

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

Факультет інформаційної безпеки та електронних комунікацій
(повне найменування факультету)

Кафедра інформаційної безпеки та наноелектроніки
(повне найменування кафедри)

Пояснювальна записка

до дипломного проєкту (роботи)

магістр

(ступінь вищої освіти)

на тему Інфрачервоне поглинання композитом зі сферичними
металевими включеннями

(назва теми)

Виконав(ла): студент(ка) II курсу,
групи БК-312м
Спеціальності 153 Мікро- та
наносистемна техніка

(код і найменування спеціальності)

Освітня програма (спеціалізація)
Мікро- та наноелектронні прилади і
пристрої

СУВОРОВА М.А.

(ПРИЗВИЩЕ та ініціали)

Керівник КОРОТУН А.В.

(ПРИЗВИЩЕ та ініціали)

Рецензент КУРБАЦЬКИЙ В.П.

(ПРИЗВИЩЕ та ініціали)

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

Факультет інформаційної безпеки та електронних комунікацій

Кафедра інформаційної безпеки та наноелектроніки

Ступінь вищої освіти магістр

Спеціальність 153 Мікро- та наносистемна техніка

(код і найменування)

Освітня програма (спеціалізація) Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої

(назва освітньої програми (спеціалізації))

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. завідувача кафедри ІБтаН

Андрій КОРОТУН

«___» _____ 2023 року

ЗАВДАННЯ
НА ДИПЛОМНИЙ ПРОЄКТ (РОБОТУ) СТУДЕНТА(КИ)

СУВОРОВІЙ Марині Анатоліївні

(ПРИЗВИЩЕ, ім'я, по батькові)

1. Тема проєкту (роботи) Інфрачервоне поглинання композитом зі сферичними металевими включеннями

Infrared absorption by a composite with spherical metal inclusions

керівник проєкту (роботи) к.ф.-м.н., доцент, КОРОТУН Андрій Віталійович,

(науковий ступінь, вчене звання, ПРИЗВИЩЕ, ім'я, по батькові)

затверджені наказом закладу вищої освіти від «28» листопада 2023 року №470

2. Строк подання студентом проєкту (роботи) 11.12.2023

3. Вихідні дані до проєкту (роботи) композит зі сферичними металевими наночастинками, параметри наночастинок та несучого середовища

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити)

Поглиналильні властивості композитів зі сферичними металевими наночастинками в інфрачервоній області спектра

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень, кількість слайдів, плакатів)

Презентація доповіді (в MS PowerPoint), 11 слайдів.

6. Консультанти розділів проєкту (роботи)

Розділ	ПРИЗВИЩЕ, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	прийняв виконане завдання
1 – 2	КОРОТУН А.В., професор кафедри ІБтаН	04.09.2023	05.12.2023
Нормоконтроль	КОРОЛЬКОВ Р. Ю., доцент кафедри ІБтаН		08.12.2023

7. Дата видачі завдання «04» вересня 2023 року.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломного проєкту (роботи)	Строк виконання етапів проєкту (роботи)	Примітка
1.	Збір та аналіз інформації про дипольне поглинання електромагнітного випромінювання ІЧ діапазону композитамі сферичними металевими наночастинками	04.09.23 – 18.09.23	виконано
2.	Систематизація літературних даних	19.09.23 – 24.09.23	виконано
3.	Складання і затвердження наукового завдання	25.09.23 – 27.09.23	виконано
4.	Формування та уточнення наукового завдання	27.09.23 – 28.09.23	виконано
5.	Одержання частотних залежностей коефіцієнта поглинання з урахуванням електричного та магнітного внесків	29.09.23 – 15.10.23	виконано
6.	Складання процедури розрахунку	16.10.23 – 31.10.23	виконано
7.	Одержання чисельних розрахунків та їх аналіз	01.11.23 – 13.11.23	виконано
8.	Оформлення графічної частини	14.11.23 – 19.11.23	виконано
9.	Оформлення ПЗ		

Студент(ка)

_____ Марина СУВОРОВА
(підпис) (Ім'я ПРИЗВИЩЕ)

Керівник проєкту (роботи)

_____ Андрій КОРОТУН
(підпис) (Ім'я ПРИЗВИЩЕ)

АНОТАЦІЯ

Пояснювальна записка до магістерської роботи: 55 с., 2 табл., 9 рис., 36 джерел.

ДІЕЛЕКТРИЧНА ПРОНИКНІСТЬ, ДИПОЛЬНЕ НАБЛИЖЕННЯ, ЕФЕКТИВНИЙ ЧАС РЕЛАКСАЦІЇ, КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ, МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИЧНИЙ НАНОКОМПОЗИТ

Мета роботи: дослідження частотних залежностей коефіцієнта поглинання метал-діелектричних нанокompatитів.

Об'єкт та предмет дослідження: об'єктом дослідження виступають нанокompatити зі сферичними металевими включеннями; предметом дослідження є оптичні характеристики зазначених композитів.

Методи дослідження: розрахунково-аналітичний.

Результати роботи: аналітичні вирази для коефіцієнта поглинання нанокompatиту в дипольному наближенні з урахуванням електричного та магнітного внесків.

Рекомендації щодо впровадження: робота носить фундаментальний характер, проте деякі її результати можуть бути використані при створенні нових нанофотонних пристроїв та в інших прикладних галузях.

Практична цінність: розроблено практичні рекомендації щодо матеріалів і розмірів наночастинок, вбудованих у діелектричне середовище.

Апробація результатів роботи: Основні положення та результати роботи були представлені на наукових конференціях та опубліковані в матеріалах:

1. **Перепелиця, М.** Вплив розмірних ефектів на електричне і магнітне дипольне поглинання електромагнітного випромінювання ансамблем

сферичних металевих наночастинок [Текст] / М. Перепелиця, А. Коротун // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА-2023. Тези доповідей. (Травень, 16–18, 2023). – Львів. – 2023. – С. 6.

2. **Suvorova, M. A.** Optical properties of metal-dielectric composites. The role of electric and magnetic dipole absorption [Text] / M. A. Suvorova, A. V. Korotun // The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2023). Abstract Book of participants of the International research and practice conference, 16–19 August 2023, Bukovel. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2023. – 640 p. – P. 514.

ABSTRACT

Explanatory note to the master's thesis: 55 p., 2 tables, 9 figures, 36 sources.

ABSORPTION COEFFICIENT, DIELECTRIC CONSTANT, DIPOLE APPROXIMATION, EFFECTIVE RELAXATION TIME, METAL-DIELECTRIC NANOCOMPOSITE

The goal of the work: study of frequency dependences of the absorption coefficient of metal-dielectric nanocomposites .

Object and subject of research: the object of research is nanocomposites with spherical metal inclusions; the subject of research is the optical characteristics of the specified composites .

Research methods: computational and analytical.

The results of the work: analytical expressions for the absorption coefficient of the nanocomposite in the dipole approximation, taking into account the electric and magnetic contributions.

Recommendations for implementation: the work is of a fundamental nature, but some of its results can be used in the creation of new nanophotonic devices and other applied fields.

Practical value: practical recommendations for materials and sizes of nanoparticles embedded in a dielectric medium have been developed.

Approbation of work results: The main provisions and results of the work were presented at scientific conferences and published in materials:

1. **Perepelitsa, M.** Influence of dimensional effects on electric and magnetic dipole absorption of electromagnetic radiation by an ensemble of spherical metal nanoparticles [Text] / M. Perepelitsa, A. Korotun // International conference of students and young scientists in theoretical and experimental physics EURYKA-2023. Abstracts of reports. (May, 16–18, 2023). - Lviv. – 2023. – P. 6.

2. **Suvorova, M. A.** Optical properties of metal-dielectric composites. The role of electric and magnetic dipole absorption [Text] / M. A. Suvorova, A. V. Korotun // The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2023). Abstract Book of participants of the International research and practice conference, 16–19 August 2023, Bukovel. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2023. – 640 p. – P. 514.

ЗМІСТ

	С.
Вступ.	9
1 Поглинання електромагнітних хвиль. Електродинамічний опис композитних середовищ.	11
1.1 Модель ефективного середовища.	11
1.2 Ефективна діелектрична проникність суміші.	15
1.3 Магнітна проникність середовища з металевими сферичними частинками.	19
1.3.1 Магнітний дипольний момент металевої сферичної частинки в ефективному середовищі.	19
1.3.2 Ефективна магнітна проникність суміші провідних частинок.	21
1.3.3 Дипольного наближення для поля зовні металевої частинки в ефективному середовищі.	24
1.3.4 Порівняння моделей ефективною магнітної проникності.	26
1.4 Формули Максвелла Гарнетта і Бруггемана та їх аналоги.	28
2 Оптичні властивості метал-діелектричних нанокompозитів.	34
2.1 Коефіцієнт поглинання нанокompозита в дипольному наближенні.	34
2.2 Ефективний час релаксації електронів у металевих наночастинках.	36
2.3 Оцінка впливу матриці на коефіцієнт поглинання композита в дипольному наближенні.	42
2.3 Результати розрахунків та їх обговорення.	45
Висновки.	51
Перелік джерел посилань.	52

ВСТУП

Оптичні властивості неупорядкованих композитів із металевими включеннями активно вивчаються для глибшого розуміння процесів поширення електромагнітних хвиль по поверхні таких композитів та ефективного використання метал-діелектричних композитів у різних практичних застосуваннях, серед яких розробка елементів мікро- та оптоелектроніки, оптичних пристроїв, нанофотонні технології [1–3].

Як відомо, у металевих наноструктурах, внаслідок збудження поверхневих плазмонів, можлива сильна локалізація світла за дифракційною межею. У свою чергу, взаємодія фотонів з плазмонами призводить до виникнення поверхневих електромагнітних хвиль, що поширюються вздовж межі поділу середовищ (поверхневих плазмон-поляритонів) [4–7]. Таким чином, нанофотонні технології, що розробляються у даний час, потребують пошуку нових матеріалів, які підтримують поширення поверхневих плазмон-поляритонів. Одним із таких матеріалів є метал-діелектричні нанокомпозити [8–10].

Оптичні характеристики метал-діелектричних нанокомпозитів можуть суттєво відрізнятись від відповідних характеристик як матеріалу матриці, так і окремих частинок-включень, і визначаються розміром, формою, впорядкованістю наночастинок, ступенем заповнення середовища, а також відношенням відстані між наночастинками до довжини хвилі падаючого випромінювання.

З метою подолання розбіжностей результатів експериментів і теоретичних розрахунків у моделі Друде замість часу релаксації електронів в об'ємному металі використовують ефективний час релаксації, у співвідношення для якого входить час об'ємної релаксації, час поверхневої релаксації та час радіаційного загасання.

Внаслідок того, що зі збільшенням розміру наночастинок у інфрачервоній

області спектра суттєву роль починають відігравати вихрові струми [11; 12], які наводяться магнітними полями світлової хвилі, необхідним є вихід за межі квазістатичного наближення і врахування магнітного дипольного поглинання.

Таким чином, метою роботи є розрахунок частотної залежності коефіцієнта поглинання метал-діелектричного композиту з урахуванням відповідного внеску вищевказаних механізмів релаксації електронів та магнітного дипольного поглинання.

1 ПОГЛИНАННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ.

ЕЛЕКТРОДИНАМІЧНИЙ ОПИС КОМПОЗИТНИХ СЕРЕДОВИЩ

1.1 Модель ефективного середовища

Питання поглинання електромагнітного (зокрема мікрохвильового) випромінювання в композитних матеріалах набувають актуальності зокрема у зв'язку з розвитком методів високотемпературної мікрохвильової обробки матеріалів [13-15]. Дослідження в галузі спікання порошкових компактів з використанням нагріву, розпочаті для діелектричних керамічних матеріалів, були продовжені для порошкових металів [16; 17]. У численних експериментальних роботах з використанням мікрохвильового нагріву в одномодових резонаторах (як правило, на частоті 2,45 ГГц) спостерігалось, що процес нагріву зразків, компактованих з металевих порошоків, протікає найбільш ефективно, коли вони розміщуються в пучності магнітного поля [18]. Очевидно, ця обставина обумовлена втратами, пов'язаними із збудженням у металевих частинках вихрових електричних струмів під дією змінного магнітного поля.

Ефективний мікрохвильовий нагрів тривав і тоді, коли металеві порошки за рахунок дії високотемпературних дифузійних механізмів спікалися до великих густин. Детальні дослідження показали, що поглинання мікрохвильового випромінювання в спечених зразках пов'язане з присутністю на металевих частинках оксидних шарів, що електрично ізолюють ці частинки одна від одної [19]. Розрахунок потужності мікрохвильового випромінювання, що поглинається в компактних електропровідних порошкових матеріалах, набуває актуального значення при моделюванні процесів високотемпературної мікрохвильової обробки. Композитні матеріали є неоднорідними середовищами, що складаються як мінімум з двох фаз – твердої речовини та матричного середовища. Відносна об'ємна концентрація кожної з цих фаз в процесі ущільнення при спіканні змінюється в широких межах. У тому

випадку, коли характерний масштаб неоднорідності мікроструктури набагато менший за довжину електромагнітної хвилі в речовині, для опису взаємодії електромагнітного поля з таким матеріалом застосовуються методи, засновані на введенні усереднених характеристик середовища. У разі такого усередненого опису речовина розглядається як однорідна, а вплив на неї електромагнітного поля характеризується ефективними величинами, такими як ефективні діелектрична та магнітна проникності. Ефективні властивості неоднорідних середовищ описують із застосуванням різних моделей. Зокрема, найбільш широко використовуються моделі, засновані на так званому наближенні ефективного середовища [20; 21]. В рамках цього наближення компоненти, що становлять неоднорідний матеріал, розглядаються як включення в середовищі, властивості якого є шуканими. Поле в кожному включенні обчислюється на основі розв'язання відповідної електродинамічної задачі, а ефективні властивості визначаються в результаті усереднення за об'ємом.

