

Оптика наносистем



Тимошенко Виктор Юрьевич

*Московский Государственный Университет
им. М. В. Ломоносова, Физический факультет
Научно-Образовательный Центр по нанотехнологиям*

Содержание курса

Лекция 1. Основные понятия оптики конденсированных фаз вещества.

Лекция 2. Взаимодействие света с металлами и диэлектриками.

Лекция 3. Поглощение света в полупроводниках.

Лекция 4. Экситонное и примесное поглощение света.

Лекция 5. Эмиссия излучения из твердых тел.

Лекция 6. Оптические явления в неоднородных твердотельных системах.

Лекция 7. Оптические свойства твердотельных нанокomпозитов.

Лекция 8. Фотонные кристаллы и микрорезонаторы.

Лекция 9. Рассеяние света в твердых телах.

Лекции 10,11. Влияние размеров тел на их оптические свойства.

Лекции 12-14. Экситоны в полупроводниковых наноструктурах.

Лекция 15. Оптические свойства и применения полупроводниковых наноструктур.

Лекция 16. Элементы спиновой оптики и спинтроники.

Лекция 17. Нелинейные оптические явления в твердотельных системах.

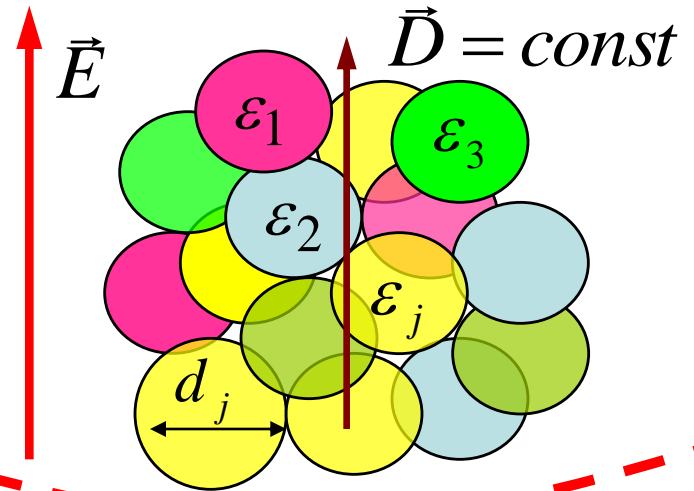
Лекция 18. Элементы нелинейной оптики наноструктур и нанокomпозитов.

Лекция 6. Оптические явления в неоднородных твердотельных системах.

Матричные и статистические гетеросистемы. Концепция эффективной среды и эффективная диэлектрическая проницаемость гетеросистемы. Электростатическое приближение. Фактор поля. Формула Максвелла. Соотношение Максвелла-Гарнетта. Приближение эффективной среды - формула Бруггемана.

Оптические свойства неоднородных сред и нанокомпозитов. Концепция эффективной диэлектрической проницаемости

Многокомпонентная твердотельная гетеросистема (ГС), состоящая из N компонент с диэлектрическими проницаемостями ϵ_j и размерами d_j ($j=1,2,\dots,N$)



Световая волна

λ

Если характерные размеры структурных элементов d каждой из фаз много меньше длины световой волны λ , то гетеросистема может быть рассмотрена как однородная оптическая среда, а ее свойства могут быть описаны **эффективной диэлектрической проницаемостью ϵ_{eff}** и **эффективным показателем преломления n_{eff}**

$$\epsilon_{eff} \equiv \frac{\langle \vec{D} \rangle}{\langle \vec{E} \rangle}$$

$$n_{eff} = \sqrt{\epsilon_{eff}}$$

(система единиц СГС)

Это может быть легко сделано в электростатическом приближении:

$$d \ll \lambda$$

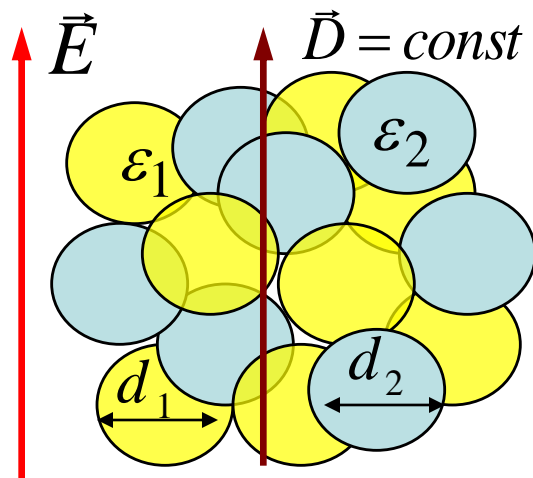
Эффективная диэлектрическая проницаемость 2-х компонентной ГС в электростатическом приближении

