

РАССЕЯНИЕ СВЕТА НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ЦИЛИНДРЕ, ВКЛЮЧАЮЩЕМ ДВУМЕРНУЮ РЕШЕТКУ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТЕРЖНЕЙ

Д.В. Нестеренко, В.В. Котляр

Институт систем обработки изображений РАН

Самарский государственный аэрокосмический университет им. С.П. Королева

Аннотация

Рассмотрена задача распространения ТМ и ТЕ поляризованного света в двумерных массивах серебряных наностержней различного радиуса и концентрации в диэлектрической структуре. Было проведено сравнение точных численных результатов с расчетами на основе нелокальной модели однородной среды для периодических массивов стержней с отрицательной диэлектрической постоянной. Показано сильное влияние мультипольных вкладов на рассеяние, что не может быть учтено рассматриваемой моделью.

Введение

Металлические частицы с размерами от 5 нм до нескольких сотен нанометров, распределенные периодически или случайно на диэлектрической подложке, или слои таких частиц имеют интересные оптические свойства и изучались долгое время [1]. В последнее время расширились возможности по изготовлению таких систем с периодичным распределением одинаковых сфер. В зависимости от размера и распределения сфер они могут быть очень хорошими поглотителями света [2, 3] или фотонными кристаллами действующими как непоглощающие зеркала в определенном частотном диапазоне электромагнитного спектра [4].

Такие структуры являются композитными средами, включающими два и более различных материалов с характерными размерами включений, много меньшими длины волны падающего света. Для анализа подобных структур применяют теорию эффективных сред (ТЭС) в виде соотношений Максвелла-Гарнета [5], когда один из компонентов может рассматриваться как основной, в который встроены включения другого материала. Они предполагают точное вычисление поля в однородном основном материале, произведенного одиночным сферическим или эллиптическим включением, и модификация его с учетом взаимодействия между включениями. Теория Максвелла-Гарнета пригодна для низких концентраций (менее 30 %) относительно малых наночастиц (до нескольких десятков нанометров).

В работе [6] предложен метод расчета эффективной диэлектрической проницаемости композитной среды на основе детального учета запаздывания радиационного взаимодействия между составляющими среду сферическими частицами, расстояние между которыми сопоставимо с длиной волны излучения. Представленный метод позволяет рассчитывать оптические свойства композитных сред, в которых расстояние между частицами сопоставимо с длиной волны внешнего излучения. Исследования сферических серебряных включений в диэлектрическую среду показали влияние радиуса сфер и расстояний между ними на отклонение результатов

теории Максвелла-Гарнета от решения, учитывающего зависимость оптических свойств металлических наночастиц от их размеров. В частности, для среды с наночастицами радиусом 10 нм и концентрацией 10 % отличие в результатах численного расчета показателя преломления композитного материала несущественно. Однако уже при радиусе 20 нм разница достигает нескольких десятков процентов.

В работе [7] было исследовано прохождение ТМ и ТЕ поляризованных волн в двумерных массивах серебряных наностержней различного диаметра в желатиновой среде. Авторы провели сравнение метода рекурсивных функций Грина с теорией Максвелла-Гарнета на примере изучения характеристик пропускания периодических и непериодических массивов наностержней. Было показано сильное влияние взаимодействия между наностержнями, вкладов мультиполей и формирования фотонных запрещенных зон на оптические спектры, что не может быть учтено в рамках классической ТЭС. Авторы отметили частичную адекватность теории Максвелла-Гарнета для ТМ поляризованного света и ее непригодность для случая ТЕ поляризации.

В [8, 9] была предложена нелокальная модель однородной среды для периодических массивов стержней с отрицательной диэлектрической постоянной на основе определения поляризуемости одиночного стержня и применения методов интегральных уравнений. Исследование модели было проведено для низких концентраций стержней (менее 0,8 %) и малого радиуса стержней (до 12 нм для видимого диапазона). Сравнение результатов моделирования задачи отражения на конечной пластине со стержнями, ориентированными параллельно поверхности пластины, полученных с использованием нелокальной модели и электромагнитного подхода, показало адекватность подхода для ТЕ и ТМ поляризаций.