Для опису взаємодії мікрохвильового випромінювання з компактними електропровідними матеріалами найчастіше використовується модель ефективного середовища, заснована на квазіелектростатичному розрахунку полів у сферичних включеннях і яка враховує наявність на частинках провідної речовини діелектричних оболонок [22]. Таке наближення адекватно описує речовини з не надто високою електричною провідністю (наприклад, напівпровідники [23]), проте воно не застосовується для опису мікрохвильового поглинання в композитах, що містять металеві частинки [24], тому що, не забезпечує в цьому випадку необхідної точності. Вихід за рамки квазіелектростатичного опису при розрахунку поля всередині металевої частинки дозволив суттєво розширити межі застосовності моделі ефективного середовища для визначення ефективної діелектричної проникності композитів [25]. Що стосується розрахунку втрат магнітного типу, в більшості випадків, які визначаються поглинанням мікрохвильового випромінювання в компактованих порошкових металах на найбільш поширеній індустріальній частоті 2.45 ГГц,

до цього часу не було запропоновано методу, що дозволив би адекватно врахувати взаємний вплив частинок при їх високій концентрації (що реалізується, наприклад, у ході спікання). У більшості робіт такі втрати розраховувалися множенням потужності випромінювання, що поглинається однією ізольованою сферичною металевою частинкою, на число таких частинок у об'ємі, що розглядається. Створення наближення ефективного середовища для магнітної проникності електропровідних гранульованих матеріалів методом усереднення напруженості та індукції магнітного поля за аналогією з тим, як це робиться для ефективної діелектричної проникності, є складною задачею. Це пов'язано з тим, що магнітна індукція в таких матеріалах формально всюди дорівнює напруженості магнітного поля (зрозуміло, якщо не брати до уваги власну магнітну проникність частинок речовини) і врахувати таким чином вплив вихрових струмів, що збуджуються змінним магнітним полем в частинках, неможливо. Проте, наближення ефективного середовища можна побудувати, на основі розрахунку магнітного моменту сферичної частинки з провідного матеріалу, зануреної в середовище з шуканою ефективною магнітною проникністю.

Потужність електромагнітного випромінювання, що поглинається в одиниці об'єму речовини, визначається його діелектричними та магнітними характеристиками:

$$w = w_e + w_m = \frac{\omega}{8\pi} (\epsilon'' |\mathbf{E}|^2 + \mu'' |\mathbf{H}|^2), \quad (1.1)$$

де ω – циклічна частота мікрохвильового випромінювання, \mathbf{E} та \mathbf{H} – вектори напруженостей електричного та магнітного полів, відповідно, $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ – комплексна діелектрична проникність, $\mu = \mu' + i\mu''$ – комплексна магнітна проникність речовини. Для визначення поглинання електромагнітних хвиль у неоднорідному середовищі, що складається з великої кількості частинок, необхідно знати ефективні значення діелектричної та магнітної проникностей

цього середовища. Будемо, розглядати ефективну магнітну проникність неоднорідного середовища, що складається з частинок матеріалів з високою електричною провідністю σ . Відгук середовища, у складі якого є частинки електропровідного матеріалу (металу), при впливі на неї високочастотного магнітного поля визначається виникненням у частинках наведених магнітних моментів, пов'язаних із збудженням вихрових електричних струмів. Магнітний момент, віднесений до одиниці об'єму частинки і величини зовнішнього магнітного поля, називають магнітною поляризованістю частинки. Для сферичної металевої частинки радіусу a , яка знаходиться в змінному магнітному полі, комплексна магнітна поляризованість α_m має вигляд [26]

$$\alpha_m = \frac{3}{8\pi} \left(1 - \frac{3}{(ka)^2} - \frac{3\text{ctg}(ka)}{ka} \right), \quad (1.2)$$

де

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon} = \frac{1+i}{\delta}$$

– хвильове число в металевій частинці; $\epsilon = \epsilon' + i \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0}$, $\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu_0 \sigma \omega}}$ – глибина

проникнення магнітного поля в метал (товщина скін-шару).

З виразу (1.2) випливає, що втрати магнітного типу, що визначаються уявною частиною магнітної поляризованості досягають максимуму, коли радіус частинок порядку товщини скін-шару. Якщо відносна об'ємна концентрація електропровідних частинок у середовищі η (визначається як відношення об'єму речовини частинок до загального об'єму середовища) настільки мала, що кожна з них може розглядатися як ізольована, ефективна магнітна проникність такого середовища може бути визначена наступним виразом

$$\mu_{\text{eff}} = 1 + \chi_{\text{eff}} = 1 + \eta\alpha_m, \quad (1.3)$$

де χ_{eff} – ефективна магнітна сприйнятливність середовища.

Для більш точного визначення ефективної магнітної проникності при великих значеннях відносної об'ємної концентрації частинок потрібно враховувати взаємний вплив частинок в середовищі. Для цього необхідно визначити магнітний дипольний момент частинки в однорідному змінному магнітному полі, коли частинка розміщена в так званому ефективному середовищі, тобто, середовищі з шуканими ефективними діелектричними властивостями.

1.2 Ефективна діелектрична проникність суміші

В якості ілюстрації методу розрахунку ефективної магнітної проникності середовища, що складається з сферичних провідних частинок, аналогічний метод використовується спочатку для визначення ефективної діелектричної проникності середовища, що є сумішшю сферичних металевих частинок, в рамках квазіелектростатичного приближення, в якому результат був отриманий раніше методами прямого усереднення полів за об'ємом [20; 21]. В рамках цього наближення, при накладенні однорідного електричного поля \mathbf{E}_0 на однорідне середовище, в яке вміщено сферичну частинку радіусу a з діелектричною проникністю ϵ_j , в цій частинці наводиться електричний дипольний момент

$$\mathbf{p}_j = \frac{\epsilon_e(\epsilon_j - 1)}{\epsilon_j + 2\epsilon_e} a^3 \mathbf{E}_0, \quad (1.4)$$

де ϵ_e – діелектрична проникність середовища.

Електричне поле зовні частинки являє собою в цьому випадку суперпозицію однорідного і дипольного полів, і потенціал електричного поля має вигляд:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + A \frac{\mathbf{E}_0 \mathbf{r}}{r^3}, \quad (1.5)$$

де \mathbf{r} радіус-вектор, проведений із центру сферичної частинки в точку спостереження, а постійна A у дипольній складовій поля пов'язана з дипольним моментом частинки виразом:

$$\mathbf{p}_j = \left(\frac{1+2\epsilon_e}{3} A + \frac{\epsilon_e-1}{3} a^3 \right) \mathbf{E}_0. \quad (1.6)$$

Зазначимо, що такий самий зв'язок (1.6) матиме місце, якщо накласти однорідне поле на однорідне середовище зі сферичною порожниною радіусу a , всередину якого поміщений електричний дипольний момент \mathbf{p}_j , паралельний полю \mathbf{E}_0 , густину якого довільним симетричним способом розподілено за об'ємом порожнини. В останньому випадку в дипольну складову поля поза порожнинною дають, також внесок зв'язані заряди, що індукуються на межі порожнини, тому $A\mathbf{E}_0 \neq \mathbf{p}_j$, якщо діелектрична проникність середовища відрізняється від одиниці.

Аналогічне співвідношення справедливе і у випадку, коли дипольний момент \mathbf{p}_j , не пов'язаний із зовнішнім полем \mathbf{E}_0 , та їх напрямки не збігаються:

$$\varphi(r) = -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + \frac{\mathbf{A} \mathbf{r}}{r^3}, \quad \mathbf{A} = \frac{3}{1+2\epsilon_e} \mathbf{p} - \frac{\epsilon_e-1}{1+2\epsilon_e} a^3 \mathbf{E}_0. \quad (1.7)$$

Розглянемо середовище, що із сумішшю металевих сферичних включень різних сортів $j(j=1,2,\dots)$ з діелектричними проникностями ϵ_j . Поляризованість такого середовища дорівнює сумі всіх дипольних моментів металевих включень, що містяться в об'ємі такого середовища, поділеного на об'єм середовища V . З іншого боку, поляризованість можна виразити через ефективну діелектричну проникність середовища ϵ_{eff} :

$$\frac{1}{V} \sum_j \mathbf{p}_j = \epsilon_0 (\epsilon_{eff} - 1) \mathbf{E}_0. \quad (1.8)$$

Використовуючи вираз для дипольного моменту частинки в середовищі (1.6), отримуємо рівняння, що зв'язує величину ефективної діелектричної проникності середовища ϵ_{eff} з величинами діелектричних проникностей включень всіх сортів ϵ_j :

$$\sum_j \eta_j \frac{\epsilon_j - \epsilon_{eff}}{\epsilon_j + 2\epsilon_{eff}} = 0, \quad (1.9)$$

де η_j – відносна об'ємна концентрація включень сорту j (при отриманні рівняння (1.9) використано умову $\sum_j \eta_j = 1$).

Наведемо порівняння розглянутого підходу з іншими методами розрахунку.

1) Рівняння (1.9) збігається з рівнянням, що одержується методом прямого усереднення полів за об'ємом [20; 21] (наближення ефективного середовища Бруггемана).

2) Середовище, в якому всі частинки ізотропні, в різниці між їх діелектричними проникненнями малі у порівнянні з самими діелектричними проникностями [26]. У такому граничному випадку діелектрична проникність

суміші визначається з точністю до членів другого порядку за вказаними різницями:

$$\epsilon_{eff} = \bar{\epsilon} - \frac{\overline{\epsilon^2}}{3\bar{\epsilon}}, \quad (1.10)$$

де риска означає усереднення за об'ємом набагато більшим за об'єм неоднорідності

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{V} \int \epsilon dV.$$

Вираз (1.9) дає аналогічний результат у разі двокомпонентного середовища з діелектричними проникностями

$$\epsilon_1 = \epsilon + \delta\epsilon \quad \text{та} \quad \epsilon_2 = \epsilon + \delta\epsilon.$$

3) Діелектрична проникність емульсії з довільною різницею між діелектричною проникністю середовища ϵ_1 та діелектричною проникністю диспергованої фази ϵ_2 , але малою концентрацією останньої ($\eta \ll 1$) [26]. У такому випадку діелектрична проникність суміші описується формулою з точністю до першого порядку за малою концентрацією

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_1 + \eta \frac{3\epsilon_1(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1}. \quad (1.11)$$

Той самий результат можна одержати з формули (1.9), якщо розкласти розв'язки квадратного рівняння для ефективної діелектричної проникності в ряд з точністю до членів першого порядку за малою концентрацією.

1.3 Магнітна проникність середовища з металевими сферичними частинками

1.3.1 Магнітний дипольний момент металевої сферичної частинки в ефективному середовищі

Для знаходження магнітного моменту окремої частинки потрібно узагальнити розв'язок відомої задачі про збурення однорідного змінного магнітного поля електромагнітної хвилі у вакуумі провідною сферичною частинкою [26], на випадок, коли частинка, занурена в середовище з магнітною проникністю μ_{eff} . Магнітне поле всередині і зовні частинки в такому випадку представимо у вигляді:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{in} &= \nabla \times \nabla (f \mathbf{B}_m \mathbf{H}_0), \quad f = \frac{\sin(kr)}{r}, \\ \mathbf{H}_{out} &= -\nabla \left(-\mathbf{H}_0 \mathbf{r} + A_m \frac{\mathbf{H}_0 \mathbf{r}}{r^3} \right), \end{aligned} \quad (1.13)$$

За аналогією з розглянутою вище електростатичною задачею магнітний момент провідної сферичної частинки можна представити у вигляді

$$\mathbf{p}_m = \left(\frac{1 + 2\mu_{eff}}{3} A_m + \frac{\mu_{eff} - 1}{3} a^3 \right) \mathbf{H}_0, \quad (1.14)$$

Тоді з використанням виразу для коефіцієнта A_m отримаємо вираз для магнітного дипольного моменту сферичної частинки в ефективному середовищі:

$$\mathbf{p}_m = -\frac{a^3 \mu_{eff} \left(\xi(1+2\mu) + (ka)^2 \right)}{2 \left(\xi(\mu_{eff} - \mu) + (ka)^2 \right)} \mathbf{H}_0. \quad (1.15)$$

де $\xi = ka \operatorname{ctg}(ka) - 1$. У разі $\mu_{eff} = \mu = 1$ магнітний момент (1.15) віднесений до об'єму сферичної частинки, дорівнює магнітній поляризованості (1.2), помноженої на напруженість зовнішнього поля \mathbf{H}_0 . Вираз (1.15) збігається з результатом розрахунку магнітного моменту в [26]. Магнітний момент створюється рухом усіх зарядів усередині частинки. Середнє мікроскопічне значення густини струму пов'язане з намагніченістю \mathbf{M} і поляризацією \mathbf{P} та визначається наступним чином:

$$\overline{\rho \mathbf{v}} = \nabla \times \mathbf{M} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}. \quad (1.16)$$

Вираз для магнітного дипольного моменту представимо у вигляді суми двох доданків

$$\mathbf{p}_m = \int \mathbf{r} \times (\overline{\rho \mathbf{v}}) dV = \int \mathbf{M} dV + \int \mathbf{r} \times \mathbf{j} dV. \quad (1.17)$$

Використовуючи зв'язок намагніченості з полем усередині частинки та інтегруючи за її об'ємом, отримаємо:

$$\int \mathbf{M} dV = \mu_0 (\mu - 1) \int \mathbf{H} dV = -\frac{a^3 \mu_{eff} \xi (\mu - 1)}{\xi (\mu_{eff} - \mu) + \mu_{eff} (ka)^2}. \quad (1.18)$$

Другий доданок після перетворень та інтегрування дає наступний вираз:

$$\int \mathbf{r} \times \mathbf{j} dV = \int \mathbf{r} \times \sigma \mathbf{E} dV = \frac{\mu_0}{2} \int \mathbf{r} \times \nabla \times \mathbf{H} dV = -\frac{a^3}{2} \frac{\mu_{eff} (3\xi + (ka)^2)}{\xi(\mu_{eff} - \mu) + \mu_{eff} (ka)^2}. \quad (1.19)$$

Сума виразів (1.18) і (1.19) збігається з виразом для магнітного дипольного моменту (1.15).

