяет управлять резонансами наночастиц, что находит применение на практике, в частности, в нанофотонике и наноплазмонике [1,2]. Механизм взаимодействия оптического поля с наночастицами лежит в основе работы ряда оптоэлектронных устройств, солнечных элементов и наноантенн. Кроме того, ведутся разработки в области нанопотонных интегральных схем, нанолазеров и других устройств, работа которых основана также на эффектах субволновой оптики и квантово-размерных явлениях [3].

Резонансные явления наблюдаются не только в отдельных частицах, но и в целых ансамблях. При сближении частиц происходит смещение резонансов, что приводит к изменению поля между ними. Это явление открывает возможности использования свойств ансамблей частиц в информационных технологиях, а также производить селективное оптическое действие на распределение системы наночастиц [4].

В настоящее время ведутся разработки гибридных металлodieлектрических структур (нанономеров и слоистых наносистем), которые объединяют в себе все преимущества металлических и диэлектрических наночастиц. Гибридные

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		5

наноструктуры находят применение в качестве наноантенн и наноструктур на их основе, которые обладают способностью избирательно рассеивать световые волны, усиливать и передавать в заданном направлении оптические сигналы, управлять распространением таких сигналов и генерировать оптические гармоники.

Поскольку экспериментальные исследования ряда оптических свойств нанодимеров и слоистых наноструктур трудно реализуемы либо требуют высокоточной дорогостоящей аппаратуры, довольно эффективными являются методы априорного компьютерного и математического моделирования, позволяющие сделать оценку оптических свойств до проведения натурального эксперимента.

Цель работы – исследование и компьютерное моделирование взаимодействия оптических полей с нанодимерами кремния и золота, определение оптических свойств гибридных наночастиц Au/Si.

Для достижения цели были определены и решены следующие задачи:

- 1) Анализ научной литературы и публикаций в области нанооптики.
- 2) Разработка компьютерной модели взаимодействия оптического поля с нанодимерами Au-Au, Si-Si, Au-Si средствами COMSOL Multiphysics.
- 3) Получение диаграмм направленности для частиц в свободном пространстве и в присутствии диэлектрической подложки.
- 4) Построение графиков зависимости сечения рассеяния, поглощения и экстинкции от длины волны для нанодимеров.
- 5) Анализ полученных результатов.

Объект исследования – гибридные нанодимеры золота и кремния.

Предмет исследования – оптические свойства гибридных нанодимеров золота и кремния.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		6

# 1 РАССЕЯНИЕ СВЕТА. ТЕОРИЯ МИ ДЛЯ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НА НИХ ИЗЛУЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ДИАПАЗОНА

## 1.1 Теория Ми

Рассеяние света может рассматриваться как перенаправление света, которое происходит, когда электромагнитная волна сталкивается с препятствием, в нашем случае с частицей. Когда электромагнитная волна взаимодействует с дискретной частицей, орбиты электрона в составе молекул периодически возмущаются с той же частотой, что и электрическое поле волны. Колебание или возмущение электронного облака приводит к периодическому разделению заряда внутри молекулы, которое называется индуцированным дипольным моментом. Колеблющийся индуцированный дипольный момент проявляется как источник электромагнитного излучения, что приводит к рассеянию света. Большинство света, рассеянного частицей, излучается на той же частоте, что и падающий свет. Этот процесс определяется как упругое рассеяние. Таким образом, вышеприведенные комментарии описывают процесс рассеяния света как сложное взаимодействие между падающей электромагнитной волной и молекулярной/атомной структурой рассеянного объекта [5]. На рисунке 1.1.1 показано рассеяние света дипольной частицей.

					ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		7

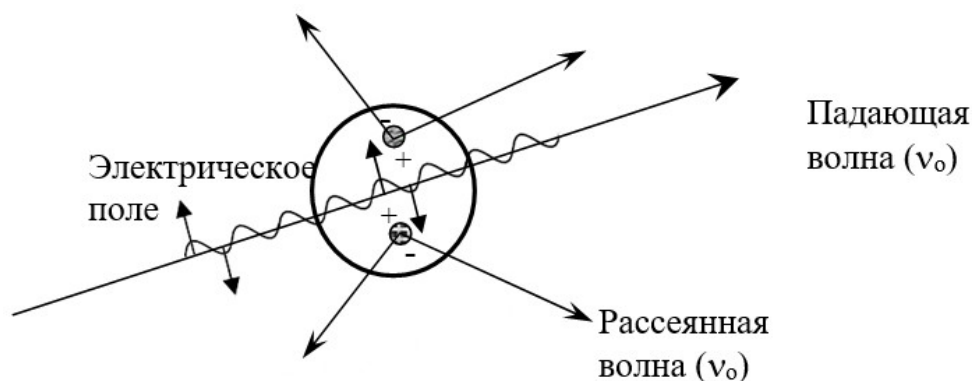


Рисунок 1.1.1 – Рассеяние света падающей электромагнитной волны дипольной частицей [5]

Формально теория рассеяния света может быть классифицирована с точки зрения двух теоретических рамок. Одним из них является теория рассеяния Релея, которая, строго говоря, как первоначально сформулировано, применима к малым, диэлектрическим, сферическим частицам. Во-вторых, теория рассеяния Ми, которая включает в себя общее решение сферического рассеяния не зависимо от размера частиц. Соответственно, теория рассеяния Ми не имеет ограничений по размеру и сходится до предела геометрической оптики для крупных частиц. Таким образом, теория Ми может быть использована для описания большинства случаев рассеяния сферическими частицами, включая рассеяние Релея. Однако теория рассеяния Релея, как правило, предпочтительнее, если применимо, из-за сложности формулировки теории Ми. Критериями релеевского рассеяния являются  $\alpha \ll 1$  и  $|m| \alpha \ll 1$ , где  $\alpha$  – это безразмерный параметр, выражаемый из:

$$\alpha = \frac{2\pi a}{\lambda}, \quad (1.1.1)$$

где  $a$  – радиус сферической частицы.

$\lambda$  – относительная длина рассеяния, определяемая как:

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		8



$$\lambda = \frac{\lambda_0}{m_0}, \quad (1.1.2)$$

где  $\lambda_0$  – длина падающей волны в вакууме;

$m_0$  – коэффициент, представляющий рефракционный индекс окружающей среды.

Наконец,  $m$  является рефракционным индексом рассеянной частицы и находится как:

$$m = n - ik, \quad (1.1.3)$$

где  $n$  – коэффициент, указывающий на преломление света и определяющийся как отношение скорости света в вакууме к скорости света в материале.

Также неотъемлемой частью теории рассеяния является коэффициент поглощения материала (*adsorption coefficient*):

$$\text{adsorption coefficient} = \frac{4\pi k}{\lambda}, \quad (1.1.4)$$

По мере необходимости величина рефракционного индекса  $|m|$  определяется как:

$$|m| = (n^2 + k^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.1.5)$$

На рисунке 1.1.2 показана геометрия рассеяния в сферических координатах, используемая в теориях Ми и Релея и соответствующая одному лучу падающей волны, рассеивающейся на одной сферической частице. Используя эту систему

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		9

координат, параметры рассеяния могут быть определены для решений Релея и Ми.

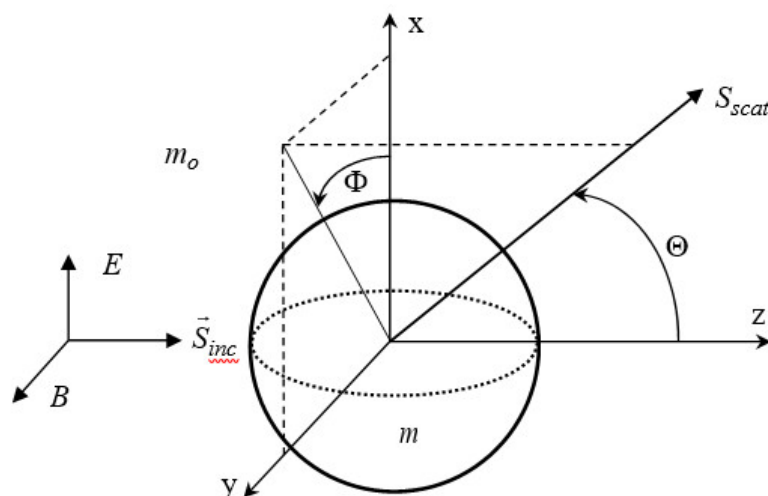


Рисунок 1.1.2 – Геометрия координат для рассеяния Ми и Релея [5]

Для каждого угла рассеяния  $(\phi, \theta)$  уравнения (1.1.6) и (1.1.7) представляют интенсивность рассеянного излучения вертикально и горизонтально поляризованного света по отношению к плоскости рассеяния, соответственно, что определяется падающим лучом (интенсивность  $I_0$ ) и рассеянным лучом:

$$I_{\phi} = I_0 \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} i_1 \sin^2 \phi, \quad (1.1.6)$$

$$I_{\theta} = I_0 \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} i_2 \cos^2 \phi. \quad (1.1.7)$$

Для идеально сферических частиц поляризованное излучение падающей волны производит столь же поляризованное рассеянное излучение; следовательно, проблема рассеяния может быть пересмотрена с точки зрения состояний поляризации в отношении рассеяния плоскости. Соответственно, уравнения (1.1.6) и (1.1.7) могут быть переформулированы с точки зрения дифференциального рассеяния поперечных сечений, а именно

					ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		10

$$I_{VV} = I_0 \frac{1}{r^2} \sigma'_{VV}, \quad (1.1.8)$$

$$I_{HH} = I_0 \frac{1}{r^2} \sigma'_{HH}. \quad (1.1.9)$$

В этих двух уравнениях описывается состояние поляризации падающей волны и рассеянного света, соответственно, относительно ориентации плоскости рассеяния. В частности, индексы VV относятся как к вертикально поляризованной падающей волне, так и к вертикально поляризованному рассеянному свету по отношению к плоскости рассеяния. Аналогичным образом, подписки HH относятся как к горизонтально поляризованной падающей волне, так и к горизонтально поляризованному рассеянному свету по отношению к плоскости рассеяния. Для неполяризованного света, рассеяние определяется следующим образом:

$$I_{scat} = I_0 \frac{1}{r^2} \sigma'_{scat}, \quad (1.1.10)$$

где  $\sigma'_{scat}$  – является средним значением между  $\sigma'_{VV}$  и  $\sigma'_{HH}$  и не имеет зависимости от  $\varphi$ .

Уравнения 1.1.8 – 1.1.9 дают выражение интенсивности света одного рассеянного луча. Эти уравнения также могут быть пересмотрены с точки зрения скорости рассеянной энергии в определенный твердый угол, как показано на рисунке 1.1.3.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		11

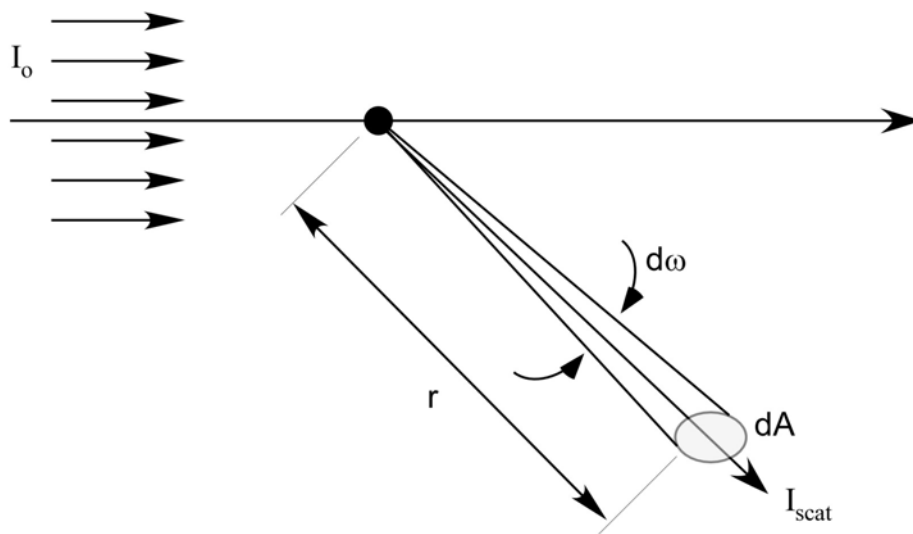


Рисунок 1.1.3 – Интенсивность углового рассеяния [5]

Теория рассеяния Ми является обобщенным решением, которое описывает рассеяние электромагнитной волны однородной сферической средой, отличной от той из среды, через которую проходит волна [6]. Стоит сказать, что рассеяние Ми не является независимым физическим явлением. Это лишь определенное решение уравнений Максвелла для многополюсного излучения, обусловленное электрической поляризацией молекул в рассеивающих частицах, когда на нее падает электромагнитная волна. Это дает решения для рассеяния, где фаза падающего сигнала может даже значительно изменяться в пределах размера рассеивающей частицы. Поэтому, в отличие от релеевского рассеяния, оно не требует, чтобы условие  $\frac{2\pi d}{\lambda} \ll 1$  было выполнено. Частицы пыли, дыма и капель дождя являются распространенными причинами рассеяния распространяющихся волн.