$$d \ll \lambda$$

$$\varepsilon_{eff} \equiv \frac{\langle \vec{D} \rangle}{\langle \vec{E} \rangle}$$

$$n_{eff} = \sqrt{\varepsilon_{eff}}$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{E} \rangle &\equiv \frac{1}{V} \int_V \vec{E} dV = \frac{1}{V} \int_{V_1} \vec{E} dV + \frac{1}{V} \int_{V_2} \vec{E} dV = \\ &= f_1 \langle \vec{E}_1 \rangle + f_2 \langle \vec{E}_2 \rangle \quad \Rightarrow \quad \mathbf{1 = f_1 \theta_1 + f_2 \theta_2} \end{aligned}$$



$$\langle \vec{D} \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_1} \varepsilon_1 \vec{E} dV + \frac{1}{V} \int_{V_2} \varepsilon_2 \vec{E} dV = f_1 \varepsilon_1 \langle \vec{E}_1 \rangle + f_2 \varepsilon_2 \langle \vec{E}_2 \rangle$$

Фактор поля :

$$\theta_{1,2} \equiv \frac{\langle \vec{E}_{1,2} \rangle}{\langle \vec{E} \rangle}$$

Фактор заполнения: $f_{1,2} \equiv \frac{V_{1,2}}{V}$

$$\frac{V_1}{V} + \frac{V_2}{V} = f_1 + f_2 = 1$$

Эффективная диэлектрическая проницаемость:

$$\varepsilon_{eff} = f_1 \varepsilon_1 \theta_1 + f_2 \varepsilon_2 \theta_2$$

Эффективная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной гетеросистемы

Формула для эффективной диэлектрической проницаемости легко может быть обобщена на случай многокомпонентной гетеросистемы (ГС), где N – количество компонент (фаз). При этом должны выполняться условия нормировки:

$$\sum_{j=1}^N f_j \theta_j (\varepsilon_{eff} - \varepsilon_j) = 0$$

$$\sum_{j=1}^N f_j = 1$$

$$\sum_{j=1}^N \theta_j = 1$$

Уравнения являются базовым в рамках концепции эффективной диэлектрической проницаемости. Различные модели эффективной среды используют дополнительные предположения и приближения относительно формы включений и свойств фаз.

В качестве основных модельных приближений в теории эффективной среды рассматриваются два типа ГС, а именно,

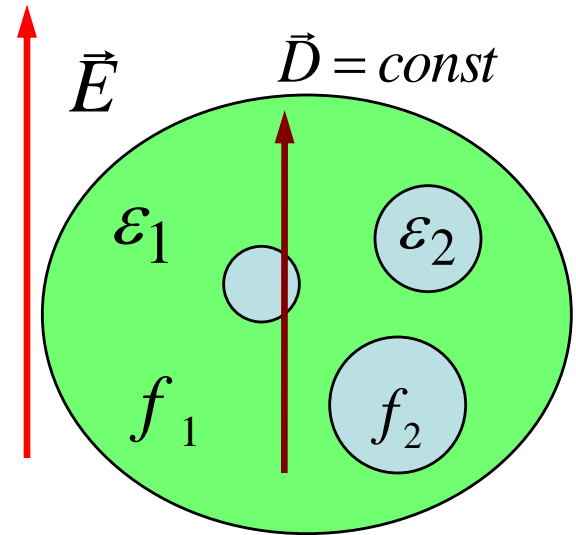
- 1) **матричные ГС**, в которых каждый элемент среды-включения окружен со всех сторон некоторой средой-матрицей, и взаимодействием элементов включения можно пренебречь, и
- 2) **статистические ГС**, для которых все компоненты среды равноправны.

Двухкомпонентная матричная ГС. Формула Максвелла.

Фактор заполнения: $f_1 \gg f_2$

$$1 = f_1 \theta_1 + f_2 \theta_2 \Rightarrow f_1 \theta_1 = 1 - f_2 \theta_2$$

$$\varepsilon_{eff} = f_1 \varepsilon_1 \theta_1 + f_2 \varepsilon_2 \theta_2 = \varepsilon_1 + f_2 \theta_2 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$$



Фактор поля для сферических включений получается из решения задачи о диэлектрическом шаре и имеет вид:

$$\theta_2 = \frac{3\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2}$$

Формула Максвелла
или приближение
слабого рассеяния :

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_1 + \frac{3f_2\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1} = \varepsilon_1 \left(1 + 3f_2 \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1} \right)$$

Формула Максвелла описывает эффективную диэлектрическую проницаемость матричной ГС без учета возможного взаимодействия (взаимной поляризации) включений, т.е. для очень разреженной фазы включений ($f_2 \ll 1$).

