

**КОНФЕРЕНЦИЯ В**

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ  
В АТМОСФЕРЕ И ОКЕАНЕ**

# РАСSEИВАЮЩИЕ СВОЙСТВА РАДИАЛЬНО НЕОДНОРОДНОГО ШАРА ИЗ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ

Н.С. Панамарев<sup>1</sup>, В.А. Донченко<sup>1,2</sup>, Ал.А. Землянов<sup>1,3</sup>, И.В. Самохвалов<sup>1</sup>, Д.В. Апексимов<sup>3</sup>,  
А.Н. Панамарёва<sup>4</sup>, А.В. Трифонова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

<sup>2</sup>Сибирский физико-технический институт, Томский государственный университет,  
г. Томск, Россия

<sup>3</sup>Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия

<sup>4</sup>Национальный исследовательский политехнический университет, г. Томск, Россия

[n.panamarev@mail.ru](mailto:n.panamarev@mail.ru), [don@spti.tsu.ru](mailto:don@spti.tsu.ru), [zeml16@mil.ru](mailto:zeml16@mil.ru), [lidar@mail.tsu.ru](mailto:lidar@mail.tsu.ru),  
[apeximov@iao.ru](mailto:apeximov@iao.ru), [mir-annie@ya.ru](mailto:mir-annie@ya.ru)

**Ключевые слова:** металлodieлектрический композит, наночастицы металлов, комплексный показатель преломления, эффективная диэлектрическая проницаемость.

**Аннотация:** В соответствие с моделью эффективной среды и теорией Г. Ми сделаны оценки сечений ослабления, рассеяния и поглощения для сферически агрегированных металлических наночастиц в зависимости от размера агрегата, степени его заполнения наночастицами и физических свойств материала наночастиц. При этом концентрация наночастиц изменяется в радиальном направлении.

## Введение

В последние десятилетия стремительно развиваются исследования в области физики низкоразмерных структур. Наноструктурированные материалы являются объектом растущего интереса для фундаментальной и прикладной науки [1, 2], поскольку, с уменьшением характерных размеров их структурных единиц до наноуровня, они зачастую приобретают новые свойства. Современный интерес к этой наиболее динамично развивающейся области физики связан как с принципиально новыми фундаментальными научными проблемами и физическими явлениями, так и с перспективами создания на основе уже открытых явлений совершенно новых устройств и систем с широкими функциональными возможностями для опто- и наноэлектроники, измерительной техники, информационных технологий нового поколения, средств связи [3]. Среди разнообразных наноструктурированных сред значительный интерес представляют гетерогенные среды, образованные путем внедрения металлических наноразмерных частиц и их агрегатов в диэлектрическую среду (матрицу). Актуальность проблемы исследования оптических свойств агрегатов наночастиц металла, их морфологии, а также возможности фотомодификации их свойств в значительной мере связана с перспективой

создания на их основе разнообразных устройств. Оптические свойства металлических наночастиц могут найти применение в создании миниатюрных переключателей, биофизических сенсоров, модуляторов, высокоскоростных оптических приборов, светодиодов с усиленной люминесценцией, солнечных батарей.

### Постановка задачи

С целью исследования влияния агрегации наночастиц на их рассеивающие свойства проведены оценки сечений ослабления, рассеяния и поглощения для наноразмерных агрегатов металлических наночастиц в зависимости от размера агрегата, степени его заполнения наночастицами и физических свойств материала наночастиц. В данной работе представлены оценки рассеивающих свойств агрегатов наночастиц Ag, Cu, Zn, Ni, Al. Для численных расчетов была выбрана модель сферически-агрегированных наночастиц, что обосновано их широким использованием в задачах как прикладного, так и фундаментального характера. В качестве модельного объекта с неоднородным, но сферически симметричным распределением комплексной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon = \varepsilon(r)$ , рассматривается шар радиуса  $a$  из металлических наночастиц в диэлектрической матрице. Для расчета оптических характеристик указанных сред применена модель эффективной среды и использовалось приближение Клаузиуса-Моссотти в соответствии с методикой предложенной авторами [4]. Следуя этим авторам, эффективная диэлектрическая проницаемость гетерогенной среды определяется выражением:

$$\varepsilon_{eff}(r) = \frac{\varepsilon_b(\varepsilon_m + 2) + 2f(\varepsilon_m - \varepsilon_b)}{(\varepsilon_m + 2) - f(\varepsilon_m - \varepsilon_b)}. \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon_b$  – диэлектрическая функция материала дисперсной фазы;  $\varepsilon_m$  – диэлектрическая функция среды, в которой взвешены наночастицы металлов;  $f = f(r)$  – объемная доля (фактор заполнения) металлических наночастиц.

