

# *Фізика і хімія твердого тіла*

---

---

УДК 621.315.592

## **ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ І ТОПОЛОГІЯ НАНОКРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДУ: МОДЕЛЬНІ ПІДХОДИ**

**Г. Є. Малашкевич<sup>1</sup>, Д. М. Фреїк<sup>2</sup>, Я. С. Яворський<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Інститут молекулярної і атомної фізики НАНБ;  
Білорусь, 220072, Мінськ, проспект Незалежності, 70;  
e-mail: malash@imaph.bas-net.by*

<sup>2</sup>*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника;  
76018, Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;  
e-mail: freik@pu.if.ua*

*Виконано чисельне моделювання полів для обмеженої зони планарних двовимірних і лінійних агрегатів напівпровідникових наночастинок PbTe. Виявлено концентраційні ефекти затемнення і просвітлення у спектрах пропускання моношарів. Встановлено залежність спектральних характеристик від ступеня впорядкованості наноструктур.*

**Ключові слова:** *оптичні властивості, наноструктури, плюмбум телурид, модельні розрахунки.*

### **Зміст**

#### **Вступ**

- I. Методи чисельних розрахунків оптичних характеристик наноструктур
- II. Елементи теорії для визначення спектральних характеристик наноструктур
- III. Моделі оптичних полів у ближній зоні напівпровідникових наноструктур
- IV. Спектрально-селективні властивості нанокристалічних структур
  - 4.1. Концентраційні ефекти
  - 4.2. Розмірна залежність спектральних характеристик
- Висновки
- Література

## Вступ

Структури на основі сполук  $\text{AlVbVI}$  є перспективними вузькощілинними напівпровідниками. Прилади на їх основі функціонують в середньому інфрачервоному діапазоні, в тому числі і в перспективному для тепловачення діапазоні 8-14 мкм. Крім того, вони знаходять застосування в якості базових термоелектричних матеріалів для середньої області температур (600-850 K). При використанні цих сполук на базі гетероструктур можуть виготовлятися гетеролазери і гетеросвітлодіоди в області 4-46 мкм, фотодіоди і фототранзистори. Наноструктури на основі цих сполук перспективні для виготовлення інжекційних лазерів терагерцового діапазону. Високі значення коефіцієнта поглинання ( $103\text{-}104\text{)cm}^{-1}$  дозволяють створювати на їх основі багатоелементні матриці. Сполуки, до складу яких входить телур, є перспективними і для створення пристроїв оптичної пам'яті. Ці пристрої можуть базуватися на фазових переходах з аморфного стану в кристалічний або можуть бути засновані на морфологічних змінах у матеріалах.

У даний час накопичено досить великий обсяг інформації про властивості напівпровідникових сполук на основі телуриду свинцю, (див., наприклад, огляд [1]). Зокрема встановлено, що одним з основних факторів, що визначають робочі характеристики приладів з використанням даних елементів, є атомні дефекти базового матеріалу – вакансії, міжвузлові атоми і т.д. Відомо також, що при переході від суцільних плівок до наногранулярних і наноструктур змінюються не лише умови формування об'ємних і поверхневих дефектів в матеріалі наночастинок, але й істотно зростає роль поверхневих дефектів у порівнянні з об'ємними. Крім того, виникають топологічні дефекти наноструктур, які також стають одним з факторів, що впливають на електронні та оптичні властивості структур, особливо в ближній зоні. Однак роботи, в яких би описувалися технологічні процеси формування різних типів кристалічних топологічних структур, і спроби керування електронними та оптичними властивостями наноструктур телуриду свинцю шляхом спрямованого формування в них топологічних нанодефектів, в літературі відсутні.

Метою цієї роботи було визначення впливу топологічних особливостей напівпровідникових наноструктур  $\text{PbTe}$  на їх оптичні властивості. На основі створеної комп'ютерної програми для розрахунку ближньопольових характеристик і оптичних перетинів наночастинок агрегатів  $\text{PbTe}$  з різною топологією, досліджено спектрально-селективні властивості у видимій та інфрачервоній області спектру та виявлено стійкі кореляції між топологічними особливостями і оптичними характеристиками.

## **I. Методи чисельних розрахунків оптичних характеристик наноструктур**

Чисельні дослідження оптичних перетинів і картин розподілу ближнього поля для наноструктурних агрегатів виконувалися з викори-

станням спеціально розробленого програмного забезпечення, яке базується на застосуванні VIEF-методу, або формалізму інтегрального об'ємного рівняння [2-4]. VIEF-метод є чисельним методом, заснованим на використанні інтегральних рівнянь Максвелла. Електромагнітне поле в будь-якій точці простору описується через дипольне уявлення середовища, коли кожна точка простору з відносним показником заломлення, відмінним від одиниці, випромінює як диполь з амплітудними і фазовими характеристиками, обумовленими локальними полем і показником заломлення. При цьому напруженість електричного поля в будь-якій точці простору задається за допомогою інтегрального рівняння:

$$E_{(r_1)} = E_{(r_1)}^{in} + \frac{k^2}{(4\pi)} \iiint [m_{(r_2)}^2 - 1] E_{(r_2)} G_{(r_1, r_2)} d^3r_2, \quad (1)$$

де  $E$  означає повне поле в розглянутій точці,  $E^{in}$  – падаюче поле,  $G$  – тензорна функція Гріна,  $m$  – комплексний відносний показник заломлення.

Такий підхід застосовний до тіл будь-яких форм і внутрішніх структур і є перспективним для розрахунку характеристик розсіяння і поглинання асферичних і неоднорідних наночастинок, а також малочастинних агрегатів.

На основі викладеного підходу була розроблена спеціальна програма «VIEF-Мультимер», яка дозволяє розраховувати оптичні перетини і картини розподілу ближнього поля для планарних лінійних і нелінійних агрегатів, що складаються з частинок сферичної або циліндричної форми. Частинки сферичної форми можуть бути двошаровими, що дозволяє враховувати наявність тонких оболонок на їх поверхні. За основу була взята раніше розроблена програма «VIEF-Частинка» [5], призначена для розрахунку факторів ефективності ослаблення, поглинання і розсіяння в ближній і дальній зонах окремих частинок сферичної та циліндричної форми.

