

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧАСТОТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СВЕТОВОЙ ВОЛНЫ, ОТРАЖЕННОЙ ОТ НАНОКОМПОЗИТНОГО СЛОЯ

## MATHEMATICAL MODELING OF THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE ELLIPSOMETRIC PARAMETERS OF A LIGHT WAVE REFLECTED FROM A NANOCOMPOSITE LAYER

V. Yatsyshen  
I. Potapova

*Summary.* The paper demonstrates a high sensitivity of the ellipsometry method to the parameters of a nanocomposite material. This is especially noticeable in the region of the longitudinal frequency of the nanocomposite, which is in the region where the real part of the permittivity of the nanocomposite passes through zero, where the band gap begins. Taking into account this dependence, these regularities can be used to create controlled elements of polarization optics based on nanocomposites. It is shown that a nanocomposite based on a dielectric matrix with nanoparticles distributed in it exhibits pronounced polariton properties, which, in the case of semiconductors with phonon or exciton resonances, are widely used in nanophotonics.

*Keywords:* nanocomposite, silver nanoparticles, energy reflection and transmission coefficients, ellipsometric parameters, polaritons, band gap.

Яцышен Валерий Васильевич

Профессор

Волгоградский государственный университет

yatsyshen.valeriy@volsu.ru

Потапова Ирина Игоревна

Аспирант

Волгоградский государственный университет

ipotapova28@mail.ru

*Аннотация.* В работе продемонстрирована высокая чувствительность метода эллипсометрии к параметрам нанокompозитного материала. Особенно это заметно в области продольной частоты нанокompозита, которая находится в области перехода действительной части диэлектрической проницаемости нанокompозита через ноль — здесь образуется начало запретной зоны. С учетом такой зависимости, можно использовать данные закономерности для создания управляемых элементов поляризации оптики на основе нанокompозитов. Показано, что нанокompозит на основе диэлектрической матрицы с распределенными в ней наночастицами проявляет ярко выраженные поляритонные свойства, которые в случае полупроводников с фоннонным или экситонным резонансами находят широкое применение в нанофотонике.

*Ключевые слова:* нанокompозит, наночастицы серебра, энергетические коэффициенты отражения и прохождения, эллипсометрические параметры, поляритоны, запретная зона.

**Н**анокompозитные материалы в настоящее время привлекают большое внимание исследователей и инженеров ([1–3]). Причина заключается в том, что такие материалы обладают уникальными и, главное, управляемыми оптическими свойствами. Мы рассмотрим модель нанокompозита, состоящего из диэлектрической матрицы, в которой случайным образом распределены наночастицы из благородных металлов. В качестве последних рассмотрены частицы серебра. В ряде наших работ [4,5] был проведен анализ возбуждения поверхностных поляритонов на границе нанокompозита и проведен расчет их дисперсионных характеристик.

Для композитного материала диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon_{mix}$  вычисляется с помощью модели Максвелла-Гарнета [4,5]:

$$\frac{\varepsilon_{mix} - \varepsilon_d}{\varepsilon_{mix} + 2\varepsilon_d} = f \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_d}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_d} \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon_{mix}$  — диэлектрическая проницаемость нанокompозита;  $\varepsilon_d$  — диэлектрическая проницаемость матрицы;  $f$  — описывает объемную долю металлических частиц нанокompозита; — диэлектрическая проницаемость наночастицы серебра. Для последних используется формула Друде, которая весьма хорошо описывает оптические свойства частиц благородных металлов:

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_0 \left( 1 - \frac{\omega_L^2}{\omega^2} \right), \quad \omega_L^2 = \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_0} \quad (2)$$

- ♦ высокочастотная диэлектрическая проницаемость наночастицы серебра при  $\omega \rightarrow \infty$ , — плазменная частота.