На основе теории Ми, дифференциальные рассеяния поперечных сечений определяются с точки зрения угловой интенсивности функциями  $i_1$  и  $i_2$ , как это дается выражениями:

					ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		12

$$\sigma'_{VV} = \frac{\lambda^2}{4\pi^2} i_1, \quad (1.1.11)$$

$$\sigma'_{HH} = \frac{\lambda^2}{4\pi^2} i_2. \quad (1.1.12)$$

Два вышеуказанные уравнения усреднены для определения дифференциального рассеяния поперечного сечения для неполяризованного падающего света, что дает отношение:

$$\sigma'_{scat} = \frac{\lambda^2}{8\pi^2} (i_1 + i_2), \quad (1.1.13)$$

В этой формулировке, функции интенсивности рассчитываются из бесконечной серии:

$$i_1 = \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \theta) + b_n \tau_n(\cos \theta)] \right|^2, \quad (1.1.14)$$

$$i_2 = \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \tau_n(\cos \theta) + b_n \pi_n(\cos \theta)] \right|^2, \quad (1.1.15)$$

В уравнениях (1.1.14) и (1.1.15) угловые зависимые функции  $\pi_n$  и  $\tau_n$  выражаются с точки зрения полином Лежандра:

$$\pi_n(\cos \theta) = \frac{P_n^{(1)}(\cos \theta)}{\sin \theta}, \quad (1.1.16)$$

$$\tau_n(\cos \theta) = \frac{dP_n^{(1)}(\cos \theta)}{d\theta}, \quad (1.1.17)$$

где параметры  $a_n$  и  $b_n$  определяются как

$$a_n = \frac{\Psi_n(\alpha)\Psi'_n(m\alpha) - m\Psi_n(m\alpha)\Psi'_n(\alpha)}{\xi(\alpha)\Psi'_n(m\alpha) - m\Psi_n(m\alpha)\xi'_n}, \quad (1.1.18)$$

$$b_n = \frac{m\Psi_n(\alpha)\Psi'_n(m\alpha) - \Psi_n(m\alpha)\Psi'_n(\alpha)}{m\xi(\alpha)\Psi'_n(m\alpha) - \Psi_n(m\alpha)\xi'_n}, \quad (1.1.19)$$

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		13

где параметр  $\alpha$  определяется как

$$\alpha = \frac{2\pi a m_0}{\lambda_0}, \quad (1.1.20)$$

Функции Рикатти-Бесселя  $\Psi$  и  $\xi$  определяются из функции Бесселя первого вида ( $J_{n+1/2}(z)$ ), где

$$\Psi_n(z) = \left(\frac{\pi z}{2}\right)^{\frac{1}{2}} J_{n+\frac{1}{2}}(z), \quad (1.1.21)$$

$$\xi_n(z) = \left(\frac{\pi z}{2}\right)^{\frac{1}{2}} H_{n+\frac{1}{2}}(z) = \Psi_n(z) + iX_n(z), \quad (1.1.22)$$

где  $H_{n+1/2}(z)$  – функция Ханкеля второго рода;

$X_n$  – параметр, определяемый из функции Бесселя второго порядка.

Наконец, полная экстинкция и рассеяние сечения выражаются как:

$$\sigma_{ext} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}\{a_n + b_n\}, \quad (1.1.23)$$

$$\sigma_{scat} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2). \quad (1.1.24)$$

В настоящее время теория электромагнитного рассеяния для сферы, которая называется теорией Ми, представляет собой единственный практический метод расчета светорассеивающих свойств конечных частиц произвольного размера и показателя преломления. Однако вначале многие представляющие интерес частицы не являются сферами. Поэтому очень важно знать, в какой степени теория Ми применима к несферическим частицам. Для определения этого требуется обобщение большого количества экспериментальных данных и расчетов.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		14

## 1.2 Оптические свойства дипольных наночастиц

В работе [7] рассматривается дипольный резонанс для металлических наносфер и проводится анализ эффективности экстинкции в зависимости от размера дипольных частиц.

В данной работе резонанс металлических сфер описывается следующим образом: электрическое поле электромагнитной световой волны, воздействуя, смещает облако свободных электронов и, тем самым, создаёт некомпенсированные заряды около поверхности частицы. Происходящие когерентные колебания электронов во внешнем поле называются дипольным плазмоном, а оптический резонанс – поверхностным резонансом. Частота резонанса определяется концентрацией и эффективной массой электронов, формой, структурой и размером частиц, межчастичным взаимодействием и влиянием окружения. Для описания оптики наночастиц с оптическим резонансом достаточно релеевского приближения и теории Друде [8]. Поглощение и рассеяние света частицей определяется её электростатической поляризуемостью  $\alpha_0$ :

$$\alpha_0 = \frac{3V}{4\pi} \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} = a^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + \varepsilon_m}, \quad (1.2.1)$$

где  $\varepsilon_m$ - диэлектрическая проницаемость среды.

Интегральные сечения поглощения, рассеяния и экстинкции:

$$C_{ext} = C_{abc} + C_{sca} = \frac{12\pi k}{a^3} \frac{\varepsilon_m \text{Im}(\varepsilon)}{|\varepsilon - \varepsilon_m|^2} |\alpha|^2 + \frac{8\pi}{3} k^4 |\alpha|^2 = 4\pi k \text{Im}(\alpha), \quad (1.2.2)$$

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		15

где  $k = \frac{2\pi\sqrt{\varepsilon_m}}{\lambda}$  – волновое число в среде;

$\alpha$ - перенормированная поляризуемость.

$$\alpha = \frac{\alpha_0}{1 + \varphi(ka)a^{-3}\alpha_0}, \quad (1.2.3)$$

где  $\varphi(ka)$  – функция, учитывающая эффекты радиационного затухания.

Для очень малых частиц уравнение (1.2.3) выглядит так:

$$\alpha = a^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m - i\left(\frac{2}{3}\right)(ka)^3(\varepsilon - \varepsilon_m)}, \quad (1.2.4)$$

Только с использованием перенормированной поляризуемости можно удовлетворить теореме Друде. Появление мнимого члена в уравнении (1.2.4) есть следствие обратного действия рассеянного поля на осциллирующий диполь.

Из уравнения

$$C_{abs} = \pi a^2 \frac{3ka\varepsilon_m}{(2\varepsilon_m + \varepsilon_{ib})^2} \frac{\omega_p^2 \frac{\gamma_b}{\omega}}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\gamma_b}{2}\right)^2}, \quad (1.2.5)$$

где  $\varepsilon_{ib}$  – вклад межзонных электронных переходов;

$\omega_p$  – частота объёмных колебаний свободных электронов;

$\gamma_b$  – объёмная константа затухания;

$\omega_0$  – резонансная частота плазмона;

можно определить первый дипольный резонанс сферической частицы, следующие резонансы  $M_n$  описываются соотношением  $\omega_n = \frac{\omega_p}{\sqrt{\varepsilon_{ib} + \varepsilon_m \frac{(n+1)}{n}}}$ .

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		16



В данной работе приводится зависимость резонансов коллоидного золота и серебра от размера частиц. Основные характеристики: факторы эффективности  $Q_{ext,sca}$  и оптическая плотность и интенсивность рассеяния под углом 90 градусов:

$$A_{ext} = 0.651 \frac{cl}{\rho} \frac{Q_{ext}}{d}, \quad (1.2.6)$$

$$I_{90}(\lambda) = 0.651 \frac{16cl^2}{\rho d} \left[ \frac{16S_{11}(ka, \theta=90)}{3(ka)^2} \right], \quad (1.2.7)$$

где  $\rho$  – плотность металла;

$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{\pi a^2}$  – фактор эффективности экстинкции;

$S_{11}(ka, \theta)$  – нормированная интенсивность рассеяния под углом 90 градусов;

$k = \frac{2\pi n_m}{\lambda}$  – волновое число.

Выражение в скобках для релеевских частиц равно нормированному сечению рассеяния  $Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{\pi a^2}$ .

На рисунке 1.2.1 показана зависимость резонансов экстинкции и интенсивности рассеяния света на частицах золота и серебра от их диаметра. При постоянном весе металла наиболее эффективное ослабление наблюдается для частиц золота и серебра с диаметрами 70 нм и 20 нм, соответственно, а максимальное рассеяние для серебра с диаметром 40 нм и 100 нм для золота. Рисунок 1.2.1b показывает отношение между рассеянием и экстинкцией. Малые частицы поглощают свет, а большие рассеивают. Равновесие между поглощением наблюдается при диаметре 40 нм для серебряных частиц и 80 нм для золотых.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		17

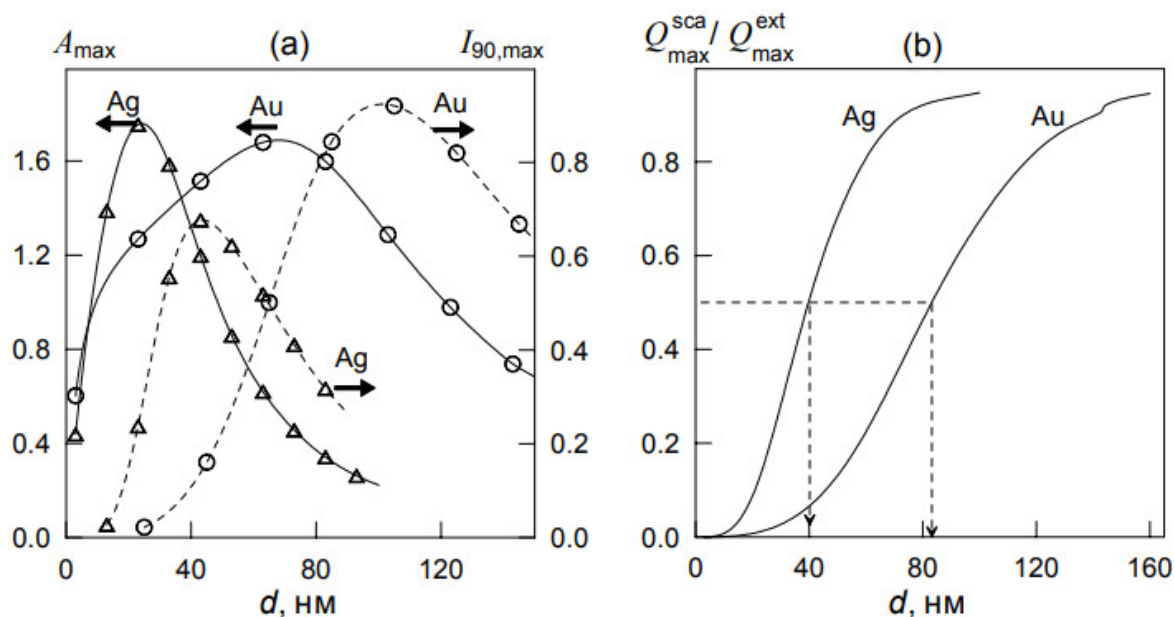


Рисунок 1.2.1 – зависимость резонансов экстинкции и интенсивности рассеяния света на частицах золота и серебра от их диаметра [7]

Также в этой работе рассматриваются геометрические факторы частиц на примере золотых и серебряных наностержней (рисунок 1.2.2).

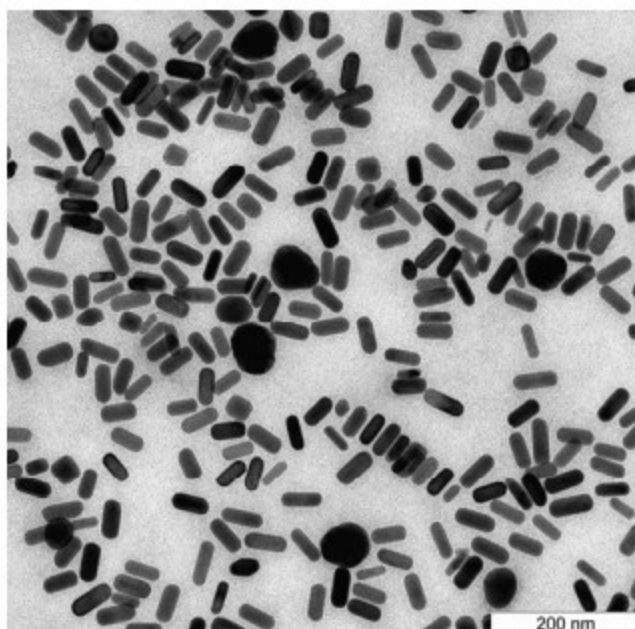


Рисунок 1.2.2 – Электронно-микроскопическое изображение образцов золотых и серебряных наностержней. Основная масса частиц – это цилиндры с полусферическими концами [7]

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		18

Формула типа (1.2.5) в данном случае предсказывает появление двух резонансов, соответствующим колебаниям электронов поперёк и вдоль оси симметрии частицы.

Золотые и серебряные оболочки также, как и наностержни представляют большой интерес. С помощью определённых протоколов могут быть синтезированы золотые наноболочки с ядром из оксида кремния, позволяющие получать частицы диаметром от 80 нм до 400 нм. Резонансы таких частиц превышают резонансы обычных золотых сферических частиц. Оптические свойства таких наноболочек рассчитываются с помощью различных программ типа решения Ми [8]. Положение резонанса определяется отношением толщины оболочки к диаметру ядра и диэлектрическими функциями ядра. Опыты с частицами типа  $\text{SiO}_2/\text{Au}$  показали, что экспериментально синтезированные суспензии наноболочек всегда имеют бóльшую ширину резонансных максимумов по сравнению с шириной, предсказываемой теоретическим моделированием оптических свойств монодисперсных двухслойных частиц по теории Ми.