Світлина 1 дає уявлення про інтерфейс модифікованої програми «VIEF-Мультимер». Як видно, програма передбачає розрахунок факторів ефективності поглинання  $Q_{abs}$ , розсіювання  $Q_{sca}$ , ослаблення  $Q_{ext}$  і картин розподілу поля всередині мультимера і поблизу його поверхні для різного стану поляризації падаючого світла. Можлива зміна відстані між частинками в мультимері, а також їх кількості (від 1 до 7).

Розроблена програма тестувалася згідно рис.2 порівнянням результатів, отриманих для окремих сферичних частинок телуриду свинцю з розрахунками за теорією Мі [6]. При тестуванні оцінювався вплив кроку сітки розбиття на точність розрахунків і були встановлені параметри чисельного розрахунку, що забезпечують необхідну точність.

Необхідно відзначити, що, як видно з рис.2, спектральна залежність фактора ефективності ослаблення наночастинок телуриду свинцю є немонотонної, з максимумом в області 400 нм. Проведені раніше оцінки вказують на можливість виконання умови Фреліха для наночастинок

плумбум телуриду у видимій області спектра при виборі матриці з показником заломлення 1.34-3.18. Внаслідок цього, в спектрі ослаблення системи наночастинок PbTe, найімовірніше, проявляється резонанс поверхневе ослаблення.

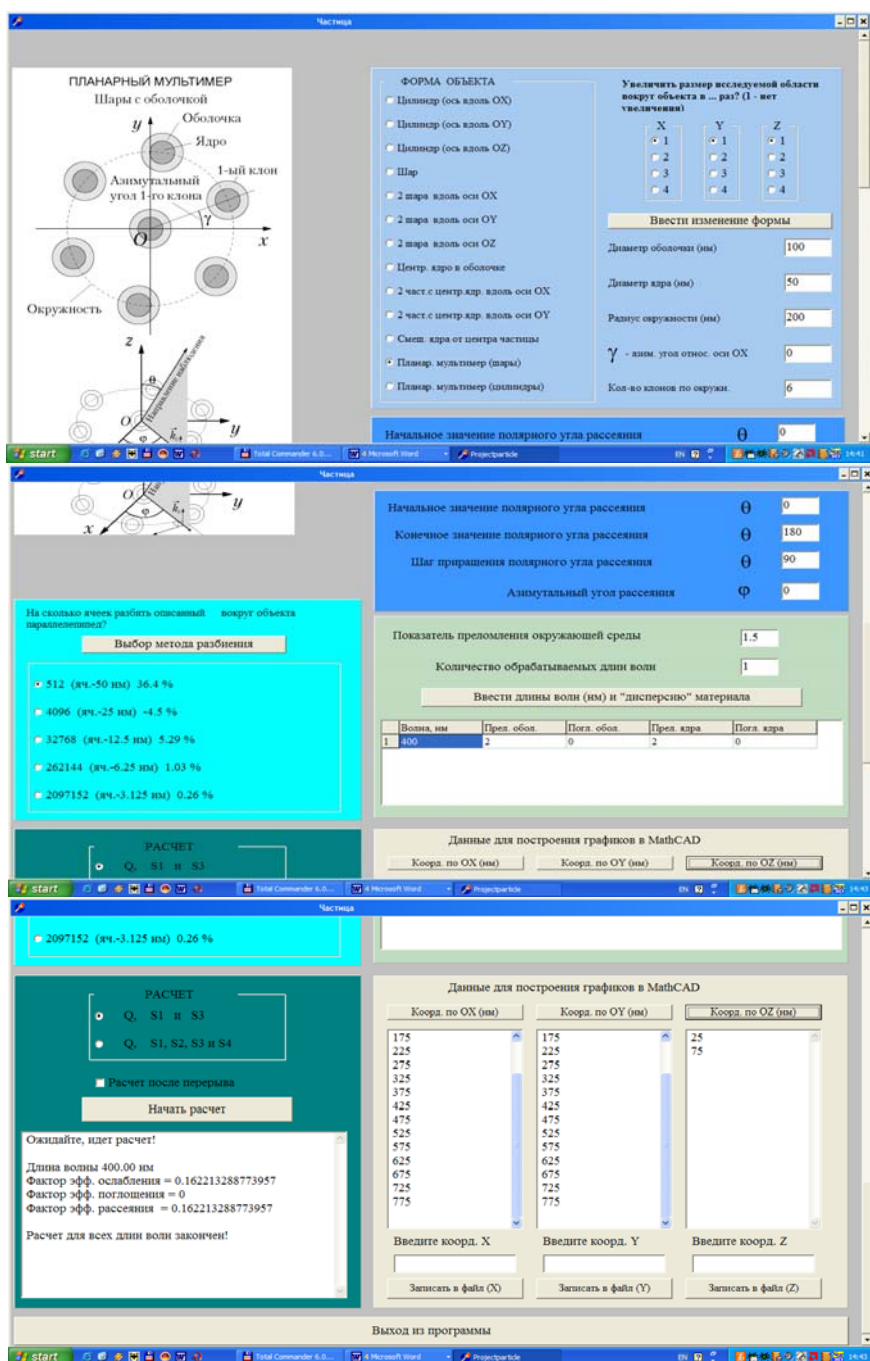


Рис. 1. Копія світлини з екрана монітора із модифікованою програмою «VIEF-Мультимер»

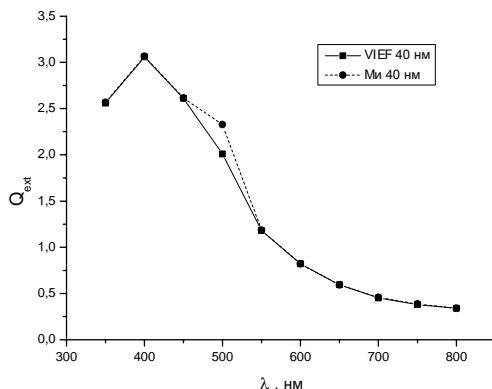


Рис.2. Порівняння результатів розрахунку спектрів фактора послаблення PbTe отриманих за формулами теорії Мі і чисельним методом VIEF