1.3.2 Ефективна магнітна проникність суміші провідних частинок

За аналогією з розглянутою вище електричною задачею, можна запропонувати наступний метод розрахунку ефективної магнітної проникності суміші провідних сферичних частинок. Спочатку потрібно визначити магнітний дипольний момент (1.15), що індукований всередині окремої провідної частинки в однорідному магнітному середовищі при накладенні на цю систему однорідного змінного в часі магнітного поля \mathbf{H}_0 .

Потім треба зв'язати намагніченість середовища, що представляє собою суміш провідних сферичних частинок, із сумою магнітних дипольних моментів цих частинок. Намагніченість середовища з ефективною магнітною проникністю μ_{eff} визначається формулою:

$$\mathbf{M}_{eff} = \mu_0 (\mu_{eff} - 1) \mathbf{H}_0.$$

Ефективне середовище можна представити у вигляді середовища, заповненого сферичними включеннями з металу та вакууму. Таким чином, ефективне середовище складається з набору металевих включень (взагалі кажучи, вони можуть бути з різних металів), що мають магнітний дипольний момент \mathbf{p}_{mj} і з вакууму. Магнітний дипольний момент вакуумних областей в ефективному середовищі дорівнює нулю. Отже, сума всіх дипольних моментів

металевих сферичних включень, що знаходяться в об'єми ефективного середовища V , дорівнює повному дипольному моменту цього об'єму

$$\frac{1}{V} \sum_j \mathbf{p}_{mj} = \mu_0 (\mu_{eff} - 1) \mathbf{H}_0. \quad (1.20)$$

Підставляючи у суму вираз для магнітного дипольного моменту включення сорту j , отримаємо рівняння для ефективної магнітної проникності

$$\mu_{eff} - 1 = -\frac{3\mu_{eff}}{2} \sum_j \frac{\xi_j (2\mu_j + 1) + (k_j a_j)^2}{\xi_j (\mu_{eff} - \mu) + (k_j a_j)^2 \mu_{eff}} \eta_j. \quad (1.21)$$

Тут a_j – радіус сферичних включень сорту j , $k_j = \sqrt{\epsilon_j \mu_j} \omega / c$. Рівняння (1.21) є алгебраїчним рівнянням, степінь якого дорівнює кількості різних сортів включень в ефективному середовищі, включаючи вакуум. У правій частині виразу (1.21) множник $\eta_j = V_j / V$ – об'ємна частка металевих включень сорту j . Об'ємну частку вакууму позначимо η_v . Сума об'ємних часток всіх компонентів речовини дорівнює одиниці: $\sum_j \eta_j + \eta_v = 1$.

Якщо середовище складається з двох компонентів, а саме металевих частинок з об'ємною часткою η і вакууму, то рівняння (1.21) зведеться до квадратного рівняння на ефективну магнітну проникність

$$2\mu_{eff}^2 (\xi + (ka)^2) + \mu_{eff} (\xi (6\eta\mu + 3\eta - 2\mu - 2) + (ka)^2 (3\eta - 2)) + 2\xi\mu = 0. \quad (1.22)$$

Ефективна магнітна проникність середовища визначається розв'язком рівняння (1.22), що відповідає поглинаючому середовищі ($\text{Im} \mu_{eff} > 0$).

Аналогічне рівняння можна отримати для ефективної діелектричної

проникності середовища. Для цього необхідно розв'язувати електростатичну задачу. Електричний дипольний момент можна знайти таким самим способом, і у формулах замінити \mathbf{H} на \mathbf{E} , μ на ϵ . Отримане таким чином рівняння збігається з рівнянням для ефективної діелектричної проникності, отриманим методом усереднення полів [25], що задовольняє принципу перестановочної двоїстості рівнянь Максвелла. На рис. 1.1 зображено уявну частину ефективної магнітної проникності середовища з металевих частинок в залежності від об'ємної концентрації частинок і відношення радіусу включень до глибини скін-шару. Рисунок 1.1 показує, що втрати магнітного типу досягають максимум, коли розмір частинок порядку товщини скін-шару. Максимум поглинання спостерігається за концентрації частинок близько 0,7. Даний максимум існує при досить великих значеннях параметра a/δ (від приблизно 3 і більше). Зменшення поглинання при високій об'ємній концентрації провідних включень мабуть пов'язане з впливом щільного середовища на магнітне поле в ньому. При менших значеннях параметра a/δ поглинання монотонно зростає зі збільшенням концентрації.

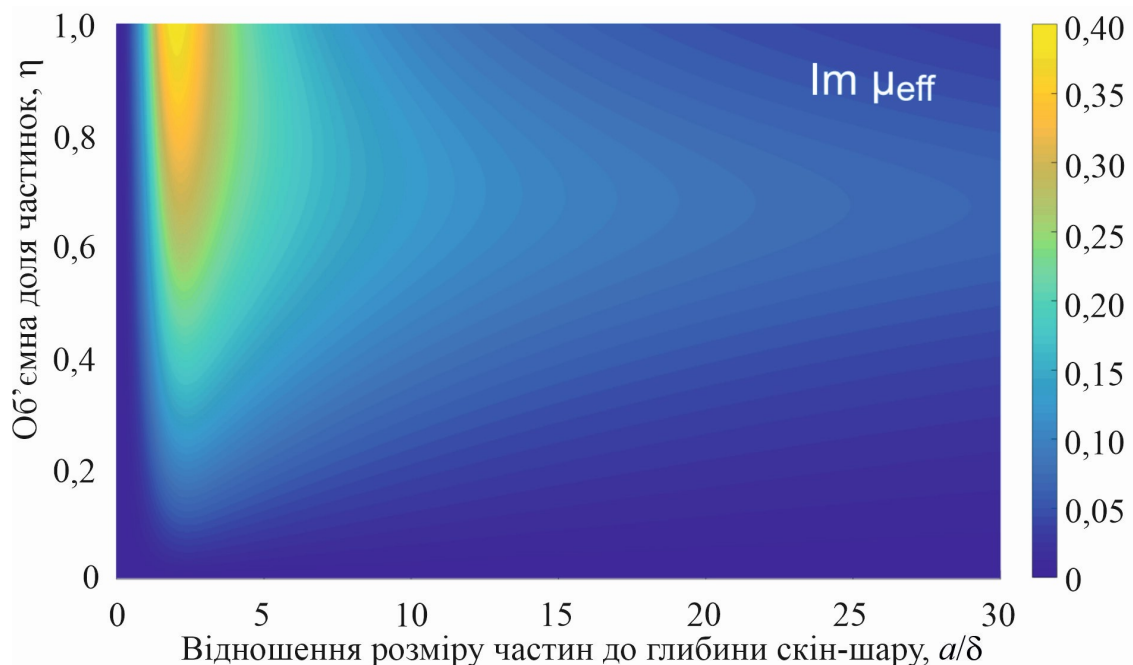


Рисунок 1.1 – Уявна частина ефективної магнітної проникності металевого порошку в залежності від відносної об'ємної концентрації частинок η і відношення радіусу частинок до глибини скін – шару a/δ .

1.3.3 Дипольного наближення для поля зовні металевої частинки в ефективному середовищі

Поле зовні сферичної частинки обчислюється в разках квазістатичного наближення, розмір сферичної частинки повинен бути малим у порівнянні з довжиною хвилі в ефективному середовищі:

$$\left| \frac{\omega}{c} a \sqrt{\epsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}}} \right| \ll 1. \quad (1.23)$$

Вираз (1.23) є умовою застосування наближеного квазістатичного опису. У нерівність (1.23) входять значення ефективної магнітної проникності та ефективної діелектричної проникності композитного середовища. Для визначення ефективної діелектричної проникності в розглянутих середовищах, коли довжина хвилі (товщина скін-шару) всередині сферичної частинки порівняна з її радіусом або менша за нього ($a / \delta \gtrsim 1$), потрібно скористатися наближенням ефективного середовища, що враховує неоднорідну (хвильову) структуру електромагнітного поля всередині металевих включень. При великих концентраціях частинок, при яких перевищено поріг перколяції провідності, необхідно, крім того, враховувати наявність на металевих частинках діелектричних (наприклад оксидних) оболонок, що ізолюють частинки одну від одної. Таку модель ефективного середовища було представлено у роботі [25] та використано для розрахунку умов застосовності (рис. 1.2). Як показують розрахунки для середовища з металевих частинок параметр застосовності не перевищує одиниці. У той же час дійсна і уявна частини ефективної діелектричної проникності композитних середовищ можуть досягти величин, набагато більших за одиницю. Наприклад, для мідних частинок радіусом 3 мкм, оточених тонкими (10 нм) діелектричними оболонками, на частоті 24 ГГц при великих концентраціях дійсна частина ефективної діелектричної проникності

може досягти величин порядку 10^4 [25]. Отже умова застосування розробленого наближення для ефективної магнітної проникності (1.23) визначатиметься переважно ефективною діелектричною проникністю середовища.

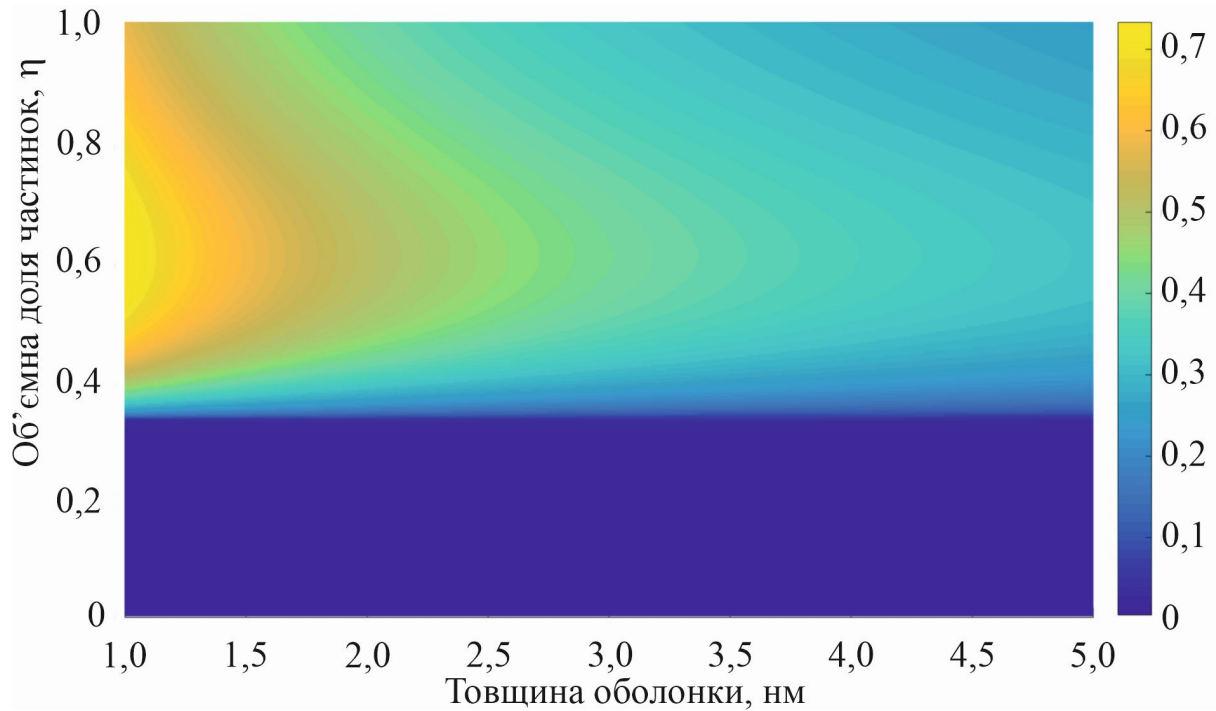


Рисунок 1.2 – Параметр застосовності $\frac{\omega}{c} a \sqrt{\epsilon_{eff} \mu_{eff}}$ моделі розрахунку ефективної магнітної проникності залежно від товщини діелектричної оболонки частинок та відносної об'ємної концентрації частинок. Мідний порошок, радіус частинок $a = 10$ мкм, провідність $\sigma = 5,96 \cdot 10^7$ См/м, частота $f = \omega / (2\pi) = 24$ ГГц.

