

ТРАНСФОРМАЦИЯ СПЕКТРОВ УДЕЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ СЛОИСТЫХ НАНОПРОВОЛОК В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.

Центр лазерной и информационной биофизики,
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Исследованы изменения спектров дипольной электрической поляризуемости композитных проводящих нанопроволок с диэлектрической оболочкой, происходящие при включении внешнего магнитного поля. Рассмотрены случаи, когда материал поверхностного изолирующего слоя проволок характеризовался бездисперсионной диэлектрической проницаемостью, либо обладал выраженной частотной дисперсией.

В ряде теоретических работ [1-6] приводятся результаты моделирования взаимодействия света с нанообъектами сферической и цилиндрической формы. В работе [1], на основе теории рассеяния Ми, получено выражение для тензора динамической поляризуемости сплошного кругового цилиндра, возбуждаемого полем произвольной конфигурации, а также представлены компактные выражения для всех элементов этого тензора. Авторы показали, что полученный тензор поляризуемости удовлетворяет ряду условий, и изучили поведение его компонент при изменении угла возбуждения, свойств материала и радиуса цилиндра. В работах [2, 3] получены выражения для тензоров поляризуемости и сечения поглощения двухчастичных нанокластеров, состоящих из слоистых сферических наночастиц и построены спектры мнимых частей поляризуемостей. В [3], при выведении выражения для поляризуемости кластера, была учтена вырожденность электронного газа металлов, из которых состоят наночастицы. Было показано, что спектры поляризуемости таких систем существенно отличаются от спектров кластеров, в которых электронный газ металла не вырожден. Варьируя толщины металлических и диэлектрических компонент композитов, можно регулировать форму их спектров поглощения света.

Кроме того, появилось много работ, в которых разными способами рассчитаны поляризуемости нанопроволок из металлов, полупроводников и диэлектриков [4-6]. В рамках теории функционала плотности и модели "желе" исследованы электронная структура и линейный отклик на внешнее электрическое поле нитей простых металлов с квантово-размерным поперечным сечением. Обнаружено немонотонное изменение работы выхода и статической поляризуемости нити при увеличении ее радиуса [5].

В данной работе произведен расчет спектров дипольной электрической поляризуемости проводящих нанопроволок кругового сечения радиуса R (двухслойных нанопроволок с металлической или диэлектрической жилой) в монохроматическом поле $E_0(\omega)$ электрической компоненты поля электромагнитной волны. Предполагалось, что внутренняя жила нанопровода

радиуса ρ , покрыта диэлектрическим материалом, который либо не имеет выраженной частотной дисперсии, т.е. характеризуется постоянной диэлектрической проницаемостью (ДП) ε_2 , либо его ДП $\varepsilon_2(\omega)$ зависит от частоты ω , как, например, в случае, когда оболочка толщиной $R - \rho$ представляет собой кристаллоподобный слой, составленный из молекулярных J-агрегатов. Кроме того, рассматривается случай композита с диэлектрической жилой, покрытой металлическим слоем и не обладающей частотной дисперсией. Если частотная дисперсия кристаллоподобного материала связана с наличием в нем экситонных мод, то диэлектрическая проницаемость имеет вид $\varepsilon_{ex}(\omega) = \varepsilon_0 - f^2 / [(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{ex}^2]$ [7]. Здесь, f^2 - параметр, характеризующий связь фотонов с экситонами, Γ - параметр релаксации экситонных состояний, ω_{ex} - частота экситонов, ε_0 - ДП, обусловленная всеми другими электронными состояниями кроме экситонного, определяющего величину ω_{ex}^2 .

Характерные частоты локальных плазмонных колебаний зависят от структуры и формы частиц, и существенно изменяются при переходе от однородных к слоистым структурам, а также от сферической формы к цилиндрической. В постоянном магнитном поле отклик электронной плазмы металла на электромагнитное возмущение с частотой ω становится анизотропным, а скалярная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\omega)$ плазмopodobной среды трансформируется в тензор второго ранга: $\varepsilon(\omega) \rightarrow \vec{\varepsilon}(\omega)$ [8]. В работе [9] методами электродинамики сплошных сред получены выражения для тензоров дипольной поляризуемости единицы длины слоистого композитного цилиндра ($d=2$) с различными материалами жилы и внешнего слоя.