### II. Елементи теорії для визначення спектральних характеристик наноструктур

У щільноупакованих частково-впорядкованих наноструктурах можливий спектральний прояв ефектів когерентної природи [7,8]. Це обумовлено тим, що при високій концентрації частинок виникає ближній порядок, і їх місця розташування стають частково корельованими, а розсіяні ними хвилі – частково-когерентними. Збільшення щільності упаковки частинок (параметра перекриття  $\eta$ ) призводить до появи ближньої впорядкованості в їх розташуванні [9]. У залежності від спектральної області, інтерференція багаторазово розсіяних хвиль може бути як конструктивною, так і деструктивною. Це призводить до додаткового структурування спектра пропускання розсіюючої системи і до зміни спектрів її відбивання і поглинання. Найбільш істотні ефекти, пов'язані з когерентністю розсіяних хвиль, можуть проявлятися в щільноупакованих моношарах, коли мінімальний внесок некогерентного багатократно розсіяння.

Для моделювання та аналізу цих оптичних процесів необхідне застосування теорії багатократного розсіяння хвиль (ТБРХ), в якій результуюче поле представляється у вигляді суми полів всіляких багаторазово розсіяних хвиль з урахуванням їх фази, причому кожна частинка знаходиться не в полі падаючої хвилі, а в деякому ефективному полі. Тоді когерентне пропускання моношару може бути представлено у вигляді:

$$T_{\text{ког}} = \left| 1 - \frac{2\eta}{x^2} S_{\text{eff}}(0) \right|^2, \quad (2)$$

де  $S_{\text{eff}}(0)$  – ефективна амплітудна функція розсіювання окремої частки, яка в квазікристалічному наближенні задається наступним виразом:

$$2S_{\text{eff}}(0) = \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1)(c_l \pm d_l) = \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1)[a_l + b_l + c_s(a_l C_l + b_l D_l)] = 2S(0) + c_s A, \quad (3)$$

$$A = \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) [ a_l C_l + b_l D_l ]. \quad (4)$$

Тут  $x = \pi d / \lambda$  – дифракційний параметр,  $\eta$  – параметр перекриття, а  $S(0)$  – амплітудна функція розсіювання в напрямку вперед для окремої частки, розміщеної у вільному просторі. Другий доданок в правій частині виразу (3) пов'язано з ефектами когерентного взаємоперепромінення частками.

Розкриваючи формулу (2) з використанням (3), отримуємо:

$$T = 1 - \eta Q_{eff}^{ext} + \frac{4\eta^2}{x^4} [\operatorname{Re}^2 S(0) + \operatorname{Im}^2 S(0)] + \frac{16\eta^3}{\pi x^4 d^2} [\operatorname{Re} S(0) \operatorname{Re} A + \operatorname{Im} S(0) \operatorname{Im} A] + \frac{16\eta^4}{\pi^2 x^4 d^4} [\operatorname{Re}^2 A + \operatorname{Im}^2 A]. \quad (5)$$

Якщо переопромінення можна повністю знехтувати, то рівняння (5) переходить в

$$T = 1 - \eta Q_{ext} + \frac{4\eta^2}{x^4} [\operatorname{Re}^2 S(0) + \operatorname{Im}^2 S(0)]. \quad (6)$$

Цей випадок (співвідношення (6)) відповідає наближенню однократного розсіювання (НОР). У такому наближенні передбачається, що ефективне поле на кожній частці збігається з падаючим, переопромінення частками один одного відсутня і когерентні взаємодії зводяться лише до інтерференції одноразово розсіяних хвиль (кооперативні ефекти 1-го роду). НОР є непоганим наближенням для систем частинок, що мають сильно витягнуті індикатриси розсіювання в напрямку вперед. Позитивним у НОР є можливість отримання простих аналітичних співвідношень, що визначають концентраційні та розмірні області прояву цих ефектів.

Згідно НОР, концентраційна залежність (залежність від параметра перекриття) оптичної щільності моношару в максимумі гібридної смуги є немонотонною і досягає, максимуму при

$$\eta_0 = x^4 Q / 8 |S(0)|^2, \quad (7)$$

при цьому

$$T_0 = 1 - x^4 Q^2 / 16 |S(0)|^2. \quad (8)$$

Якісно немонотонний характер залежності  $T_\lambda(\eta)$  можна пояснити конкуренцією двох процесів: зменшення оптично вільного простору і інтерференція розсіяного вперед світла на зростаючій кількості розсіювачів.

Цікаво відзначити, що, згідно НОР, за певних умов може реалізуватися граничний випадок повного придушення когерентного пропускання, коли величина  $T=0$  [1]. Повне погашення реалізується в ситуації, коли падаюча і розсіяна моношаром хвилі рівні за амплітудою і протилежні за фазою. З формули НОР випливає, що повне гасіння спостерігається при одночасному виконанні умов (7) і (9)

$$16 |S(0)|^2 / x^4 Q^2 = Q. \quad (9)$$

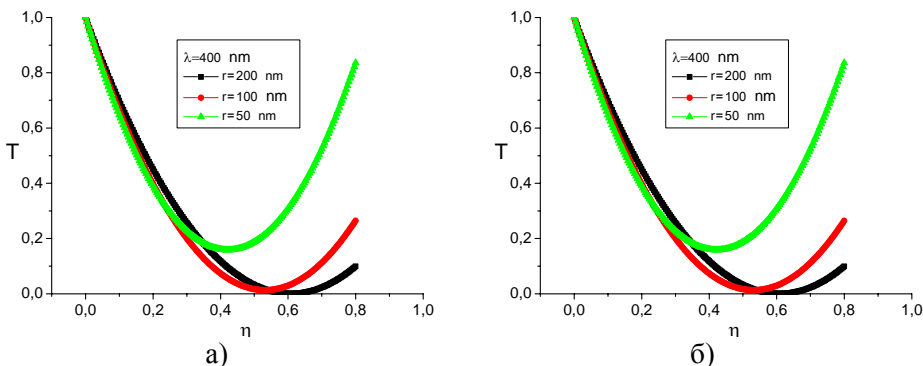


Рис.3. Залежність коефіцієнта спектрального пропускання моношару частинок РbТе різного розміру від їх поверхневої концентрації  $\lambda$ , нм: 400 (а) і 650 (б)

Рис.3 демонструє концентраційну залежність коефіцієнта спектрального пропускання моношару частинок телуриду свинцю для довжин хвиль 400 нм і 650 нм при зміні розміру часток. Як видно, у загальному випадку концентраційна залежність пропускання є немонотонною. Глибина мінімуму пропускання зростає при збільшенні розмірів частинок. Для субмікронних частинок РbТе з радіусом 200 нм при значеннях параметра перекриття порядку 0.5-0.6 виконуються умови реалізації повного інтерференційного гасіння пропускання.

