

01.1;06.1;11.2

Метод моделирования диэлектрической проницаемости анизотропного иерархически построенного нанокompозита с периодической структурой

© С.А. Корчагин¹, Д.В. Терин²¹ Финансовый университет при Правительстве РФ, Москва, Россия² Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия
E-mail: SAKorchagin@fa.ru

Поступило в Редакцию 12 апреля 2021 г.

В окончательной редакции 12 апреля 2021 г.

Принято к публикации 5 мая 2021 г.

Предложен метод моделирования комплексной диэлектрической проницаемости анизотропного иерархически построенного нанокompозита с периодической структурой, основанный на комплексном применении квантово-механических расчетов, модели эффективной среды и эквивалентных схем замещения. Исследована диэлектрическая проницаемость нанокompозита $\text{TiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ при воздействии внешнего высокочастотного электромагнитного излучения. Установлены диапазоны длин волн, при которых наблюдаются резонансные всплески. Показана возможность управления максимумами разностных потерь и резонансными максимумами поглощения за счет изменения геометрических параметров нанокompозита.

Ключевые слова: диэлектрическая проницаемость, нанокompозит, математическое моделирование, периодическая структура.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.16.51318.18822

Электрофизические свойства нанокompозитов (диэлектрическая проницаемость, электропроводность) с периодической структурой продолжают активно исследоваться с целью более глубокого понимания фундаментальных явлений взаимодействия электромагнитного поля с веществом и эффективного использования новых композиционных материалов в различных практических приложениях (разработка элементов микроэлектроники, оптических устройств, средств радиолокации и защиты информации и пр.) [1–4]. Компьютерное и математическое моделирование является мощным средством теоретических исследований новых функциональных нанокompозитов [5,6]. Вычислительный эксперимент позволяет эффективно спланировать геометрическую структуру и состав новых композиционных материалов с заданными электрофизическими свойствами, натурное изготовление которых является трудоемким и дорогостоящим этапом исследования [7,8].

В настоящей работе исследуется анизотропный иерархически построенный нанокompозит с периодической структурой (рис. 1), который состоит из слоев n , включающих блоки, ширина которых a с ростом номера слоя уменьшается в 2 раза. В качестве примера взят нанокompозит из двух материалов: $\text{TiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$.

В рамках исследования рассматривается взаимодействие электромагнитного поля с нанокompозитом в диапазоне длин волн 200–1000 нм. Важной особенностью исследования комплексной диэлектрической проницаемости иерархически построенных периодических структур является необходимость учета наноразмеров в одних направлениях и микроразмеров в других. Моделиро-

вание таких систем сопряжено с некоторыми трудностями, связанными с тем, что на макроскопический подход накладываются определенные ограничения (например, в том случае, когда длина волны внешнего электромагнитного излучения становится сопоставимой с размерами атомов), а квантово-механические методы моделирования слишком трудоемки и требуют высоких вычислительных мощностей.

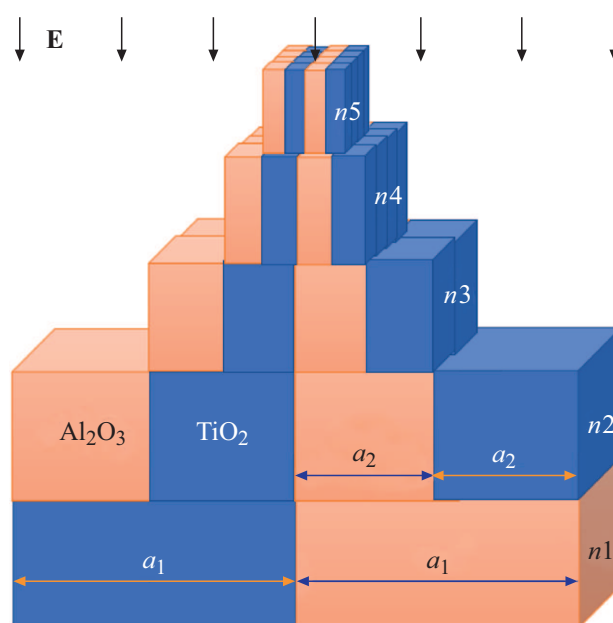


Рис. 1. Компьютерная модель нанокompозита $\text{TiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ с периодической структурой.

