

Поверхностные поляритоны на границе объемный титан – вакуум

Ю.М. Александров, В.В. Яцышен

Волгоградский государственный университет
400062, Российская Федерация, г. Волгоград
Университетский пр., 100

Из первых принципов произведен расчет действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости титана. Симуляция взаимодействия света с веществом осуществлялась с помощью программы SIESTA. В работе проводится анализ частотно-угловых спектров отражения от слоя Ti в режиме НПВО с возбуждением поверхностных поляритонов.

Ключевые слова: abinitio, DFT, SIESTA, титан, комплексная диэлектрическая проницаемость, псевдопотенциал, поверхностные поляритоны, дисперсионное уравнение, частотно-угловые спектры.

В работе на основании полученной из первых принципов комплексной диэлектрической проницаемости проводится анализ частотно-угловых спектров отражения от слоя Ti в режиме НПВО с возбуждением поверхностных поляритонов при условии строгого соответствия соотношению Крамерса – Кронига для действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости [5; 6].

1. Комплексная диэлектрическая проницаемость объемного титана

С помощью программы SIESTA [1] нами были рассчитаны частотная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости объемного титана.

Моделирование структуры титана проводилось с использованием метода DFT, представленного в SIESTA. Эта программа сочетает в себе нормированные псевдопотенциалы с локальными базисными функциями. Расчеты велись в формализме приближения локальной спиновой плотности (LDA, SA) с использованием базиса орбиталей DZP с отсеканием энергий больших 300.0 ридберг. Для оптимизации структуры использовался метод молекулярной динамики сопряженных градиентов (CG). Параметр сходимости самосогласованного функционала E10-4. Параметры элементарной ячейки альфа-титана: 2.95, 2.95, 4.68, 90.0, 90.0, 120.0 (указаны длины единичных векторов в ангстремах и углы

между ними в градусах). В моделировании взаимодействия электромагнитного излучения с веществом использовался р-поляризованный свет при нормальном падении на плоскость (001) титана. Параметр уширения пиков – 0.005 эВ. Псевдопотенциалы были взяты с сайта [2].

Мнимая часть диэлектрической проницаемости получалась методом Кубо, исходя из следующей формулы (в системе единиц Хартри) [3]:

$$\text{Im}[\epsilon^0(\vec{n}, \omega)] = 2 \frac{4\pi^2}{V_{\text{cell}}} \int dk^3 \sum_i \sum_j f_i(1-f_j) \times \\ \times \frac{\left| \langle \Psi_i(\vec{k}) | \vec{\nabla} \vec{n} | \Psi_j(\vec{k}) \rangle \right|^2}{(\epsilon_j - \epsilon_i)^2} \delta(\epsilon_i - \epsilon_j \pm \omega).$$

Затем с помощью соотношений Крамерса – Кронига восстанавливалась действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости.

На рис. 1 приведены графики зависимостей действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости в среднем инфракрасном частотном диапазоне.

Из этого графика видно, что начиная с частоты 0.2550 эВ реальная часть диэлектрической проницаемости становится отрицательной. В этом случае в принципе возможно возникновение на границы сред поверхностных поляритонов нормальных возбуждений диспергирующей среды, распространяющихся вдоль ее границы раздела.

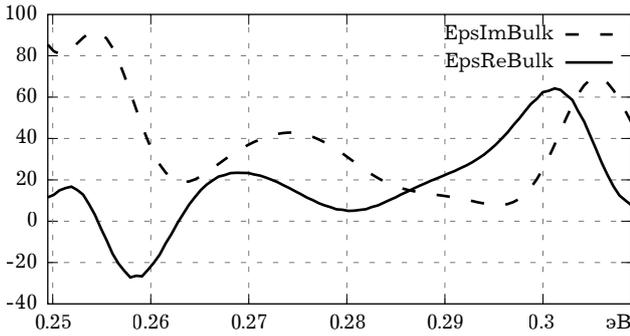


Рис. 1. Частотная зависимость действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости. По оси абсцисс отложена частота в электрон-вольтах

2. Поверхностные поляритоны

Исследуем условия существования поверхностных волн на границе среды в области отрицательных $\text{Re} \epsilon$ в соответствии с [4].

