

- [5] Смоленский Г. А., Синий И. Г., Кузьминов Е. Г., Годовиков А. А. — ФТТ, 1979, т. 21, с. 2332.
 [6] Бредихин В. И., Генкин В. Н., Соустов Л. В. — ФТТ, 1976, т. 18, с. 1436.
 [7] Злоказов В. Б., Кобелев Л. Я., Карпачев С. В. — ДАН СССР, 1981, т. 259, с. 344.
 [8] Буцко Н. И., Крушельницкая Т. Д., Набитович И. Д. — В кн.: Физ. электроника. Львов, 1979, в. 18, с. 13.
 [9] Кулаковский В. Д., Пикус Г. Е., Тимофеев В. Б. — УФН, 1981, т. 135, с. 237.
 [10] Уер Н. Н., Вобб Л. С., Лейсовитц И., Девер В. С. — *Ferroelectrics*, 1973, v. 5, p. 207.
 [11] Гурзан М. И., Головей М. И., Боднар М. П., Чепур О. В. — Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1975, т. 18, с. 1349.

Поступило в Редакцию 9 апреля 1985 г.

УДК 535.2+535.012.01

Опт. и спектр., т. 59, в. 6, 1985

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАДИСПЕРСНОЙ МАТРИЧНОЙ СМЕСИ

Уоскин А. И., Попова О. А.

Интерпретация оптических свойств матричных смесей, т. е. сред, состоящих из отдельных частиц-микровключений, погруженных в матричную среду, традиционно проводится в рамках моделей эффективной изотропной среды [1-3]. В то же время хорошо известны экспериментальные ситуации, при которых расстояния между частицами-включениями различны в разных направлениях [4], либо частицы с анизотропной поляризуемостью имеют преимущественную ориентацию вдоль какой-либо оси [5, 6]. В роли такой оси может выступать нормаль к поверхности роста кристалла или пленки, либо нормаль к границам блоков.

В настоящей работе изучено влияние анизотропии такого рода на эффективную диэлектрическую постоянную матричной смеси, структурные параметры которой много меньше длины световой волны.

Рассмотрим систему включений с диэлектрической постоянной $\bar{\epsilon}_n$, погруженных в среду с диэлектрической постоянной ϵ_0 ($\bar{\epsilon}_n$ и ϵ_0 — в общем случае комплексные величины). Предположим, что включения представляют собой эллипсоиды вращения, центры которых расположены в узлах тетрагональной решетки с параметром c вдоль оси симметрии C_4 и параметром a вдоль осей C_2 . Поскольку механизм образования матричной смеси, как правило, предполагает наличие единственного преимущественного направления, естественно предположить, что оси вращения эллипсоидальных частиц параллельны оси C_4 модельной решетки.

При наличии анизотропии локальное электрическое поле E^* , действующее на частицу при распространении световой волны, может существенно отличаться от поля, определяемого поправкой Лорентца [7, 8], за счет появления добавочного слагаемого $\gamma C f_2(\bar{\epsilon}_2, L) E^*$, где γ — коэффициент, зависящий от степени структурной анизотропии $\xi = c/a$, C — объемная концентрация включений в смеси, $f_2(\bar{\epsilon}_2, L) = (\bar{\epsilon}_2 - 1) / [(\bar{\epsilon}_2 - 1)L + 1]$ — функция, определяющая зависимость поляризуемости эллипсоидальной частицы от ее формы [9] (от которой зависит значение деполаризующего фактора L) и от относительной диэлектрической постоянной $\bar{\epsilon}_2 = \bar{\epsilon}_n / \epsilon_0$. Уравнение для локального поля, действующего на частицу, имеет вид

$$E^* = E + \frac{1}{3} C f_2(\bar{\epsilon}_2, L) E^* + \gamma C f_2(\bar{\epsilon}_2, L) E \equiv E + \beta C f_2(\bar{\epsilon}_2, L) E^*, \quad (1)$$