Тензор $\vec{\mathbf{A}}$ дипольной поляризуемости единицы длины слоистого композитного цилиндра с проводящей жилой имеет вид [9]

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) = \\ = \left[(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)\xi^2 \right] \times \quad , \quad (1) \\ \times \left[(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\xi^2 \right]^{-1} R^2 \end{aligned}$$

где $\xi = \rho / R$, ε_3 - диэлектрическая проницаемость окружающей среды. При выключении магнитного поля все тензорные величины редуцируются к своим скалярным прототипам и (1) трансформируется к известным выражениям [9] для поляризуемостей изотропных композитов.

Если проводящей в композите является оболочка, а корд - диэлектрический, поляризуемость слоистого цилиндрического композита с замагниченной проводящей оболочкой определяется выражением:

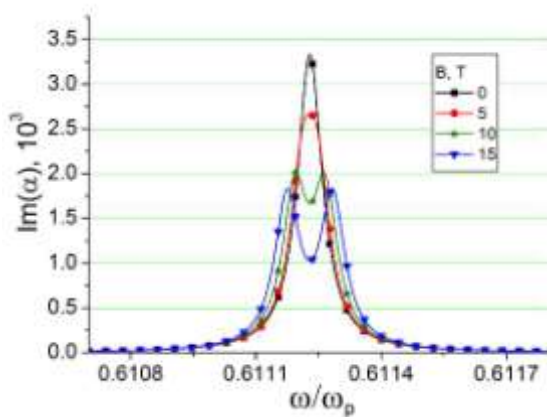
$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\varepsilon_1, \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_3) = \\ = \left[(\varepsilon_1 + \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_3) \xi^2 \right] \times \quad . (2) \\ \times \left[(\varepsilon_1 + \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_3) \xi^2 \right]^{-1} R^2 \end{aligned}$$

Тензор для цилиндрического композита металл - молекулярный кристалл выглядит так же, как (1), но теперь проницаемость диэлектрика является дисперсионной, то есть величиной, зависящей от частоты электромагнитного поля

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_{ex}(\omega), \varepsilon_3) = \\ = \left[(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) - \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) + \varepsilon_3) \xi^2 \right] \times \quad . (3) \\ \times \left[(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) + \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) - \varepsilon_3) \xi^2 \right]^{-1} R^2 \end{aligned}$$

На основе выражений (1)-(3), нами были получены спектры дипольных поляризуемостей композитных наноцилиндров с оболочками для различных электрических и конфигурационных параметров этих систем. Все расчеты проведены для удельной дипольной динамической поляризуемости цилиндра $\tilde{\alpha} = \vec{\mathbf{A}} / R^2$. Через $\text{Im}(\alpha)$ обозначена мнимая часть компоненты α_{11} тензора поляризуемости.

1 Металлический цилиндр с диэлектрическим бездисперсионным внешним слоем



$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, \varepsilon_2 = 2.2, \varepsilon_3 = 1, R = 50 \text{ нм}$$

Рис.1- Спектры поляризуемости цилиндра с металлической жилой в магнитном поле индукции $B = 0 - 15$ Тл. $\rho = 30$ нм

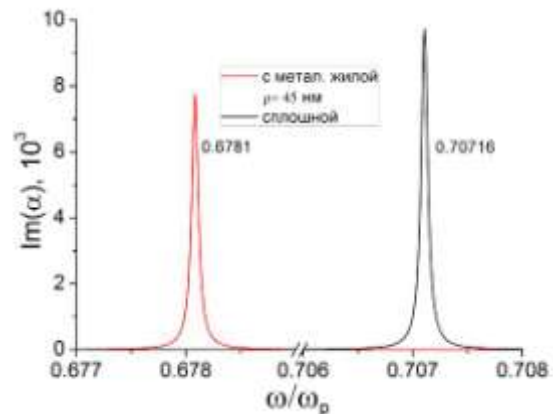


Рис.2- Спектры поляризуемости сплошного наноцилиндра (черная кривая) и слоистого с металлической жилой и диэлектрической оболочкой (красная кривая).