### Результаты и обсуждение

В результате в рамках вышеуказанной модели были рассчитаны оптические характеристики (показатель преломления и коэффициент поглощения) изотропных гетерогенных сред на основе металлических наночастиц Ag, Zn, Ni, Al (средний диаметр которых  $\sim 5$  нм), частота плазмонного резонанса которых не попадает в полосы поглощения и люминесценции молекул лазерно-активного вещества (родамина БЖ).

Самый общий анализ выражения (1) показал, что зависимость показателя преломления  $\text{Re}(m) = \text{Re}\left(\sqrt{\varepsilon_{эфф}}(\lambda)\right)$  и коэффициента поглощения  $\text{Im}(m) = \text{Im}\left(\sqrt{\varepsilon_{эфф}}(\lambda)\right)$  гетерогенной среды

от действительной части диэлектрической функции дисперсной фазы ( $\text{Re}(\varepsilon_b)$ ) имеет ярко выраженный экстремальный характер, а зависимость от мнимой ( $\text{Im}(\varepsilon_b)$ ) части – относительно монотонный (Рис. 1).

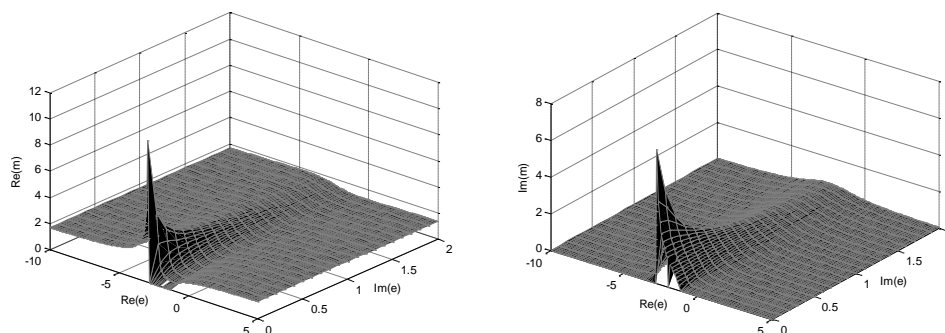


Рис. 1. Зависимость действительной ( $\text{Re}(m)$ ) и мнимой ( $\text{Im}(m)$ ) частей комплексного показателя преломления гетерогенной среды от диэлектрической проницаемости дисперсной фазы при факторе заполнения  $f = 0,4$

Численное моделирование спектров сечений экстинкции и рассеяния агрегатов металлических наночастиц Ag, Zn, Ni, и Al, находящихся в растворе этанола с родамином 6Ж проводилось в соответствие с моделью эффективной среды и теорией Г. Ми [6]. В данных теоретических расчетах агрегаты наночастиц аппроксимировались шаром радиуса  $a$ , комплексная диэлектрическая постоянная материала которого  $\varepsilon_{\text{эфф}}$  рассчитывалась по формуле (1). Вычисления сечений экстинкции и рассеяния были проведены для агрегатов (средний радиус 50–250 нм) металлических наночастиц (средним диаметром  $\sim 5$  нм) ряда металлов (Al, Zn, Ni, Ag). Влияние фактора заполнения и размера агрегата из наночастиц серебра и никеля в растворе этанола на поглощение и рассеяние оптического излучения иллюстрируется на приведенных ниже расчетных графиках (Рис. 2 и 3).

