Оптика твердого тела и наноструктур

Гончар Кирилл Александрович

Тимошенко Виктор Юрьевич

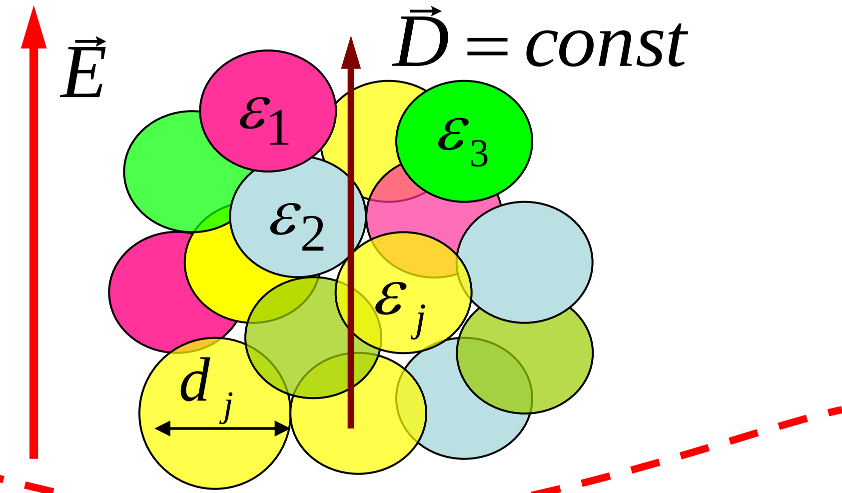
Московский Государственный Университет
им. М. В. Ломоносова, Физический факультет

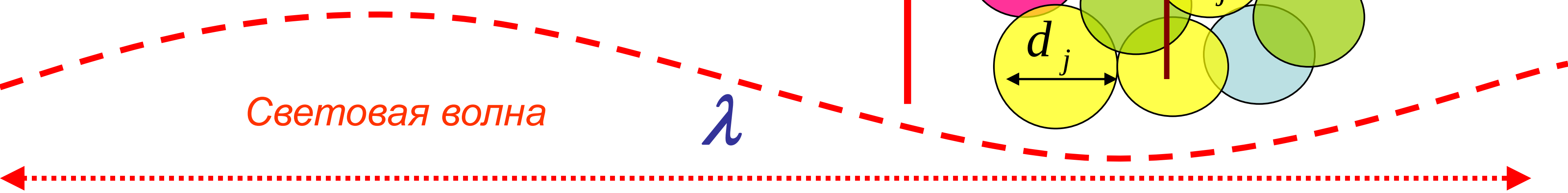
Лекция 12. Оптические явления в неоднородных твердотельных системах.

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

Оптические свойства неоднородных сред и нанокомпозитов. Концепция эффективной диэлектрической проницаемости

Многокомнонентная твердотельная гетеросистема (ГС) , состоящая из N компонент с диэлектрическими проницаемостями ε_j и размерами d_j (j =1,2,…N)





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

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

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

(система единиц СГС)

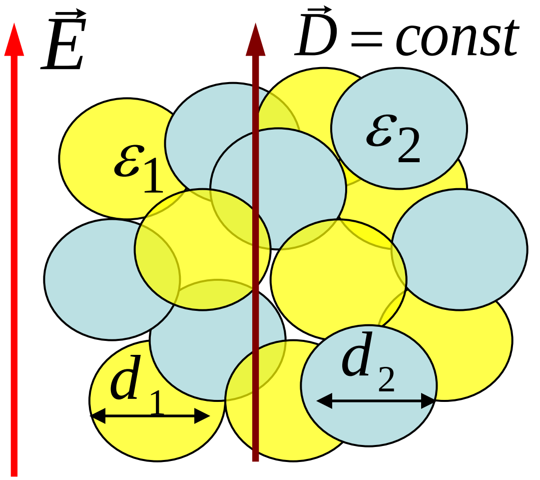
Это может быть легко сделано в электростатическом приближении: $d << \lambda$

Эффективная диэлектрическая проницаемость 2-х компонентной ГС в электростатическом приближении

$d << \lambda$

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

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



$$\langle \vec{E} \rangle \equiv \frac{1}{V}\int_V \vec{E}dV = \frac{1}{V}\int_{V_1} \vec{E}dV + \frac{1}{V}\int_{V_2} \vec{E}dV =$$

$$= f_1\langle \vec{E}_1 \rangle + f_2\langle \vec{E}_2 \rangle \Rightarrow \quad 1 = f_1\theta_1 + f_2\theta_2$$