Из рисунка 1 видно, что спектр поляризуемости слоистого наноцилиндра имеет один плазмонный резонанс на относительной плазмонной частоте $\omega/\omega_p = 0.6112$, который деформируется в постоянном внешнем магнитном поле индукции \mathbf{B} . При других значениях расчетных параметров системы резонансная частота сдвигается. На рисунке 2, для сравнения, показаны спектры поляризуемости безоболочечного и слоистого цилиндров. Черная кривая отвечает поляризуемости сплошного металлического цилиндра (плазмонный резонанс на относительной частоте $\omega/\omega_p = 0.7072$). По сдвигу спектральной полосы (красная кривая) можно видеть, что при добавлении внешнего диэлектрического слоя к металлической жиле частота плазмонного резонанса смещается в низкочастотную область. Формула (1) позволяет легко переходить от двухслойного цилиндра к однослойному - металлическому. Для этого достаточно устремить $\rho \rightarrow R$, т.е. принять $\rho = R = 50$ нм.

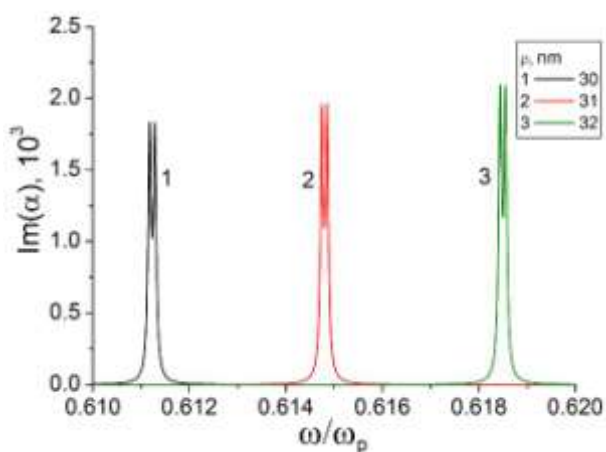


Рис. 3- Спектры поляризуемости композитного цилиндра для различного значения радиуса сердцевины. $\epsilon_2 = 2.2$

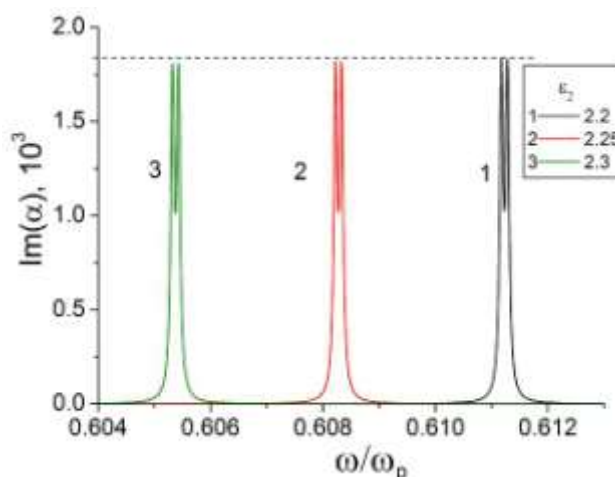


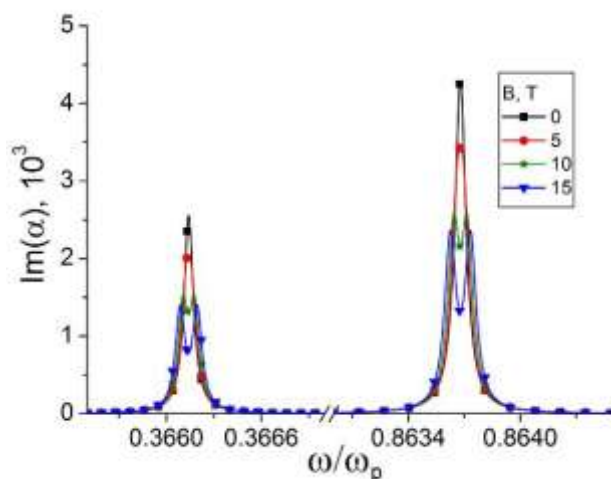
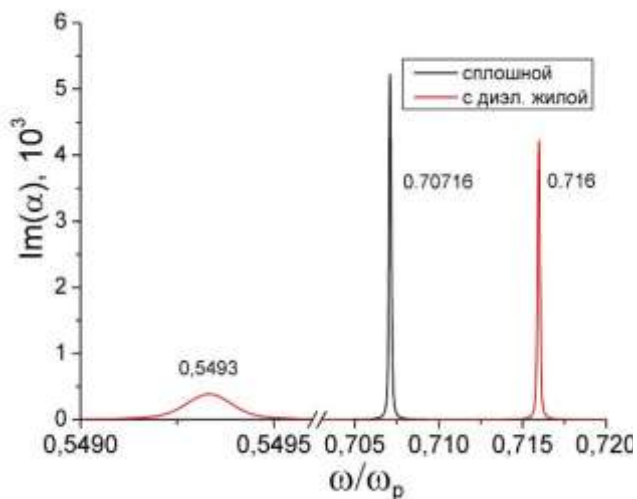
Рис. 4 - Влияние материала диэлектрического слоя на положение плазмонно-резонансного пика. $\rho = 30$ нм