### III. Моделі оптичних полів у ближній зоні напівпровідникових наноструктур

Для виявлення впливу типу агрегату на спектри ослаблення світла і картини розподілу ближнього поля розглядалися пленарні мультимерилінійні агрегати (бісфери і тримери) і нелінійні агрегати різної конфігурації. Число часток в нелінійних агрегатах змінювалося від чотирьох до семи (гептамери).

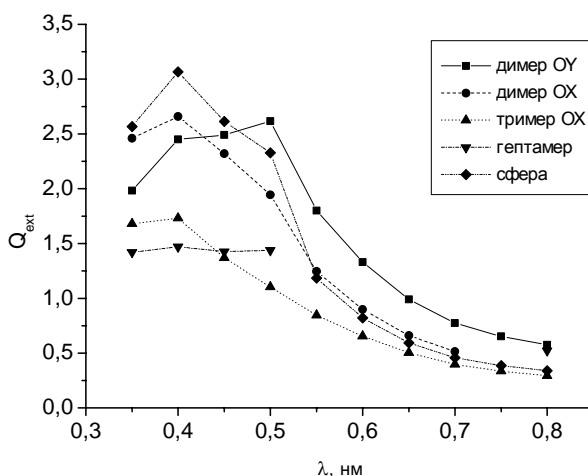


Рис.4. Спектральна залежність факторів ефективності ослаблення наночастинок плюмбум телуриду та їх агрегатів різного типу

На рис.4 для прикладу наведена спектральна залежність факторів ефективності ослаблення сферичних наночастинок плумбум телуриду з діаметром 40 нм і їх агрегатів різного типу. Показник заломлення матриці 1.6. Як видно, для лінійних агрегатів, орієнтованих уздовж напрямку поляризації падаючого поля, резонанс поверхневого ослаблення (РПО) має дублетні структури, що пов'язано з довгохвильовим зміщенням резонансу поглинання ( $\lambda \sim 500$  нм) відносно резонансу розсіювання ( $\lambda \sim 400$  нм). Для лінійних агрегатів, орієнтованих ортогонально напрямку поляризації падаючого поля, як і для окремих наносфер, резонанс присутній тільки в спектральній залежності фактора ефективності поглинання ( $\lambda \sim 400$  нм). Посилення фактора ефективності ближньопольового розсіювання досягається для окремих наночастинок в спектральній області  $\lambda \sim 500$  нм. Ця обставина, поряд із зазначеним вище впливом стану поляризації падаючого світла на інтенсивність ближньопольової взаємодії, призводить до того, що для нелінійних агрегатів резонанс поверхневого ослаблення виражений набагато слабкіше, ніж для лінійних агрегатів.

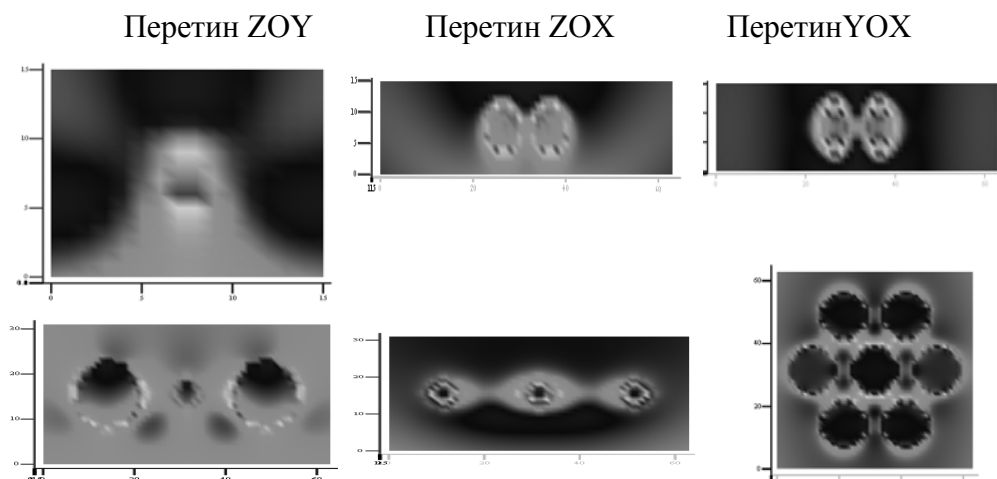


Рис.5. Вплив топології агрегату наночастинок PbTe на картину розподілу локального поля: а – димер із сферичних наночастинок, орієнтований вздовж осі OX,  $k_{\max}=1.5$ ; б – гептамер із сферичних наночастинок PbTe  $k_{\max}=2$

На рис.5 проводиться порівняння картин розподілу локального поля на довжині хвилі 400 нм для двох типів планарних мультимерів, що відрізняються топологією і числом складових їх частинок. Всі перетини проходять приблизно через центр паралелепіпеда, в який вписано розглянутий мультимер. Падаюче світло поширюється вздовж осі OZ. Електричний вектор падаючого світла спрямований по осі OY. Діаметр кожної наночастинок  $d=40$  нм, відстань між центрами частинок  $R=50$  нм., показник заломлення матриці  $n_0=1.6$ . У верхньому рядку (рис.5,а) наведено дані для димера з наночастинок PbTe сферичної форми, орієнтованого уздовж осі OX. Для цієї ситуації фактор ефективності ослаблення



$Q_{ext}=2,66$ ; фактор ефективності поглинання  $Q_{abs}=2,18$ ; фактор ефективності розсіювання  $Q_{sca}=0,48$ ; максимально досяжний коефіцієнт посилення ближнього поля  $k_{max}=1,5$ . У нижньому рядку (рис.5,б) наведено дані для гептамера з наносфери PbTe, який являє собою шість частинок, симетрично розташованих навколо центральної частинки. У цьому випадку  $Q_{ext}=1,47$ ;  $Q_{abs}=0,78$ ;  $Q_{sca}=0,69$ ,  $k_{max}=2$ .