В настоящей статье проводится моделирование микроструктур, включающих массивы наностержней, объединенным методом «конечных элементов Галеркина – граничных элементов» (МКЭГ-ГЭ) [10], основанным на точной электромагнитной теории. Полученные результаты сравниваются с моделированием данных структур с усредненной диэлек-

трической проницаемостью, рассчитанной в нелокальной модели однородной среды для периодичных массивов стержней с отрицательной диэлектрической постоянной. Прототипы подобных массивов были недавно изготовлены экспериментально [11, 12]. Эти массивы представляют собой упорядоченные длинные стержни из диэлектрического или металлического материала диаметром нескольких десятков нанометров.

Модель эффективной диэлектрической проницаемости

В работе [9] рассматривается матрица из диэлектрического материала с двумерной решеткой наностержней с отрицательной диэлектрической постоянной. Радиус стержней R , они расположены в квадратной сетке, расстояние между стержнями (постоянная сетки) a . Диэлектрическая постоянная стержней ϵ_m . Диэлектрическая постоянная материала ϵ_h . В данной работе рассматривается распространение монохроматических полей с временной зависимостью вида $e^{+j\omega t}$. Структура бесконечна по оси z , поэтому решение уравнений Максвелла разделяется на ТЕ (вектор электрического поля параллелен z) и ТМ (вектор магнитного поля параллелен z) случаи.

В [9] было показано, что для длин волн много больших радиуса стержней поле в композитной периодической структуре может быть описано с использованием нелокальной диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_{TM} = \epsilon_h + \frac{2\epsilon_h}{\frac{1}{f} \frac{\epsilon_m + \epsilon_h}{\epsilon_m - \epsilon_h} - 1} \tag{1}$$

$$\epsilon_{TE}(\omega, k_z) = \epsilon_h + \frac{\epsilon_h}{\frac{\epsilon_h}{(\epsilon_m - \epsilon_h)f} - \frac{\beta^2 - k_z^2}{\beta_p^2}} \tag{2}$$

где $\epsilon_{TM}, \epsilon_{TE}$ – диэлектрические проницаемости для ТМ и ТЕ поляризаций, $f = \pi R^2/a^2$ – концентрация стержней, k_z – z -компонента волнового вектора, $\beta = \omega\sqrt{\epsilon_h\mu_0}$ – волновое число в диэлектрической структуре, β_p – плазменное волновое число для идеально проводящих стержней приводится в [8]:

$$(\beta_p a)^2 \approx \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{a}{2\pi R}\right) + 0,5275} \tag{3}$$

Заметим, что в [8, 9] ур. (1) для ϵ_{TM} приводится только для стационарного предела ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$ и $\beta = 0$), тогда как ур. (2) для ϵ_{TE} выводится для динамического случая. Воспользовавшись вычислениями авторов в [8], запишем выражение для ϵ_{TM} для динамического случая:

$$\epsilon_{TM}(\omega) = \epsilon_h + \frac{\epsilon_h}{\frac{1}{2f} \frac{\epsilon_m + \epsilon_h}{\epsilon_m - \epsilon_h} - \frac{\beta^2}{\beta_p^2}} \tag{4}$$

Из ур. (2) и (4) следует, что среда обладает пространственной дисперсией. Так, диэлектрическая проницаемость зависит не только от частоты падающего света β , но и от компонента волнового вектора, параллельного стержням. Предложенная модель также действует для диэлектриков с положительной вещественной частью диэлектрической проницаемости.

Массивы наностержней в диэлектрическом цилиндре

Для проверки предложенной модели эффективной диэлектрической проницаемости мы рассмотрим рассеяние плоской волны с длиной волны 0,5 мкм на диэлектрическом цилиндре с серебряными стержнями. Как показано на рис. 1, стержни находятся в цилиндре круглого сечения с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_h = 2,25$. Радиус цилиндра во всех экспериментах был принят равным 0,5 мкм. Материал стержней – серебро ($\epsilon_m = -9,49 + 1,483i$). Для простоты мы ограничимся случаем падения волны с $k_z = 0$.