$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, B = 15 \text{ Тл}, \epsilon_3 = 1, R = 50 \text{ нм}$$

С увеличением толщины металлического слоя значение поляризуемости увеличивается со смещением резонансной частоты в высокочастотную область (рис. 3). С ростом величины диэлектрической проницаемости слоя, спектральная полоса мнимой части поляризуемости композита смещается в низкочастотную область, с небольшим уменьшением амплитуды $\text{Im}(\alpha)$ (рис. 4).

**2 Металлический цилиндр с диэлектрической
бездисперсионной сердцевиной**

Для такой конфигурации аксиально-симметричного композита расчеты проведены на основе выражения (2). Главное отличие от формулы (1) состоит в том, что здесь ϵ_1 является константой, а ДП ϵ_2 становится зависящим от частоты тензором второго ранга $\epsilon_2 \rightarrow \tilde{\epsilon}_2(\omega)$.

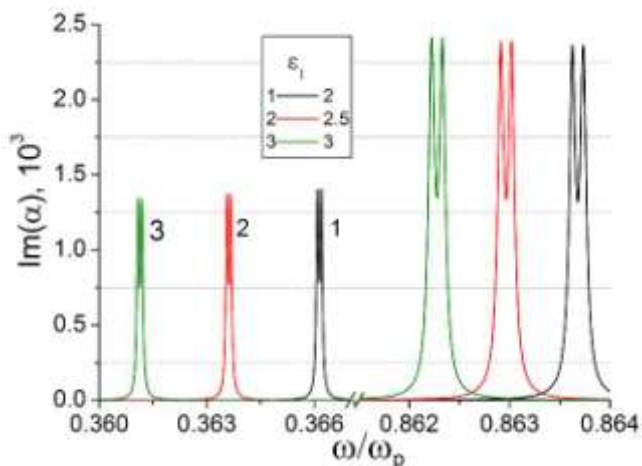
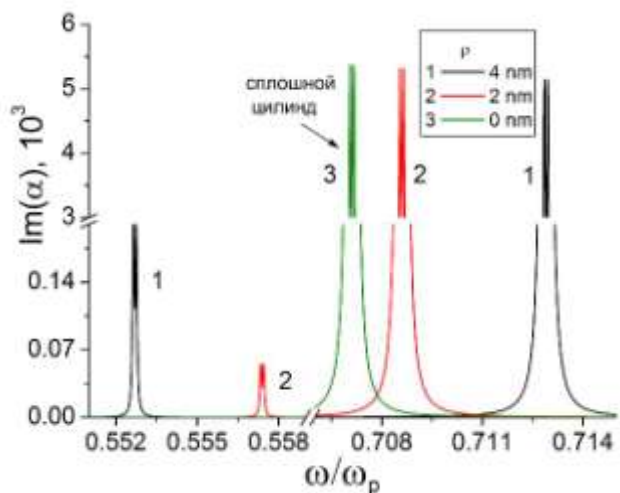


$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, \epsilon_1 = 2.2, \epsilon_3 = 1$$

Рис. 5 - Сравнение спектров поляризуемости сплошного цилиндра радиусом 50 нм со слоистым цилиндром из диэлектрической жилы и металлической оболочки радиусом 5 нм.

Рис. 6 - Спектры поляризуемости цилиндра с диэлектрической жилой и металлическим слоем в магнитном поле индукции $B = 0 - 15$ Тл. $R = 50, \rho = 30$ нм

При такой последовательности размещения слоев цилиндра в спектрах его поляризуемости наблюдаются две спектральных полосы, чувствительные к магнитному полю (рис. 6). Ширины полос одинаковы, отличаются лишь их амплитуды. Наличие двух резонансов обусловлено тем, что имеется две поверхности раздела фаз: металл - диэлектрическая сердцевина и металл - окружающая среда.