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

Фактор поля : $\theta_{1,2} \equiv \dfrac{\langle \vec{E}_{1,2} \rangle}{\langle \vec{E} \rangle}$

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

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

Эффективная диэлектрическая проницаемость:

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

Эффективная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной гетеросистемы

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

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

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

;

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

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

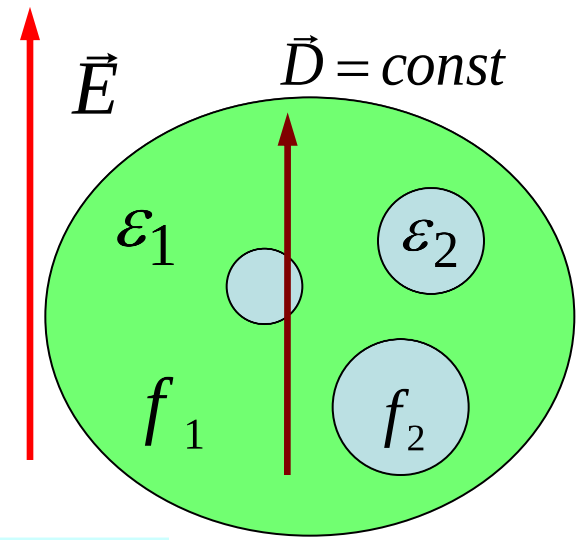
1) **матричные ГС**, в которых каждый элемент среды-включения окружен со всех сторон некоторой средой-матрицей, и взаимодействием элементов включения можно пренебречь, и
2) **статистические ГС**, для которых все компоненты среды равноправны.

Двухкомпонентная матричная ГС. Формула Максвелла.

Фактор заполнения: $f_1 >> f_2$

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

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



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

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

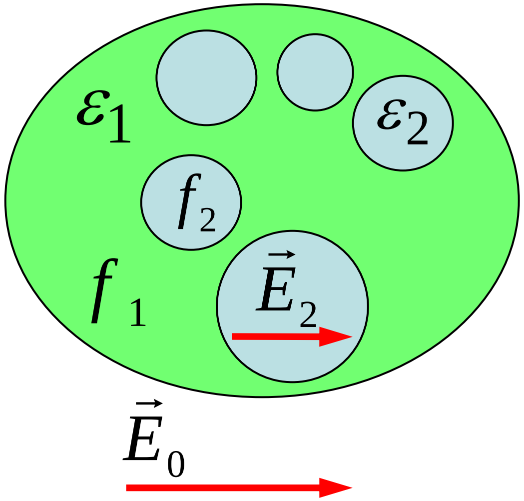
Формула Максвелла
или приближение
слабого рассеяния :

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

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

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

Фактор заполнения: $f_1 > f_2$



Локальное поле внутри включений сферической формы:

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

Поле поляризованной сферы (поле Лоренца):

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

Величина вектора поляризации среды сферического включения:

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

Полная средняя величина вектора поляризации среды включений:

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

В приближении эффективной среды:

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

***Формула Максвелла-Гарнета** :*

(справедлива для : $f_2 < 1/3$ *)*

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

Эффективная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной статистической гетеросистемы

Фактор поля для сферических включений имеет вид:

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

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

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

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

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

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

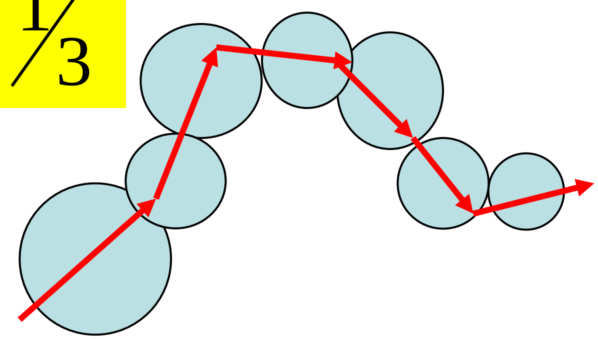
$$\vec{E}_j = \vec{E} - 4\pi \hat{L}_j \vec{P}$$

$$L_x + L_y + L_z = 1$$

для сферы: $L_x = L_y = L_z = 1/3$ для цилиндра: $L_\parallel = 0$ $L_\perp = 1/2$ $L_\parallel + 2L_\perp = 1$