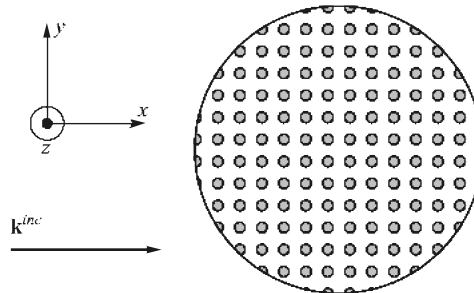


Рис. 1. Массивы наностержней в диэлектрическом цилиндре, бесконечно простирающемся по оси z

Далее, для демонстрации точности теоретических результатов, проведена серия численных экспериментов моделирования дифракции света на структуре с представленной геометрией с вариацией значений концентрации стержней f от 0 до 1 и вариацией значений радиуса стержней от 5 нм до 30 нм. Содержание стержней 100 % соответствует полностью металлическому цилиндру, содержание 0 % – полностью диэлектрическому. Выбор значений радиуса стержней был продиктован значительным отличием поляризационных характеристик маленьких и больших наночастиц [13]. Если наночастица достаточно мала ($R \ll \lambda_0$, где λ_0 – длина волны падающего света), то, в соответствии с теорией Ми, вклад в спектр поглощения дают только дипольные плазмонные колебания. Тогда как, для больших частиц вклад в спектр дают также и резонансы высокого порядка. Когда наноразмерная частица освещается светом, электрическая компонента электромагнитного поля возбуждает коллективные колебания электронной плазмы внутри частиц – плазмоны. Если частицы расположены в цепочки эти плазмонные колебания принимают резонансный характер, что облегчает прохождение волн резонансных частот. Такие цепочки исследовались в литературе [9, 14] как потенци-

альные кандидаты для субволнового волноводного распространения света.

Эффективная диэлектрическая проницаемость рассчитывалась по формулам (2) и (4). Объединенным методом МКЭГ-ГЭ проводилось моделирование дифракции плоской волны на цилиндре с вычисленной эффективной диэлектрической проницаемостью. С другой стороны, этим же методом также моделировалась дифракция на структуре с детальной геометрией стержней. Для оценки дифракционного рассеяния использована диаграмма направленности рассеяния, зависящая от угловой координаты φ и определенная в бесконечно удаленных точках ($l \rightarrow \infty$) как $\sigma(\varphi) = \lim 2\pi |u^{sc}|^2 / |u^{in}|^2$, где u^{sc} и u^{in} – рассеянное и падающее поля. В частности, рассеяние определялось в прямом ($\varphi = 0^\circ$), в обратном ($\varphi = 180^\circ$) и в поперечном направлениях ($\varphi = 90^\circ$).

TE поляризация

Рассмотрим прохождение TE поляризованного света через структуру с геометрией, представленной на рис. 1. На рис. 2 представлены зависимости от концентрации f отношения значений рассеяния TE волн σ к значениям рассеяния σ_0 диэлектрического цилиндра для расчетных углов φ для стержней радиусом 5, 10, 20, 30 нм.

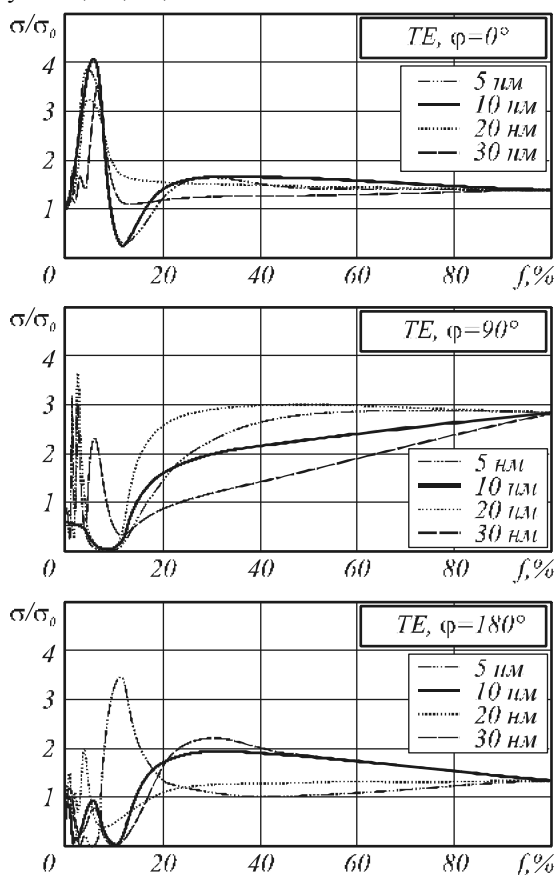


Рис. 2. Зависимость рассеяния TE волны на структуре точной геометрии от концентрации стержней f

Рассматривая зависимости рассеяния в прямом направлении можно отметить незначительное отли-

чие распределений для стержней различных радиусов. В диапазоне концентрации от 6 % до 20 % с увеличением радиуса стержней наблюдается увеличение рассеяния вперед в несколько раз. Рассеяние в поперечном направлении для стержней радиусом 5, 10 и 20 нм и концентрацией от 6 % до 12 % существенно снижается, для стержней радиусом 30 нм в данном диапазоне концентрации наблюдается обратная зависимость. Рассеяние в обратном направлении для стержней радиусом 5 и 10 нм имеет минимумы на концентрациях 3 и 11 %. Минимумы смещаются на концентрации 3 и 7 % соответственно для радиуса стержней 20 нм и 3 и 6 % для радиуса 30 нм.