$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, B = 15 \text{ Тл}, \varepsilon_3 = 1, R = 50 \text{ нм}$$

Рис. 7- Спектры поляризуемости композитного цилиндра с диэлектрической жилой и металлическим слоем для различных значений радиуса сердцевинки. $\varepsilon_1 = 2.2$

Рис. 8 - Влияние ДП ε_1 диэлектрической жилы на положение плазмонно-резонансного пика. $\rho = 30 \text{ нм}$

Из рисунка 7 видно, что с увеличением радиуса диэлектрической жилы обе резонансные частоты смещаются, причем в противоположные стороны. Низкочастотный пик постепенно уменьшается по величине, а высокочастотный, наоборот, возрастает (рис. 7). При $\rho \rightarrow 0$, цилиндр превращается из слоистого в сплошной, при этом один из двух резонансных пиков исчезает.

С ростом проницаемости ε_1 амплитуда высокочастотного пика увеличивается, а низкочастотного – уменьшается, при этом обе резонансные спектральные полосы смещаются в низкочастотную область (рис. 8).

3 Металлический цилиндр с экситоногенным внешним слоем

В данном разделе рассматривается металлический наноцилиндр покрытый кристаллоподобным молекулярным слоем, в котом могут возникать экситоны Френкеля. На спектрах поляризуемости, в отличие от первых двух случаев, наблюдаются три спектральных полосы (рис. 9 а, б). Рисунки 9а и 9б являются фрагментами одного спектра, но для удобства график был разбит на две части. В высокочастотной области располагается плазмонный пик, который чувствителен к магнитному полю, а в низкочастотной находятся два экситонных резонанса.

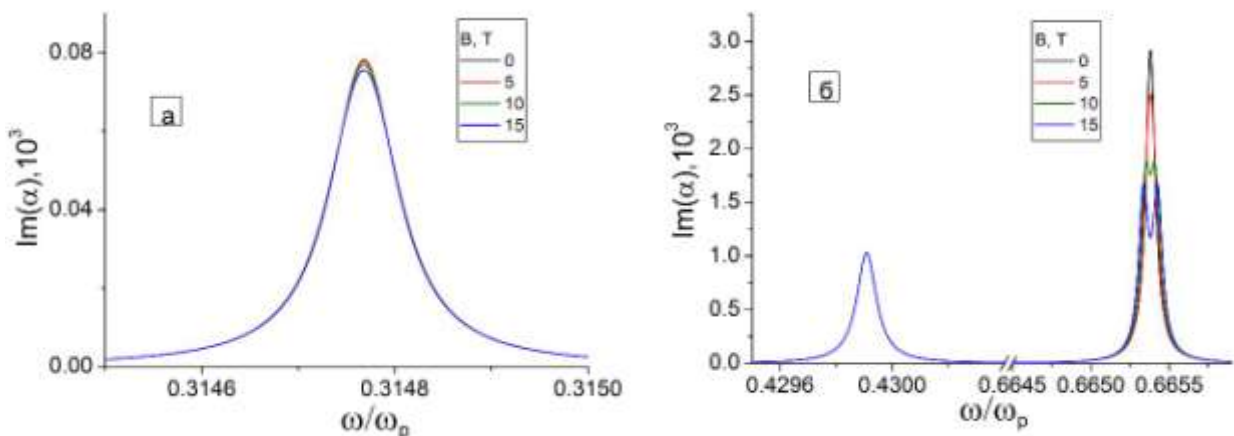


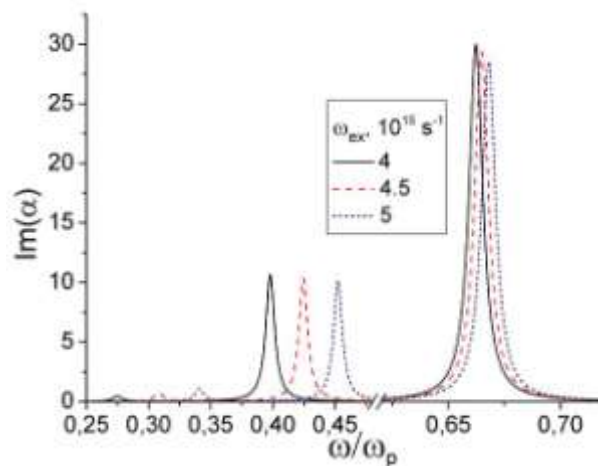
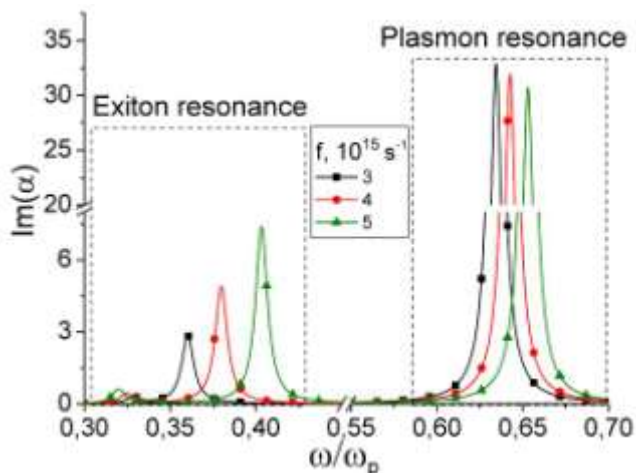
Рис. 9(а, б) - Спектры поляризуемости композитного цилиндра с металлической жилой и экситоногенным слоем в магнитном поле индукции $B = 0 - 15 \text{ Тл}$.