1.3.4 Порівняння моделей ефективної магнітної проникності

У тому випадку, коли середовище складається із сферичних металевих немагнітних частинок одного сорту ($\mu = 1$), та вакууму, рівняння (1.22) можна переписати у вигляді

$$2\mu_{eff}^2 \left(\xi + (ka)^2 \right) + \mu_{eff} \left(\xi(9\eta - 4) + (ka)^2 (3\eta - 2) \right) + 2\xi = 0. \quad (1.24)$$

Для металевих частинок з високою провідністю ($\pi\sigma / \epsilon_0\omega \gg \text{Re}\epsilon$) рівнянні залишається два параметри: відношення радіусу частинки до товщини скін-шару a / δ і відносно об'ємна концентрація частинок η .

Рис. 1.3 показує, що зі зростанням концентрації частинок характеристики і величини дійсної і уявної частин ефективної магнітної проникності, отримані в рамках моделі (1.24), починають помітно відрізнятися від результатів, отриманих у рамках моделі без урахування взаємного впливу частинок одна на одну (1.3). На відмінну від моделі, яка не враховує взаємний вплив частинок, описана модель при великих концентраціях не призводить до отримання від'ємних значень дійсної частини ефективної магнітної проникності.

Розрахунки ефективної магнітної проникності металевих частинок у мікрохвильовому діапазоні в рамках описаної моделі добре збігаються з результатами чисельного моделювання, наведеними в роботі [27]. На рис. 1.4 наведено порівняння частотних залежностей ефективної магнітної проникності середовища із сферичних мідних частинок різних розмірів та відносно об'ємної концентрації $\eta = 0,74$.

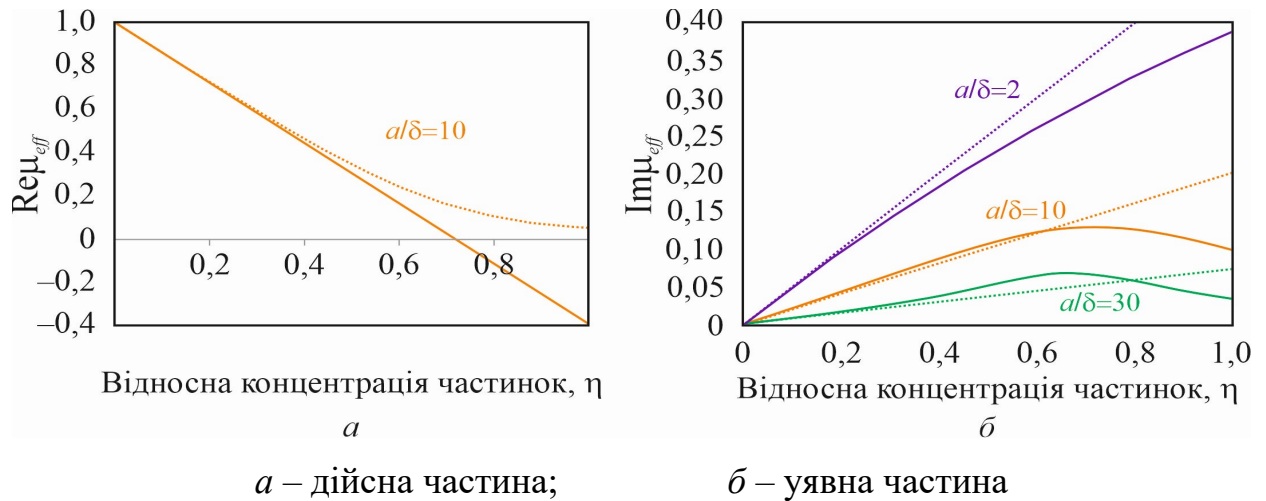


Рисунок 1.3 – Залежність ефективної магнітної проникності металевого порошку від відносної об’ємної концентрації твердої речовини η за різних відношень радіусу частинки до товщини скін-шару a/δ .

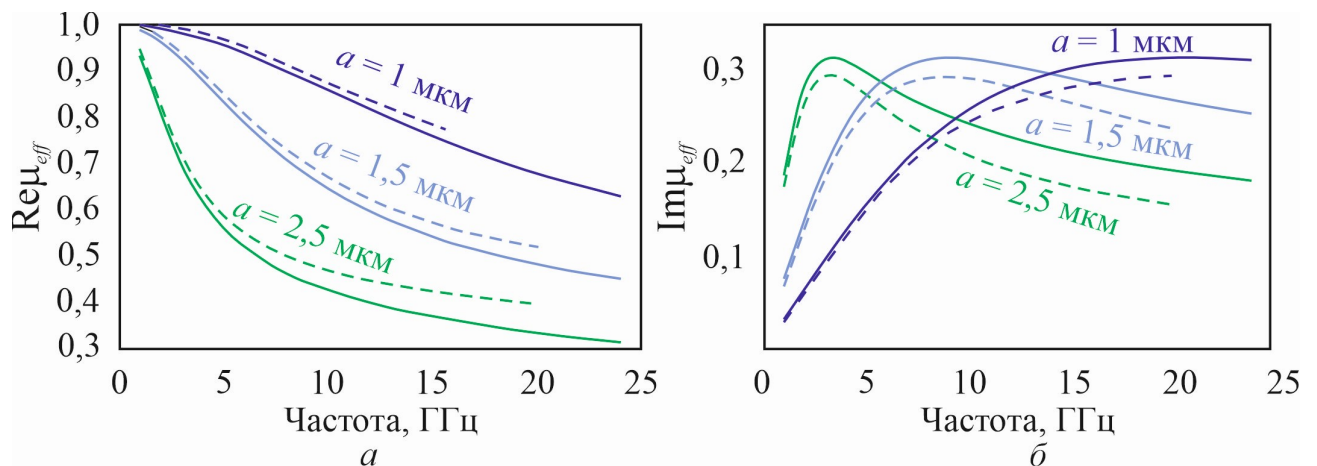


Рисунок 1.4 – Частотні залежності ефективної магнітної проникності мідного порошку за різних розмірів частинок і відносної об’ємної концентрації 0,74.

Суцільні лінії відповідають моделям, а пунктирні лінії відповідають результатам, отриманим у роботі [27].

Суцільні лінії відповідають моделі (1.24), пунктирні – моделі, зі збільшенням частоти, результати наближаються до одиниці на частотах міліметрового діапазону [28]. При більш високих частотах (зокрема, в оптичному діапазоні) врахування магнітної проникності є перевищенням точності [26]. Цікавим є дослідження залежності ефективної магнітної

проникності середовища у розробленому наближенні від величини власної магнітної проникності матеріалу частинок. Як впливає з експериментальних даних, наведених у [28], у вибраному діапазоні параметрів максимальні значення дійсної та уявної частини ефективної магнітної проникності, обчислені в наближенні ефективного середовища, порядку одиниці. Отже, наявність у частинок власних магнітних властивостей практично не впливає на умови застосування моделі (1.13). Ця модель ефективного середовища для визначення ефективної магнітної проникності може бути використана для моделювання швидкого мікрохвильового нагріву до температури плавлення сферичних кластерів металевих частинок, а також при моделюванні спікання компакт-порошків з провідних матеріалів при нагріванні мікрохвильовим випромінюванням. У роботі [29] також враховувався вплив провідності оксидних оболонок на ефективну діелектричну та магнітну проникності металевих порошків, і було показано, що втрати в граничних шарах можуть стабілізувати процес мікрохвильового нагріву, сприяючи швидкому ущільненню.

1.4 Формули Максвелла Гарнетта і Бруггемана та їх аналоги

Розглянемо еліпсоїд з розмірами півосей a , b , c за координатними осями x , y , z . Абсолютна діелектрична проникність еліпсоїда дорівнює ϵ , абсолютна діелектрична проникність навколишнього середовища дорівнює ϵ_m . Нехай зовнішнє поле, в якому знаходиться еліпсоїд, є постійним і однорідним і має проєкції E_{0x} , E_{0y} , E_{0z} на координатні осі. Поле всередині еліпсоїда також є однорідним і має проєкції $E_x^{(i)}$, $E_y^{(i)}$, $E_z^{(i)}$ [25; 30]:

$$E_s^{(i)} = \frac{E_{0s}}{1 + \frac{\epsilon_m + \epsilon}{\epsilon} \mathcal{L}_s}, \quad s = x, y, z. \quad (1.25)$$

Величини $\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y, \mathcal{L}_z$, звані коефіцієнтами деполяризації, залежать тільки від форми еліпсоїда (у зв'язку з чим іноді називаються форм-факторами) і задовольняють умовам:

$$\mathcal{L}_x + \mathcal{L}_y + \mathcal{L}_z = 1, \quad 0 \leq \mathcal{L}_{x,y,z} \leq 1. \quad (1.26)$$

Розглянемо композит із сферичними включеннями, що мають діелектричну проникність ϵ та розподіленими з об'ємною концентрацією c у матриці з діелектричною проникністю ϵ_m . Якби окрема сфера-включення знаходилася в нескінченному середовищі з діелектричною проникністю ϵ_m , однорідне електричне поле в якій на великій відстані від сфери дорівнює E_0 , то, враховуючи, що коефіцієнт деполяризації кулі $\mathcal{L} = 1/3$ отримуємо з (1.25):

$$\frac{E^{(i)}}{E_0} = \frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}, \quad (1.27)$$

де $E^{(i)}$ – поле всередині сфери. Припустимо, що у композиті відношення середнього поля всередині включень до середнього поля в матриці дорівнює правій частині (1.27)

$$\frac{E_2}{E_1} = \frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}. \quad (1.28)$$

Після простих перетворень отримуємо формулу Максвелла Гарнетта для ефективної діелектричної проникності композиту зі сферичними включеннями [25]:

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_m \left[1 + \frac{3c}{\frac{\epsilon + 2\epsilon_m}{\epsilon - \epsilon_m} - c} \right]. \quad (1.29)$$

Припустимо тепер, що у композиті сферичні включення перебувають у середовищі з діелектричною проникністю ϵ_{eff} , рівній ефективній проникності композиту, а зовнішнє поле E , що діє на включення, дорівнює середньому полю в композиті, $E = cE_2 + (1-c)E_1$. Роблячи в (1.28) заміни $E_2 \rightarrow E$, $\epsilon_m \rightarrow \epsilon_{eff}$ отримуємо:

$$\frac{E_2}{(1-c)E_1 + cE_2} = \frac{3\epsilon_{eff}}{\epsilon + 2\epsilon_{eff}}, \quad \frac{E_2}{E_1} = \frac{1-c}{\frac{\epsilon + 2\epsilon_{eff}}{\epsilon_{eff}} - c}. \quad (1.30)$$

Таким чином матимемо квадратне рівняння відносно величини ϵ_{eff} :

$$2\epsilon_{eff}^2 - [(2-3c)\epsilon_m + (3c-1)\epsilon]\epsilon_{eff} - \epsilon_m\epsilon = 0 \quad (1.31)$$

Рівняння (1.31) еквівалентно наступному рівнянню, що називається формулою Бруггемана [25, 31]:

$$c \frac{\epsilon - \epsilon_{eff}}{\epsilon + 2\epsilon_{eff}} + (1-c) \frac{\epsilon_m - \epsilon_{eff}}{\epsilon_m + 2\epsilon_{eff}} = 0. \quad (1.32)$$

З (1.31) знаходимо:

$$\begin{cases} \epsilon_{eff} = B \pm \sqrt{B^2 + \frac{1}{2}\epsilon_m\epsilon}, \\ B = \frac{(3c-1)\epsilon + (2-3c)\epsilon_m}{4}. \end{cases} \quad (1.33)$$

При чисельних розрахунках вибирається такий корінь (1.33), якому відповідає додатна уявна частина ϵ_{eff} , якщо часовий множник передбачається таким, що має вигляд $e^{-i\omega t}$. Корінь із від'ємною уявною частиною при такому виборі часового множника означав би не поглинання електромагнітної енергії в композиті, а її генерацію, що не має фізичного сенсу.