На рис. 3 представлены зависимости от концентрации f отношения отклонений $\Delta\sigma$ значений рассеяния TE волн σ от значений σ_{eff} , рассчитанных на основе эффективной диэлектрической проницаемости, к значениям рассеяния σ_0 диэлектрического цилиндра для расчетных углов φ . По представленным зависимостям можно отметить рост значений отклонений с ростом радиуса стержней на всем диапазоне концентраций. Неравномерность роста можно объяснить резонансными эффектами, связанными с взаимодействием плазмонов в стержнях и зависящих от расстояния между ними.

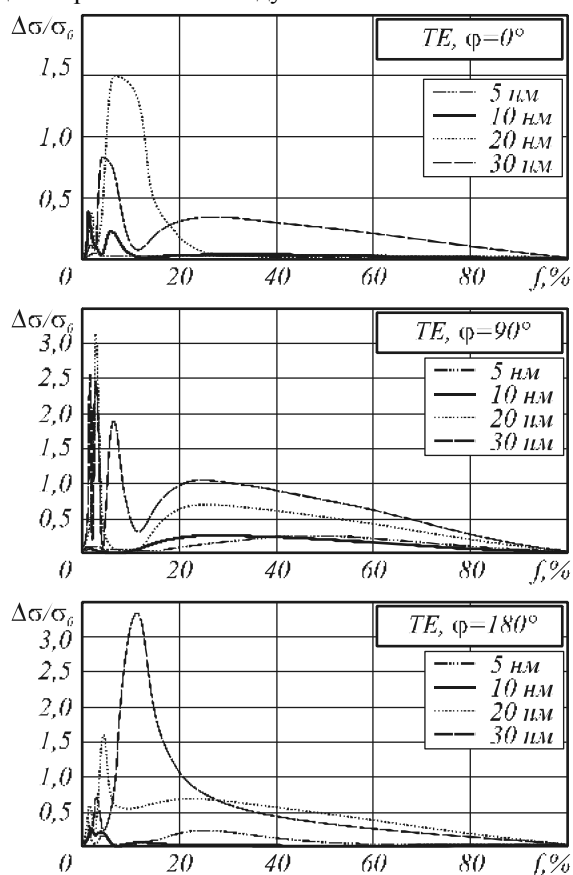


Рис. 3. Зависимость от концентрации стержней f отклонений рассеяния TE волны на структуре точной геометрии от отклонений рассеяния на структуре с эффективной диэлектрической проницаемостью

На рис. 4 представлены зависимости от концентрации f относительных отклонений $\Delta\sigma$ значений рассеяния TE волн σ от значений σ_{eff} , рассчитанных на основе эффективной диэлектрической проницаемости.

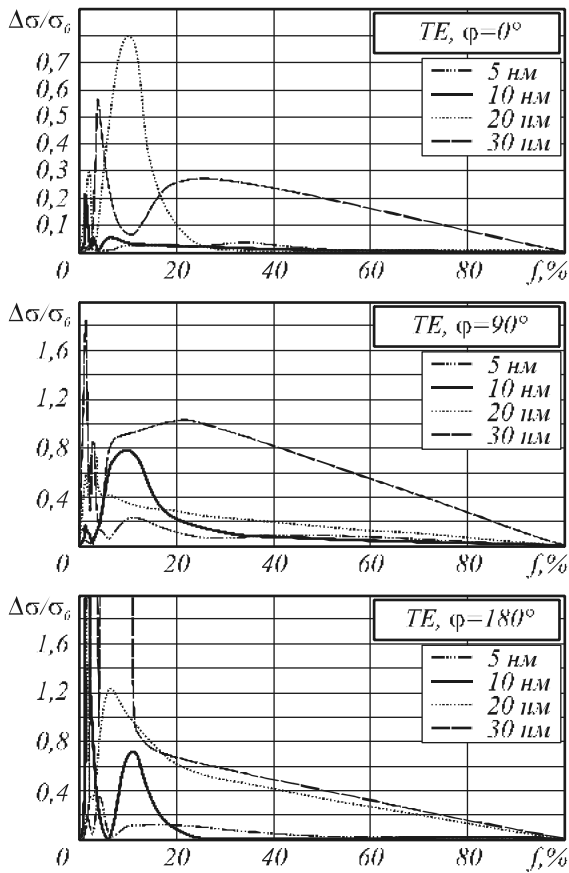


Рис. 4. Зависимость от концентрации стержней f относительных отклонений рассеяния TE волны на структуре точной геометрии от отклонений рассеяния на структуре с эффективной диэлектрической проницаемостью