$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, \varepsilon_2 = 2.2, \varepsilon_3 = 1, \varepsilon_0 = 2, R = 50 \text{ нм}, \rho = 30 \text{ нм},$$

$$\omega_{\text{exc}} = 4.6 \text{ r } 10^{15} \text{ c}^{-1}, \Gamma = 5.9 \text{ r } 10^{11} \text{ c}^{-1}, f = 6 \text{ r } 10^{15} \text{ c}^{-1}$$

Далее в расчетах принималось $\gamma = 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $\Gamma = 5.9 \text{ r } 10^{13} \text{ с}^{-1}$, т.е. значения, характерные для «комнатной» температуры.

Увеличение силы осциллятора f приводит к увеличению амплитуды экситонного резонансного пика и уменьшению плазмонного, при этом экситонные пики расходятся относительно друг друга (рис. 10). С увеличением частоты, максимум экситонной полосы смещается в высокочастотную область, вместе с этим происходит незначительное смещение полосы плазмонного резонанса (рис. 11).



$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ с}^{-1}$, $\gamma = 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $\epsilon_0 = 2$, $\epsilon_2 = 2.2$, $\epsilon_3 = 1$, $R = 50$, $\rho = 30 \text{ нм}$, $\Gamma = 5.9 \text{ r } 10^{13} \text{ с}^{-1}$

Рис. 10 - Поляризуемость цилиндра с экситон-плазмонным взаимодействием при разных значениях f . $\omega_{\text{exc}} = 4.6 \text{ r } 10^{15} \text{ с}^{-1}$

Рис. - 11 Изменение спектров поляризуемости при разных значениях частоты перехода, соответствующей центру экситонной полосы. $f = 6 \text{ r } 10^{15} \text{ с}^{-1}$

Изменение радиуса металлической жилы в большую сторону, приводит к росту величины плазмонного пика и к уменьшению экситонного.

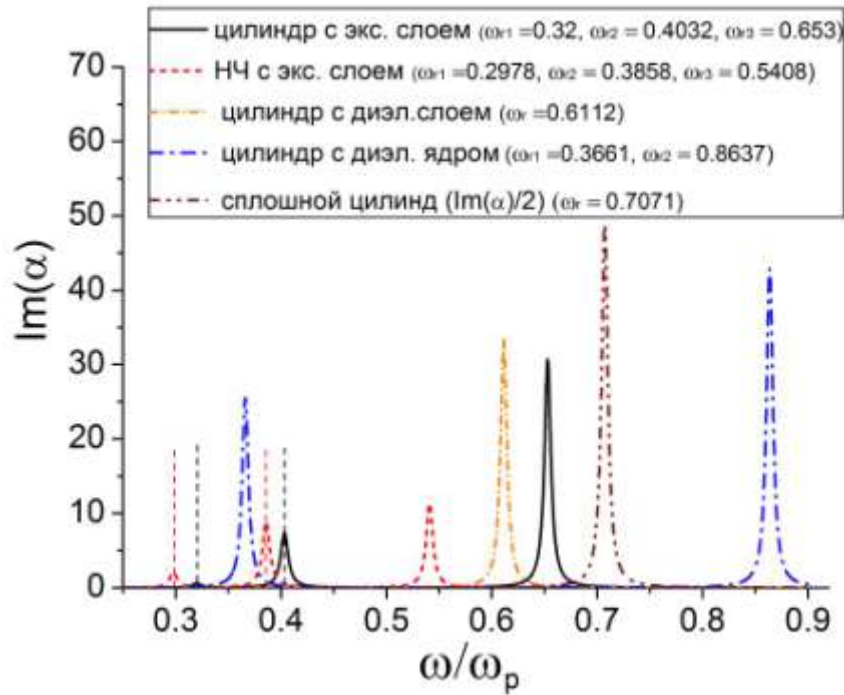


Рис. 12 - Спектры поляризуемостей сферической наночастицы и слоистых цилиндров различной структуры