В этой работе предлагается новый подход для оценки поляризуемости наноболочки и её дипольных оптических свойств, который основан на «принципе дипольной эквивалентности», суть которого описана на рисунках 1.2.3 и 1.2.4.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		19

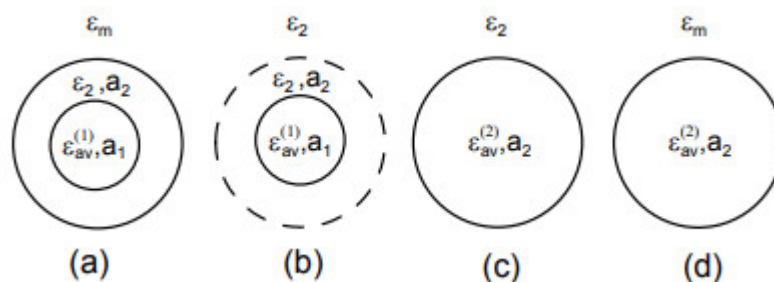


Рисунок 1.2.3 – Схема принципа дипольной эквивалентности. (а) – исходная частица ( $\epsilon_{av}^{(1)}, a_1$ ), покрытая внешним слоем ( $\epsilon_2, a_2$ ) и встроенная в окружающую среду с проницаемостью  $\epsilon_m$ ; (б) – начальная частица в среде с проницаемостью  $\epsilon_2$ , окруженная воображаемой сферой радиуса  $a_2$ ; (с) – эквивалентная частица ( $\epsilon_{av}^{(2)}, a_2$ ) в среде с проницаемостью  $\epsilon_2$ ; (д) – эквивалентная частица ( $\epsilon_{av}^{(2)}, a_2$ ) в среде с проницаемостью  $\epsilon_m$  [7]

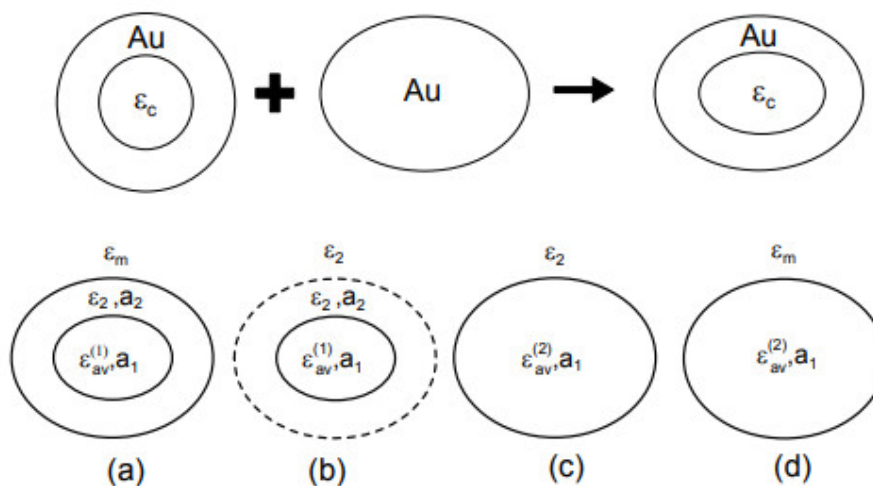


Рисунок 1.2.4– Схема комбинации нанооболочки и наноэллипса (наностержня) для получения эллипсоидальной нанооболочки («нанориса»). Нижняя схема поясняет принцип дипольной эквивалентности для эллипсоидальной оболочки [7]

С подробным описанием этого принципа можно ознакомиться в работе [7]. Можно только сказать, что главным преимуществом этого подхода является возможность применения обычных формул для резонансов сферических частиц по отношению к многослойным сферам с эквивалентной проницаемостью.

В заключение ко всему вышесказанному можно сказать, что особые свойства дипольных частиц могут быть использованы для детектирования биоспецифических взаимодействий на поверхности частиц, также в работе [9]

предлагается использовать необычные свойства дипольного взаимодействия в качестве терапии онкологических заболеваний в медицине и рассматривается возможность создания условий для реализации логических операций, так как данный процессор будет иметь минимальное рассеяние энергии.

### 1.3 Резонансы Ми

Оптические резонансы в металлических наночастицах были выявлены давно, но экспериментальные исследования начались после разработки технологии получения частиц контролируемого размера и формы. В этих экспериментах применялись различные методы получения резонансов: рассеяние света, возбуждение люминесценции, нелинейно-оптические методы. Если не брать во внимание влияние окружающей среды, то резонансные свойства в основном зависят от размера и формы наночастиц.

Например, были проведены исследования спектров релеевского рассеяния шариками из золота и серебра. Подробное описание опыта, его результаты и выводы описаны в работе [10]. Можно только сказать, что форма наблюдавшихся резонансов для частичек в форме шара с диаметром менее 100 нм была близка к лоренцевой.

#### 1.3.1 Оптические резонансы в сферических частицах произвольных размеров

Отдельные члены в выражениях 1.3.1.1 и 1.3.1.2 соответствуют электрическим или магнитным сферическим волнам. Чаще всего в выражениях для электромагнитных полей большую роль играет всего один член. В таких случаях говорят о резонансах. Резонансы возникают, когда коэффициенты Ми

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		21

становятся малы или даже обращаются в ноль. В сферических частицах зависимость коэффициентов  $M_i$  исходит от частоты и радиуса сферы. Зависимость от частоты возникает из-за существенного влияния диэлектрической и магнитной проницаемости. В сфере, состоящей из различных материалов, возникновение резонансов происходит при различных условиях [11]. Диэлектрическую проницаемость можно рассматривать как независимую величину.

$$B^{(2)} = -k_0 \varepsilon_2 \mu_2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_2 r) \hat{L}Y_{nm}(v, \varphi) - i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} \left[ \nabla(h_n^{(1)}(k_2 r) \hat{L}Y_{nm}(v, \varphi)) \right], \quad (1.3.1.1)$$

$$E^{(2)} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} [\nabla(h_n^{(1)}(k_2 r) \hat{L}Y_{nm}(v, \varphi))] + k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_2 r) \hat{L}Y_{nm}(v, \varphi), \quad (1.3.1.2)$$

Где  $\alpha_{nm}^{(2)}$ ,  $\beta_{nm}^{(2)}$  – коэффициенты разложения, которые определяются из непрерывности тангенциальных компонент полей на границе сферы.

Пользуясь вышеприведёнными выражениями, можно найти неизвестные коэффициенты  $\alpha_{nm}$ ,  $\beta_{nm}$ :

$$\beta_{nm}^{(2)} = - \frac{\varepsilon_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 j_n(z_2)] j_n(z_1) - \varepsilon_2 \frac{d}{dz_2} [z_1 j_n(z_1)] j_n(z_2)}{\varepsilon_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 h_n^{(1)}(z_2)] j_n(z_1) - \varepsilon_2 \frac{d}{dz_1} [z_1 j_n(z_1)] h_n^{(1)}(z_2)} b_{nm} = -q_n b_{nm}, \quad (1.3.1.3)$$

$$\alpha_{nm}^{(2)} = - \frac{\mu_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 j_n(z_2)] j_n(z_1) - \mu_2 \frac{d}{dz_2} [z_1 j_n(z_1)] j_n(z_2)}{\mu_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 h_n^{(1)}(z_2)] j_n(z_1) - \mu_2 \frac{d}{dz_1} [z_1 j_n(z_1)] h_n^{(1)}(z_2)} a_{nm} = -p_n a_{nm}, \quad (1.3.1.4)$$

где  $z_{1,2} = \sqrt{\varepsilon_{1,2} \mu_{1,2}} k_0 a = k_{1,2} a$ ;

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		22

$p_n$  и  $q_n$  - коэффициенты Ми.

Данное решение является обобщением решения Ми и чаще всего применяется для решения задач в нанооптике, в случае, когда наночастица может взаимодействовать с атомом.

В диэлектрическом случае коэффициенты Ми зависят от четырёх параметров:  $n=1,2,3,\dots$ ,  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ,  $ka = \frac{\omega a}{c}$ . На рисунке 1.3.1.1 показана зависимость абсолютной величины коэффициентов Ми  $a_n$  ( $n=1$ ) от диэлектрической проницаемости и  $x = \frac{\omega a}{c}$  (параметр, характеризующий размер сферы).

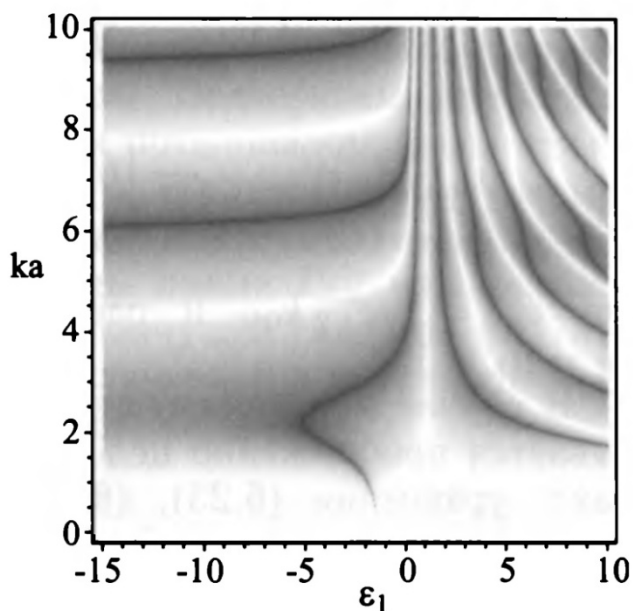


Рисунок 1.3.1.1 – Зависимость абсолютной величины коэффициентов Ми от диэлектрической проницаемости и размера сферы [11].

На этом рисунке чёрный цвет соответствует коэффициенту Ми, который равен 1, то есть резонансу. Белый цвет означает, что коэффициент Ми равен 0, резонанс отсутствует.

Из рисунка 1.3.1.1 видно, что возможно существование бесконечно многих резонансов. Когда  $\epsilon_1$  положительна, резонансы соответствуют модам «шепчущей галереи», и свет распространяясь не может выйти из сферы из-за эффекта полного

					ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		23

внутреннего отражения, но всё-таки из-за кривизны сферы часть энергии излучается. При меньших размерах сферы требуются большие значения диэлектрической проницаемости для существования резонансов мод «шепчущей галереи».

В работе [12] рассматриваются последние достижения Ми резонансных метаматериалов, описанием основополагающих механизмов. Также рассматриваются новые потенциальные положения.

На рисунке 1.3.1.2 показано распределение электрического и магнитного поля в диэлектрическом кубе с магнитным полем, поляризованным вдоль оси  $Z$  и электрическим полем, поляризованным вдоль оси  $Y$ . На 1.3.1.2. *a*, *c* показано электрическое поле в плоскости  $Z=0$  рядом с первым и вторым резонансом Ми соответственно. В случае 1.3.1.2. *b*, *d* изображено магнитное поле в плоскости  $Y=0$  вблизи первого и второго резонанса Ми соответственно.

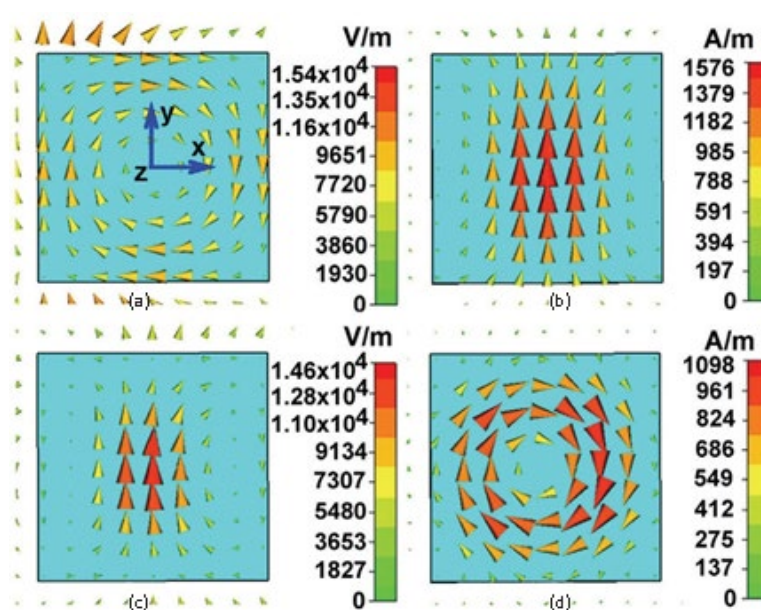


Рисунок 1.3.1.2 – Распределение электрического и магнитного поля в диэлектрическом кубе с магнитным полем, поляризованным вдоль оси  $Z$  и электрическим полем, поляризованным вдоль оси  $Y$  [12]

С точки зрения теории рассеяния все объекты рассеяния могут быть представлены с помощью электрической и/или магнитной плотности



поляризуемости. Рассеяние света на малых сферических частицах является фундаментальной темой в классической электродинамике и основано на решении проблемы Ми дифракции. Рассеянное поле одной изолированной диэлектрической сферы с радиусом  $r_0$  и относительным рефракционным индексом  $n$  может быть разложено в многополюсную серию с 2-полюсным членом рассеянного электрического поля:

$$a_m = \frac{n\psi'_n(nx)\psi'_m(x) - \psi_m(x)\psi'_m(nx)}{n\psi_m(nx)\xi'_m(x) - \xi_m(x)\psi'_m(nx)}, \quad (1.3.1.5)$$

в то время как 2-полюсный член рассеянного магнитного поля:

$$b_m = \frac{\psi_m(nx)\psi'_m(x) - n\psi'_m(x)\psi'_m(nx)}{\psi_m(nx)\xi'_m(x) - n\xi_m(x)\psi'_m(nx)}, \quad (1.3.1.6)$$

где  $x = k_0 r_0$ ,  $k_0$ - волна свободного пространства;

$\psi_m(x)$  и  $\xi_m(x)$ - функции Рикатти- Бесселя.

Коэффициент рассеяния  $a_m$  и  $b_m$  связаны с электрическими и магнитными реакциями сферы. Исходя из теории Ми, мы можем вычислить электрические и магнитные коэффициенты диполя,  $a_1$  и  $b_1$ , соответственно.

Поскольку магнитная реакция немагнитной частицы обычно слаба, важно усилить электромагнитное резонансное поведение. Для самых низких резонансных частот  $a_1$  и  $b_1$  сфера имеет электрические и магнитные диполи. Этот вывод можно оценить из распределения электромагнитной интенсивности в высоком диэлектрическом керамическом кубе для плоскости волны, распространяющейся вдоль оси X (рисунок 1.3.1.2). Видно, что электрические или магнитные поля в основном локализованы в кубиках. Азимутальная компонента смещения тока внутри каждого куба значительно усиливается при первом

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		25

резонансе Ми (рисунок 1.3.1.2 *a*), что приводит к большому магнитному полю вдоль оси Z (рисунок 1.3.1.2 *b*), что соответствует в резонансном режиме  $TE_{011}$  Ми. На втором резонансе Ми, Y компонента тока увеличивает смещения внутри кубов (рисунок 1.3.1.2 *c*) и, следовательно, с большим магнитным полем вдоль азимута (рис. 1.3.1.2 *d*), что соответствует резонансному режиму  $TM_{011}$  Ми.

В статье [13] на примере наночастиц кремния рассматриваются оптические свойства высокоиндексных диэлектрических наночастиц, применение их в качестве резонаторов.

Известно, что в уравнениях Максвелла два типа тока являются источниками электромагнитного поля: ток проводимости и ток смещения. В диэлектриках и полупроводниках, в спектральном диапазоне, далеком от их основной полосы поглощения, ток смещения сильно превышает ток проводимости. Например, на рисунке 1.3.1.3 *a* показаны спектральные зависимости реальных и мнимых частей рефракционного индекса, измеренного при комнатной температуре. На рисунке 1.3.1.3 *b* показано отношение тока проводимости и тока смещения. Видно, что ток смещения сильно превышает ток проводимости при длине волны примерно 400 нм. Поэтому с точки зрения электродинамики чистый кремний можно рассматривать как диэлектрик в этом спектральном диапазоне.