Среднее по концентрации относительное отклонение представлено в таблице:

Радиус стержней	Направление рассеяния		
	$\varphi = 0^\circ$	$\varphi = 90^\circ$	$\varphi = 180^\circ$
5 нм	1 %	8 %	5 %
10 нм	2 %	16 %	13 %
20 нм	11 %	19 %	41 %
30 нм	15 %	60 %	579 %

Таким образом, из сводной таблицы следует, что для случая прохождения TE волны через массив металлических стержней в диэлектрической структуре рассматриваемая нелокальная модель однородной среды адекватно описывает среду со стержнями радиусом $R < \lambda_0/50$.

TM поляризация

Рассмотрим прохождение TM поляризованного света через рассматриваемую структуру. На рис. 5

представлены зависимости от концентрации f отношения значений рассеяния TM волн σ к значениям рассеяния σ_0 диэлектрического цилиндра для расчетных углов φ .

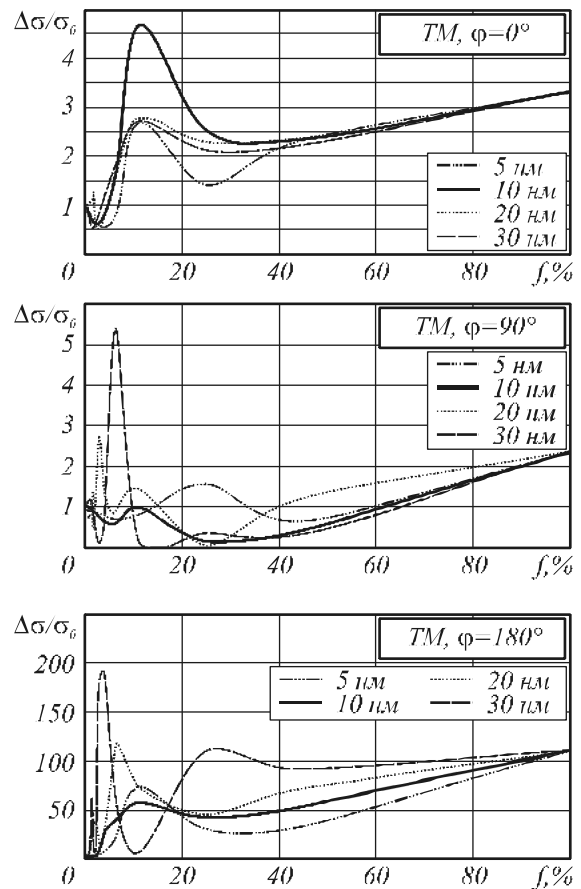


Рис. 5. Зависимость рассеяния TM волны на структуре точной геометрии от концентрации стержней f

Зависимости рассеяния в прямом направлении слабо отличаются для радиусов 5, 20 и 30 нм. Рассеяние в поперечном направлении для радиуса стержней 5 нм не имеет резонансных экстремумов. Для $R > 20$ нм появляются ярко выраженные минимумы на порядок меньшие рассеяния диэлектрической структуры. Рассеяние назад для металлической структуры на два порядка больше рассеяния назад диэлектрической структуры. При увеличении радиуса стержней до 30 нм в зависимости рассеяния назад от концентрации появляются минимумы одного порядка с рассеянием на диэлектрической структуре.

На рис. 6 представлены зависимости от концентрации f отношения отклонений $\Delta\sigma$ значений рассеяния TM волн σ от значений σ_{eff} , рассчитанных на основе эффективной диэлектрической проницаемости, к значениям рассеяния σ_0 диэлектрического цилиндра для расчетных углов φ . По представленным зависимостям не отмечается явная зависимость значений отклонений от радиуса стержней.