Критерий протекания и свойства пористых материалов

Критерий протекания в одной из фаз: $f_j \geq 1/3$



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

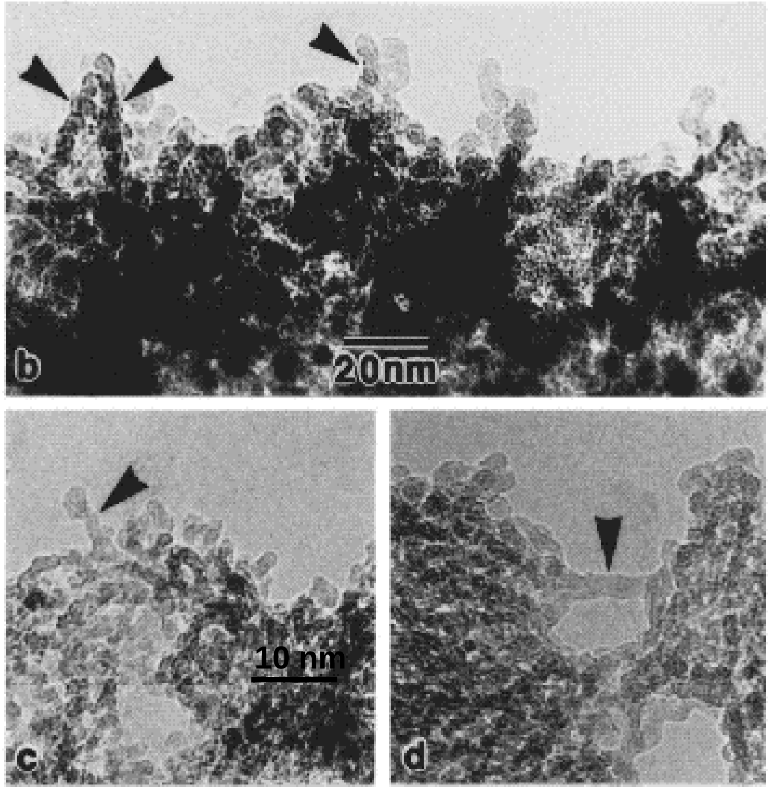
Для 2-х компонентной ГС обе фазы связанные, если : $1/3 \leq f_j \leq 2/3$

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

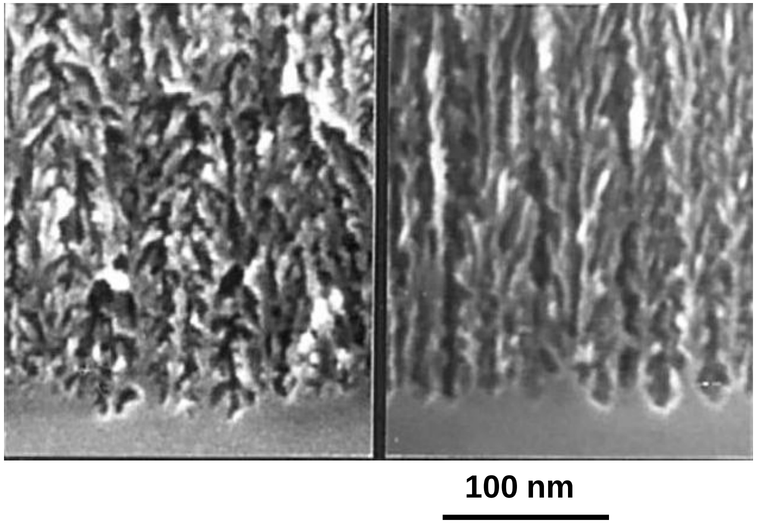
Мезо- и микропористый кремний как примеры наноструктурированных полупроводников

Вид ПК	Размер пор
Микропористый	$\leq$ 2 нм
Мезопористый	2-50 нм
Макропористый	>50 нм

Микропористый кремний



Мезопористый кремний



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

Итоги Лекции 12:

- **Эффективная диэлектрическая проницаемость описывает усредненный по пространству отклик всех компонент гетеросистемы.**
- **Электростатическое приближение используется, когда размеры неоднородности много меньше длины световой волны.**
- **Различают матричные и статистические гетеросистемы в зависимости от фактора заполнения и для их описания используют различные приближения (формулы Максвелла-Гарнета и Бруггемана).**
- **Фактор поля описывает отношение напряженности поля, усредненного в некоторой фазе, к полному среднему полю.**
- **Фактор деполяризации описывает влияние формы элементов гетеросистемы.**