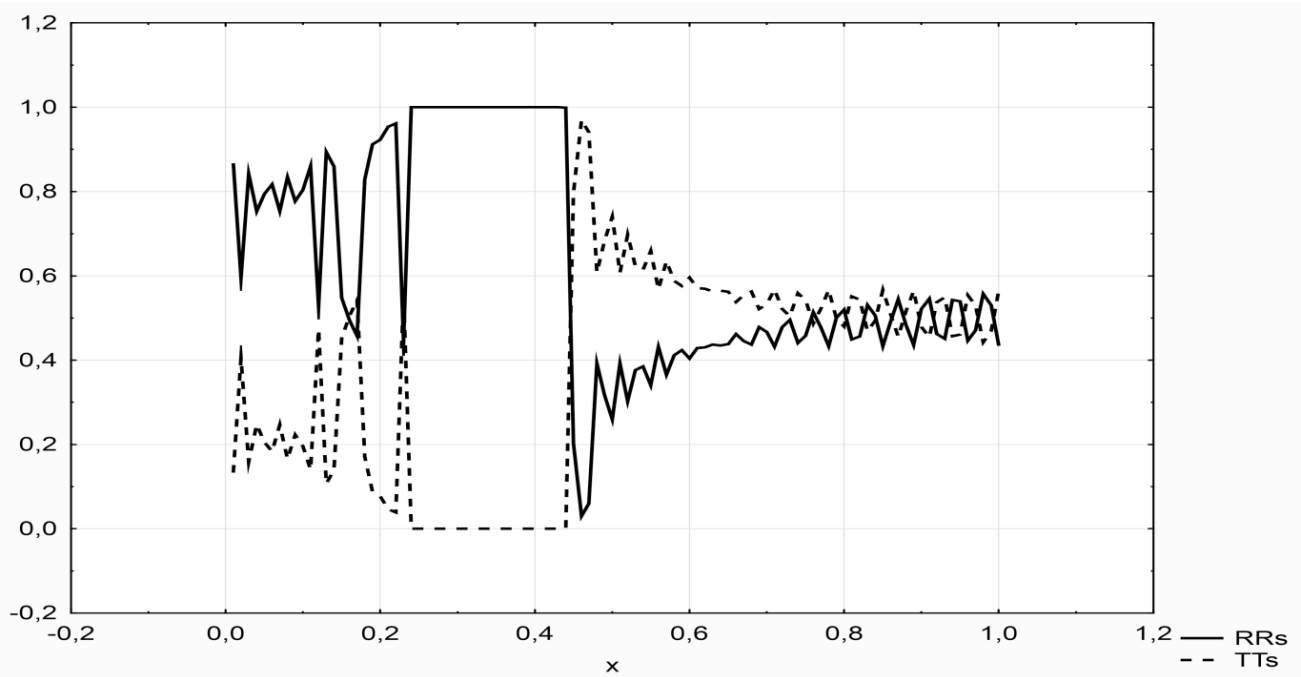


Рис. 1. Зависимость энергетических коэффициентов отражения RRs и прохождения TTs от относительной частоты  $x = \omega / \omega_p$