Рассмотрим случай р-поляризации. Уравнение Гельмгольца для поля H имеет вид

$$\Delta H_y + \frac{\omega^2}{c^2} \mu H_y = 0. \quad (1)$$

Поле вблизи границы для поверхностной волны имеет вид

$$\vec{H} = \vec{n}_y H_0 e^{\kappa z} e^{i(k_{\parallel} x - \omega t)}. \quad (2)$$

Подставляя это выражение в уравнение Гельмгольца, получаем для параметра затухания по оси Z выражение

$$\kappa = \pm \sqrt{k_{\parallel}^2 - k_0^2 \epsilon}, \quad k_0 = \omega / c. \quad (3)$$

Из уравнений Максвелла можно получить следующую связь между компонентами магнитного и электрического полей:

$$ik_0 \epsilon E_x = \kappa H_y. \quad (4)$$

Выбор знака перед параметром затухания определяется из условий:

$$\begin{aligned} z < 0, \quad \kappa &= +\kappa_1, \\ z > 0, \quad \kappa &= -\kappa_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Применяя граничные условия непрерывности тангенциальных составляющих электрического и магнитного полей, получаем следующие соотношения:

$$\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} + \frac{\kappa_2}{\epsilon_2} = 0. \quad (6)$$

Перенесем второе слагаемое направо:

$$\frac{\kappa_1}{\epsilon_1} = -\frac{\kappa_2}{\epsilon_2}. \quad (7)$$

Если теперь возвести в квадрат обе части этого равенства и провести несложные преобразо-

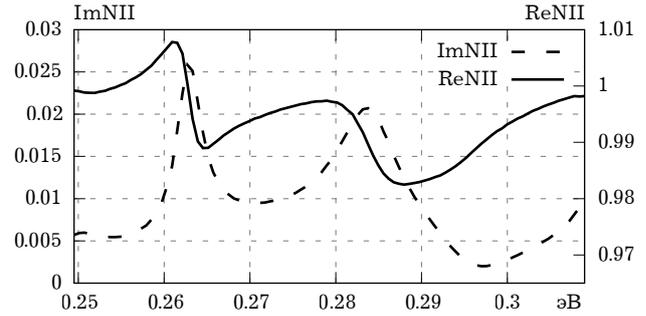


Рис. 2. Частотная зависимость действительной и мнимой частей величины N_{\parallel} – постоянной распространения поверхностной волны вдоль оси Z . По оси абсцисс отложена частота в электрон-вольтах. Правая ось ординат относится к $\text{Re} N_{\parallel}$, а левая – к $\text{Im} N_{\parallel}$

вания, то можно получить окончательно дисперсионное уравнение для поверхностных поляритонов:

$$k_{\parallel}^2 = \frac{k_0^2 \epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}. \quad (8)$$

Введем безразмерную величину:

$$N_{\parallel} = k_{\parallel} / k_0. \quad (9)$$

Тогда получим дисперсионное уравнение, выраженное через N_{\parallel} :

$$N_{\parallel}^2 = \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}. \quad (10)$$

Мы провели многочисленные расчеты по поиску областей существования поверхностных поляритонов для объемного Ti , имеющего комплексную диэлектрическую проницаемость, представленную в предыдущем разделе.

На рис. 2 приведена частотная зависимость комплексной величины постоянной распространения поверхностной волны N_{\parallel} .

3. Расчет коэффициента отражения и прохождения в режиме НПВО

Для выяснения особенностей частотной зависимости энергетических коэффициентов отражения и прохождения нами были проведены многочисленные расчеты этих величин для геометрии, изображенной на рис. 3.