Двухкомпонентная матричная ГС с учетом взаимной поляризации включений. Формула Максвелла-Гарнета.

Фактор заполнения: $f_1 > f_2$

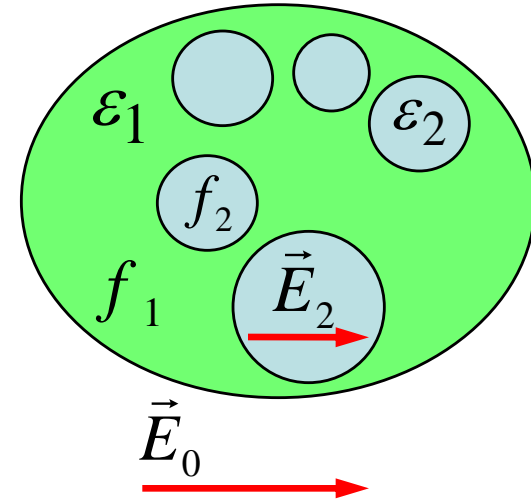
Локальное поле внутри включений сферической формы:

$$E_2 = E_0 + E_d = E_0 - \frac{4\pi}{3} P = \frac{3\varepsilon_1}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1} E_0$$

Поле поляризованной сферы (поле Лоренца):

$$E_d = -\frac{4\pi}{3} P$$

Величина вектора поляризации среды сферического включения:

$$P = \frac{3}{4\pi} \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1} E_0$$


Полная средняя величина вектора поляризации среды включений:

$$\langle P \rangle = f_2 \frac{3}{4\pi} \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1} E_0$$

В приближении эффективной среды:

$$\langle P \rangle = \frac{3}{4\pi} \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_1} E_0$$

Формула Максвелла-Гарнета :
(справедлива для : $f_2 < \frac{1}{3}$)

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_1} = f_2 \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1}$$

Эффективная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной статистической гетеросистемы

Фактор поля для сферических включений имеет вид:

$$\theta_j = \frac{3\varepsilon_{eff}}{\varepsilon_j + 2\varepsilon_{eff}}$$

Используя общую формулу, получим так называемую **формулу Бруггемана**, известную также как **приближение эффективной среды**:

$$\sum_{j=1}^N f_j \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_j}{\varepsilon_j + 2\varepsilon_{eff}} = 0$$

Последняя формула может быть обобщена на случай эллипсоидальной формы включений, что дает, так называемую, **обобщенную формулу Бруггемана**:

$$\sum_{j=1}^N f_j \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_j}{\varepsilon_{eff} + L_j(\varepsilon_j - \varepsilon_{eff})} = 0$$

Фактор деполяризации L_j определяет локальное электрическое поле в области j -й фазы:

$$\vec{E}_j = \vec{E} - 4\pi\hat{L}_j\vec{P}$$
$$L_x + L_y + L_z = 1$$

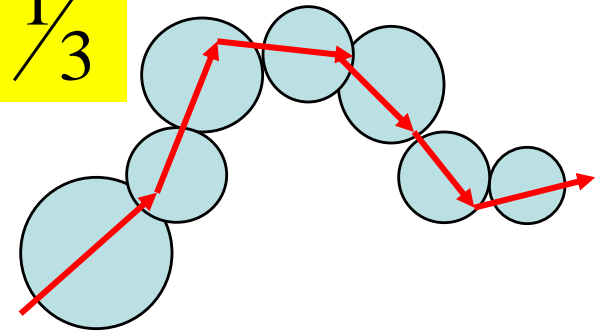
для сферы: $L_x = L_y = L_z = \frac{1}{3}$

для цилиндра: $L_{\parallel} = 0$ $L_{\perp} = \frac{1}{2}$ $L_{\parallel} + 2L_{\perp} = 1$

Критерий протекания и свойства пористых материалов

Критерий протекания в одной из фаз: $f_j \geq \frac{1}{3}$

Становится возможным контакт включений данной фазы, т.е. частицы фазы являются связанными



Для 2-х компонентной ГС обе фазы связанные, если :