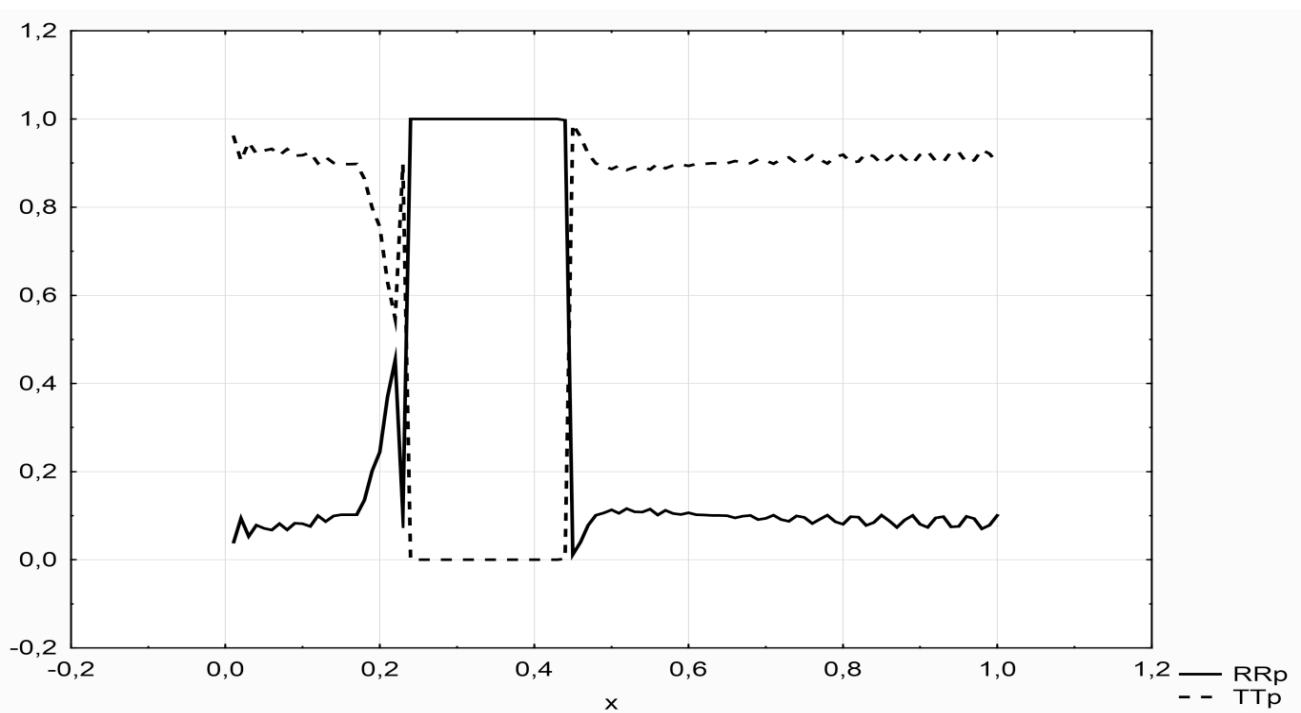


Рис. 2. Зависимость энергетических коэффициентов отражения RRp и прохождения TTp от относительной частоты  $x = \omega / \omega_p$ .