Мы выбирали диэлектрическую проницаемость среды I, достаточно большую для реализации режима нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) $\epsilon_1 = 20.00$, толщина слоя воздуха равна $d_0 = 3.25$ мкм, среда III – титан. На рис. 4 и 5 приведены трехмерные графики частотно-угловых спектров отражения и прохождения из которых выбирались наиболее приемлемые условия для возбуждения поверхностного поляритона.

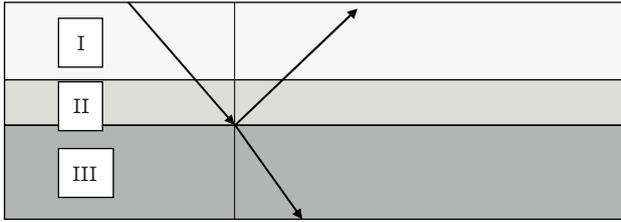


Рис. 3. Геометрия отражения электромагнитной волны: I – призма; II – воздушный слой; III – титан

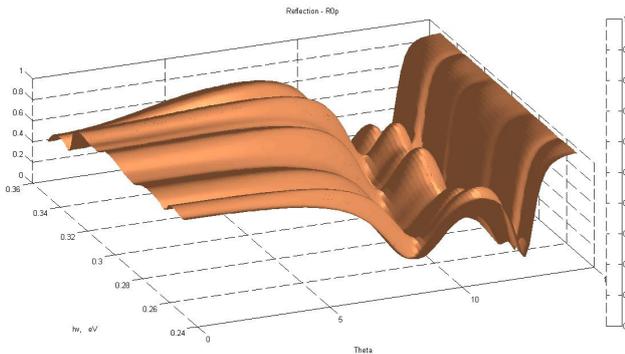


Рис. 4. Частотно-угловая зависимость энергетического коэффициента отражения R_p для геометрии отражения, показанной на рис. 3

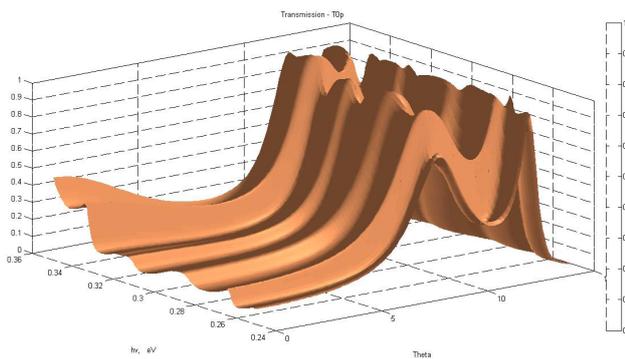


Рис. 5. Частотно-угловая зависимость энергетического коэффициента прохождения T_p для геометрии отражения, показанной на рис. 3

На рис. 6 изображена частотная зависимость энергетических коэффициентов отражения и прохождения для угла падения, являющегося характерным углом, как это будет видно из дальнейшего рассмотрения.

Из рис. 6 видно, что в области $h\nu = 0.261$ эВ наблюдается минимум коэффициента отражения и максимум коэффициента прохождения. Подчеркнем, что в рассматриваемом случае коэффициент прохождения значительно меньше коэффициента отражения. В области указанного пика наблюдается наибольшее проникновение волны в третью среду.

Нами был проведен более тщательный анализ возбуждения поверхностного поляритона вблизи частоты $h\nu = 0.261$ эВ ($\lambda = 4.75$ мкм), отвеча-

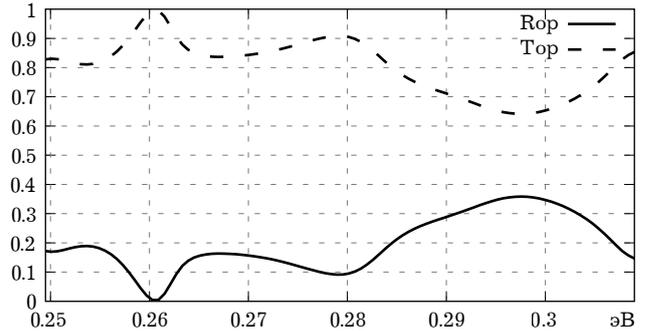


Рис. 6. Частотная зависимость энергетических коэффициентов отражения R_p и прохождения T_p для геометрии отражения, показанной на рис. 3