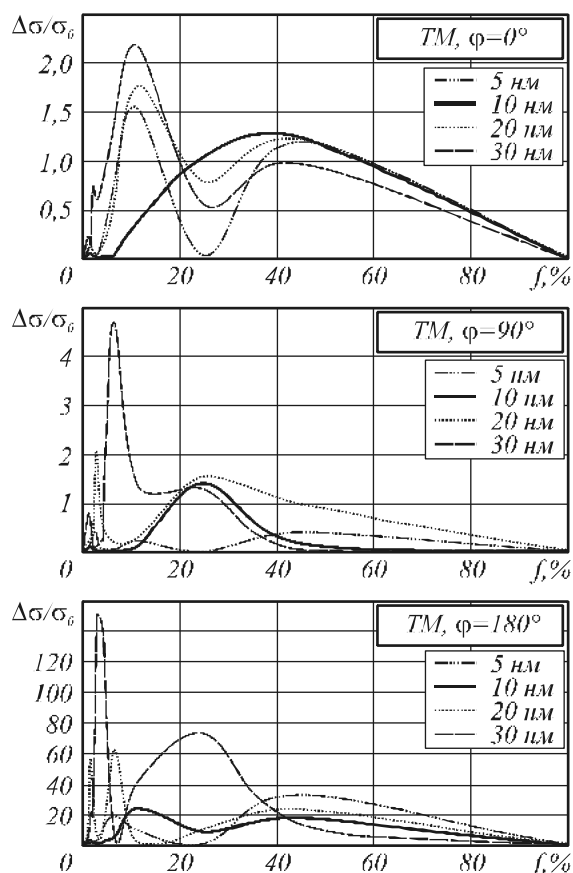


Рис. 6. Зависимость от концентрации стержней f отклонений рассеяния ТМ волны на структуре точной геометрии от отклонений рассеяния на структуре с эффективной диэлектрической проницаемостью

На рис. 7 представлены зависимости от концентрации f относительных отклонений $\Delta\sigma$ значений рассеяния ТМ волн σ от значений σ_{eff} , рассчитанных на основе эффективной диэлектрической проницаемости.

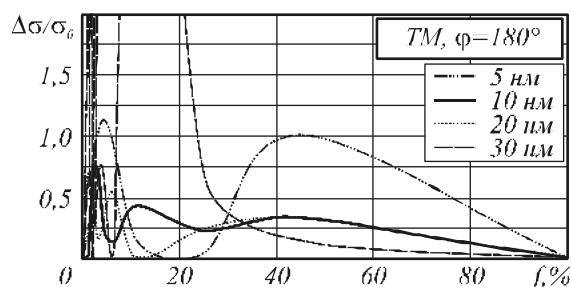
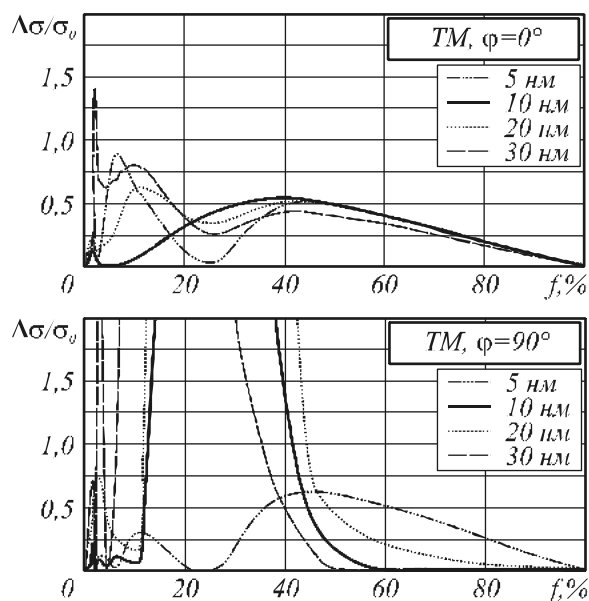


Рис. 7. Зависимость от концентрации стержней f относительных отклонений рассеяния ТМ волны на структуре точной геометрии от отклонений рассеяния на структуре с эффективной диэлектрической проницаемостью

Среднее по концентрации относительное отклонение представлено в таблице:

Радиус стержней	Направление рассеяния		
	$\varphi = 0^\circ$	$\varphi = 90^\circ$	$\varphi = 180^\circ$
5 нм	29 %	27 %	50 %
10 нм	28 %	162 %	23 %
20 нм	33 %	483 %	21 %
30 нм	34 %	169 %	106 %

Среднее относительное отклонение рассеяния для случая прохождения ТМ волны заметно больше среднего относительного отклонения в случае прохождения ТЕ волны. Можно отметить, что для концентраций $f < 1\%$ среднее отклонение не превышает 10 %, если радиус стержней меньше 20 нм.