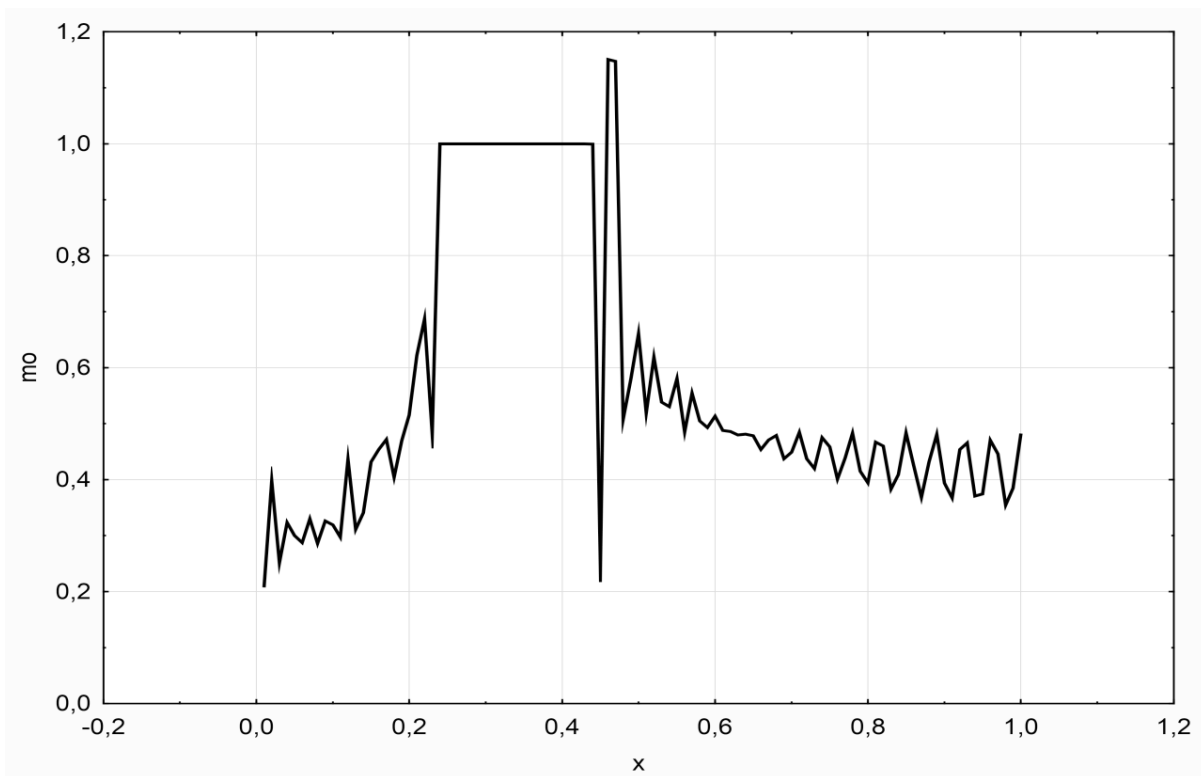


Рис. 3. Зависимость эллипсометрического параметра  $m_0$  от относительной частоты  $x = \omega / \omega_p$ .

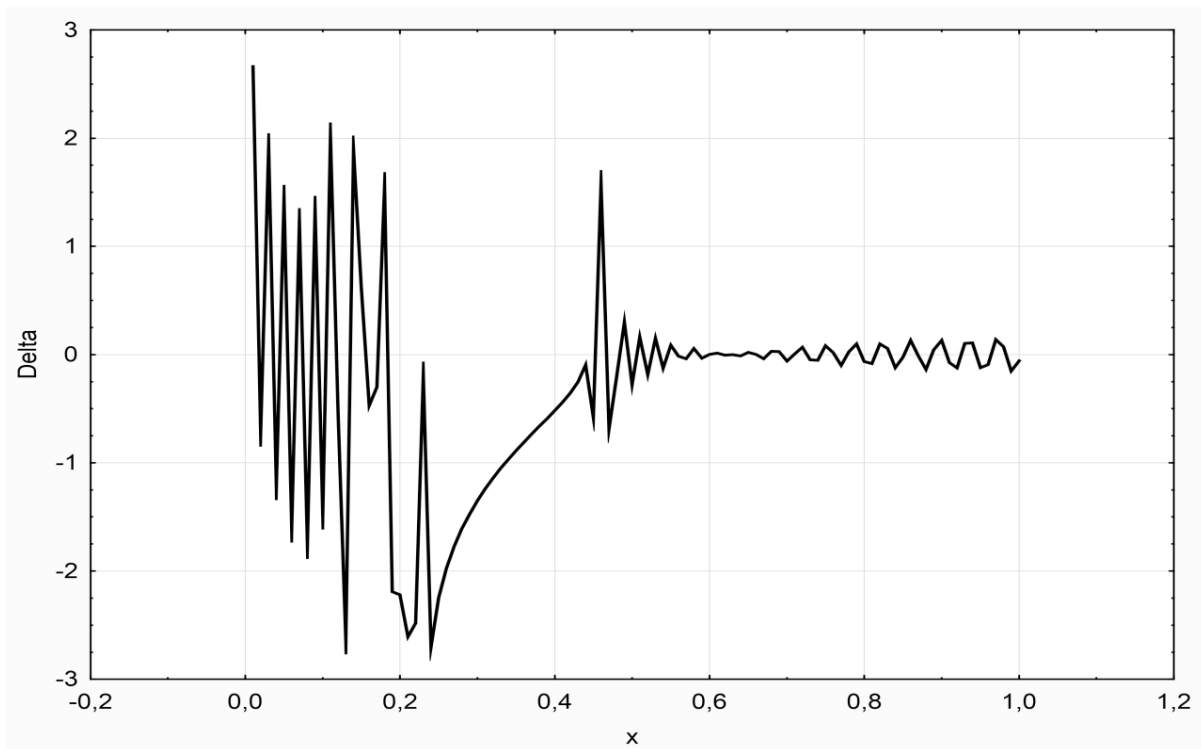


Рис. 4. Зависимость эллипсометрического параметра  $\Delta$  от относительной частоты  $x = \omega / \omega_p$ .

## Постановка задачи

На пластинку из нанокompозита толщиной из среды  $z < 0$  с диэлектрической проницаемостью под углом падает плоская гармоническая световая волна. Требуется провести анализ частотной зависимости отраженного и прошедшего света: энергетических коэффициентов отражения и прохождения, эллипсометрических параметров отраженного и прошедшего света. Диэлектрическая проницаемость среды, в которую после пластинки поступает свет, равна  $\varepsilon_3 = 2.5$ .