Якщо композит складається з орієнтованих однойменними осями вздовж поля еліпсоїдів зі значенням коефіцієнта деполаризації, рівним \mathcal{L} в напрямку орієнтації, то, використовуючи формули що зв'язують поля всередині і поза еліпсоїдами, можна отримати аналог формули Максвелла Гарнетта що має назву формули Оделевського [32]:

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_m \left[1 + \frac{c}{(1-c)\mathcal{L} + \frac{\epsilon_m}{\epsilon - \epsilon_m}} \right]. \quad (1.34)$$

Як формула Максвелла Гарнетта, так і формула Бруггемана задовольняють співвідношенням:

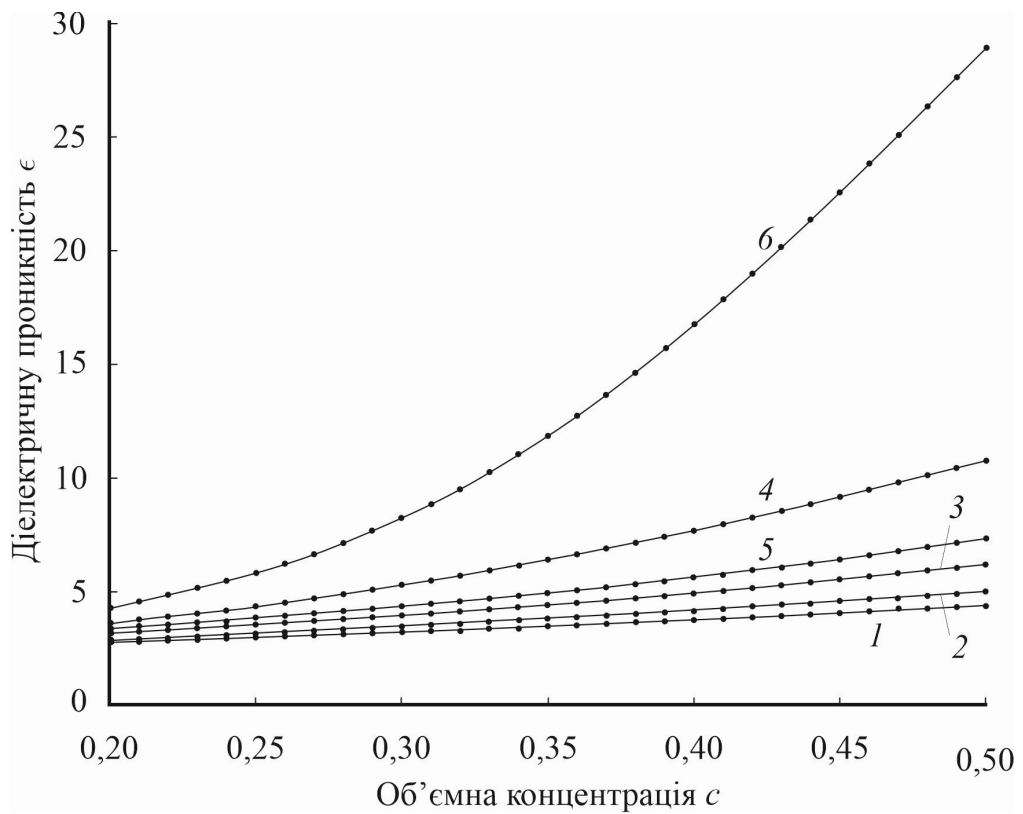
$$\epsilon_{eff} = \epsilon_m \quad \text{при } c = 0; \quad \epsilon_{eff} = \epsilon \quad \text{при } c = 1. \quad (1.35)$$

Як показують чисельні розрахунки, значення ефективної проникності, що обчислюються за формулами Максвелла Гарнетта та Бруггемана, можуть суттєво відрізнятись один від одного.

Як показано в [33], формула Максвелла Гарнетта є першим наближенням для ефективної діелектричної проникності композиту зі сферичними включеннями, розташованими впорядковано у вузлах кубічної ґратки. Такому розташуванню включень відповідає використане при виведенні формули (1.29) припущення, що включення знаходяться в середньому полі матриці в середовищі, діелектрична проникність якої дорівнює проникності матриці. Формула Бруггемана, отримана у припущенні, що включення перебувають у середовищі з ефективною проникністю й у середньому полі композиті, більше відповідає випадку хаотичного розташування включень. Формула Максвелла Гарнетта асиметрична щодо проникності включень і матриці, тоді як формула Бруггемана симетрична. Остання обставина вказує на те, що формула Бруггемана найбільш адекватна ситуації, коли частинки включення і частинки матриці ідеально перемішані.

На рис. 1.5 наведено розрахункові залежності від концентрації ефективної діелектричної проникності композитів на основі сферичних включень з речовинною діелектричною проникністю ϵ , розподілених у матриці з діелектричною проникністю $\epsilon_m = 2$.

Як видно з рис. 1.5, відмінність між значеннями ефективної проникності композиту зі сферичними включеннями, отриманими за формулами Максвелла Гарнетта і Бруггемана, тим вища, чим більша концентрація і чим більша діелектрична проникність включень у порівнянні з діелектричною проникністю матриці.



1 – $\epsilon = 10$, розрахунок за формулою Максвелла Гарнетта;

2 – $\epsilon = 10$, розрахунок за формулою Бруггемана;

3 – $\epsilon = 30$, розрахунок за формулою Максвелла Гарнетта;

4 – $\epsilon = 30$, розрахунок за формулою Бруггемана;

5 – $\epsilon = 100$, розрахунок за формулою Максвелла Гарнетта;

6 – $\epsilon = 100$, розрахунок за формулою Бруггемана

Рисунок 1.5 – Залежність ефективної проникності композиту на основі сферичних включень від концентрації включень.

2 ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛ-ДИЕЛЕКТРИЧНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ

2.1 Коефіцієнт поглинання нанокompозита в дипольному наближенні

Розглянемо композит, в якому розмір частинок-включень значно менший за довжину електромагнітної хвилі. За такої умови у поглинанні немагнітними матеріалами є внесок як електричної складової (електричне поглинання), так і магнітної складової (магнітне поглинання) електромагнітної хвилі. Одержимо співвідношення для коефіцієнта поглинання нанокompозиту в класичному наближенні з урахуванням внесків як електричної, так і магнітної складових.

Відправною точкою є наступне співвідношення

$$\eta(\omega) = \frac{2\omega}{c\sqrt{\epsilon_m}} \operatorname{Im} \sqrt{\epsilon_{\text{eff}}(\omega)\mu_{\text{eff}}(\omega)}, \quad (2.1)$$

де ϵ_m – діелектрична проникність матриці, а ефективні діелектрична та магнітна проникності композита ϵ_{eff} і μ_{eff} відповідно дорівнюють:

$$\epsilon_{\text{eff}}(\omega) = \frac{1 + 2Z^e}{1 - Z^e}, \quad \mu_{\text{eff}}(\omega) = \frac{1 + 2Z^m}{1 - Z^m}, \quad (2.2)$$

а Z^e і Z^m –

$$Z^e = \beta \epsilon_m \frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_m}{\epsilon(\omega) + 2\epsilon_m}, \quad Z^m = \beta \frac{(qR)^2}{30} (\epsilon(\omega) - \epsilon_m), \quad (2.3)$$

β – об'ємна фракція; q – хвильове число; R – радіус частинки-включення.

Вважаючи Z^e і Z^m малими, матимемо

$$\epsilon_{\text{eff}} = 1 + \frac{3Z^e}{1 - Z^e} \approx 1 + 3Z^e, \quad \mu_{\text{eff}} = 1 + \frac{3Z^m}{1 - Z^m} \approx 1 + 3Z^m; \quad (2.4)$$

тому

$$\sqrt{\epsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}}} \approx (1 + 3Z^e + 3Z^m)^{1/2} \approx 1 + \frac{3}{2}(Z^e + Z^m) \quad (2.5)$$

і

$$\eta(\omega) = \frac{3\omega}{c} (\text{Im} Z^e + \text{Im} Z^m). \quad (2.6)$$

Вважаючи справедливим наближення Друде для діелектричної функції металевої наночастинки

$$\epsilon = \epsilon^\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\tau^{-1})}, \quad (2.7)$$

де ϵ^∞ – внесок іонного остову, ω_p – плазмова частота, τ – час релаксації.

Перетворюючи вираз для $\text{Im} Z^e$, матимемо

$$\text{Im} Z^e = \beta \epsilon_m \text{Im} \left\{ \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right\} = 3\beta \epsilon_m^2 \frac{\text{Im} \epsilon(\omega)}{[\text{Re} \epsilon(\omega) + 2\epsilon_m]^2 + [\text{Im} \epsilon(\omega)]^2}. \quad (2.8)$$

Для магнітної складової з урахуванням того, що

$$q = \frac{\omega}{c},$$

матимемо

$$\operatorname{Im} Z^m = \frac{\beta}{30} \left(\frac{\omega R}{c} \right)^2 \operatorname{Im} \epsilon(\omega). \quad (2.9)$$

Отже, остаточно можна записати

$$\eta(\omega) = \frac{3\beta\omega^2}{c\sqrt{\epsilon_m}} \operatorname{Im} \epsilon(\omega) \left[\frac{3\epsilon_m^2}{[\operatorname{Re} \epsilon(\omega) + 2\epsilon_m]^2 + [\operatorname{Im} \epsilon(\omega)]^2} + \frac{1}{30} \left(\frac{\omega R}{c} \right)^2 \right]. \quad (2.10)$$

Таким чином, співвідношення (2.10) визначає коефіцієнт поглинання електромагнітного випромінювання метал-діелектричним нанокompatитом у дипольному наближенні з урахуванням електричного та магнітного внесків.

2.2 Ефективний час релаксації електронів у металевих наночастинках

Як зазначено вище, у співвідношення для діелектричної функції (2.7) входить час релаксації. У випадку нанорозмірних металевих включень час релаксації не можна вважати сталою величиною, а треба використовувати ефективний час релаксації, що визначається співвідношенням [34]

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_{\text{bulk}}} + \frac{1}{\tau_s} + \frac{1}{\tau_{\text{rad}}}, \quad (2.11)$$

де $\tau_{\text{bulk}} = \text{const}$ – час об'ємної релаксації електронів, а час поверхневої релаксації τ_s і радіаційного загасання τ_{rad} визначаються співвідношеннями [35; 36]

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{\operatorname{Re}\sigma(\omega)}{\epsilon_0(2\epsilon_m + 1)}, \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{rad}}} = \frac{2}{27\epsilon_0} \left(\frac{\omega_p R}{c} \right)^3 \frac{\operatorname{Re}\sigma(\omega)}{\sqrt{\epsilon_m(\epsilon^\infty + 2\epsilon_m)}}, \quad (2.13)$$

У співвідношеннях (2.12) і (2.13) $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ – дійсна частина провідності, яку визначимо із закону Ома у диференціальній формі, згідно з яким внутрішнє електричне поле збуджує в наночастинці високочастотний струм

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = 2e \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^3 \int \mathbf{v} f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} = \sigma(\omega) \mathcal{E}_{\text{вн}}, \quad (2.14)$$

де \mathbf{r} і \mathbf{v} – радіус-вектор і швидкість електронів, відповідно; $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ – нерівноважна частина функції розподілу електронів у полі $\mathcal{E}_{\text{вн}}$

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) - f_0(\epsilon), \quad (2.15)$$

$f_0(\epsilon)$ – фермівська функція розподілу електронів за енергією ϵ .

Таким чином, $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ являє собою лінійну за полем \mathcal{E}_{loc} поправку до функції $f_0(\epsilon)$. Вказана функція є розв'язком лінеаризованого за \mathcal{E} кінетичного рівняння Больцмана

$$(\mathbf{v} - i\omega) f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) + \mathbf{v} \frac{\partial f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})}{\partial \mathbf{r}} + e(\mathcal{E}_{\text{вн}} \cdot \mathbf{v}) \frac{\partial f_0(\epsilon)}{\partial \epsilon} = 0 \quad (2.16)$$

з граничними умовами на поверхні

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})\Big|_S = 0, \quad v_n < 0, \quad (2.17)$$

де v_n – нормальна до поверхні наночастинки складова швидкості.

Гранична умова (2.17) відповідає дифузійному розсіюванню електронів поверхнею металевої наночастинки.

Розв'язок рівняння (2.16) із граничною умовою (2.17), яка має вигляд

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = -e(\mathcal{E}_{\text{вн}} \cdot \mathbf{v}) \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{1 - e^{-(v-i\omega)t_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})}}{v - i\omega}, \quad (2.18)$$

де t_0 – характеристика рівняння (2.16), яка має вигляд

$$t_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{v^2} \left[\mathbf{r} \cdot \mathbf{v} + \sqrt{(R^2 - r^2)v^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})^2} \right]. \quad (2.19)$$

Оскільки внутрішнє поле є векторною сумою локального та вихрового полів

$$\mathcal{E}_{\text{вн}} = \mathcal{E}_{\text{loc}} + \mathcal{E}_{\text{ед}},$$

а вихрове поле

$$(\mathcal{E}_{\text{ед}})_j = \sum_{k=1}^3 \beta_{jk} x_k, \quad (x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z), \quad (2.20)$$

де матриці β_{jk} визначаються з рівнянь Максвелла

$$\text{div} \mathcal{E}_{\text{ед}} = 0, \quad \text{rot} \mathcal{E}_{\text{ед}} = i\omega \mathcal{B}_0,$$

то виразу (2.18) можна надати вигляду

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = -e \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left[\mathbf{v} \cdot \mathcal{E}_{\text{in}} + \sum_{i,j=1}^3 \beta_{ij} v_i \left(\frac{x_j R_j}{R} + v_j \frac{\partial}{\partial (\mathbf{v} - i\omega)} \right) \right] \left(\frac{1 - e^{-(\mathbf{v} - i\omega)t_0}}{\mathbf{v} - i\omega} \right). \quad (2.21)$$

Підставляючи (2.21) в (2.14), інтегруючи за просторовими координатами та в просторі швидкостей з урахуванням

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F),$$

де ε_F – енергія Фермі, матимемо для дійсної частини провідності

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{3ne^2}{4m} \text{Re} \frac{\Psi(q) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}}{\mathbf{v} - i\omega},$$

де n – об’ємна концентрація електронів.