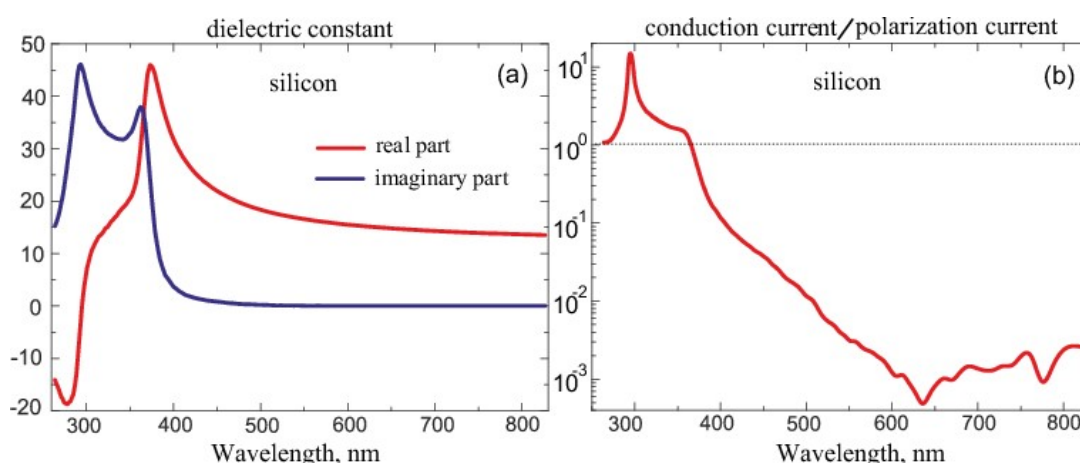


Рисунок 1.3.1.3 – (а) Реальные и мнимые части проницаемости кристаллического кремния. (б) Соотношение тока смещения и тока проводимости в кристаллическом кремнии [13]

Ток смещения увеличивается с увеличением диэлектрической проницаемости. Значит, в диэлектрических частицах ток смещения может быть достаточно силён для появления Ми резонансов. Тем более если такой резонатор изготовлен из диэлектрика с большой проницаемостью, например, кремния, дипольные резонансные условия могут быть выполнены для частиц с размерами меньше длины волны [13].

Диэлектрические наночастицы можно рассматривать как открытый резонатор, который поддерживает различные типы конфигурации электромагнитного поля-моды. Точный анализ дифракции плоской волны сферической частицей, известной как Ми рассеяние, показывает, что наночастицы могут поддерживать электрические и магнитные моды разного порядка. Количество возбуждённых режимов и их порядок зависит от соотношения  $\gamma = \frac{\lambda}{R}$ , где  $\lambda$  – это длина волны, а  $R$  – это радиус диэлектрической частицы. Если  $\gamma$  достаточно большая величина, дифракция частицы может быть описана Релеевским приближением. При уменьшении  $\gamma$  (например, когда длина волны уменьшается и радиус частицы остаётся постоянным), формируется первый резонанс диполя магнитного поля.

На рисунке 1.3.1.4 показано рассеяние спектров кремния радиуса  $R$ . Здесь электрические и магнитные дипольные вклады отмечены  $ed$  и  $md$  соответственно. На рисунке 1.3.1.4 *a* показано рассеяние спектров частиц кремния, расположенного в воздухе, на рисунке 1.3.1.4 *b* показано рассеяние спектров частицы кремния с радиусом  $R=65$  нм, стрелки на рисунке указывают вклад электрического и магнитного диполя.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		27

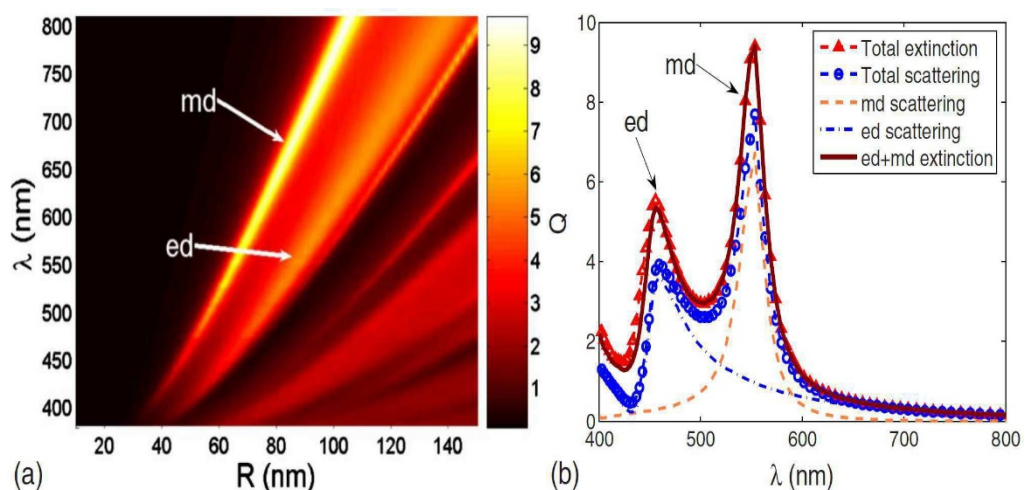


Рисунок 1.3.1.4 – (a) Рассеяние спектров сферических частиц кремния с радиусом  $R$ , расположенных в воздухе. (b) Рассеяние спектров частицы кремния ( $R=65$  нм) [13]

В качестве одного из наиболее важных полупроводников кремний использовался для изготовления электронных устройств, волноводов, детекторов, солнечных элементов и так далее. Однако непрямая запрещенная зона и низкая квантовая эффективность препятствуют использованию кремния для изготовления хороших излучателей. Для интегральных фотонных схем крайне желательны излучатели на основе кремния с размерами в диапазоне 100-300 нм. В статье [14] показывается использование электрического и магнитного резонансов в наночастицах кремния для повышения квантовой эффективности и демонстрируется излучение белого света от наночастиц кремния с размерами элементов  $\sim 200$  нм. Магнитный и электрический дипольный резонансы используются для значительного увеличения времени релаксации горячих носителей, а магнитный и электрический квадрупольные резонансы используются для уменьшения времени излучательной рекомбинации горячих носителей. Эта стратегия приводит к увеличению квантовой эффективности наночастиц кремния почти на пять порядков по сравнению с объемным кремнием с учетом трехфотонно-индуцированного поглощения.

## 1.4 Проблемы рассеяния

Перейдем теперь к проблеме рассеяния. Заметно, что резонансные явления проявляется на графиках фазовых углов  $\alpha_n$  и  $\beta_n$ . В качестве примера на рисунке 1.4.1 показан график фазовых углов для  $m = 9$ . Этот показатель преломления водой для очень большого значения длины волны и наибольшего значения  $m$  встречается на практике.

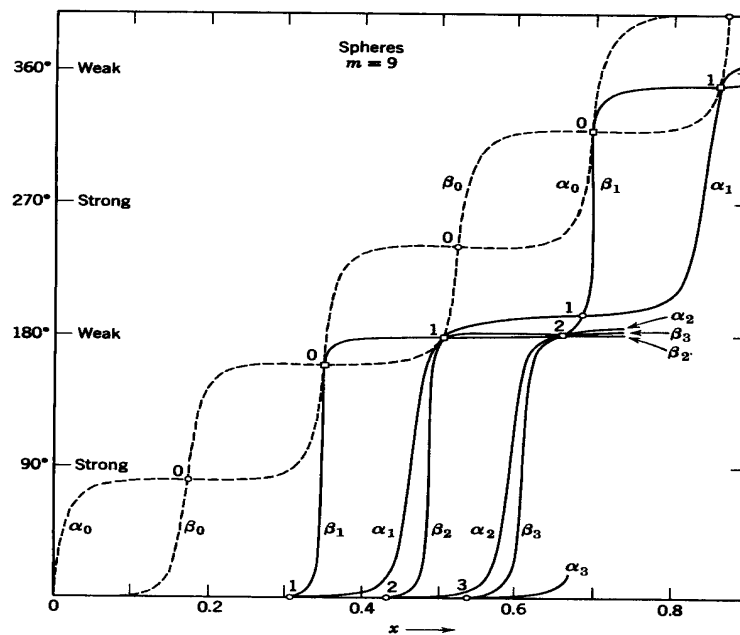


Рисунок 1.4.1 – График фазовых углов  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  против  $x$  для  $m = 9$ . Слова «слабый» и «сильный» относятся ко вкладу в рассеяние; сильные вклады определяют резонансные точки [15]

График был построен на основе фигуры, показывающей все узлы. Кривые для  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  имеют симметричный рекуррентный характер и построены по точной формуле. Другие кривые были нарисованы в виде кривых через узлы, используя все правила касательных. Углы образуются вначале около  $0^\circ$ , затем около  $180^\circ$ , затем  $360^\circ$ , то есть непосредственно около углов, для которых коэффициенты Ми

					ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		29

$$a_n = \frac{1}{2}(1 - e^{-2i\alpha_n}), \quad (1.4.1)$$

$$b_n = \frac{1}{2}(1 - e^{-2i\beta_n}), \quad (1.4.2)$$

равны нулю. Однако проходя из  $0^\circ$  к почти  $180^\circ$ , углы быстро проходят  $90^\circ$  и  $270^\circ$ , где коэффициент  $M_i$  равен 1.

Затем  $a_n$  и  $b_n$  быстро вращаются по кругу во всей области. Их реальные части достигают максимума значений  $a_n=1$  или  $b_n=1$ , когда  $\alpha_n$  или  $\beta_n$  равны  $90^\circ$  и  $270^\circ$ . Значения  $x$ , в которых достигается максимум, определяют точки резонанса. На рисунке 1.4.1 видно, что резонанс точки  $\alpha_n$  превосходит резонанс в точке  $\beta_{n+1}$ , и оба немного превосходят первый узел, который достигается в  $x=r_n$ . Это хорошо согласуется с положением резонансных точек, получаемых из естественных мод колебаний сферы.

Обработка резонанса с помощью фазовых углов выходит за рамки обработки с помощью естественных мод в нескольких отношениях. Во-первых, полезно также, если условия  $m \gg 1$  и  $x \ll 1$  не выполняются строго. Даже если значения  $m = 9$  и  $x = 0,346$  примера (рисунок 1.2.3) не находятся в диапазоне, в котором обычно ожидается, что асимптотические формулы будут выполнены. На самом деле, можно увидеть полное ухудшение резонансного явления, если постепенно уменьшать  $m$  от больших до малых значений. Было эмпирически отмечено, что большинство кривых рассеяния имеют «неровности»; значения  $x$  для положения первых неровностей приведены в таблице 1.4.1.

Таблица 1.4.1 – Значения  $x$  для положения первых неровностей кривой рассеяния [15]

$m$	9	2	1.55	1.5	1.33
$x$	0.346	1.6	2.0	2.0	2.4
$y=mx$	3.11	3.2	3.1	3.0	3.2

Первая неровность обусловлена магнитным диполем с коэффициентом  $b_1$ . Асимптотически при  $m \rightarrow \infty$  резонанс в точке  $y = 3,14$ . При  $m = 9$  резонансный характер все еще очень хорошо сохраняется. Для меньших значений  $m = 2$  или  $1,5$  неровность появляется из-за внезапного увеличения  $\beta_1$  без полного колебания  $b_1$  вокруг круга в комплексной области.

Еще одним преимуществом использования фазовых углов является то, что мы можем легко определить, насколько велико затухание на пике резонанса. Теперь ограничимся асимптотическими условиями  $m \gg 1$  и  $x \ll 1$ . Оставляя только один член в формуле для  $Q$ , где или  $a_n$  или  $b_n$  равно 1, находим:

$$Q = \frac{2(2n+1)}{x^2}, \quad (1.4.3)$$

и, следовательно, поперечное сечение

$$C = Q \cdot \pi a^2 = \frac{(2n+1)\lambda^2}{2\pi}, \quad (1.4.4)$$

Таким образом, мы находим в точке резонанса сечение экстинкции, которое не зависит от размера и коэффициента эффективности  $Q$ , который намного больше 1.  $Q$  в пике магнитного диполя составляет  $6/x^2$ . Для  $m = 9$  и  $x = 0,346$  это дает  $Q = 50$ , что намного выше, чем самое высокое значение  $Q=5.7$ , показанного на рисунке 1.4.2 для умеренного  $m$ . Ширина резонансного пика может быть определена по наклону, на котором график фазовых углов проходит точку резонанса.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		31

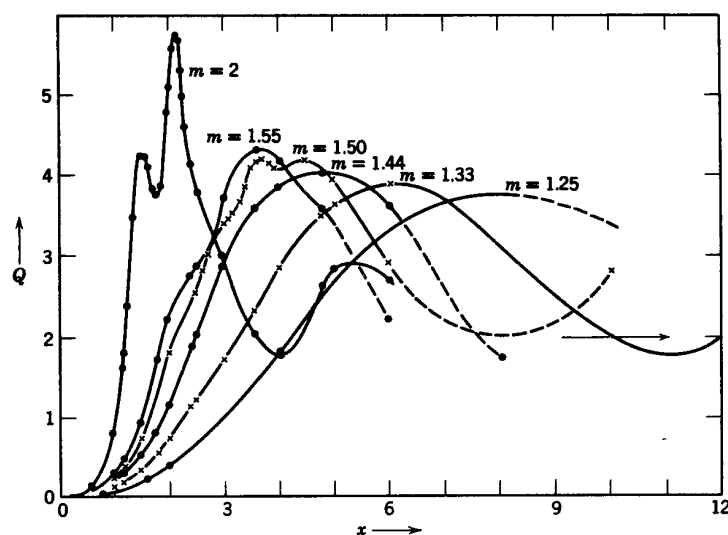


Рисунок 1.4.2 – Кривые экстинкции сфер для шести значений показателя преломления [15]

### 1.5 Плазмонные, диэлектрические и гибридные наночастицы

Оптические свойства плазмонных (металлических) и диэлектрических наночастиц сферической формы могут быть рассмотрены с одной точки зрения основанной на решении задачи дифракции, полученном Густавом Ми. Поле волны, рассеянной на частице может быть записано в виде суммы парциальных сферических волн, также можно записать выражение для нормированного полного сечения рассеяния, сечения поглощения и сечения экстинкции для сферической частицы радиуса  $R$  находящимся в пространстве, заполненном немагнитным диэлектриком с следующим виде:

$$Q_{scs} = \frac{2}{(kR)^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) (|a_l|^2 + |b_l|^2), \quad (1.5.1)$$

$$Q_{ext} = \frac{2}{(kR)^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \operatorname{Re}(a_l + b_l), \quad (1.5.2)$$

$$Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{scs}, \quad (1.5.3)$$

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		32



где  $a_l$  и  $b_l$  – электрическая и магнитная амплитуды рассеяния для немагнитного материала соответственно, которые могут быть выражены в виде:

$$a_l = \frac{R_l^{(a)}}{R_l^{(a)} + iT_l^{(a)}}, \quad (1.5.4)$$

$$b_l = \frac{R_l^{(b)}}{R_l^{(b)} + iT_l^{(b)}}, \quad (1.5.5)$$

где функции  $R_l$  и  $T_l$  записываются в следующем виде:

$$R_l^{(a)} = n\psi_l'(kR)\psi_l(nkR) - \psi_l(kR)\psi_l'(nkR), \quad (1.5.6)$$

$$T_l^{(a)} = n\chi_l'(kR)\psi_l(nkR) - \chi_l(kR)\psi_l'(nkR), \quad (1.5.7)$$

где  $\psi_l(x)$  и  $\chi_l(x)$  – функции Бесселя и Неймана соответственно.