## Решение задачи

Для различных видов поляризации падающего излучения мы решаем задачу с использованием характеристической матрицы слоя нанокompозита [4]. Для  $s$  — и  $p$  — поляризации получаем комплексные амплитуды отраженного и прошедшего света, с помощью которых находятся эллипсометрические параметры. В частности, для отраженной волны последние определяются с помощью отношения:

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = m_0 \exp(i\Delta) \quad (3)$$

В этой формуле  $R_p$  и  $R_s$  есть комплексные коэффициенты отражения для  $p$  — и  $s$  — поляризаций соответственно;  $m_0$  — модуль эллипсометрического параметра,  $\Delta$  — его фаза. Следует особо подчеркнуть, что эллипсометрические параметры несут более детальную информацию об исследуемой структуре по сравнению с обычными энергетическими коэффициентами отражения и прохождения. В расчеты мы использовали следующие значения параметров [4,5]:  $\varepsilon_0 = 5$ ,  $d = 1$  нм,  $\varepsilon_d = 2.56$ ,  $f = 0.5$ ,  $\theta_0 = 75^\circ$ ,  $\omega_p = 9$  eV. Затухание в наночастицах не учитывалось — параметр диссипации в диэлектрической проницаемости металла полагался равным нулю. Это позволяет провести контроль вычислений и обоснование их корректности с помощью закона со-

хранения энергии. Относительная частота  $x = \omega / \omega_p$  изменялась в диапазоне:  $x = 0.01:0.01:1$ .

## Результаты расчетов и их обсуждение

На рисунках 1–4 представлены результаты вычислений по предложенной модели нанокompозита.

Из рисунка 1 видно, что энергетические коэффициенты отражения и прохождения для  $s$ - поляризации носят осцилляционный характер, обусловленный интерференцией волны в пластинке. Также эти спектры обнаруживают ярко выраженный поляритонный характер — существует запрещенная зона от  $x=0.24$  до  $x=0.43$ , где в пластинке из нанокompозита волна не распространяется, а полностью отражается  $RR_s = 1$ .

Картина для  $p$  — поляризации обнаруживает такое же интерференционное поведение с такой же запретной зоной  $RR_p = 1$ . Необходимо подчеркнуть, что в процессе расчета спектров осуществлялся контроль за корректностью работы модели с помощью закона сохранения энергии:  $RR_s + TT_s = 1$  и

$RR_p + TT_p = 1$  для любого значения  $x$ . Особый интерес представляет анализ частотного спектра эллипсометрических параметров, которые изображены на Рисунках 3,4.

Отметим резко выраженную интерференционную картину этих параметров, а также наличие резкого скачка модуля  $m_0$  с  $m_0=0.24$  до  $m_0=1.58$  при переходе с  $x=0.45$  до  $x=0.46$ . Кроме этого, заметим, что если модуль эллипсометрического параметра внутри запрещенной зоны остается, как и следовало ожидать, равным единице, то фаза эллипсометрического параметра в этой зоне плавно меняется от значения  $\Delta = -0,19397$  до  $\Delta = -0,09499$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Abed C., Ali M.B., Addad A., Elhouichet H. Growth, structural and optical properties of ZnO-ZnMgO-MgO nanocomposites and their photocatalytic activity under sunlight irradiation // Materials Research Bulletin, 2019, V.110, pp. 230–238
2. Al-Rekabi S.H., Kamil Y.M., Abu Bakar M.N. et al. Hydrous ferric oxide-magnetite-reduced graphene oxide nanocomposite for optical detection of arsenic using surface plasmon resonance // Optics and Laser Technology 2019, V. 111, pp.417–423.
3. Xu L., Zheng G., Liu Y., Su J., Kuang W., Rao W. The optical properties of Ag/ZnO nanocomposite thin films with different thickness // Optik 2017, V. 147, pp. 6–13.
4. Potapova I.I., Yatsishen V.V. Propagation and damping constants of surface plasmons on the boundary of nanocomposite // AIP Conference Proceedings. 2019. p. 020244.
5. Potapova I.I., Yatsishen V.V. Dependence of complex dielectric permeability and complex refraction index from frequency for composite with gold nanoparticles // AIP Conference Proceedings. 2020. p. 030026.