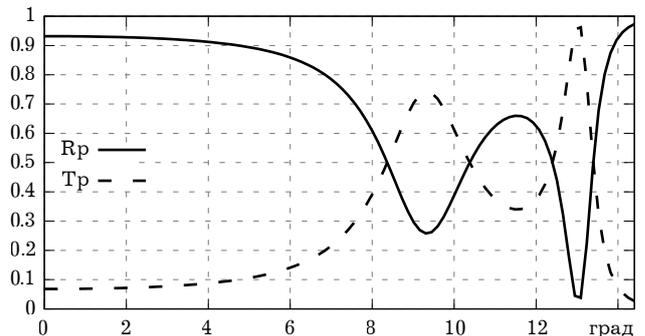


Рис. 7. Угловая зависимость энергетических коэффициентов отражения R_p и прохождения T_p для геометрии отражения, показанной на рис. 4

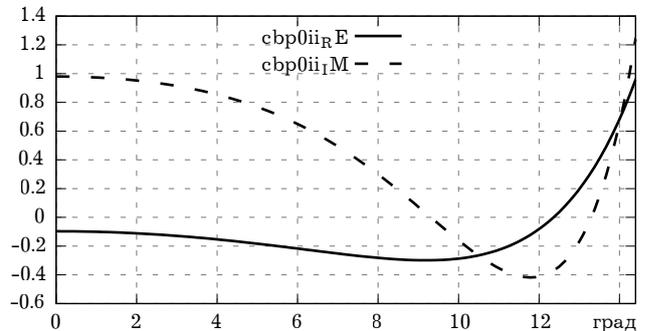


Рис. 8. Угловая зависимость действительной и мнимой частей знаменателя $cbp0ii$ комплексного коэффициента отражения r_p для р-поляризации в геометрии отражения, показанной на рис. 3

ющей пику на рис. 7. Для этого был рассчитан угловой спектр отражения в геометрии рис. 3.

На рис. 7 изображен угловой спектр энергетических коэффициентов отражения и прохождения при изменении угла падения от 0° до 15° . Все остальные параметры такие же, как и при расчете частотных спектров.

Виден пик на угле $\alpha = 13.05^\circ$. Именно при таком угле падения в геометрии рис. 4 возбуждается поверхностный поляритон. Для демонстрации этого нами был проведен расчет величины знаменателя $cbp0ii$ комплексного коэффициента отражения r_p для р-поляризации, а также моду-

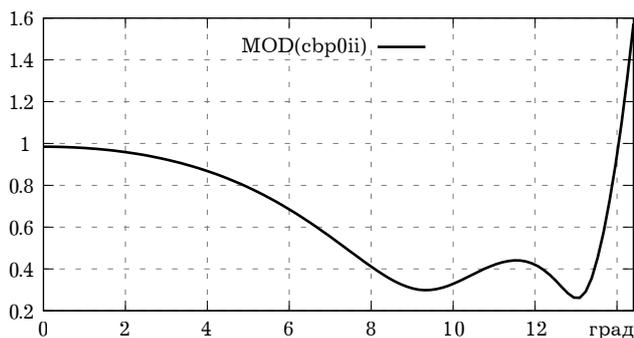


Рис. 9. Угловая зависимость модуля $MOD(sbr0ii)$ знаменателя $sbr0ii$ комплексного коэффициента отражения r_p для р-поляризации в геометрии отражения, показанной на рис. 3

ля $MOD(sbr0ii)$ этого знаменателя. На рис. 8 и 9 изображены эти величины.