Як видно з рис.5, в розподілі поля можна виділити характерні області локалізації «гарячих плям», тобто ділянок простору зі значними коефіцієнтами посилення локального поля. Для мультимерів обох розглянутих типів найбільш інтенсивні «гарячі плями» розташовуються поблизу площини центрального перетину, близько поверхні кожній з зовнішніх сфер, зверненої до центральної частці, у напрямку вектора поляризації падаючого світла. Близькі за своїм значенням і максимально досяжні коефіцієнти локального поля в кожному з характерних перерізів. Слід, однак, відзначити, що зі збільшенням числа частинок в агрегаті збільшується кількість «гарячих плям» в цих характерних перетинах.

Рис.6 демонструє зміну картини розподілу ближнього поля в центральних перетинах гептамера при переході з короткохвильової в довгохвильову область. Можна відзначити, що електродинамічні взаємодії проявляється найбільш сильно в короткохвильовій області спектра і слабшають при просуванні в довгохвильову область, у міру збільшення дійсної і уявної частин комплексного показника заломлення телуриду свинцю [10]. Така залежність може призводити до сильної якісної трансформації спектрів в щільно упакованих планарних наноструктурах.

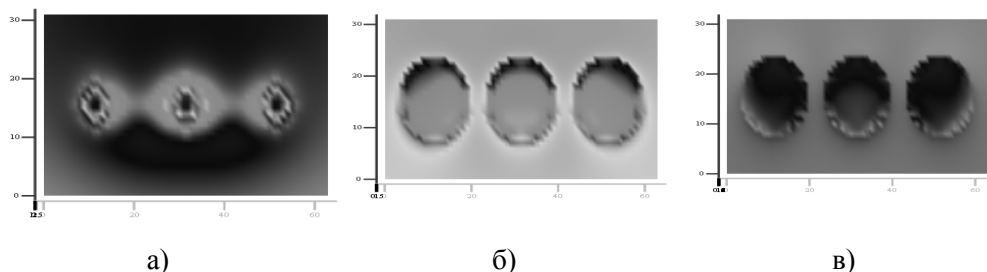


Рис.6. Вплив довжини хвилі падаючого випромінювання на картини розподілу локального поля в центральному перерізі нелінійного агрегату з 7 частинок PbTe, розташованого на площині XOY:

а –  $\lambda=400$  нм,  $n=1$ ,  $k=1,2$ ; б –  $\lambda=500$  нм,  $n=1,35$ ;  $k=2,86$ ;  
в –  $\lambda=800$  нм,  $n=3,7$ ;  $k=3$

Досліджувалися також закономірності зміни розподілу ближнього поля і оптичних перерізів для агрегатів різної топології (лінійні та нелінійні двомірні агрегати) при варіюванні розміру наночастинок телуриду свинцю, що утворюють агрегат, відстані між ними і показника заломлення матриці, в яку поміщені наночастинок. Метою такого досліджен-

ня було встановлення впливу перерахованих параметрів на електродинамічні взаємодії між близько розташованими наночастинками, що може бути причиною сильної якісної трансформації спектрів в щільноупакованих планарних наноструктурах. Дослідження проводилися для спектрального діапазону 300-450 нм, оскільки внаслідок особливостей спектральної залежності параметра виживання фотона електродинамічні взаємодії між наночастинками телуриду свинцю в агрегаті найбільш сильно проявляються в короткохвильовій області спектра і слабшають у міру просування в довгохвильову область, у міру збільшення дійсної і уявної частин комплексного показника заломлення телуриду свинцю.

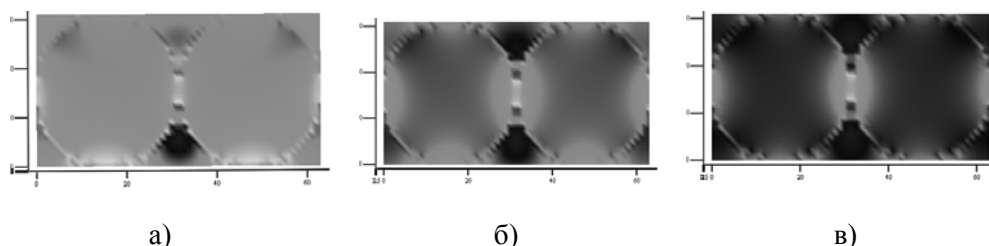


Рис.7. Димер із дотичних наносфер PbTe різного розміру, орієнтованих вздовж осі OY. Перетин ZOY, довжина хвилі 400 нм, показник заломлення матриці  $n_0=1.6$ .

а: діаметр 60 нм,  $Q_{ext}=1.027$ ,  $Q_{abs}=0.720$ ,  $Q_{sca}=0.307$ ,  $K_{max}=1.2$ ;

б: діаметр 40 нм,  $Q_{ext}=0,771$ ,  $Q_{abs}=0,612$ ,  $Q_{sca}=0.159$ ,  $K_{max}=1.5$ ;

в: діаметр 20 нм,  $Q_{ext}=0,439$ ,  $Q_{abs}=0,368$ ,  $Q_{sca}=0,070$ ,  $K_{max}=2.0$ .