Оскільки при $\varepsilon = \varepsilon_F$ маємо $\mathbf{v} = \mathbf{v}_s = v_F/2R$ – частота індивідуальних осциляцій електронів і $q = 2R(\mathbf{v} - i\omega)/v$, а плазмова частота

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_0 m}},$$

то остаточно дійсна частина провідності

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{3}{2} \epsilon_0 \omega_p^2 \frac{R}{v_F} \text{Re} \frac{\Psi(q) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}}{q}. \quad (2.22)$$

Враховуючи, що $q = q_1 - iq_2$, де $q_1 = v/v_s$, а $q_2 = \omega/v_s$, та той факт, що в

$\psi(q)$ дають адитивний внесок електрична та магнітна складові

$$\psi(q) = \psi_{\text{el}}(q) + \psi_{\text{mag}}(q), \quad (2.23)$$

де

$$\psi_{\text{el}}(q) = \frac{4}{3} - \frac{2}{q} + \frac{4}{q^3} - \frac{4}{q^2} \left(1 + \frac{1}{q}\right) e^{-q}, \quad (2.24)$$

$$\psi_{\text{mag}}(q) = \frac{8}{15} - \frac{1}{q} + \frac{4}{q^3} - \frac{24}{q^5} + \frac{8}{q^3} \left(1 + \frac{3}{q} + \frac{3}{q^2}\right) e^{-q}. \quad (2.25)$$

З урахуванням виразів (2.23) – (2.25) співвідношення (2.22) набуває вигляду

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{3}{2} \epsilon_0 \omega_p^2 \frac{R}{v_F} \text{Re} \left\{ \frac{28}{15q} - \frac{3}{q^2} + \frac{8}{q^4} - \frac{24}{q^6} + \frac{4}{q^3} \left[-1 + \frac{1}{q} + \frac{6}{q^2} \left(1 + \frac{1}{q}\right) \right] e^{-q} \right\}. \quad (2.26)$$

Обчислимо тепер дійсну частину виразу в квадратних дужках формули (2.26). Для зручності використовуємо комплексно спряжену до q величину $q^* = q_1 + i q_2$ та відоме з комплексного аналізу співвідношення $qq^* = |q|^2 = q_1^2 + q_2^2$. Таким чином, матимемо

$$\text{Re} \left\{ \frac{28}{15q} \right\} = \frac{28}{15} \text{Re} \left\{ \frac{q^*}{|q|^2} \right\} = \frac{28}{15} \frac{q_1}{q_1^2 + q_2^2};$$

$$\text{Re} \left\{ -\frac{3}{q^2} \right\} = -3 \text{Re} \left\{ \frac{q^{*2}}{|q|^4} \right\} = -3 \frac{q_1^2 - q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^2};$$

$$\operatorname{Re}\left\{\frac{8}{q^4}\right\} = 8\operatorname{Re}\left\{\frac{q^{*4}}{|q|^8}\right\} = 8\frac{q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^4};$$

$$\operatorname{Re}\left\{-\frac{24}{q^6}\right\} = -24\operatorname{Re}\left\{\frac{q^{*6}}{|q|^{12}}\right\} = -24\frac{(q_1^2 - q_2^2)(q_1^4 + q_2^4 - 14q_1^2q_2^2)}{(q_1^2 + q_2^2)^6};$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\left\{\frac{4}{q^3}\left[-1 + \frac{1}{q} + \frac{6}{q^2}\left(1 + \frac{1}{q}\right)\right]e^{-q}\right\} &= 4\operatorname{Re}\left\{\frac{q^{*3}}{|q|^6}\left[-1 + \frac{q^*}{|q|^2} + 6\frac{q^{*2}}{|q|^4}\left(1 + \frac{q^*}{|q|^2}\right)\right]e^{-q}\right\} = \\ &= \frac{4e^{-q}}{(q_1^2 + q_2^2)^4}\operatorname{Re}\left\{(\cos q_1 + i\sin q_2)(q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2q_2^2 + 4iq_1q_2(q_1^2 - q_2^2))\times\right. \\ &\times\left.\left(1 - q_1 + iq_2 + (1 + q_1 - iq_2)\frac{6(q_1^2 + 2iq_1q_2 - q_2^2)}{(q_1^2 + q_2^2)^2}\right)\right\} = \\ &= \frac{4e^{-q}}{(q_1^2 + q_2^2)^4}\left\{(q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2q_2^2)\left(1 - q_1 + 6\frac{(1 + q_1)(q_1^2 - q_2^2) + 2q_1q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^2}\right)\cos q_2 -\right. \\ &- 4q_1q_2^2(q_1^2 - q_2^2)\left(1 - 6\frac{q_1^2 - q_2^2 - 2q_1q_2(1 + q_1)}{(q_1^2 + q_2^2)^2}\right)\cos q_2 - q_2(q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2q_2^2)\times \\ &\times\left(1 - 6\frac{q_1^2 - q_2^2 - 2q_1q_2(1 + q_1)}{(q_1^2 + q_2^2)^2}\right)\sin q_2 - 4q_1q_2(q_1^2 - q_2^2)\times \\ &\times\left.1 - q_1 + 6\frac{(1 + q_1)(q_1^2 - q_2^2) + 2q_1q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^2}\right)\sin q_2\left\}. \end{aligned}$$

Отже, остаточний вираз для дійсної частини провідності матиме вигляд

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}\sigma(\omega) = & \frac{3}{2} \epsilon_0 \omega_p^2 \frac{R}{v_F} \left\{ \frac{28}{15} \frac{q_1}{q_1^2 + q_2^2} - 3 \frac{q_1^2 - q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^2} + 8 \frac{q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2 q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^4} - \right. \\
& - 24 \frac{(q_1^2 - q_2^2)(q_1^4 + q_2^4 - 14q_1^2 q_2^2)}{(q_1^2 + q_2^2)^6} + \frac{4e^{-q}}{(q_1^2 + q_2^2)^4} \times \\
& \times \left\{ (q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2 q_2^2) \left(1 - q_1 + 6 \frac{(1+q_1)(q_1^2 - q_2^2) + 2q_1 q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^2} \right) \cos q_2 - \right. \\
& - 4q_1 q_2^2 (q_1^2 - q_2^2) \left(1 - 6 \frac{q_1^2 - q_2^2 - 2q_1 q_2 (1+q_1)}{(q_1^2 + q_2^2)^2} \right) \cos q_2 - q_2 (q_1^4 + q_2^4 - 6q_1^2 q_2^2) \times \\
& \times \left(1 - 6 \frac{q_1^2 - q_2^2 - 2q_1 q_2 (1+q_1)}{(q_1^2 + q_2^2)^2} \right) \sin q_2 - 4q_1 q_2 (q_1^2 - q_2^2) \times \\
& \left. \left. \times \left(1 - q_1 + 6 \frac{(1+q_1)(q_1^2 - q_2^2) + 2q_1 q_2^2}{(q_1^2 + q_2^2)^2} \right) \sin q_2 \right\} \right\}.
\end{aligned}
\tag{2.27}$$

Надалі для одержання чисельних результатів використовуватимуться вираз (2.10) з урахуванням співвідношень (2.7), (2.11) – (2.13) та (2.27).

2.3 Оцінка впливу матриці на коефіцієнт поглинання композита в дипольному наближенні

Оцінимо вплив діелектричної проникності матриці на коефіцієнт поглинання нанокompозиту в електричному дипольному наближенні. У випадку сферичних наночастинок-включень за їх малої об'ємної концентрації ($\beta \ll 1$), згідно з формулою Ландау [26], діелектрична функція композита має вигляд

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_m + \beta \frac{3\epsilon_m(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon + 2\epsilon_m}. \quad (2.28)$$

Внаслідок того, що $|\operatorname{Re}\epsilon(\omega)| \gg \epsilon_m$, $|\operatorname{Im}\epsilon(\omega)| \gg \epsilon_m$, матимемо

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{eff}} &= \epsilon_m \left(1 + 3\beta \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right) = \epsilon_m \left(1 + 3\beta - 9\beta \frac{\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right) \approx \\ &\approx \epsilon_m \left(1 + 3\beta - 9\beta \frac{\epsilon_m}{\epsilon} \right) = \epsilon_m \left(1 + 3\beta - 9\beta \epsilon_m \frac{\epsilon^*}{|\epsilon|^2} \right). \end{aligned}$$

Розділяючи дійсну й уявну частини ϵ_{eff} , одержуємо

$$\operatorname{Re}\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_m \left(1 + 3\beta - 9\beta \epsilon_m \frac{\operatorname{Re}\epsilon}{|\epsilon|^2} \right), \quad \operatorname{Im}\epsilon_{\text{eff}} = 9\beta \epsilon_m^2 \frac{\operatorname{Im}\epsilon}{|\epsilon|^2}. \quad (2.29)$$

З формул (2.29) випливає, що $\operatorname{Re}\epsilon_{\text{eff}} \gg \operatorname{Im}\epsilon_{\text{eff}}$.

Якщо прийняти, що

$$x + iy = \sqrt{\epsilon_{\text{eff}}} = \sqrt{\operatorname{Re}\epsilon_{\text{eff}} + i\operatorname{Im}\epsilon_{\text{eff}}},$$

то

$$\operatorname{Re}\epsilon_{\text{eff}} + i\operatorname{Im}\epsilon_{\text{eff}} = (x + iy)^2 = x^2 - y^2 + 2ixy,$$

звідки випливає

$$\operatorname{Re}\epsilon_{\text{eff}} = x^2 - y^2, \quad \operatorname{Im}\epsilon_{\text{eff}} = 2xy.$$

Тому

$$y = \frac{\text{Im} \epsilon_{\text{eff}}}{2x}, \quad x \approx \sqrt{\text{Re} \epsilon_{\text{eff}}} \cong \sqrt{\epsilon_m};$$

$$y = \frac{\text{Im} \epsilon_{\text{eff}}}{2\sqrt{\epsilon_m}} = \frac{9\beta\epsilon_m^2}{2\sqrt{\epsilon_m}} \frac{\text{Im} \epsilon(\omega)}{|\epsilon|^2} = \frac{9}{2} \beta \epsilon_m^{\frac{3}{2}} \frac{\text{Im} \epsilon(\omega)}{|\epsilon|^2}.$$

Тоді коефіцієнт поглинання в електричному дипольному наближенні

$$\eta_e = \frac{2\omega}{c} \text{Im} \sqrt{\epsilon_c} = \frac{2\omega}{c} y = \frac{2\omega}{c} \frac{9}{2} \beta \epsilon_m^{\frac{3}{2}} \frac{\text{Im} \epsilon}{|\epsilon|^2} = \frac{9\beta\omega}{c} \epsilon_m^{\frac{3}{2}} \frac{\text{Im} \epsilon}{|\epsilon|^2}. \quad (2.30)$$

Розглянемо тепер питання про вплив діелектричної проникності матриці на коефіцієнт поглинання нанокompозиту в магнітному дипольному наближенні. З урахуванням співвідношення (2.9) матимемо

$$\eta_m = \frac{1}{10} \beta \frac{\omega}{c \sqrt{\epsilon_m}} \left(\frac{\omega R}{c} \right)^2 \text{Im} \epsilon(\omega). \quad (2.31)$$

Об'єднуючи вирази (2.30) і (2.31), остаточно отримуємо

$$\eta(\omega) = \eta_e + \eta_m = \frac{3\beta\omega}{c \sqrt{\epsilon_m}} \left[\frac{3\epsilon_m^2}{|\epsilon|^2} + \frac{1}{30} \left(\frac{\omega R}{c} \right)^2 \right] \text{Im} \epsilon(\omega). \quad (2.32)$$

2.4 Результати розрахунків та їх обговорення

Розрахунки проводилися для композиту зі сферичними наночастинками-включеннями різних розмірів і різних металів, що знаходяться у різних середовищах. Параметри металів, потрібні для одержання чисельних результатів, наведені в табл. 2.1 і 2.2.