Метод определения диэлектрической проницаемости иерархически построенного композита с периодической структурой

Слой	Ширина a блока, входящего в слой, nm	Метод определения ϵ		
		для блока	для слоя	для всего нанокompозита
n_5	5	Квантово-механический подход	Модель эффективной среды	Метод эквивалентных схем
n_4	10			
n_3	20	Экспериментальные значения	Метод эквивалентных схем	
n_2	40			
n_1	80			

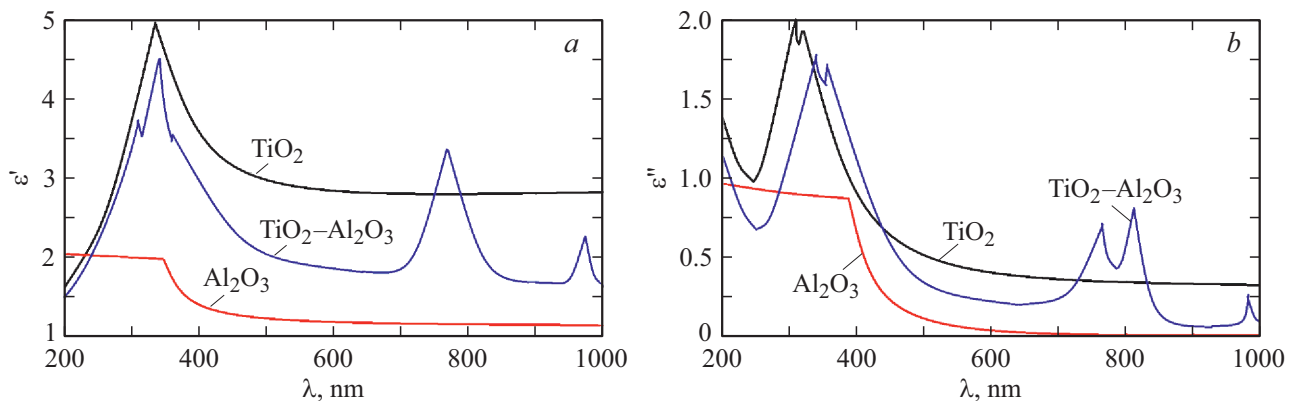


Рис. 2. Зависимости комплексной диэлектрической проницаемости (a — действительная часть, b — мнимая часть) нанокompозита с периодической структурой от длины волны электромагнитного поля.

В настоящей работе предлагается комбинированный метод определения диэлектрической проницаемости ϵ анизотропного нанокompозита с периодической структурой, который основан на комплексном применении квантово-механических расчетов, модели эффективной среды и эквивалентных схем замещения (см. таблицу).

Для моделирования диэлектрической проницаемости блоков шириной до 10 nm, где необходимо учитывать квантово-размерные эффекты, используется уравнение, предложенное в работе [9] и адаптированное для исследуемой структуры:

$$\epsilon(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{V} \sum_i \frac{Z_i}{(\omega - \omega_m + \omega_n)^2}, \quad (1)$$

где ϵ — диэлектрическая проницаемость блока, V — объем блока, $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$ — волновой вектор, ω — частота внешнего электромагнитного излучения, ω_n — частота перехода из основного состояния молекулы, ω_m — частота перехода из возбужденного состояния молекулы, Z_i — эффективный заряд моды i . Для проведения моделирования необходима информация о базе собственных волновых функций и собственных

значений гамильтониана рассчитываемых структур. Для их получения используются теория функционала плотности, программный пакет Quantum ESPRESSO и кластер на графических видеоадаптерах NVIDIA GeForce GTX 1060.