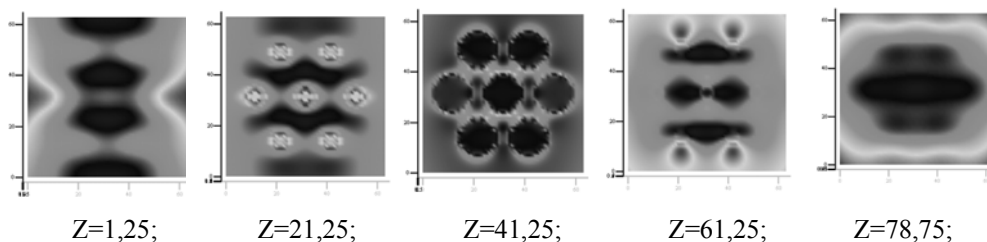


Рис.8. Гептамер із семи наносфер з діаметром 40 нм, відстань між центрами 50 нм. Довжина хвилі 400 нм,  $n_0=1,6$

Трансформація картини розподілу ближнього поля в перерізі XOY зі зміною відстані від площини, в якій розташований планарний мультимер

Для прикладу на рис.7 представлені картини розподілу локального поля для довжини хвилі 400 нм поблизу димера з двох дотичних сфер різного розміру. Всі перетини проходять приблизно через центр паралелепіпеда, в який вписано розглянутий мультимер. Електричний вектор падаючого світла, що поширюється уздовж осі OZ, спрямований по осі OY. Як видно з наведеного рисунка, у всіх розглянутих випадках найбільш інтенсивні «гарячі плями» (тобто ділянки простору зі значними коефіцієнтами посилення локального поля) розташовуються поблизу

точки дотику поверхонь наночастинок. Слід зазначити, що збільшення розміру наночастинок (в області значень 20-60 нм), показника заломлення матриці (в області значень 1-1,6) і відстаней між центрами частинок (в області значень  $R=d-2d$ ) призводить до істотного (приблизно двократному) зменшенню максимально досяжного коефіцієнта підсилення локального поля.

На рис.8 на прикладі гептамера з наночасток телуриду свинцю з діаметрами 40 нм показана типова трансформація картини розподілу ближнього поля в перерізі XOY при зміні відстані від площини, в якій розташований планарний мультимер. Як видно з малюнка, в міру віддалення від центрального перетину, відповідного значенню  $Z=40$  нм, «гарячі плями» швидко розмиваються і практично зникають при видаленні від поверхні частинок приблизно на 20 нм.

#### **IV. Спектрально-селективні властивості нанокристалічних структур**

##### **4.1. Концентраційні ефекти**

Спектральні характеристики дисперсних середовищ, до числа яких відносяться і нанокристалічні структури PbTe, формуються в результаті спільної дії селективного розсіювання та поглинання. Просторова кореляція окремих неоднорідностей призводить до необхідності додатково враховувати ще й інтерференцію багаторазово розсіяних хвиль, яка може істотно трансформувати спектральні характеристики. До виникнення часткової упорядкованості ансамблю частинок призводить, наприклад, збільшення щільності їх упаковки або забезпечення періодичності розподілу принаймні в одному з вимірів. Для теоретичного моделювання спектрально-селективних властивостей нанокристалічних планарних структур на основі PbTe з різною топологією використовувалися методи статистичної теорії багатократного розсіяння хвиль [7]. Спектри пропускання, відбивання і поглинання щільноупакованих моношарів з наночасток плюмбум телуриду розраховувалися на основі квазікристалічного наближення (ККП) [8]. Для виявлення можливості управління спектральними характеристиками за рахунок ефектів фотонного обмеження розглядалися також так звані квазіодномірні фотонні кристали, тобто планарні багатошарові системи, що складаються з по чергованих щільноупакованих моношарів наночастинок плюмбум телуриду, розділених субхвильовими по оптичній товщині діелектричними плівками. Спектральні характеристики таких квазіодномірних фотонних кристалів на основі наночасток плюмбум телуриду розраховувалися з використанням ККП в поєднанні з методом матриці переносу (метод МП-ККП) [11].

Досліджувалися закономірності зміни спектрів пропускання, відбивання і поглинання планарних наноструктур при варіюванні розміру наночастинок PbTe, щільності їх упаковки в окремих моношарах і числа цих моношарів в одновимірно-періодичних (багатошарових) системах. На рис.9 представлені спектральні характеристики моношарів наночас-

тинок п्लомбум телуриду з різними діаметрами і параметрами перекриття, поміщених у матрицю з показником заломлення 1.6. Параметр перекриття являє собою відношення площі, зайнятої частками, до площі всього моношару, тобто ця величина пропорційна поверхневій концентрації частинок. Для порівняння на малюнку приведені також спектри пропускання розрідженого зразка з тією ж кількістю частинок, розраховані за законом Бугера:  $T_{\text{Буг}} = \exp(-\eta Q_{\text{ext}})$ .

Порівняння рис.9,а та 9,б показує, що збільшення числа частинок в моношарі (зростання їхньої поверхневої концентрації) призводить до якісної трансформації спектральної залежності як пропускання, так і відбивання. Найбільш сильні зміни спостерігаються у короткохвильовій області спектра (рис.10). Крім того, як видно з рис.9,б, для щільноупакованих моношарів для наночастинок п्लомбум телуриду з розмірами 40 нм (з параметром перекриття  $\eta=0.4$ ) у всій видимій області спектра спостерігаються концентраційні ефекти затемнення, тобто із збільшенням щільності упаковки одного і того ж кількості частинок пропускання зменшується. Такий характер концентраційної залежності властивий системам часток з низьким параметром виживання фотонів. При збільшенні розміру частинок до 100 нм, коли зростає внесок розсіювання в екстинкції окремої частки, ефекти затемнення компенсуються за рахунок процесів інтерференції багаторазово розсіяного світла (рис.9,в).