где E — среднее макроскопическое поле в среде, $\beta = 1/3 + \eta$. Вычисление с помощью уравнения (1) эффективной диэлектрической постоянной матричной смеси $\bar{\epsilon}_{\alpha\beta}$ приводит к соотношению

$$\frac{\bar{\epsilon} - 1}{(\bar{\epsilon} - 1)\beta + 1} = C \frac{\bar{\epsilon}_2 - 1}{(\bar{\epsilon}_2 - 1)L + 1}, \quad (2)$$

где $\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}_{\alpha\beta}/\bar{\epsilon}_0$. Полученное соотношение носит более общий характер, чем известные соотношения Максвелла—Гарнетта [3], Давида—Шопшера [1], Беттхера [2] (для случая малых концентраций) и другие, которые могут быть получены как частные случаи из соотношения (2) при конкретных значениях β и L .

Определим зависимость коэффициента β от степени анизотропии ξ для различных компонент поляризации. В соответствии с определением β , следующим из уравнения (1), данный коэффициент зависит от суммы электрических полей, создаваемых в центре сферы диполями [9], расположенными в узлах тетрагональной решетки. Проводя суммирование внутри сферы радиусом $r = Na$ для случаев, когда электрическое поле перпендикулярно оси C_4 и параллельно этой оси, соответственно получим

$$\beta_a = \frac{1}{3} + \frac{\xi}{4\pi} \sum_{i,j,k} \frac{2k^2 - j^2 - (\xi i)^2}{|(\xi i)^2 + j^2 + k^2|^{3/2}}, \quad \beta_c = \frac{1}{3} + \frac{\xi}{4\pi} \sum_{i,j,k} \frac{2(\xi i)^2 - j^2 - k^2}{|(\xi i)^2 + j^2 + k^2|^{3/2}}. \quad (3)$$

Здесь i, j, k — целые (положительные и отрицательные) числа. Пределы суммирования определяются условием $0 < (\xi i)^2 + j^2 + k^2 \leq N^2$. Результаты численного суммирования для сферы с относительным радиусом $N = r/a = 20$, заключающей внутри себя $\sim 3.4 \cdot 10^4/\xi$ диполей, представлены на рис. 1. Для кубической решетки ($\xi = 1$), как и следует ожидать, $\beta_a = \beta_c = 1/3$. Из рис. 1 видно, что при $\xi > 2$, а также при $\xi < 0.5$ β_a и β_c достигают весьма больших положительных и отрицательных значений. Это означает, что даже в случае изотропных диполей соответствующие компоненты тензора приведенной диэлектрической постоянной $\bar{\epsilon}_a$ и $\bar{\epsilon}_c$ могут существенно отличаться — эффективная среда приобретает оптические свойства одноосного кристалла.

Укажем ряд обстоятельств, упрощающих расчеты. Так, комбинируя суммы (3), нетрудно показать, что

$$\beta_c + 2\beta_a = 1. \quad (4)$$

Благодаря этому становится достаточным проводить суммирование лишь для одной из компонент поляризации. Кроме того, расчеты показывают, что зависимость $\beta_{a,c}$ от ξ можно приближенно описать следующими соотношениями:

$$\beta_a \approx \frac{\xi}{3}, \quad \beta_c \approx 1 - \frac{2}{3}\xi \quad (5)$$

при $\xi \geq 1$ и

$$\beta_a \approx \frac{3\xi^2 - 1}{6\xi^2}, \quad \beta_c \approx \frac{1}{3\xi^2} \quad (6)$$

при $\xi \leq 1$.

Относительная погрешность этих соотношений при расчете $\beta_{a,c}$ не превышает 15 % (для положительных ветвей β). Заметим также, что суммы (3) довольно быстро сходятся. Это иллюстрируют приведенные на рис. 2 зависимости абсолютной ошибки $\Delta\beta_a$ при вычислении β_a от размера сферы N , внутри которой проводится суммирование. Как видно из графика, при расчете достаточно учитывать вклад от диполей, находящихся на расстоянии $r \leq (3-5)a$. Медленнее сходятся суммы, соответствующие большим значениям ξ .