Из этих рисунков видно, что пики на угловом спектре отвечают минимальным значениям модуля знаменателя коэффициента отражения. При отсутствии мнимой части диэлектрической проницаемости знаменатель обращается в нуль, и это отвечает возбуждению поверхностного поляритона. Но такой случай (обычно рассматриваемый при анализе поверхностных волн на границе) является идеализацией и не соответствует действительности, потому что действительная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости должны удовлетворять соотношению Крамерса – Кронига. В нашем расчете диэлектрической проницаемости Ti это соотношение положено в основу.

Наконец еще одним свидетельством является сравнительная зависимость величины $n_{||}$, реализуемой в геометрии рис. 3, и аналогичной величины, являющейся решением дисперсионного уравнения (10) для поверхностного поляритона

$$N_{||} = \text{Re } N_{||} + \text{Im } N_{||}. \quad (11)$$

Для $n_{||}$ имеем выражение

$$n_{||} = \sqrt{\epsilon_T} \sin(\alpha). \quad (12)$$

На рис. 10 показаны угловые зависимости указанных величин

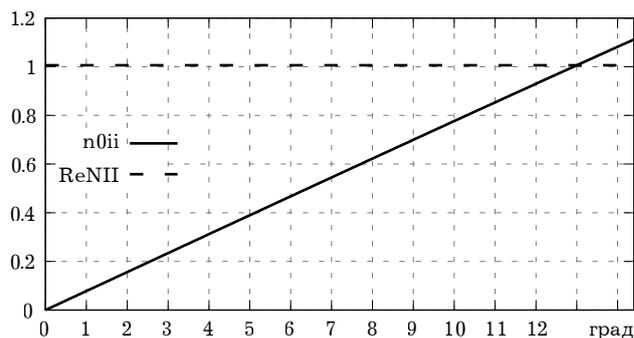


Рис. 10. Угловая зависимость величины $n0ii = n_{||}$ и $\text{Re } N_{||}$ в геометрии отражения, показанной на рис. 4

Из рис. 10 мы видим, что эти величины совпадают как раз в области угла падения $\alpha = 13.05^\circ$, т. е. реализуемая при таком угле падения величина $n_{||}$, ровно такая, которая необходима для возбуждения поверхностного поляритона.

Список литературы

1. Aleksandrov Y.M., Yatsishen V.V. Calculation of permittivity imaginary part for titanium oxide nanoparticles // NN 12 Nanoscience and Nanotechnology. 13th International Workshop on Nanoscience and Nanotechnology. 1-4 October 2012. INFN – Frascati National Laboratories Frascati, Italy. P. 116.
2. SIESTA web page [Электронный ресурс] // URL: <http://departments.icmab.es/leem/siesta/> (дата обращения: 01.10.2013).
3. SIESTA web page [Электронный ресурс] // URL: http://departments.icmab.es/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/Pseudos_LDA_Abinit/Ti_html/Ti.psf (дата обращения: 01.10.2013).
4. Александров Ю.М., Яцышен В.В. АВ INITIO расчет мнимой части комплексной электрической проницаемости наночастиц оксида титана // Вестник ВолГУ. 2012. Сер. 10. Вып. 6. С. 21–23.
5. Давыдов А.С. Теория твердого тела: учебное пособие. М.: Наука, 1976. 646 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 621 с.

Surface polaritons at the boundary of the bulk titanium – vacuum

Y.M. Aleksandrov, V.V. Yatsishen

The calculations of the real and imaginary part of complex dielectric constant of bulk Ti is produced by the first principles. Using the SIESTA program, the simulating of the interaction of light with substance is carried out. For a Ti layer the reflection frequency – angle spectra have been analyzed in the ATR configuration. The surface polaritons may be generated in this case.

Keywords: ab initio, DFT, SIESTA, titanium, dielectric constant, pseudopotential, surface polaritons, dispersion equation, frequency – angle spectra.