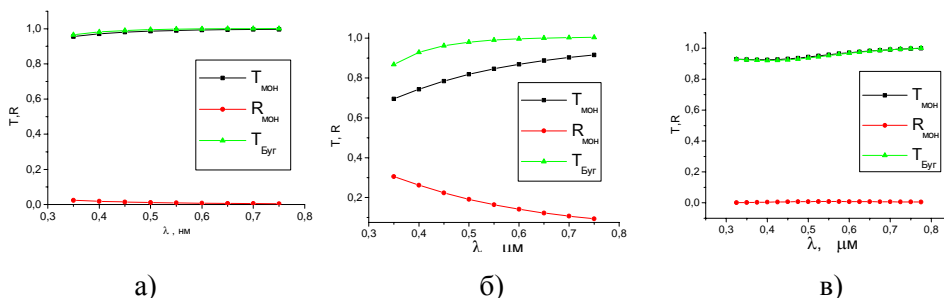


Рис.9. Спектри пропускання (а) і відбивання (б,в) щільноупакованими моношарами з наночастинок п्लомбум телуриду з розмірами 40 нм (а,б) і 100 нм (в). Параметр перекриття  $\eta=0.1$  (а), 0.4 (б,в)

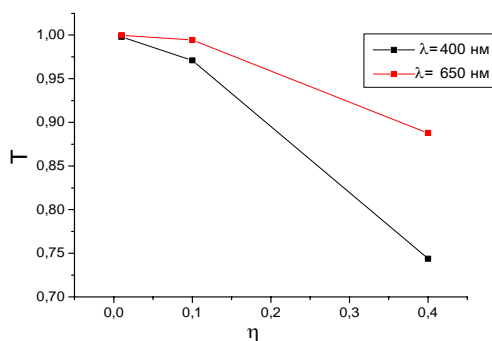


Рис.10. Залежність пропускання моношару наночастинок PbTe з діаметром 40 нм від параметра перекриття

На рис.11,а,б,в, на прикладі одновимірно-періодичних (багатошарових) систем, що містять чергуючі моношари наночастинок плумбум телуриду свинцю і тонкі діелектричні плівки, продемонстрована можливість управління спектрами поглинання ( $A=1-T-R$ ) за рахунок використання ефектів просторового обмеження. Як видно з наведених даних на рисунках, багаторазове перевідбиття випромінювання на межах моношарів одновимірно-періодичної системи призводить до значного посилення поглинання у всій видимій області спектра. При цьому максимум спектра поглинання багатошарової системи може бути зміщений відносно максимуму спектра поглинання відповідного моношара (згідно з рис.11,в), що пов'язано з селективністю коефіцієнта відбиття моношарів (згідно з рис.9,в).

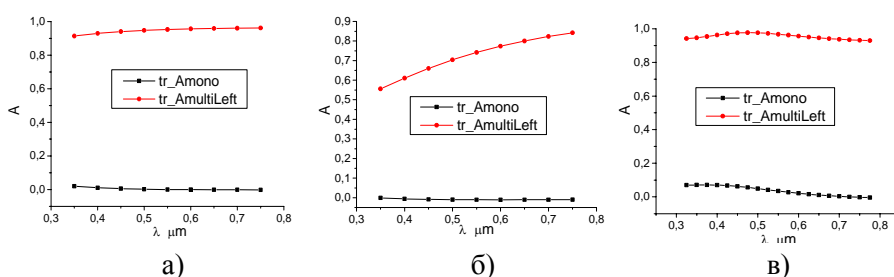


Рис.11. Спектри поглинання моно- та багатошарових систем з наночастинок плумбум телуриду з розмірами 40 нм (а,б) і 100 нм (в). Параметр перекриття  $\eta=0,1$  (а), 0,4 (б,в)

Відзначимо також, що в короткохвильовій області спектра поглинання багатолісників з розмірами 40 нм зменшується при збільшенні параметра перекриття. Мабуть, це пов'язано зі зростанням коефіцієнта відбиття окремих моношарів (рис.9,а,б), і з викликаним цією обставиною зменшенням глибини проникнення випромінювання в дисперсну систему.

#### 4.2 Розмірна залежність спектральних характеристик

Однією з причин короткохвильового зсуву межі пропускання наночастинок PbTe може бути зміна ефективності розсіювання у випадку зміни їх розміру. Для перевірки цього припущення з використанням теорії Мі були проведені розрахунки факторів ефективності поослаблення, розсіяння і поглинання частинок плумбум телуриду сферичної форми з різними розмірами.

Як видно з рис.12, для більш дрібних частинок радіусом 500 нм спектральна область найбільш значного послаблення збігається зі спектральною областю смуги поглинання плумбум телуриду. Для більш великих часток, для яких значний внесок вносить і розсіювання на частинках, істотно збільшується послаблення в довгохвильовій області спектра, за межами смуги поглинання плумбум телуриду.

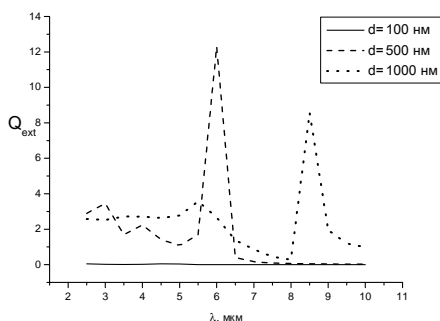


Рис.12. Спектральна залежність факторів ефективності послаблення сфер плумбум телуриду з різними розмірами

Розмірна залежність факторів ефективності послаблення, розсіювання і поглинання ( $Q_{ext}$ ,  $Q_{sca}$ ,  $Q_{abs}$ ) часток плумбум телуриду в широкій області зміни їх розмірів (100-1000 нм) наведена на рис.13.

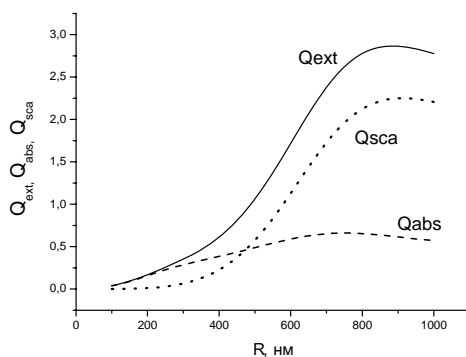


Рис.13. Розмірна залежність факторів ефективності послаблення  $Q_{ext}$ , розсіювання  $Q_{sca}$  і поглинання  $Q_{abs}$  наночастинок плумбум телуриду в матриці з показником заломлення  $n_0=1$  на довжині хвилі 5 мкм

Для кожної довжини хвилі в розглянутій області розмірів (100-1000) нм залежність фактора послаблення немонотонна. В області розмірів (100-260) нм для всього дослідженого спектрального діапазону (2.5-10) мкм фактор ефективності послаблення монотонно зростає.