Таким образом, уравнение (2) совместно с соотношениями (3)–(6) позволяют определять компоненты тензора диэлектрической постоянной $\bar{\epsilon}_a$ и $\bar{\epsilon}_c$ для эффективной среды с параметром анизотропии ξ при известной форме частиц. Последняя в свою очередь определяет входящие в соотношение (2) факторы деполяризации L_a и L_c , которые связаны между собой соотношением $L_c + 2L_a = 1$ [9]. Оценки

указывают на возможность достижения существенного двуупреломления Δn в исследуемой системе. Действительно, из соотношений (2), (4) имеем

$$\Delta \bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}_c - \bar{\epsilon}_a = C (\bar{\epsilon}_2 - 1)^2 \frac{3Q_a - 1 + C}{(\bar{\epsilon}_2 - 1)^2 Q_a (1 - C - 2Q_a) + (\bar{\epsilon}_2 - 1) (1 - C - Q_a) + 1}, \quad (7)$$

где $Q_a = L_a - C\beta_a$. Примеры расчета с помощью соотношений (5)–(7) величины двуупреломления $\Delta n \approx \Delta \bar{\epsilon} \sqrt{\bar{\epsilon}_0}/2$ в зависимости от степени анизотропии ξ (при

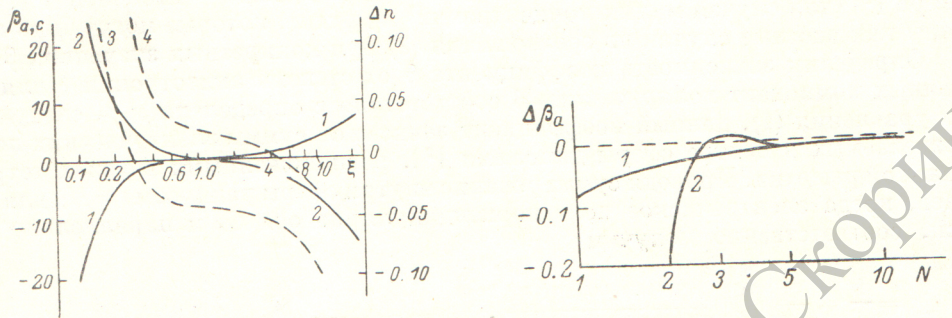


Рис. 1. Зависимости $\beta_a(\xi)$ (1), $\beta_c(\xi)$ (2) и $\Delta n(\xi)$ (3, 4).
Кривые 3, 4 рассчитаны для $C = 0.05$, $\epsilon_B = 10$, $\epsilon_0 = 2$, L_a : 3—0.2, 4—0.4.

Рис. 2. Зависимости $\Delta \beta_a(N)$ (кривые проведены условно).
 ξ : 1—0.2; 2—5.

и $\bar{\epsilon}_2 = 0$) рассмотрены на рис. 1, откуда следует, что знак Δn может быть изменен за счет дипольного взаимодействия в анизотропной системе частиц. Так, для первого из рассмотренных случаев $\Delta n = 0.05$ при $\xi = 0.2$, в то время как при изотропном распределении частиц ($\xi = 1$) $\Delta n = -0.04$. Это означает, что так называемое двойное лучепреломление «формы» [5] может подавляться двойным лучепреломлением «структуры». Таким образом, следует заключить, что при исследовании матричных смесей необходимо одновременно учитывать оба указанных эффекта. Это позволяют осуществить полученные выше соотношения.

Литература

- [1] Розенберг Г. В. Оптика тонкослойных покрытий. М., 1958. 570 с.
- [2] Якобсон Р. — В кн.: Физика тонких пленок. М., 1978, т. 8, с. 61.
- [3] Webman I., Jorther J., Cohen M. H. — Phys. Rev. B, 1977, v. 15, N 12, p. 5712.
- [4] Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М., 1974. 384 с.
- [5] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М., 1970. 856 с.
- [6] Chassagne G. — In: Defects in Insulating Crystals (Proceedings of the International Conference. Riga, 18–23 V 1981). Riga, 1981, p. 393–410.
- [7] Слатер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы. М., 1969. 647 с.
- [8] Кизель В. А. Отражение света. М., 1973. 352 с.
- [9] Браун В. Диэлектрики. М., 1961. 326 с.

Поступило в Редакцию 22 мая 1985 г.