Используя выражения (1.5.1) – (1.5.7) проведём сравнительный анализ сечения поглощения и сечения рассеяния металлической и диэлектрической наночастицы [16]. В качестве металлической наночастицы было выбрано серебро, которое имеет наименьшие потери в оптической области спектра. В качестве материала диэлектрической наночастицы был использован кристаллический кремний, имеющий лучшие характеристики среди диэлектриков в видимой области спектра. Результаты приведены на рисунке 1.5.1.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		33

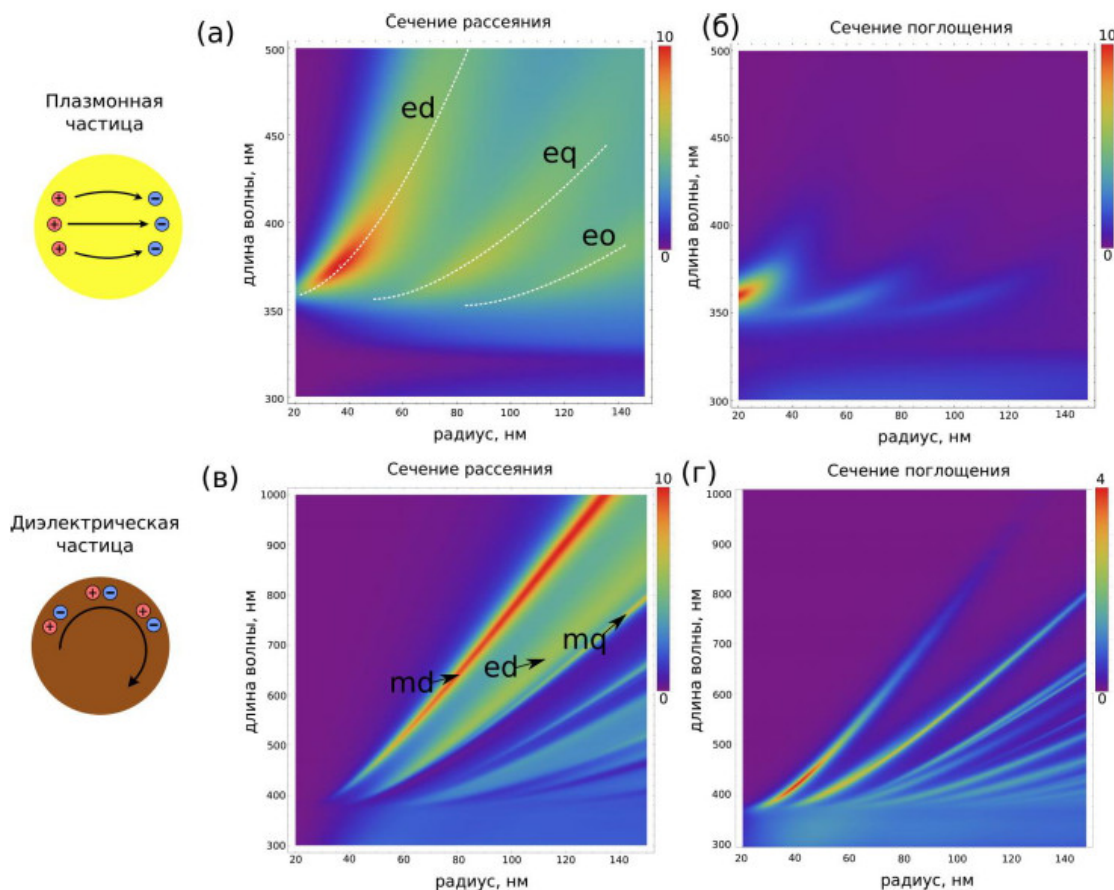


Рисунок 1.5.1 – Оптические свойства металлической и диэлектрической наночастиц в свободном пространстве. Нормированное полное сечение рассеяния серебряной частицы (а) и кремниевой частицы (в) в зависимости от их радиуса и длины волны. Нормированное сечение поглощения серебряной наночастицы (б) и кремниевой наночастицы (г) в зависимости от их радиуса и длины волны [16]

Из рисунка видно, что серебряная частица имеет резонансы только электрического типа, также электрический дипольный (ed), электрический квадрупольный (eq) и электрический октупольный (eo) резонансы, поведение которого изменяется с ростом радиуса, и показано белыми штриховыми линиями. А спектр резонансных мод кристаллического кремния наоборот шире и включает магнитный дипольный момент (md) и магнитный квадрупольный момент (mq). Сравнительный анализ показывает, что диэлектрическая частица имеет значительно меньшие диссипативные потери, которые падают с увеличением длины волны.

Таким образом, плазмонные и диэлектрические наноструктуры имеют как недостатки, так и достоинства. Недостаток плазмонных структур – это высокие диссипативные потери и низкие пороги разрушения. Недостаток диэлектрических структур – низкий коэффициент усиления поля, которое преимущественно усиливается внутри частицы, что является затруднением при использовании таких наноструктур для рамановской спектроскопии и биологических датчиков.

Исходя из всех недостатков и достоинств, в последнее время ведутся разработки гибридных металлодиэлектрических структур, которые объединяют в себе все преимущества металлических и диэлектрических наночастиц. Гибридные наноструктуры находят применение в качестве наноантенн и наноструктур на их основе, которые обладают способностью избирательно рассеивать световые волны, усиливать и передавать в заданном направлении оптические сигналы, управлять распространением таких сигналов и генерировать оптические гармоники [17-19].

На рисунке 1.5.2 приведены несколько способов применения гибридных металлодиэлектрических наноструктур, которые объединяют преимущества металлических и диэлектрических наноантенн (рисунок 1.5.2 а), и способных выполнять преобразование падающего поля в ближнее и обратно, и управлять магнитной компонентой света.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		35

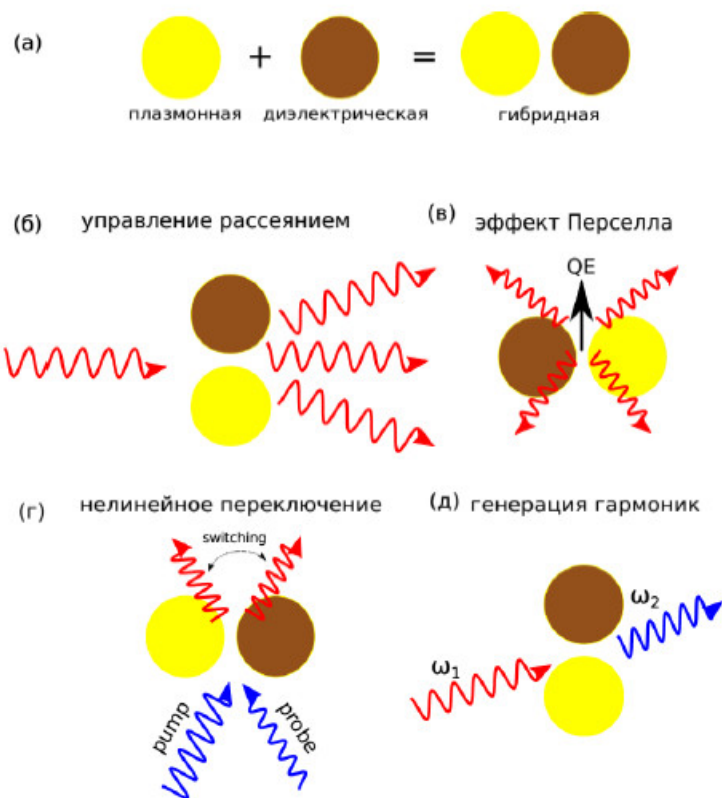


Рисунок 1.5.2 – (а) объединение плазмонных и диэлектрических наноструктур для получения уникальных оптических свойств. (б) – линейное управление излучением в дальней зоне, (в) – управление скоростью распада возбуждённого состояния квантового источника, (г) – нелинейное управление рассеяния света при помощи света, (д) – генерация новых оптических гармоник [16]

## 2 РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИБРИДНЫХ НАНОДИМЕРОВ Au/Si С ОПТИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

### 2.1. Выбор среды моделирования

В данной работе в качестве программы для моделирования был выбран COMSOL Multiphysics. С помощью этого программного пакета инженеры и исследователи моделируют физические процессы по ряду научных направлений.

COMSOL Multiphysics включает в себя все этапы моделирования: создание геометрии, определение свойств материалов и описание физических явлений, настройку решения и процесса постобработки. Моделирование совместно с успешными инженерными расчётами, в некоторых случаях, могут дополнить или частично заменить физические эксперименты и прототипирование, а также позволяют лучше понять изучаемый процесс и увеличить его эффективность для определенной технологии.

Таким образом, COMSOL Multiphysics позволяет находить априорные решения задач, требующих впоследствии сложных экспериментальных исследований, сочетает в себе произвольное число физических явлений, даёт возможность задавать пользовательские описания физических явлений, уравнений и выражений через графический пользовательских интерфейс, помогает проектировать и оптимизировать процессы с учетом реальных условий их работы.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		37

## 2.2 Разработка модели гибридного нанодимера Au/Si средствами COMSOL Multiphysics

В данной работе предполагается провести исследование оптических свойств гибридных нанодимеров золота и кремния. Все процессы будут смоделированы в программе COMSOL Multiphysics. В процессе моделирования планируется получить различные диаграммы направленности, графики сечений рассеяния, поглощения и экстинкции и в дальнейшем сделать вывод о том, как влияет расстояние между сферами, расстояние до подложки и выбор материала верхней и нижней сфер на полученные результаты.

После запуска COMSOL Multiphysics в стартовом окне предлагается выбрать одно из двух: либо создать пустую модель, либо с помощью «матера создания моделей» (рисунок 2.1.1). Необходимо выбрать второе.

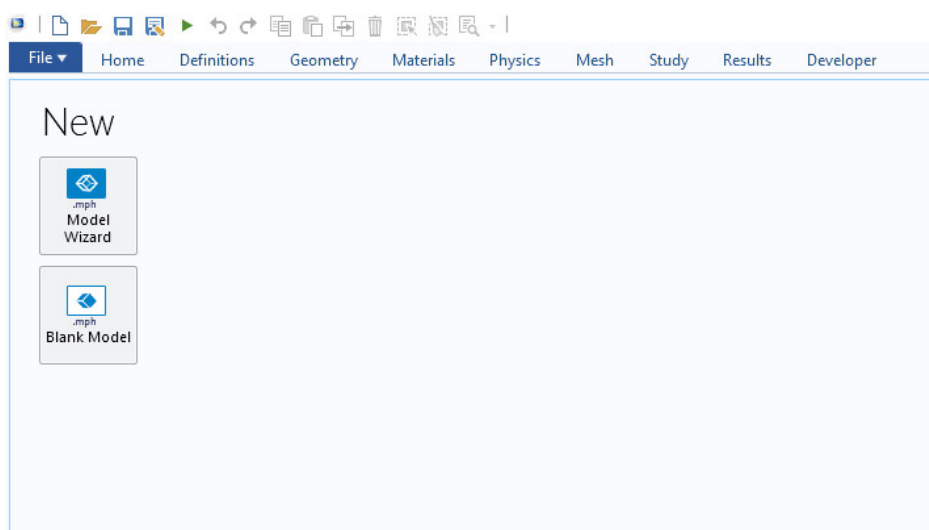


Рисунок 2.1.1 – Стартовое окно программы COMSOL Multiphysics

Далее программа предлагает выбрать размеры пространства моделирования (рисунок 2.1.2). Для исследований данной работы нужно выбрать вариант «3D».

					ВЛГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		38

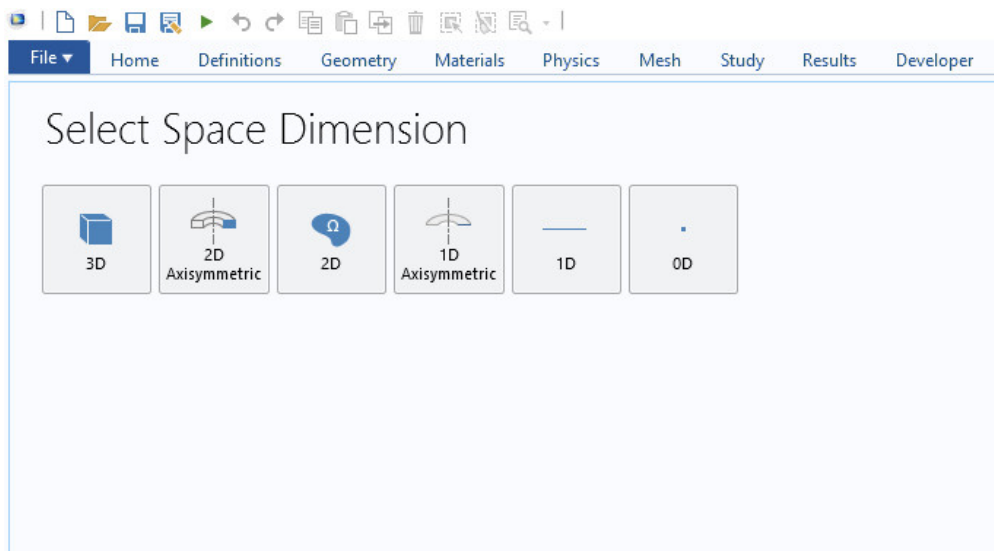


Рисунок 2.1.2 – Выбор размера пространства моделирования

Затем необходимо выбрать физический интерфейс. Для изучения оптических свойств гибридных нанодимеров Au/Si выбирается «Electromagnetic Waves, Frequency Domain» (рисунок 2.1.3).

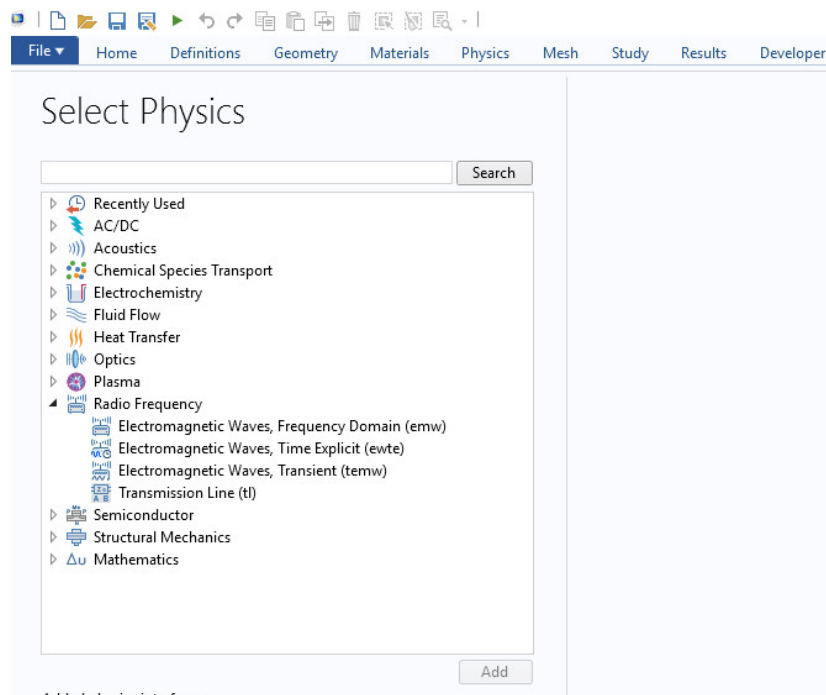


Рисунок 2.1.3 – Выбор физического интерфейса

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		39

После этого интерфейс программы перемещается в основную рабочую зону (рисунок 2.1.4). Для начала необходимо во вкладке «Parameters» ввести основные параметры (таблица 2.1.1), которые далее будут использоваться при построении геометрии, вычислении уравнений и запуске моделирования.

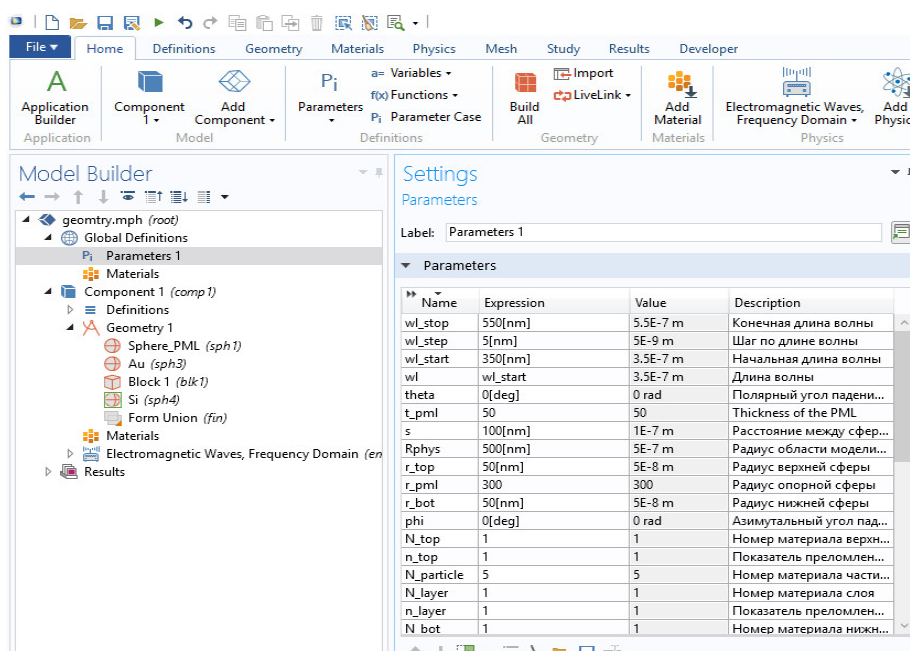


Рисунок 2.1.4 – Основная рабочая зона программы COMSOL

Сами параметры с соответствующими пояснениями приведены в таблице 2.1.1

Таблица 2.1.1 – Исходные параметры для моделирования

Name	Expression	Value	Description
wl	wl_start	3.5E-7 m	Длина волны
wl_start	350[nm]	3.5E-7 m	Начальная длина волны
wl_step	5[nm]	5E-9 m	Шаг по длине волны
wl_stop	700[nm]	7E-7 m	Конечная длина волны
theta	0[deg]	0 rad	Полярный угол падения плоской волны в вакууме
phi	0[deg]	0 rad	Азимутальный угол падения плоской волны в вакууме
N_top	1	1	Номер материала верхнего п-п



Продолжение таблицы 2.1.1

N_bot	1	1	Номер материала нижнего п-п
N_layer	1	1	Номер материала слоя
N_particle	5	5	Номер материала частицы
n_top	1	1	Показатель преломления верхнего п-п
n_bot	1	1	Показатель преломления нижнего п-п
n_layer	1	1	Показатель преломления полимерного слоя
eps_particle	$n\_layer^2$	1	Диэлектрическая проницаемость
r_pml	300[nm]	3E-7m	Радиусвнешней сферы
d	0[nm]	0 m	Высота сферы над подложкой
r_top	50[nm]	5E-8	Радиус верхней сферы
r_bot	50[nm]	5E-8	Радиус нижней сферы
s	50[nm]	5E-8	Расстояние между сферами
Rphys	500[nm]	5E-7 m	Радиус области моделирования
h_pml	150[nm]	1.5E-7 m	Толщина слоя PML
h_layer	211[nm]	2.11E-7 m	Толщина слоя полимера
h_top	200[nm]	2E-7 m	Высота области моделирования над слоем полимера
h_bot	250[nm]	2.5E-7 m	Высота области моделирования в подложке
delta	1[nm]	1E-9 m	Высота зазора для правильной работы selections
k0	$2*\pi/wl$	1.7952E7 1/m	Волновое число
kx	$\sin(\theta)*k0$	0 1/m	
Es	$E_{s\_re} + 1i E_{s\_im}$	1 V/m	
Ep	$E_{p\_re} + 1i E_{p\_im}$	0 V/m	
Es_re	1[V/m]	1 V/m	Компоненты поля
Es_im	0[V/m]	0 V/m	
Ep_re	0[V/m]	0 V/m	
Ep_im	0[V/m]	0 V/m	

После этого создаётся модель, представляющая собой две сферы из разных материалов, располагающихся одна над другой на определённом расстоянии. Обе сферы находятся над подложкой на расстоянии d, которое будет меняться в процессе моделирования.

Для начала необходимо построить внешнюю сферу, которая является виртуальной и служит для вычисления на ней сечений (рисунок 2.1.5 а).

Далее строятся две сферы на определённом расстоянии друг от друга внутри внешней сферы (рисунок 2.1.5 б). Одна из сфер является диэлектрической (из материала с высоким показателем преломления) наночастицей, а другая – металлической.

Затем строится подложка на расстоянии  $d$ , которое будет изменяться в процессе моделирования (рисунок 2.1.5 в), чтобы в дальнейшем проверить его влияние на конфигурацию распределения дальнего поля и графики сечений.

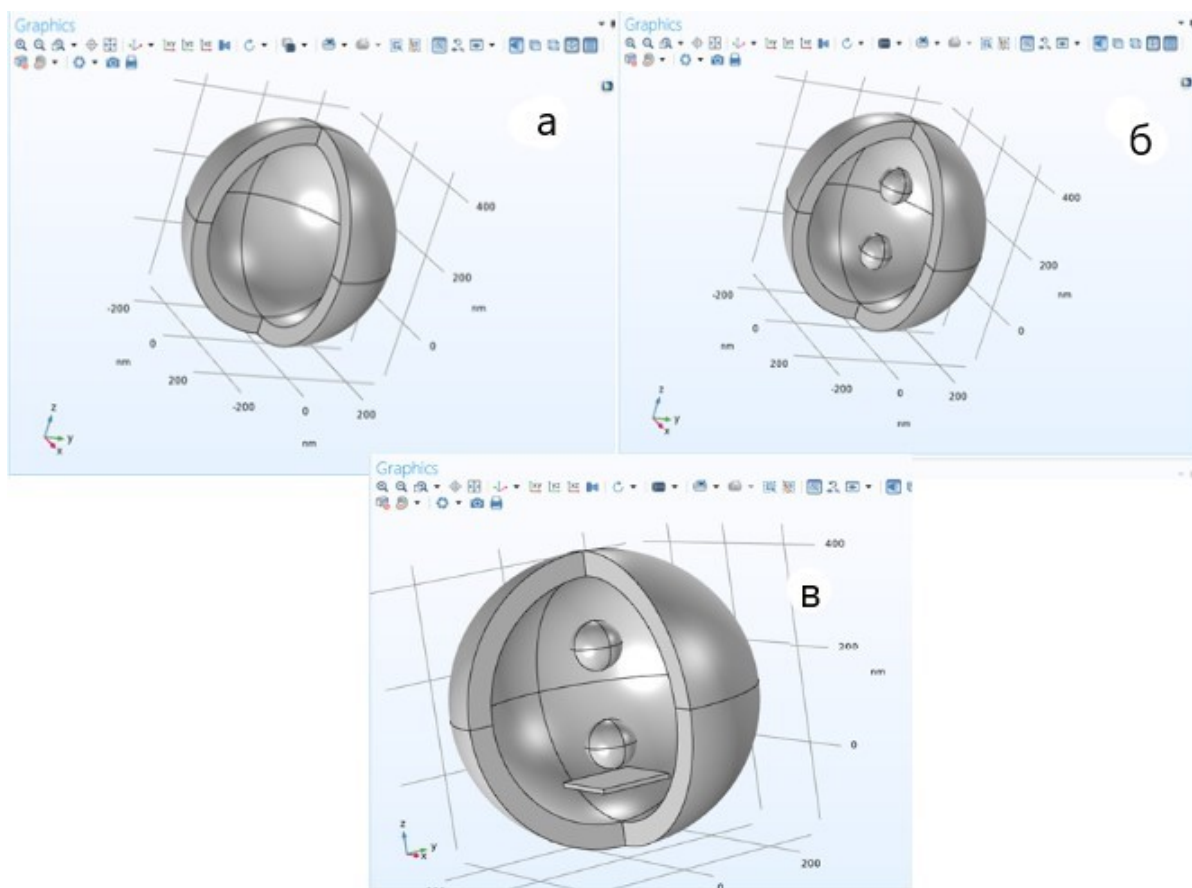


Рисунок 2.1.5 – Построение модели гибридного нанодимера: *a* – внешняя – виртуальная сфера; *б* – Расположение нанодимера Au/Si внутри внешней сферы; *в* – наличие подложки на расстоянии  $d$  от нижней сферы

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		42

Таблица 2.1.2 – Параметры Стокса и матрицы когерентности

Матрица когерентности	
fsxx	$\text{conj}(\text{ewfd.relEx}) * \text{ewfd.relEx}$
fsxy	$\text{conj}(\text{ewfd.relEx}) * \text{ewfd.relEy}$
fsxz	$\text{conj}(\text{ewfd.relEx}) * \text{ewfd.relEz}$
fsyx	$\text{conj}(\text{ewfd.relEy}) * \text{ewfd.relEx}$
fsyy	$\text{conj}(\text{ewfd.relEy}) * \text{ewfd.relEy}$
fsyz	$\text{conj}(\text{ewfd.relEy}) * \text{ewfd.relEz}$
fszx	$\text{conj}(\text{ewfd.relEz}) * \text{ewfd.relEx}$
fszy	$\text{conj}(\text{ewfd.relEz}) * \text{ewfd.relEy}$
fszz	$\text{conj}(\text{ewfd.relEz}) * \text{ewfd.relEz}$
Параметры Стокса	
L0	$f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}$
L1	$3/2 * (f_{xy} + f_{yx})$
L2	$3/2 * 1i * (f_{xy} - f_{yx})$
L3	$3/2 * (f_{xx} - f_{yy})$
L4	$3/2 * (f_{xz} + f_{zx})$
L5	$3/2 * 1i * (f_{xz} - f_{zx})$
L6	$3/2 * (f_{yz} + f_{zy})$
L7	$3/2 * 1i * (f_{yz} - f_{zy})$
L8	$\text{sqrt}(3)/2 * (f_{xx} + f_{yy} - 2 * f_{zz})$
S3xy	$1i * (f_{xy} - f_{yx})$
S3xz	$1i * (f_{xz} - f_{zx})$
S3yz	$1i * (f_{yz} - f_{zy})$
$I \text{ abs}(\text{ewfd.Ex})^2 + \text{abs}(\text{ewfd.Ey})^2 + \text{abs}(\text{ewfd.Ez})^2$	
$P \text{ deg } \text{sqrt}(1 - (S3xy/I)^2 - (S3xz/I)^2 - (S3yz/I)^2)$	

Используемые обозначения следует понимать следующим образом:

conj – комплексное сопряжение;

ewfd – переменная для вычисления коэффициентов поглощения,

отражения и пропускания;

abs – абсолютная величина;  
rel – вещественная часть;  
fsxx...fszz – компоненты матрицы;

После того как геометрия модели сформирована, необходимо выполнить выбор материала (в случае рассматриваемой задачи, это Si и Au), провести описание областей, секторов и узлов для объемных тел в модели и задать триангуляцию для установления границ численных расчетов.