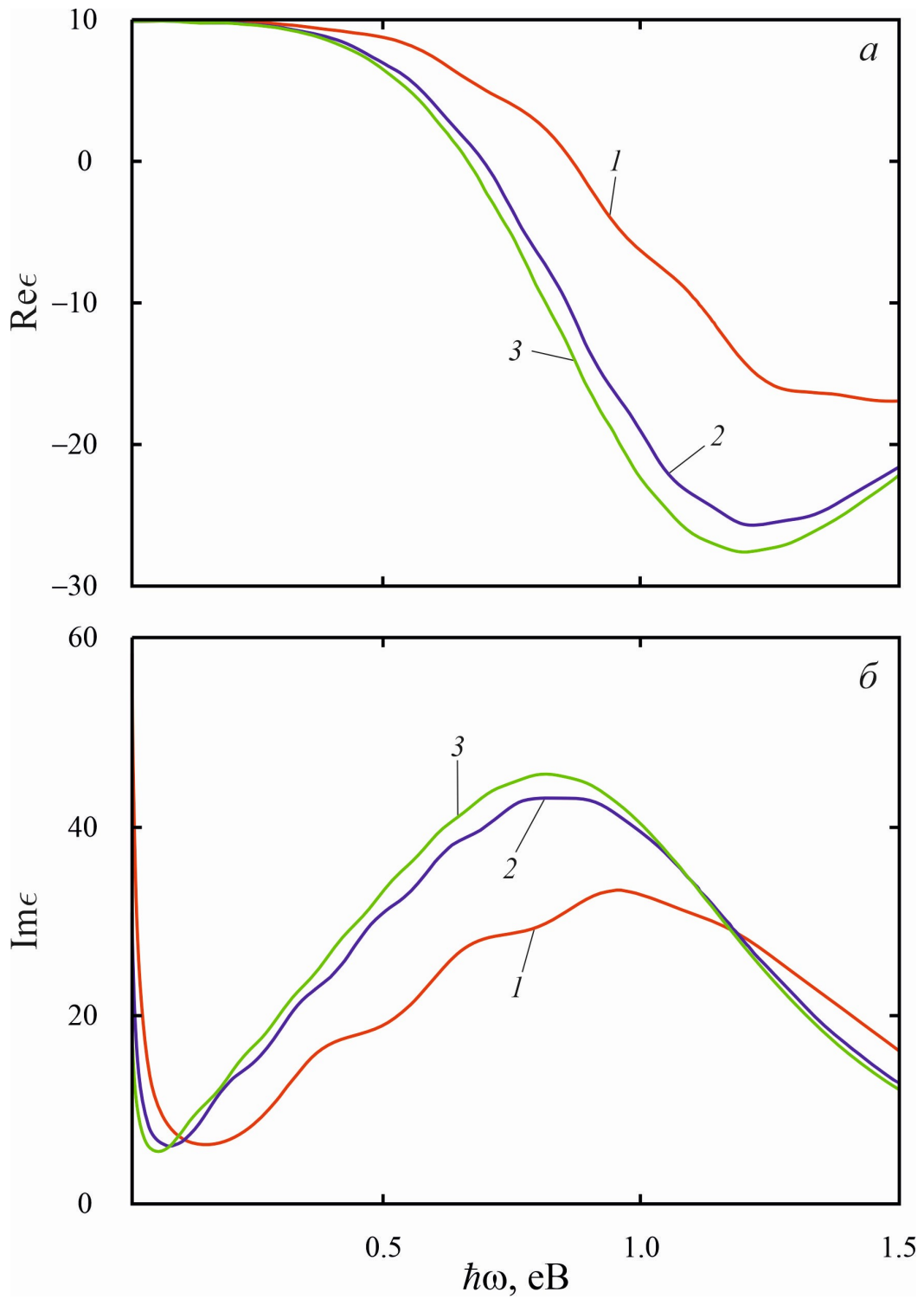
Таблиця 2.1 – Параметри металів, використовувані для чисельних розрахунків

Метали	Параметри			
	$n_e, 10^{22} \text{ см}^{-3}$	ϵ^∞	$\hbar\omega_p, \text{ eV}$	$\hbar\gamma_{\text{bulk}}, \text{ eV}$
Ag	5.85	3.70	9.17	0.023
Au	5.91	9.84	9.07	0.016
Al	17.2	12.03	12.6	0.024

Таблиця 2.2 – Діелектричні проникності матриць

Речовина	Повітря	CaF ₂	Тефлон	Al ₂ O ₃	TiO ₂	C ₆₀
ϵ_m	1	1.54	2.3	3.13	4.0	6.0

На рис. 2.1 наведено частотні залежності дійсної та уявної частин діелектричної функції наночастинок Au різного радіусу в тефлоні. Відмітимо, що криві $\text{Re}\epsilon(\omega)$ та $\text{Im}\epsilon(\omega)$ для частинок різних розмірів якісно подібні, а відрізняються лише кількісно. Так, $\text{Re}\epsilon(\omega)$ зменшується зі збільшенням радіусу частинок, а $\text{Im}\epsilon(\omega)$, навпаки, збільшується зі збільшенням радіусу. Цей факт свідчить про збільшення зворотного часу релаксації зі збільшенням розмірів наночастинок внаслідок того, що при незмінному часі об'ємної релаксації, час радіаційного загасання зменшується швидше, ніж зростає час поверхневої релаксації.



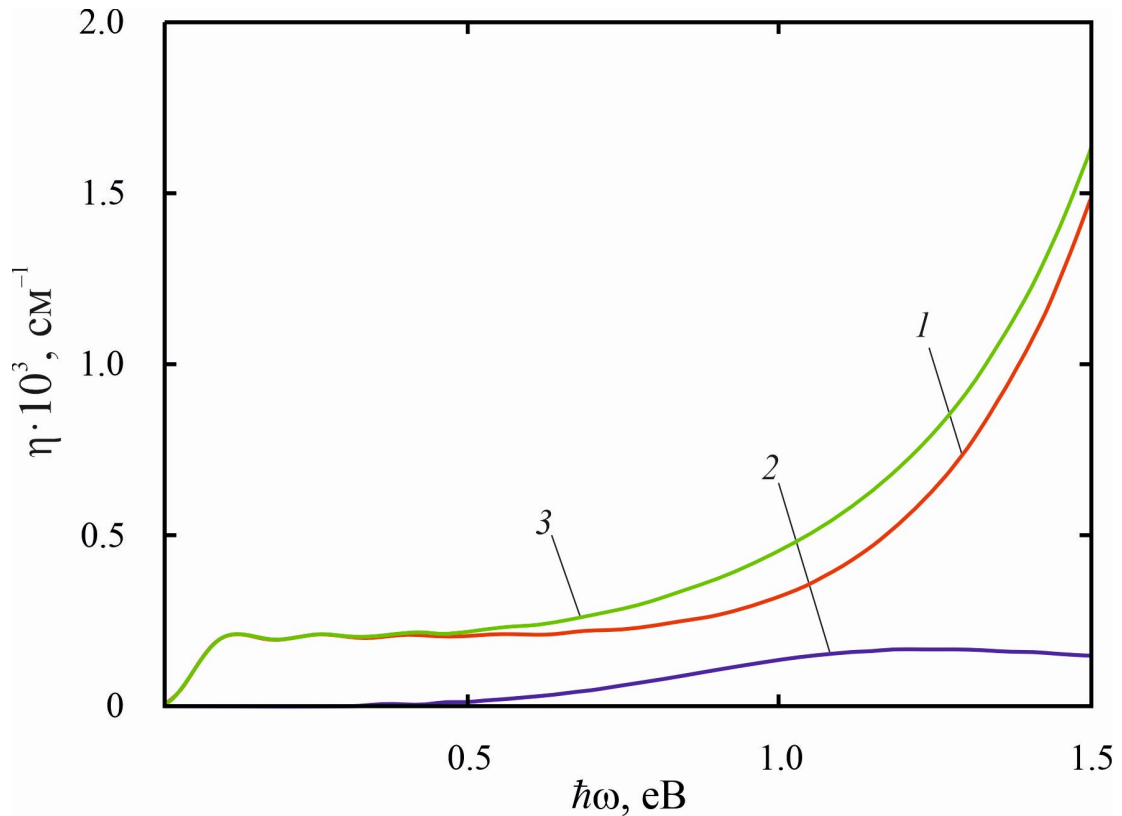
a – дійсна частина; b – уявна частина

1 – $R = 10$ нм; 2 – $R = 20$ нм; 3 – $R = 30$ нм

Рисунок 2.1 – Частотні залежності діелектричної функції наночастинок Au різного радіусу в тefлоні.

Частотні залежності коефіцієнта дипольного поглинання зображено на

рис. 2.2. Зауважимо, що коефіцієнти поглинання η_e та η_m є спів мірними у ближній інфрачервоній області частот, проте в інших спектральних діапазонах ($\hbar\omega < 0,7$ eV) та у видимій області $\eta_m \ll \eta_e$, а тому магнітне дипольне поглинання у цих частотних діапазонах можна не враховувати.

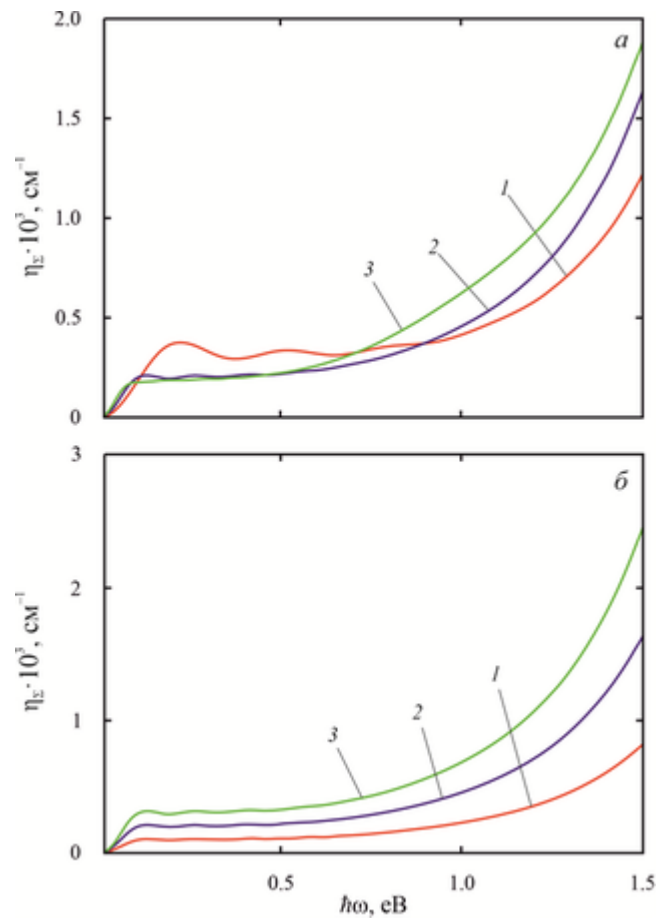


- 1 – електричне дипольне поглинання;
 2 – магнітне дипольне поглинання;
 3 – сумарне дипольне поглинання

Рисунок 2.2 – Частотні залежності коефіцієнта поглинання наночастинок Au радіусом $R = 20$ нм у тефлоні.

На рис. 2.3 продемонстровано частотні залежності сумарного коефіцієнта дипольного поглинання композиту з частинками різного радіусу та для випадку різного об'ємного вмісту частинок-включень. Вказані залежності також якісно подібні і відрізняються лише кількісно: зі збільшенням радіусу частинок-включень та об'ємного вмісту металевої фракції коефіцієнт поглинання композиту збільшується. Це пов'язане з тим, що за поглинання відповідає

металева фракція, тому і коефіцієнт поглинання збільшується зі збільшенням вмісту металевих частинок та їх радіусів.



a – наночастинки різного радіусу з $\beta = 0,10$:

1 – $R = 10$ нм; 2 – $R = 20$ нм; 3 – $R = 30$ нм;

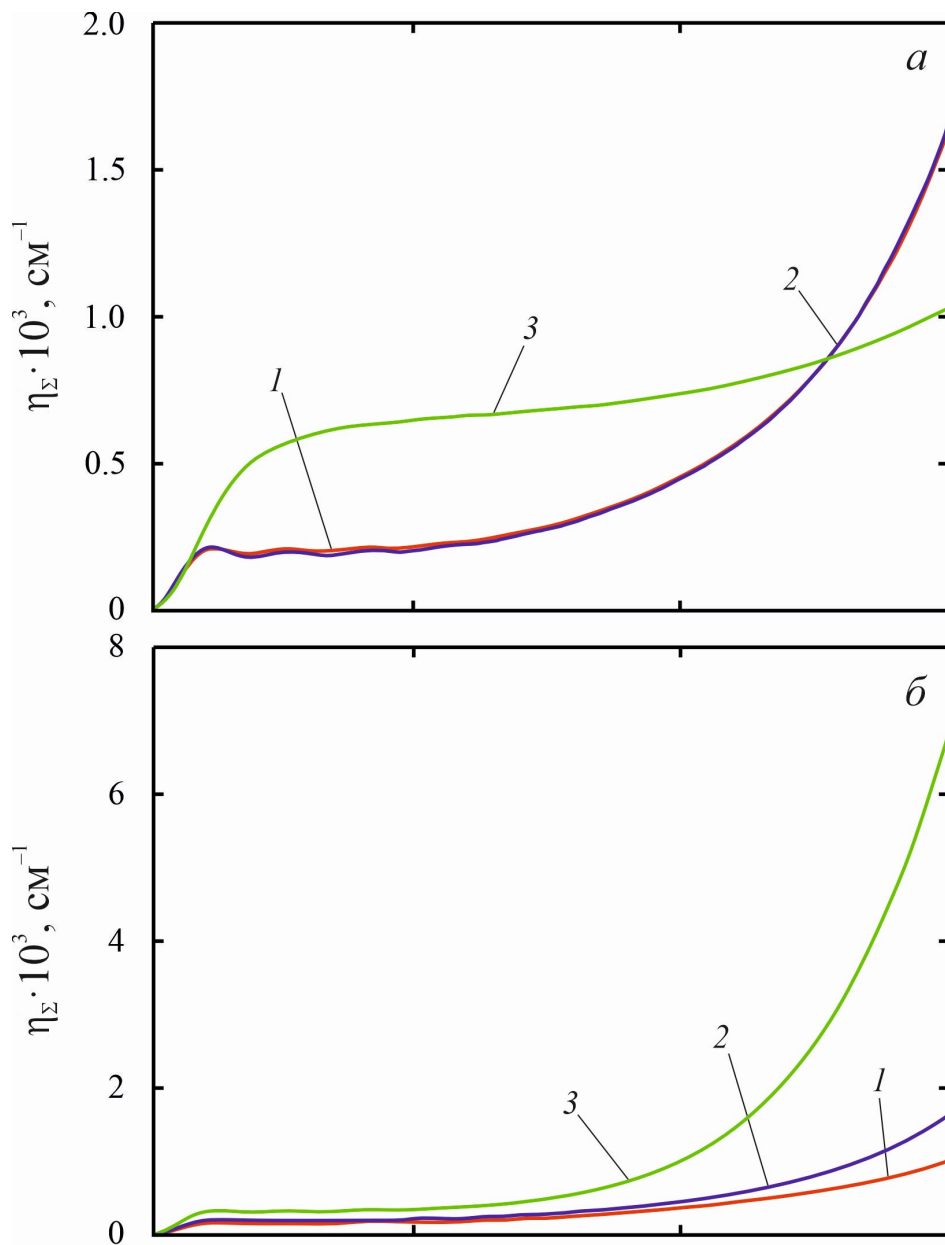
б – наночастинки радіусом $R = 20$ нм з різною об'ємною фракцією:

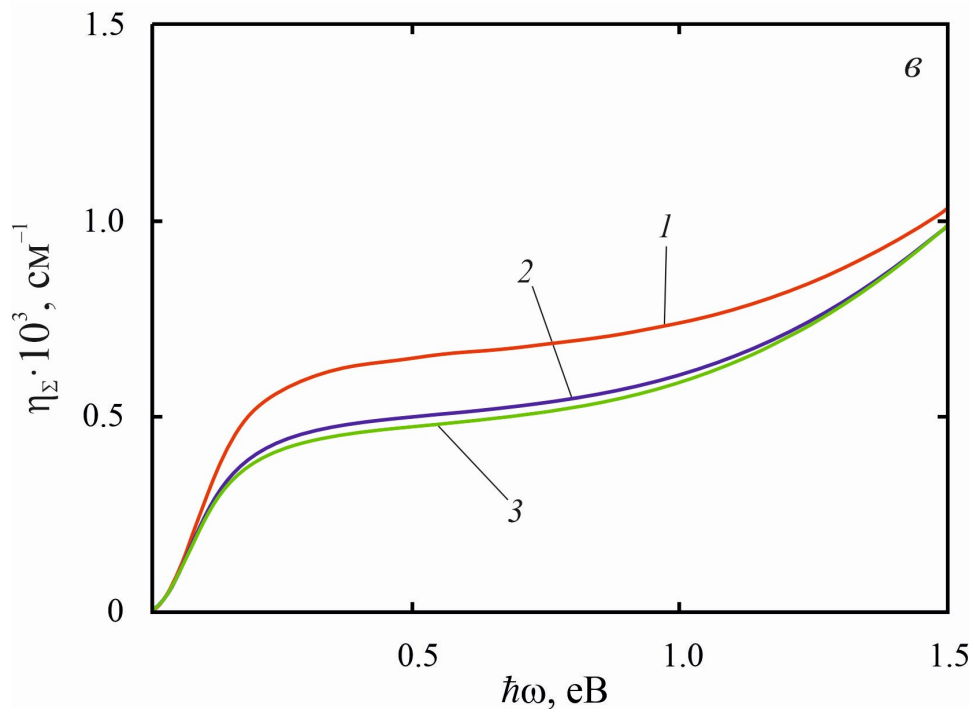
1 – $\beta = 0,05$; 2 – $\beta = 0,10$; 3 – $\beta = 0,15$

Рисунок 2.3 – Частотні залежності коефіцієнта поглинання композиту із наночастинками Au в тефлоні.

Вплив матеріалу наночастинок-включень, матричного середовища та ефективної маси електронів наночастинок можна визначити за кривими $\eta_{\Sigma}(\omega)$ на рис. 2.4. Так, коефіцієнт поглинання композиту з частинками Al практично у всій інфрачервоній області більший за коефіцієнт поглинання для композитів із

частинками Au та Ag, проте при наближенні до видимої частини спектра коефіцієнти поглинання композитів із включеннями Au та Ag починає стрімко зростати та суттєво перевищує значення $\eta_{\Sigma}(\omega)$ для Al. Проникність матричного діелектрика також суттєво впливає на коефіцієнт поглинання композитів – чим більше ϵ_m , тим більшим є коефіцієнт поглинання композиту (рис. 2.4, б). Зі зменшенням же ефективної маси електронів, збільшується плазмова частота, а, отже, і $\text{Im}\epsilon(\omega)$ та коефіцієнт поглинання композиту (рис. 2.4, в).





a – частинки різних металів у тефлоні:

1 – Au; 2 – Ag; 3 – Al;

b – частинки Au у різних матрицях:

1 – Ag; 2 – тефлон; 3 – KCl;

в – частинки Al у тефлоні з різною ефективною масою:

1 – $m^* = 1,06m_e$; 2 – $m^* = 1,48m_e$; 3 – $m^* = 1,60m_e$;

Рисунок 2.4 – Частотні залежності коефіцієнта поглинання композиту з металевими наночастинками в діелектричному середовищі ($R = 20$ нм, $\beta = 0,10$).

ВИСНОВКИ

Одержано співвідношення для коефіцієнта дипольного поглинання композиту зі сферичними металевими наночастинками в інфрачервоному діапазоні спектра з урахуванням електричної та магнітної складових.

Показано, що дійсна частина діелектричної функції зменшується, а уявна – збільшується зі збільшенням радіусу наночастинок, що пов'язане зі збільшенням зворотного ефективного часу релаксації у вказаному випадку.

Встановлено, що у ближньому інфрачервоному діапазоні частот разом із електричним необхідно враховувати й магнітне дипольне поглинання, в той час як у дальньому інфрачервоному та оптичному діапазонах електричне дипольне поглинання суттєво переважає магнітне.

Доведено, що оскільки за поглинання в композиті відповідають металеві наночастинки, коефіцієнт поглинання збільшується зі збільшенням радіусу частинок-включень та об'ємному вмісту металевої фракції.

Продемонстровано, що матеріал частинок-включень та матричного середовища суттєво впливає на коефіцієнт поглинання. Так, зі збільшенням діелектричної проникності матриці зростає коефіцієнт поглинання. В той же час, практично у всій інфрачервоній області частот коефіцієнт поглинання композиту з частинками алюмінію суттєво перевищує аналогічну величину для композитів із частинками інших металів.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ

1. Composites and their properties / ed. by N. Hu. InTech, 2012. DOI: <https://doi.org/10.5772/2816>.
2. Resonant optical phenomena in heterogeneous plasmon nanostructures of noble metals: a review / I. M. Krishchenko et al. *Theoretical and experimental chemistry*. 2020. Vol. 56, no. 2. P. 67–110. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11237-020-09642-6>.
3. Sancho-Parramon J., Janicki V., Zorc H. On the dielectric function tuning of random metal-dielectric nanocomposites for metamaterial applications. *Optics express*. 2010. Vol. 18, no. 26. P. 26915. DOI: <https://doi.org/10.1364/oe.18.026915>.
4. Surface plasmon-phonon polaritons in GaAs / G. A. Melentev et al. *Journal of physics: conference series*. 2017. Vol. 917. P. 062038. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/917/6/062038>.
5. Bonačić Lošić Ž. Surface plasmons in Weyl semimetals. *Journal of physics: condensed matter*. 2018. Vol. 30, no. 36. P. 365003. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648x/aad6f5>.
6. Saleh N. M., Aziz A. A. Simulation of surface plasmon resonance on different size of a single gold nanoparticle. *Journal of physics: conference series*. 2018. Vol. 1083. P. 012041. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1083/1/012041>.
7. Exciton–plasmon hybrids for surface catalysis detected by SERS / E. Cao et al. *Nanotechnology*. 2018. Vol. 29, no. 37. P. 372001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6528/aacec4>.
8. Golovan L. A., Timoshenko V. Yu., Kashkarov P. K. Optical properties of porous-system-based nanocomposites. *Phys. Usp.* 2007. Vol. 50, no. 6. P. 595–612.

9. The Ag dielectric function in plasmonic metamaterials / V. P. Drachev et al. *Optics express*. 2008. Vol. 16, no. 2. P. 1186. DOI: <https://doi.org/10.1364/oe.16.001186>.
10. Zamchiy A. O., Starinskiy S. V., Baranov E. A. Morphology and Optical Properties of a Composite Material Based on Gold Nanoparticles and Nonstoichiometric Silicon Oxide. *Tech. Phys. Lett.* 2020. Vol. 46 P. 827–830 DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063785020080283>
11. Tomchuk P. M. Light absorption by island metal films in the infrared range. *Surface science*. 1995. Vol. 330, no. 3. P. 350–366. DOI: [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(95\)00403-3](https://doi.org/10.1016/0039-6028(95)00403-3).
12. Petrov Yu.I. Clusters and Small Particles. Moscow: Nauka, 1986. 368 p. (in Russian)
13. Bykov Y. V., Rybakov K. I., Semenov V. E. High-temperature microwave processing of materials. *Journal of physics D: applied physics*. 2001. Vol. 34, no. 13. P. R55–R75. DOI: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/34/13/201>.
14. Microwave processing of materials and applications in manufacturing industries: a review / S. Singh et al. *Materials and manufacturing processes*. 2014. Vol. 30, no. 1. P. 1–29. DOI: <https://doi.org/10.1080/10426914.2014.952028>.
15. Clark D. E., Sutton W. H. Microwave processing of materials. *Annual review of materials science*. 1996. Vol. 26, no. 1. P. 299–331. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev.ms.26.080196.001503> .
16. Full sintering of powdered-metal bodies in a microwave field / R. Roy et al. *Nature*. 1999. Vol. 399, no. 6737. P. 668–670. DOI: <https://doi.org/10.1038/21390>.
17. Gupta M., Leong E. W. W. *Microwaves and metals*. John Wiley & Sons (Asia), 2007. 256 p. DOI: <https://doi.org/10.1002/9780470822746.ch4>.
18. Cheng J., Roy R., Agrawal D. *Journal of materials science letters*. 2001. Vol. 20, no. 17. P. 1561–1563. DOI: <https://doi.org/10.1023/a:1017900214477>.
19. Mahmoud M. M., Link G., Thumm M. The role of the native oxide shell on the microwave sintering of copper metal powder compacts. *Journal of alloys and*

compounds. 2015. Vol. 627. P. 231–237. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.11.180>.

20. Bruggeman D. A. G. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen. *Annalen der physik*. 1935. Vol. 416, no. 7. P. 636–664. DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.19354160705>.

21. Rybakov K. I., Semenov V. E. Microwave heating of electrically conductive materials. *Izvest. Vyssh. Uchebn. Zav. Radiofizika*. 2005. Vol. 48, no. 10–11. P. 997–1005.

22. Microwave heating of conductive powder materials / K. I. Rybakov et al. *Journal of applied physics*. 2006. Vol. 99, no. 2. P. 023506. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2159078>.

23. Bergman D. J., Stroud D. Physical properties of macroscopically inhomogeneous media. *Solid state physics*. Vol. 46, no. 1992. P. 147–269. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60398-7](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60398-7).

24. Bykov Yu.V., Egorov S.V., Ereemeev A.G., Kholoptsev V.V., Plotnikov I.V., Rybakov K.I., Semenov V.E., Sorokin A.A. Effects of microwave heating in nanostructured ceramic materials. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. 2010. Vol. 49, no. 1-2. P. 31–41.

25. Rybakov K. I., Semenov V. E. Effective Microwave Dielectric Properties of Ensembles of Spherical Metal Particles. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 2017. Vol. 65, no. 5. P. 1479–1487. DOI: <https://doi.org/10.1109/tmtt.2016.2645154>.

26. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Electrodynamics of Continuous Media*. Addison-Wesley, Reading, MA, 1960

27. Extraction of effective permittivity and permeability of metallic powders in the microwave range / T. Galek et al. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. Vol. 18, no. 2. P. 025015. DOI: <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/2/025015>.

28. Arkadiew W. Die Reflexion elektromagnetischer Wellen an ferromagnetischen Oberflächen. *Z. Physik*. 1926. Vol. 38. P. 908–919 DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01397191>.
29. Smirnova D., Kivshar Y. S. Multipolar nonlinear nanophotonics. *Optica*. 2016. Vol. 3, no. 11. P. 1241. DOI: <https://doi.org/10.1364/optica.3.001241>.
30. Tribelsky M. I., Miroschnichenko A. E. Giant in-particle field concentration and Fano resonances at light scattering by high-refractive-index particles. *Physical Review A*. 2016. Vol. 93, no. 5. DOI: <https://doi.org/10.1103/physreva.93.053837>.
31. Light Scattering by a Dielectric Sphere: Perspectives on the Mie Resonances. *Applied Sciences*. 2018. Vol. 8, no. 2. P. 184. DOI: <https://doi.org/10.3390/app8020184>.
32. Optically resonant dielectric nanostructures / A. I. Kuznetsov et al. *Science*. 2016. Vol. 354, no. 6314. P. aag2472. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.aag2472>.
33. Optimum Forward Light Scattering by Spherical and Spheroidal Dielectric Nanoparticles with High Refractive Index / B. S. Luk'yanchuk et al. *ACS Photonics*. 2015. Vol. 2, no. 7. P. 993–999. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.5b00261>.
34. Huffman D. R., Bohren C. F. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. Wiley & Sons, Limited, John, 2007. 544 p.
35. Butenko D. V., Tomchuk P. M. Influence of the Magnetic Dipole Moment of a Metal Nanoellipsoid on the Scattering of Electromagnetic Waves. *Ukrainian Journal of Physics*. 2016. Vol. 61, no. 3. P. 255–264. DOI: <https://doi.org/10.15407/ujpe61.03.0255>.
36. Grigorochuk N. Broadening of surface plasmon resonance line in spheroidal metallic nanoparticles. *Journal of Physical Studies*. 2016. Vol. 20, no. 1-2. P. 1701.