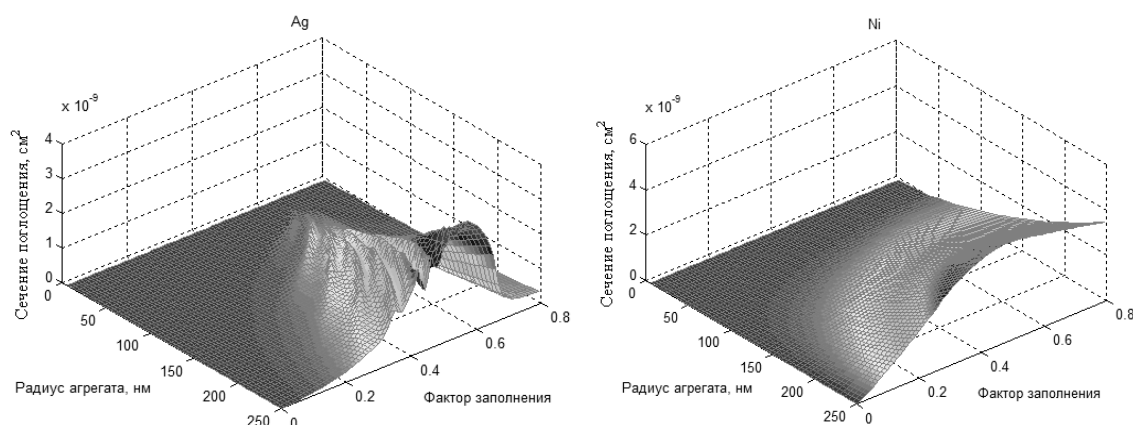


Рис. 2. Расчетные зависимости сечений поглощения агрегированных наночастиц серебра и никеля от радиуса агрегата и фактора заполнения

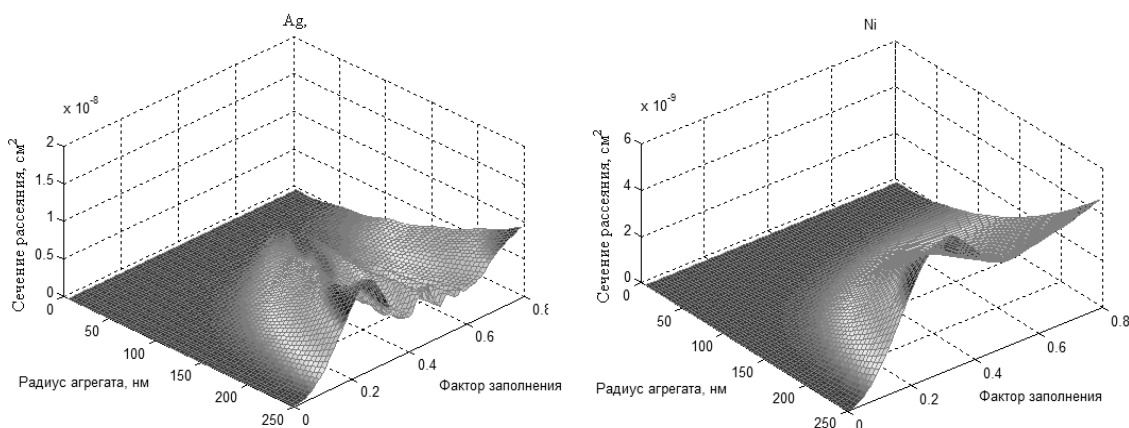


Рис. 3. Расчетные зависимости сечений рассеяния агрегированных наночастиц серебра и никеля от радиуса агрегата и фактора заполнения

Из анализа приведенных выше графиков (Рис. 2, 3) можно заключить, что зависимость сечений поглощения и рассеяния агрегатов наночастиц металлов от фактора заполнения имеет четко выраженный экстремальный характер, причем положение этих максимумов существенным образом зависит от вида металла.

### Заключение

В видимом диапазоне длин волн рассчитаны сечения рассеяния и сечения поглощения сферически агрегированных наночастиц Al, Ag, Ni, Zn в этанольном растворе родамина 6Ж при изменении радиуса агрегатов от 50 до 250 нм и изменении фактора их заполнения от 0,02 до 0,7. Путем численного моделирования сделаны оценки рассеивающих свойств агрегатов в зависимости от размера агрегата, степени его заполнения наночастицами и материала наночастиц.

### Литература

1. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами // 1986.
2. Kreibig U., Vollmer M. Optical Properties of Metal Clusters // Springer. Berlin. 1995.
3. Борисенко В.Е. Нанoeлектроника – основа информационных систем XXI века // Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 5. С. 100–104.
4. Ораевский А.Н., Проценко И.Е. Оптические свойства гетерогенных сред // Квантовая электроника. – 2001. – Т. 31, № 3. – С. 252–246.
5. Донченко В.А., Землянов Ал.А., Панамарев Н.С., Харенков В.А. Коэффициент усиления оптического излучения в композите «органический краситель – металлические наночастицы» // Изв. вузов. Физика. – 2010. – № 9/3. – С. 73-74.
6. Mie G. BeitrÄage zur Optik trÄuber Medien, speziell kolloidaler MetallÄosungen // Ann. d. Physik IV. – 1908. – Vol. 25. – No. 3. – P. 377-445.