### 2.3. Результаты моделирования. Диаграммы направленности дальнего поля

Диаграмма направленности представляет собой графическое изображение излучаемой трёхмерной волны. В основном эти графики показывают форму и угол направления излучения.

В диаграмме направленности в дальней зоне прослеживается только один контур вокруг наноэмиттера. При усилении сигнала диаграмма направленности выглядит более вытянутой, соответственно, уже меньше угол излучения. Это имеет свои преимущества, если нужно передать сигнал на более далёкие расстояния, без создания помех, и недостатки: невозможность покрытия большой площади. Контурные поверхности сосредоточены вокруг наноэмиттера, а контурные линии центрированы на взаимно перпендикулярных плоскостях, которые пересекают наноэмиттер, часто через линию симметрии. Для получения различных диаграмм направленности конструируются различные наноэмиттеры.







Существуют различные методы анализа диаграмм направленности: проекционный апертурный метод, геометрическая теория дифракции и другие. В основном анализ диаграмм заключается в изучении степени усиления волны, её ширины и угла излучения.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		44



В рамках предложенной модели было проведено сопоставление диаграмм направленности дальнего поля для нанодимеров различного состава. Выявлены зависимости трансформации диаграмм направленности от размеров частиц, расстояния взаимного расположения их друг относительно друга, дистанции до подложки, а также длины волны падающего излучения.

В таблице 2.2.1 приведено сравнение диаграмм направленности различных димеров при фиксированной длине волны в случаях присутствия и отсутствия подложки.

Таблица 2.2.1 – Диаграммы направленности при фиксированной дине волны, с расстоянием между сферами  $s = 50$  нм. В первом случае подложка отсутствует, а во втором присутствует ( $d=50$  нм)

$\lambda=410$ нм		
d, нм	free space	50
Au-Au		
Si-Si		
Au-Si		




Продолжение таблицы 2.2.1

Si-Au		
-------	---	---







Заметно, что при отсутствии подложки диаграмма направленности имеет более широкий главный лепесток и больший задний лепесток, что может означать большее рассеяние назад. Но в случае Si-Si – наоборот, в присутствии подложки главный лепесток стал ещё шире. Это может быть обосновано большим коэффициентом преломления кремния.

В таблице 2.2.2 показана зависимость формы диаграммы направленности от расстояния между сферами.

Таблица 2.2.2 – Диаграммы направленности при фиксированной длине волны и расстоянии до подложки, но различном расстоянии между сферами

$\lambda = 380 \text{ нм}, d = 50 \text{ нм}$			
s, нм	25	50	100
Au-Au			





Продолжение таблицы 2.2.2

Si-Si			
Au-Si			







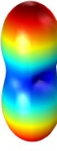
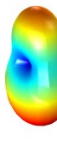



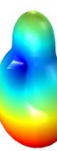
У образцов Au-Au при  $s=100$  нм, Si-Si при  $s=25$  нм и 100 нм присутствует довольно широкие задние лепестки и менее вытянутые. В основном при смене расстояния между сферическими наночастицами происходит незначительное либо увеличение, либо уменьшение рассеяния вперёд, а также изменение задних и боковых лепестков.

Сравнение диаграмм направленности нанодимеров Au-Si и Au-Au (при наличии и отсутствии подложки) при изменении длины волны приведены в таблице 2.2.3.

Таблица 2.2.3 – Диаграммы направленности димеров Au-Si и Au-Au при наличии и отсутствии подложки в зависимости от длины волны

$\lambda$ , нм	380	410	470	600
Au-Si $d=0$ нм $s=50$ нм				




Продолжение таблицы 2.2.3

Au-Au d=0 нм s=50 нм				
Au-Si free space s=50 нм				
Au-Au free space s=50 нм				

При увеличении длины волны заметно, что диаграмма направленности становится шире (уменьшается рассеяние вперёд и увеличивается назад) как со стороны главного лепестка, так и заднего, причём при отсутствии подложки этот эффект заметен больше. Возможно, это связано с тем, что длина волны излучаемого света много больше диаметра сфер.



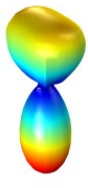
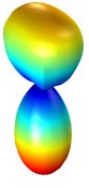
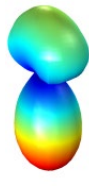
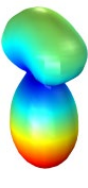
В таблице 2.2.4 приведены диаграммы направленности для гибридного нанодимера Au-Si при расстоянии до подложки 25 нм, расстоянии до подложки 50 нм и различных длинах волн.

Таблица 2.2.4 – Диаграммы направленности для димера Au-Si при расстоянии между сферами 25 нм и расстоянии до подложки 50 нм

380 нм	395 нм	410 нм
		







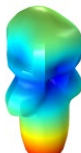
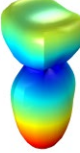
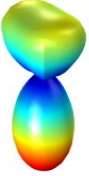
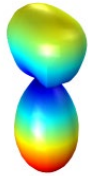
Продолжение таблицы 2.2.4

460 нм	475 нм	500 нм
		
540 нм	650 нм	700 нм
		

Анализируя данные, можно заметить, что с увеличением длины волны увеличивается рассеяние назад и уменьшается вперёд (это обусловлено ростом заднего лепестка и уменьшением переднего).

В таблице 2.2.5 показаны результаты моделирования для гибридного нанодимера Au-Si при расстоянии между сферами 50 нм и расстоянии до подложки 0 нм.

Таблица 2.2.5 – Диаграммы направленности для димера Au-Si при расстоянии между сферами 50 нм и расстоянии до подложки 0 нм

380 нм	395 нм	410 нм
		
445 нм	460 нм	470 нм
		
505 нм	550 нм	
		

При расстоянии до подложки 0 нм из полученных данных видно, что по сравнению с  $d=50$  нм увеличилось рассеяние назад, что позволяет предположить у подложки экранирующей функции.

Данные для димеров состава Au–Au и Si–Si приведены в ПРИЛОЖЕНИИ А.

1) Диаграммы направленности для димера Au-Au при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 100 нм (таблица А.1).

При увеличении длины волны заметно сильное вырождение главного и боковых лепестков и исчезновение заднего (650 нм, 700 нм), что может быть связано с экранирующими свойствами плазмонных частиц. Рассеяние вперёд уменьшается, зато увеличивается его угол.

2) Диаграммы направленности для димера Au-Au при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 25 нм (таблица А.2).

При увеличении длины волны уменьшается рассеяние вперед и увеличивается в стороны и назад

3) Диаграммы направленности для димера Si-Si при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 25 нм (таблица А.3).

Из данных результатов видно увеличение рассеяния назад и уменьшение рассеяния вперед. Это можно судить из менее вытянутого главного лепестка.

4) Диаграммы направленности для димера Si-Si при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 50 нм (таблица А.4)

С увеличением длины волны до 445 нм заметно уменьшение обратного рассеяния. Но после видно резкое увеличение боковых и задних лепестков и уменьшение рассеяния вперед.

5) Диаграммы направленности для димера Si-Si в свободном пространстве (отсутствии подложки) и расстоянии между сферами 100 нм (таблица А.5)

Из диаграмм направленности видно, что при увеличении длины волны происходит сильное рассеяние в стороны и исчезновение рассеяния назад, что связано с высоким коэффициентом преломления кремния. Результаты, полученные при 500 нм, 600 нм, 700 нм представляют большой интерес для фотовольтаики.

6) Диаграммы направленности для димера Si-Si, при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 100 нм (таблица А.6)

Анализ полученных диаграмм позволяет заметить, что расстояние между сферами оказывает на них большое влияние, что проявляется в уменьшении обратного рассеяния и увеличении рассеяния в бок, что может быть взято на вооружение для задач фотовольтаики. Также видно уширение главного лепестка. Можно обратить внимание на образование «ямки» на заднем лепестке, которая может быть вызвана высоким коэффициентом преломления кремния.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		51

Из всех полученных диаграмм направленности можно сделать вывод по каждому варианту.

1) Димеры Au–Si

Увеличение расстояния между частицами не приводит к смещению резонансов, а также значительному изменению диаграмм направленности. При длинах волн примерно в диапазоне от 440 нм до 540 нм наблюдается рассеяние в стороны. Наличие подложки приводит к трансформации диаграмм направленности.

2) Димеры Au–Au (верхняя частица в слое  $n = 1$ , нижняя – с  $n = 1.5$ )

Рассеяние в стороны наблюдается в длинноволновой области, после резонансной длины волны. Это представляет интерес с точки зрения внедрения таких частиц в солнечные элементы, поскольку способствует увеличению перерассеяния световой волны в слое, которое приводит к возрастанию эффективности.

3) Димеры Si–Si

Диаграммы направленности кремниевых димеров в свободном пространстве не обладают симметрией, по мере увеличения длины волны возрастает рассеяние преимущественно вперед. Наличие подложки с  $n=1,5$  приводит к увеличению направленности рассеяния в дальней зоне (диаграммы направленности «сужаются»), при возрастании длины волны направленность снижается. На всем диапазоне длин волн (380 – 700 нм) наблюдается рассеяние преимущественно вперед, при длинах волн порядка 460 нм присутствует рассеяние в стороны.

4) Димеры Si–Au (верхняя частица в слое  $n = 1$ , нижняя – с  $n = 1.5$ )

Во всем диапазоне (380–660 нм) наблюдается рассеяние в стороны, особенно выражено в диапазоне 440–540 нм. Что демонстрирует независимость от области спектра подающего излучения и косвенно указывает на более высокую эффективность гибридных нанодимеров с точки зрения фотовольтаики.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		52

## 2.4 Анализ графиков сечений рассеяния, поглощения и экстинкции

Особого внимания заслуживает рассмотрение димеров диэлектрического состава, поскольку варьирование расстояний между частицами и до подложки приводит к значительному изменению (по положению в спектральной области) резонансов.

Ниже приведены графики сечений рассеяния, поглощения и экстинкции для димеров Si-Si.

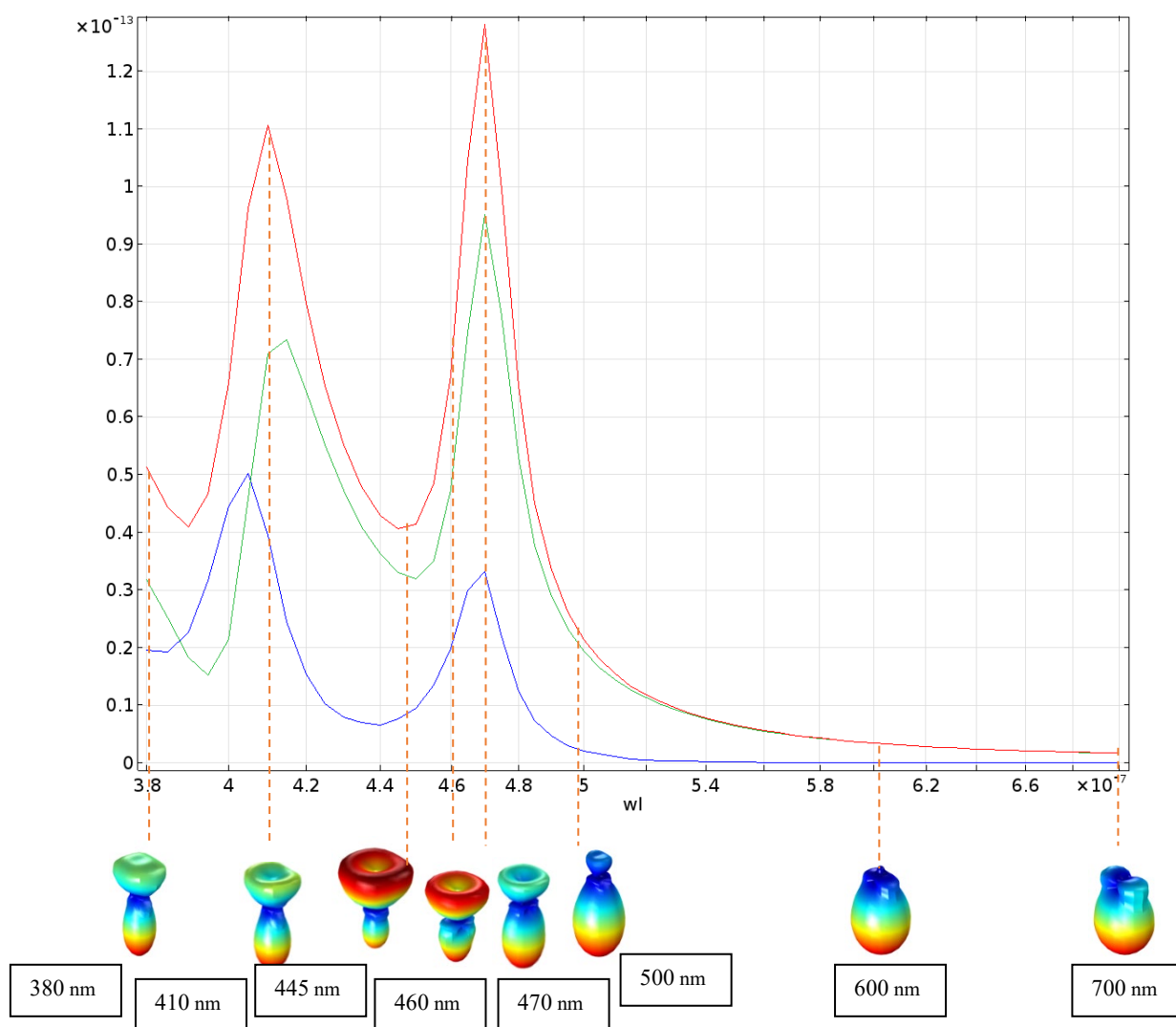


Рисунок 2.4.1 – График сечений рассеяния, поглощения и экстинкции димера Si-Si при  $d=50$  нм,  $s=100$  нм

					ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ		Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата			53

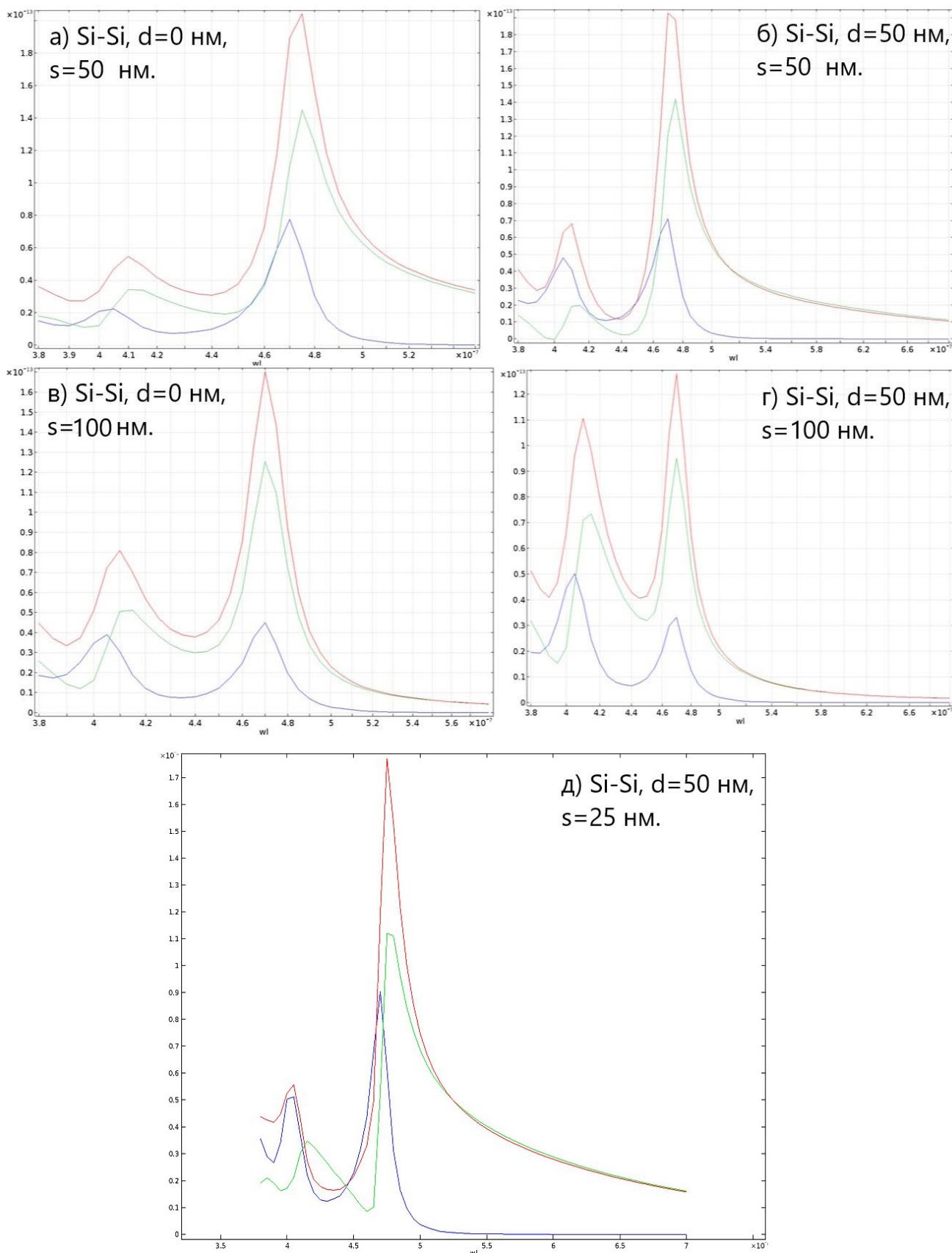


Рисунок 2.4.2 – Графики сечений рассеяния, поглощения и экстинкции димера Si-Si при различных расстояниях до подложки и между сферами.

Анализируя вышеприведённые графики, можно сказать, что увеличение высоты над подложкой (с 0 до 50 нм) при  $s=50$  нм (рисунки 2.4.2 а и 2.4.2 б) и  $s=100$  нм (рисунки 2.4.2 в и 2.4.2 г) приводит к возрастанию коэффициента ED (электро-дипольный) резонанса и к уменьшению MD (магнито-дипольного).

Увеличение расстояния между частицами при фиксированном значении высоты над подложкой (рисунки 2.4.2 б, 2.4.2 г, 2.4.2 д) также приводит к возрастанию коэффициента ED резонанса и к уменьшению MD. При длинах волн 440 – 460 нм, соответствующих минимуму между ED и MD резонансам, наблюдается резкое увеличение интенсивности рассеяния в стороны.

При длинах волн от 380 до 470 нм (резонанса) наблюдается выраженное рассеяние в стороны, при значениях длин волн больших 470 нм выраженное рассеяние вперед. Увеличение расстояния между частицами (10 до 50 нм) приводит к увеличению значения ED резонанса и увеличению MD, но при расстоянии 100 нм между сферами ED резонанс становится менее выраженным (рисунок 2.4.2 в, 2.4.2 г).

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		55

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics была разработана модель взаимодействия оптического поля с нанодимерами.

Получены и проанализированы диаграммы направленности для нанодимеров золота и кремния в свободном пространстве и в присутствии подложки.

Построены графики зависимости сечений рассеяния, поглощения и экстинкции от материалов нанодимера, длины волны, расстояния между сферами и расстояния до подложки. Замечено, что варьирование расстояний между частицами и до подложки приводит к значительному изменению (по положению в спектральной области) резонансов Ми в нанодимерах диэлектрического состава. Это обстоятельство указывает на возможность манипулирования электро-дипольным и магнито-дипольными вкладками в резонанс.

В длинноволновой области в случае нанодимеров Au-Au и Si-Si при расстоянии между сферами 100 нм наблюдалось ярко выраженное рассеяние в стороны, что может найти применение в фотовольтаике, поскольку рассеяние в стороны позволяет эффективнее локализовать энергию в материале и увеличить КПД солнечного элемента [20].

В коротковолновой области наблюдается увеличение направленности рассеяния в дальней зоне, особенно у Si-Si. Это может быть полезно для наноэмитеров, где необходим узконаправленный пучок сигнала, что позволяет передавать его на большие расстояния.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		56



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1) Born M., Wolf E. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light. – 7th Edition. – Cambridge University Press, 1999. – 987 p.
- 2) Novotny L. Hecht B. Principles of Nano-optics. – 2nd Edition. – Cambridge University Press, 2012. – 584 p.
- 3) С. В. Гапоненко, Н. Н. Розанов, Е. Л. Ивченко, А. В. Федоров, А. В. Баранов, А. М. Бонч-Бруевич, Т. А. Вартамян, С. Г. Пржибельский. //Оптика наноструктур// Под редакцией А. В. Федорова: СПб «Недра», 2005 г. – 326 с.
- 4) Медведев А. С. Теоретическое исследование спектров поглощения и рассеяния света гибридными металлоорганическими наночастицами: Дис. Медведева А. С. к-н физ.-мат наук. – М., 2013. – 141 с.
- 5) David W. Hahn. // Light Scattering Theory // Department of Mechanical and Aerospace Engineering University of Florida, 2009.
- 6) Videen G. Light scattering from a sphere on or near a surface: errata. // JOSA A. – 1992. – Т. 9, № 5. – С. 844-845.
- 7) Н.Г. Хлебцов, В.А. Богатырев. Оптические методы определения параметров наночастиц с плазмонным резонансом: Учеб. пособие. – М.: 2010. – 63
- 8) Bohren C.F., Huffman D.R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. – New York: Wiley, 1983– 553 p.
- 9) Е.Н. Каблов, О.Г. Оспенникова, В.П. Пискорский, Д.В. Королев, Е.И. Куницына, А.Д. Таланцев, Р.Б. Моргунов. Влияние магнитного дипольного взаимодействия и вращения микрочастиц (DyPr) CoFeB на магнитные свойства их ансамблей // Физика твёрдого тела. – 2015. – Т. 57. - №11.
- 10) C. Sonnichsen, T. Franzl, T. Wilk, G. von Plessen, J. Feldmann // Plasmon resonances in large noble-metal clusters. // New Journal of Physics. –vol. 4. – 2002. – p. 90-98.
- 11) Климов В.В. Наноплазмоника. – М.: ФИЗМАЛИТ. – 2009. – С. 480.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		<i>57</i>

12) Zhao Q., Zhou J., Zhang F., Lippens D. //Mie resonance-based dielectric metamaterials // Mater. Today. – 2009. – Т. 12. – № 12. – С. 60–69.

13) Zhao Q., Zhou J. // Dielectric metamaterials. // Article inMaterials Today. – 2009. – 10 December.

14) Priolo, F., Gregorkiewicz, T., Galli, M. & Krauss, T. F. // Silicon nanostructures for photonics and photovoltaics. // Nat. Nanotech. – 2014. Vol. 9 –P. 19–32.

15) Н. С. van de Hulst. // Light scattering by small particles. // New York. – 1957. – P. 478.

16) Сергей Лепешов, Александр Краснок, Павел Белов, Андрей Мирошниченко. // Гибридная Нанофотоника. С. 68

17) Новый поворот: кремниевые наноантенны развернули свет [Электронный ресурс]: Моск. физ.-техн. ин-т.– Электрон. журн. – Долгопрудный: МФТИ, 2016. – Режим доступа к журн: [https://mipt.ru/newsblog/lenta/novyy\\_povorot\\_kremnievye\\_nanoantenny\\_razvernuli\\_svet](https://mipt.ru/newsblog/lenta/novyy_povorot_kremnievye_nanoantenny_razvernuli_svet).

18) Кремниевые наночастицы помогут создать наноразмерные лазеры и усилители, выяснили ученые [Электронный ресурс]: Моск. физ.-техн. ин-т. – Электрон. журн. – Долгопрудный: МФТИ, 2016. – Режим доступа к журн:[https://mipt.ru/newsblog/lenta/1kremnievye\\_nanochastitsy\\_pomogut\\_sozdat\\_nan\\_orazmernye\\_lazery\\_i\\_usiliteli\\_vyyasnili\\_uchenye](https://mipt.ru/newsblog/lenta/1kremnievye_nanochastitsy_pomogut_sozdat_nan_orazmernye_lazery_i_usiliteli_vyyasnili_uchenye)

19) Наночастицы из кремния научили жонглировать светом [Электронный ресурс]: Моск. физ.-техн. ин-т. – Электрон. журн. – Долгопрудный: МФТИ, 2016. – Режим доступа к журн: [https://mipt.ru/newsblog/lenta/nanochastitsy\\_iz\\_kremniya\\_nauchili\\_zhonglirovat\\_svetom](https://mipt.ru/newsblog/lenta/nanochastitsy_iz_kremniya_nauchili_zhonglirovat_svetom)

20) Миличко В.А. и др. Солнечная фотовольтаика: современное состояние и тенденции развития. // Успехи физических наук. – 2016. – Том 186, № 8. – С. 801-852.

					<i>ВлГУ.28.03.01.НТ-116.03.00 ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		<b>58</b>

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

Таблица А.1 – Диаграммы направленности для димера Au-Au при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 100 нм


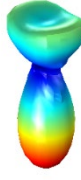

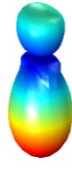

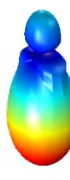
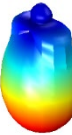
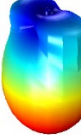
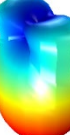
380 нм	400 нм	475 нм
		
500 нм	525 нм	550 нм
		
600 нм	650 нм	700 нм
		

Таблица А.2 – Диаграммы направленности для димера Au-Au при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 25 нм





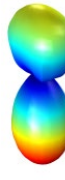
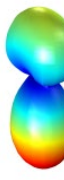
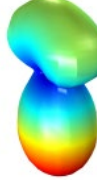
380 нм	430 нм	470 нм
		
535 нм	550 нм	600 нм
		
700 нм		
		

Таблица А.3 – Диаграммы направленности для димера Si-Si при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 25 нм




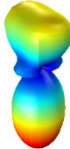

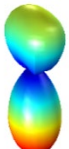
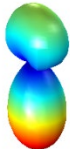


380 нм	400 нм	425 нм
		
475 нм	500 нм	550 нм
		
600 нм	650 нм	700 нм
		

Таблица А.4 – Диаграммы направленности для димера Si-Si при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 50 нм





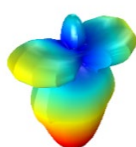

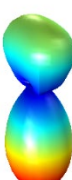
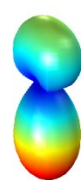

380 нм	400 нм	415 нм
		
445 нм	460 нм	500 нм
		
550 нм	600 нм	700 нм
		

Таблица А.5 – Диаграммы направленности для димера Si-Si в свободном пространстве (отсутствии подложки) и расстоянии между сферами 100 нм

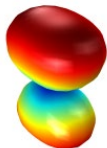
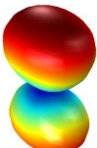
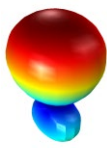
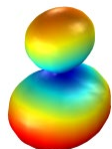
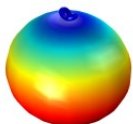
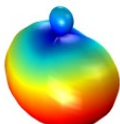
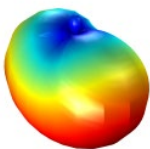


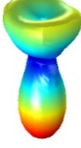



380 нм	410 нм	440 нм
		
470 нм	500 нм	600 нм
		
700 нм		
		

Таблица А.6 – Диаграммы направленности для димера Si-Si, при расстоянии до подложки 50 нм и расстоянии между сферами 100 нм

380 нм	395 нм	415 нм
		
445 нм	475 нм	500 нм
		
550 нм	600 нм	700 нм