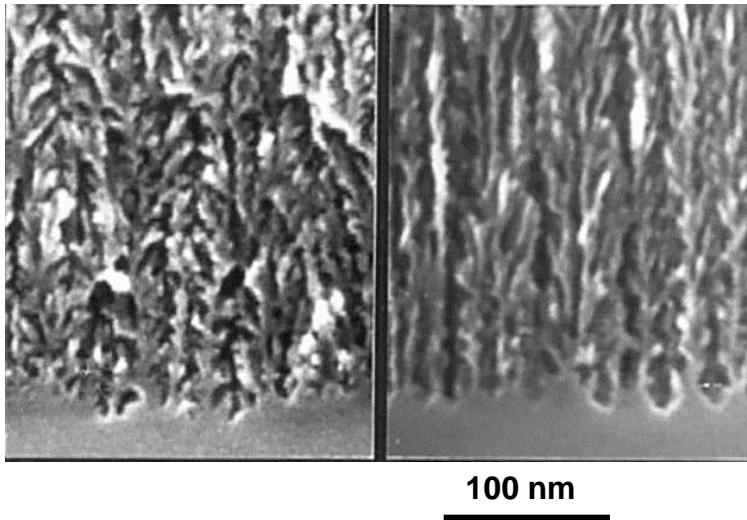
$$\frac{1}{3} \leq f_j \leq \frac{2}{3}$$

Примерами таких систем являются пористые материалы, например, пористый кремний, диэлектрическая проницаемость и оптические свойства которого хорошо описываются формулой Бруггемана.

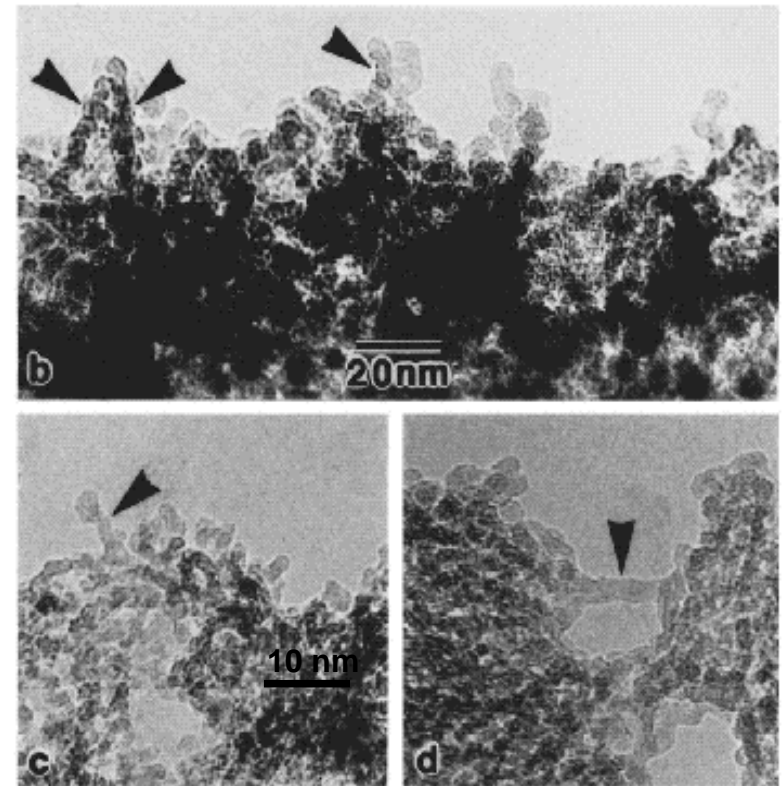
Мезо- и микропористый кремний как примеры наноструктурированных полупроводников

Вид ПК	Размер пор
Микропористый	≤ 2 нм
Мезопористый	2-50 нм
Макропористый	>50 нм

Мезопористый кремний



Микропористый кремний



Микро- и мезопористый кремний для света видимого и ИК-диапазонов могут быть рассмотрены в рамках электростатического приближения теории эффективной среды

Контрольные вопросы к Лекции 6:

- Что такое эффективная диэлектрическая проницаемость?
- В чем состоит различие между матричными и статистическими гетеросистемами?
- Что такое фактор поля и фактор заполнения?
- Для каких гетеросистем справедливы формулы Максвелла и Бруггемана?
- Что такое «электростатическое приближение»?
- Что такое фактор деполяризации и чему он равен для сферы, цилиндра и плоскости?
- Что такое критерий протекания?