Для блоков шириной 20–80 nm в качестве исходных данных по диэлектрической проницаемости используются экспериментально полученные электрофизические свойства материалов [10].

Далее для расчета диэлектрической проницаемости слоев с блоками размером 5–40 nm применялась модель эффективной среды [11]:

$$\epsilon = \sum_{j=1}^n \epsilon_j a_j / \sum_{j=1}^n a_j, \quad (2)$$

где ϵ_j — диэлектрическая проницаемость блока j . Для определения диэлектрической проницаемости слоев с блоками шириной 80 nm и нанокompозита в целом использовались классические уравнения электродинамики и метод эквивалентных схем замещения [12].

На рис. 2 приведены зависимости диэлектрической проницаемости от длины волны внешнего электромаг-

нитного воздействия для материалов TiO_2 и Al_2O_3 , а также результаты численного моделирования диэлектрической проницаемости иерархически построенного нанокompозита с периодической структурой. Видно, что в области длин волн 350–370 nm (электронная поляризация), 750–820 nm (блоховские осцилляции) и 980–1030 nm (поверхностные эффекты) наблюдаются резонансные всплески, которые составляют спектр поглощения и разностных потерь иерархически построенного нанокompозита с периодической структурой. Варьируя геометрические параметры нанокompозита, можно управлять максимумами действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости TiO_2 – Al_2O_3 .

Представленный метод позволяет довольно полно исследовать диэлектрическую проницаемость нанокompозитов с периодической структурой, что может быть полезно при разработке новых материалов с заданными электрофизическими свойствами.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Y. Zhang, J.R. Choi, S.J. Park, *Composites A*, **101**, 227 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2017.06.019>
- [2] P.K. Mishra, *Int. J. Eng. Technol. Managem. Res.*, **5** (2), 315 (2018). <https://doi.org/10.29121/ijetmr.v5.i2.2018.663>
- [3] S. Moussa, F. Namouchi, H. Guermazi, S. Guermazi, *Mater. Sci. Eng. B*, **266**, 115035 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2020.115035>
- [4] S.A. Korchagin, D.V. Terin, Y.V. Klinaev, S.P. Romanchuk, *2018 Int. Conf. on actual problems of electron devices engineering (APEDE)* (IEEE, 2018), p. 397. DOI: 10.1109/APEDE.2018.8542433
- [5] Д.В. Стороженко, В.П. Дзюба, Ю.Н. Кульчин, *Письма в ЖТФ*, **44** (16), 75 (2018). DOI: 10.21883/PJTF.2018.16.46479.17127
- [6] Н.С. Гинзбург, М.Н. Вилков, Ю.Ю. Данилов, А.П. Коношков, Л.А. Юровский, Е.В. Иляков, И.С. Кулагин, И.В. Зотова, *Письма в ЖТФ*, **47** (4), 29 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.04.50642.18365
- [7] A. Chaurasia, A. Verma, A. Parashar, R.S. Mulik, *J. Phys. Chem. C*, **123** (32), 20059 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05965>
- [8] X. Zhang, H. Wen, Y. Wu, *Polymers*, **9** (9), 430 (2017). <https://doi.org/10.3390/polym9090430>
- [9] T. Yamamoto, H. Momida, T. Hamada, T. Uda, T. Ohno, *Thin Solid Films*, **486** (1-2), 136 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2004.11.240>
- [10] E.D. Palik, *Handbook of optical constants of solids* (Academic Press, San Diego, 1997).
- [11] Л.А. Апресян, Д.В. Власов, Д.А. Задорин, В.И. Красовский, *ЖТФ*, **87** (1), 10 (2017). DOI: 10.21883/JTF.2017.01.44011.1841
- [12] Н.А. Секушин, Н.А. Жук, Л.А. Кокшарова, В.А. Белый, Б.А. Макеев, Д.С. Безносиков, М.В. Ермолина, *Письма о материалах*, **9** (1), 5 (2019). DOI: 10.22226/2410-3535-2019-1-5-10