Таким образом, рассматриваемая нелокальная модель однородной среды не может адекватно описать резонансные процессы высокого порядка, происходящие в стержнях большого радиуса. Также стоит отметить, что учет взаимодействия между наностержнями, осуществленный в модели, не полностью описывает реальные процессы. В случае малых концентраций стержней и, соответственно, большого расстояния между ними расчеты показывают низкое отклонение. С уменьшением расстояния между стержнями, погрешность увеличивается.

Заключение

В работе рассмотрена задача распространения ТМ и ТЕ поляризованного света в двумерных массивах серебряных наностержней различного радиуса и концентрации в диэлектрической структуре. Сравнение точных численных результатов с расчетами на основе нелокальной модели однородной среды для периодических массивов стержней с отрицательной диэлектрической постоянной было проведено объединенным методом МКЭГ-ГЭ. На основе сравнения были установлены границы применимости нелокальной модели.

Работа выполнена при поддержке российско-американской программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (грант CRDF RUX0-014-SA-06), и грантов РФФИ №№05-08-50298, 07-07-97600 и 08-07-99007.

Литература

1. **Abeles F.**, Optical properties of discontinuous thin films and rough surfaces of silver // Abeles F., Borensztein Y., Lopez-Rios T., -Advances in solid state physics, Braunschweig: Vieweg, 1984. Vol. 24. P. 93-117.
2. **Taleb A.**, Collective optical properties of silver nanoparticles organized in two-dimensional superlattices // Taleb A., Russier V., Courty A., Pileni M.P.,- Phys. Rev. B, 1999. Vol. 59(20). P. 13350-13358.
3. **Yannopapas V.**, Scattering and absorption of light by periodic and nearly periodic metallodielectric structures // Yannopapas V., Modinos A., Stefanou N.,- Opt. Q. Electr., 2002. Vol. 34. N.1-3. P. 227-234.
4. **Zhang W.Y.**, Robust photonic band gap from tunable scatterers // Zhang W.Y., Lei X.Y., Wang Z.L., Zheng D.G., Tam W.Y., Chan C.T., Sheng P.,- Phys. Rev. Lett., 2000. Vol. 84(13). P. 2853-2856.
5. **Maxwell-Garnett J. C.**, Colours in metal glasses and in metallic films // Maxwell-Garnett J. C.,- Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A, 1904. Vol. 203. P. 385-420.
6. **Сухов С.В.** Нанокompозитный материал с единичным показателем преломления // Квантовая электроника, 2005. В. 35. № 8.
7. **Rahachou A.I.**, Light propagation in nanorod arrays // Rahachou A.I., Zozoulenko I.V.,- J. Opt. A: Pure Appl. Opt., 2007. Vol. 9. P. 265-270.
8. **Silveirinha M.G.** Nonlocal homogenization model for a periodic array of ϵ -negative rods // Phys. Rev. E, 2006. Vol. 73. P. 046612.
9. **Silveirinha M.G.**, Subwavelength imaging at infrared frequencies using an array of metallic nanorods // Silveirinha M.G., Belov P.A., Simovski C.R.,- Phys. Rev. B, 2007. Vol. 75. P. 035108.
10. **Нестеренко Д.В.**, Анализ дифракции света на элементах цилиндрической микрооптики объединенным методом конечных элементов Галеркина и граничных элементов // Нестеренко Д.В., Котляр В.В.,- Компьютерная оптика, 2007. В. 31. №2. С. 9-15.
11. **Ahsanulhaq Q.** Controlled selective growth of ZnO nanorod arrays and their field emission properties // Ahsanulhaq Q, Kim J.H., Hahn Y.B.,- Nanotechnology, 2007. Vol. 18. N. 40. P. 485307.
12. **Yang J.**, Controlled growth of aluminium nitride nanorod arrays via chemical vapour deposition // Yang J., Liu T.W., Hsu C.W., Chen L.C., Chen K.H., Chen C.C.,- Nanotechnology, 2006. Vol. 17. N. 11. P. 321-326.
13. **Kelly K.**, The optical properties of metal nanoparticles: the influence of size, shape, and dielectric environment // Kelly K., Coronado E., Zhao L., Schatz G.,- J. Phys. Chem. B, 2003. Vol. 107. P. 668-677.
14. **Quidant R.**, Frustrated energy transport through microwaveguides decorated by gold nanoparticle chains // Quidant R., Leveque G., Weeber J.-C., Dereux A., Girard C., Weiner J.,- Europhys. Lett., 2004. Vol. 66 (6). P. 785-791.