Для сравнения, на рисунке 12 приведены спектры поляризуемостей всех видов рассмотренных цилиндров (величина поляризуемости сплошного цилиндра уменьшена в два раза). В легенде напротив каждой кривой приведены резонансные частоты соответствующих пиков для конкретных геометрических параметров (как было показано выше, при изменении некоторых параметров частоты плазмонно-резонансных пиков смещаются).

Заключение

Таким образом, в работе подробно исследованы поляризационные характеристики цилиндрических однослойных и двухслойных наноструктур. Показано, что спектры дипольной поляризуемости цилиндров зависят от материала и толщины слоев. В зависимости от того, является ли металлической жила композита или его внешний слой, спектры плазмонного резонанса выглядят по-разному. Так, в случае композита «металлическая жила - бездисперсионный диэлектрический слой» в спектре наблюдается одна резонансная полоса, а в случае инвертированной системы – две. Если плазмонная металлическая жила покрыта экситоногенным слоем, в спектре наблюдается три резонансных полосы.

Обнаружено влияние внешнего магнитного поля на спектральные характеристики композитных наноцилиндров. В спектрах поляризуемости слоистых систем возникают расщепления резонансных пиков на две либо три компоненты, в зависимости от взаимной ориентации векторов магнитной индукции \mathbf{B} и напряженности \mathbf{E} электрического поля. Положения и амплитуды резонансов зависят от структурных характеристик композитов.

Работа выполнена при поддержке грантами РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 16-42-560671), а также по Госзаданию Министерства образования и науки РФ (проект № 233).

Список литературы

1. Strickland, D. *Dynamic polarizability tensor for circular cylinders* / D. Strickland, A. Ayón, A. Alù // *Phys. Rev. B.* –2015. –V. 91. –Iss.8. –P. 085104.
2. Кучеренко, М. Г. *Спектры поляризуемости нанокластеров из двух композитных частиц во внешнем магнитном поле* / М. Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // *Вестн. Оренбург. гос. ун-та.* –2015. – № 13. –С. 156-161.
3. Кучеренко, М. Г. *Дипольные поляризуемости и сечения поглощения двухчастичных нанокластеров из проводящих однородных и слоистых частиц с вырожденным электронным газом* / М. Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // *Известия вузов. Физика.* –2016. –Т. 59. –№ 9. –С. 87-93.
4. Завитаев, Э.В. *Поглощение электромагнитного излучения металлической частицей цилиндрической формы* / Э.В. Завитаев, А.А. Юшканов, Ю.И. Яламов // *Журнал технической физики.* –2001. –Т. 71. –№ 11. –С. 114-118.
5. Smogunov, A. N. *Electronic Structure and Polarizability of Quantum Metallic Wires* / A. N. Smogunov , L. I. Kurkina , O. V. Farberovich // *Physics of the Solid State.* –2000. –V. 42. –№. 10. - P. 1898-1907.
6. Kallos, E. *Resonance properties of optical all-dielectric metamaterials using two-dimensional multipole expansion* / E. Kallos, I. Chremmos, V. Yannopoulos // *Physical Review B.* –2012. –V.86. –P. 245108.
7. Давыдов, А.С. *Теория твердого тела* / А.С. Давыдов. //М.: Наука, 1976. –640 с.
8. Kucherenko, M.G. *Absorption and spontaneous emission of light by molecules near metal nanoparticles in external magnetic field* / M.G. Kucherenko, V.M. Nalbandyan // *Physics Procedia.* –2015. –V.73. –P. 136–142.
9. Кучеренко, М.Г. *Генерация экситонов и поглощение света молекулами в слое композитной наноструктуры с замагниченной проводящей частью* / М. Г. Кучеренко // *Универ. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 1-3 февр. 2017 г., Оренбург / Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург , 2017. (Настоящий сборник).*