Як видно з аналізу наведених рис.11-13, картина розмірної залежності оптичної щільності для монодисперсних систем (з частинок PbTe одного розміру) може бути досить складною. Це обумовлено сильною дисперсією комплексного показника заломлення плумбум телуриду в розглянутій спектральній області. Слід, однак, відзначити, що, розкид частинок за розмірами згладжує різкі екстремуми розмірної залежності усередненого фактора ефективності розсіювання і в результаті виявляється тільки загальна тенденція збільшення оптичної щільності в довгохвильовій області спектра при збільшенні середнього розміру наночасток.

### **Висновки**

Встановлено, що для планарних нелінійних агрегатів наносфери PbTe, що володіють центральною симетрією, області найбільш інтенсивного посилення локального поля розташовуються поблизу площини центрального перетину, близько поверхні кожній з зовнішніх сфер, зверненої до центральної частинки. Для лінійних агрегатів наносфери PbTe області найбільш інтенсивного посилення локального поля розташовуються поблизу точки дотику поверхонь наночастинок. Показано, що в міру збільшення числа частинок в агрегаті зростає ступінь просторової неоднорідності структури ближнього поля.

Виявлено, що для нелінійних агрегатів резонанс поверхневого ослаблення виражений набагато слабкіше, ніж для лінійних агрегатів. Для лінійних агрегатів, крім того, структура смуги ослаблення і спектральне положення резонансу поверхневого ослаблення залежать від стану поляризації падаючого світла.

Встановлено, що електродинамічні взаємодії між наночастинками в агрегаті найбільш сильно проявляються в короткохвильовій області спектра і слабшають при просуванні в довгохвильову область, у міру збільшення дійсної і уявної частин комплексного показника заломлення плюмбум телуриду;

У спектрах пропускання частково-впорядкованих щільноупакованих моношарів з наночасток плюмбум телуриду спостерігаються концентраційні ефекти затемнення і просвітлення. Зменшення розміру часток і, пов'язане з цим зменшення ймовірності виживання фотона, призводить до розширення спектральної області прояву ефектів затемнення.

Зміною розміру наночастинок плюмбум телуриду та їх щільності упаковки в моношарі можна впливати на величину і спектральну селективність поглинання одновимірно-періодичними багатошаровими системами з таких моношарів.

Виявлений вплив концентраційних ефектів затемнення і просвітлення на спектральну залежність пропускання тонких нанокристалічних шарів плюмбум телуриду може бути використано для оптимізації параметрів таких структур при вирішенні задач фільтрації випромінювання короткохвильового діапазону видимій області спектра.

Встановлена залежність ефектів просторового обмеження в періодичних багатошарових структурах на основі моношарів плюмбум телуриду від розміру наночастинок та їх щільності упаковки в моношарі може бути використана для регулювання величини і спектральної селективності поглинання випромінювання видимого діапазону.

### *Література*

1. Иванов А.П. Распространение света в плотноупакованных дисперсных средах / А.П.Иванов, В.А.Лойко, В.П.Дик. – Минск: Наука и техника, 1988. – 191 с.
2. Goodman J.J. Application of fast-Fourier-transform techniques to the discrete-dipole approximation / J.J.Goodman, В.Т.Draine, P.J.Flatau //

- Optics Letters. – 1991. – Vol. 16, № 15. – P. 1198-1200;
3. Hage J.I. Scattering from arbitrarily shaped particles: theory and experiment / J.I.Hage, J.M.Greenberg, and R.T.Wang // Appl. Optics. – 1991. – V. 30. – P. 1141-1152,
  4. Mishchenko, M.I. Scattering, absorption and emission of light by small particles / M.I. Mishchenko, L.D. Travis, A. Lacis– Cambridge: University Press, 2002. – 445 p.
  5. Верещагин В.Г. Рассеяние излучения конечными диэлектрическими цилиндрами / В.Г.Верещагин, Р.А.Дынич, А.Н.Понявина // Журн. прикл. спектр. – 1998. – Т.65, N2. – С. 256-260.
  6. Борен К. Поглощение и рассеяние света малыми частицами / К.Борен, Д.Хафмен.– Москва: Мир, 1986. – 664 с.
  7. Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах / А.Исимару. – М.: Мир, 1981. – Т.2. – 317 с.
  8. Понявина А.Н. Когерентное отражение и пропускание плотноупакованных монослоев рассеивателей / А.Н.Понявина, Н.И.Сильванович // Журн. прикл. спектр. – 1990. – Т. 53, N 2. – С. 299-305.
  9. Займан Дж. Модели беспорядка / Дж.Займан. – М.: Мир, 1982. – 391 с.
  10. Palik E.D. Handbook of optical constants of solids / E.D.Palik. – Washington: Academic Press, 1985.
  11. Понявина А.Н. Интерференционные эффекты и спектральные характеристики многослойных рассеивающих систем / А.Н. Понявина, Н.И. Сильванович // Опт.и спектр. – 1994. – Т.6, N4. – С. 648-655.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 20.12.2012 р.  
Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Рувінським М.А.,  
д.ф.-м.н., професором Стасюком І.В.(м. Львів)*

## OPTICAL PROPERTIES AND TOPOLOGY OF NANOCRYSTALLINE STRUCTURES BASED ON LEAD TELLURIDE: MODEL APPROACHES

**G. E. Malashkevych<sup>1</sup>, D. M. Freik<sup>2</sup>, Ya. S. Yavorskiy<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Molecular and Atomic Physics, NASB;  
220072, Belarus, Minsk, Independence Avenue, 70;  
e-mail: [malash@imaph.bas-net.by](mailto:malash@imaph.bas-net.by)*

<sup>2</sup>*Vasyl Stefanyk Precarpatian National University;  
76018, Ivano-Frankivsk, Shevchenko str., 57; e-mail: [freik@pu.if.ua](mailto:freik@pu.if.ua)*

*Numerical simulation of fields in a limited area of two-dimensional planar and linear aggregates of semiconductor nanoparticles PbTe. The concentration effects of the eclipse and enlightenment in the transmission spectra of monolayers. The dependence of the spectral characteristics of the degree of ordering of the nanostructures.*

**Key words:** *optical properties, nanostructure, lead telluride, model calculations.*