LIGHT SCATTERING BY THE DIELECTRIC CYLINDER INCLUDING 2-D GRATING OF METALLIC NANOWIRES

D.V. Nesterenko¹, V.V. Kotlyar²
¹Image Processing Systems Institute of the RAS,
²Samara State Aerospace University

Abstract

The propagation of transverse magnetic (TM) and transverse electric (TE) polarized light in two-dimensional silver-nanorod arrays of various radii and concentration in dielectric structures is studied. Accurate numerical results are compared with results estimated by a nonlocal model of the homogeneous environment for periodic arrays of rods with negative dielectric permittivity. Strong influence of multipole light scattering is shown that can't be regarded as relevant for the considered model.

Keywords: dielectric cylinder, silver-nanorod arrays, negative dielectric permittivity, multipole light scattering.

Acknowledgements: The work was supported within the framework of the Russian-American Basic Research and Higher Education Program (grant CRDF RUX0-014-SA-06) and by the Russian Foundation for Basic Research (grants No. 05-08- 50298, No. 07-07-97600 and No. 08-07 99007).

Citation: Nesterenko DV, Kotlyar VV. Light scattering in a dielectric cylinder consisting of metallic nanorod arrays [In Russian]. *Computer Optics* 2008; 32(1): 23-28.

References

- [1] Abeles F, Borensztein Y, Lopez-Rios T. Optical properties of discontinuous thin films and rough surfaces of silver. *Advances in solid state physics*. Braunschweig: Vieweg 1984; 24: 93-117.
- [2] Taleb A, Russier V, Courty A, Pileni MP. Collective optical properties of silver nanoparticles organized in two-dimensional superlattices. *Phys. Rev. B* 1999; 59(20): 13350-13358.
- [3] Yannopapas V, Modinos A, Stefanou N. Scattering and absorption of light by periodic and nearly periodic metallodielectric structures. *Opt. Q. Electr.* 2002; 34(1-3): 227-234.
- [4] Zhang WY, Lei XY, Wang ZL, Zheng DG, Tam WY, Chan CT, Sheng P. Robust photonic band gap from tunable scatterers. *Phys. Rev. Lett.* 2000; 84(13): 2853-2856.
- [5] Maxwell-Garnett JC. Colours in metal glasses and in metallic films. *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* 1904; 203: 385-420.
- [6] Sukhov SV. Nanocomposite material with the unit refractive index. *Quantum Electronics* 2005; 35(8): 741-744.
- [7] Rahachou AI, Zozoulenko IV. Light propagation in nanorod arrays. *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* 2007; 9: 265-270.
- [8] Silveirinha MG. Nonlocal homogenization model for a periodic array of ϵ -negative rods. *Phys. Rev. E* 2006; 73: 046612.
- [9] Silveirinha MG, Belov PA, Simovski CR. Subwavelength imaging at infrared frequencies using an array of metallic nanorods. *Phys. Rev. B* 2007; 75: 035108.
- [10] Nesterenko DV, Kotlyar VV. Analysis of light diffraction on cylindrical micro-optical elements using Galerkin finite element method [In Russian]. *Computer Optics* 2007; 31(2): 9-15.
- [11] Ahsanulhaq Q, Kim JH, Hahn YB. Controlled selective growth of ZnO nanorod arrays and their field emission properties. *Nanotechnology* 2007; 18(40): 485307.
- [12] Yang J, Liu TW, Hsu CW, Chen LC, Chen KH, Chen CC. Controlled growth of aluminium nitride nanorod arrays via chemical vapour deposition. *Nanotechnology* 2006; 17(11): 321-326.
- [13] Kelly K, Coronado E, Zhao L, Schatz G. The optical properties of metal nanoparticles: the influence of size, shape, and dielectric environment. *J. Phys. Chem. B* 2003; 107: 668-677.
- [14] Quidant R, Leveque G, Weeber J-C, Dereux A, Girard C, Weiner J. Frustrated energy transport through microwaveguides decorated by gold nanoparticle chains. *Europhys. Lett.* 2004; 66(6): 785-791.