

FDTD방법에 의한 Au-CdTe복합나노재료의 산란특성

안영신, 리명일, 한영수

최근 나노결정의 제조기술이 급속히 발전함에 따라 한가지 나노재료가 아니라 두가지 이상의 복합나노재료를 제조하여 응용하기 위한 연구가 많이 진행되고있다. 특히 금나노립자와 반도체량자점은 그 광학적특성으로 하여 여러 분야에 광범히 리용되고있으며 금속과 반도체재료들로 이루어진 새로운 나노재료들을 제조하여 그 효과성을 높이고있다.[1-3]

론문에서는 CdTe량자점과 Au-CdTe복합나노재료의 광학적특성을 시공간유한계차법(FDTD방법)으로 모의하고 실험값과 비교평가하였다.

1. 이론적기초

Au와 CdTe는 균일한 구모양의 립자라고 보고 미산란을 리용하여 Au-CdTe의 산란특성을 고찰하자.

산란파는 전자기마당속에서 다음과 같이 표시된다.

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \nabla \times (\mathbf{r}\mathbf{v}) + \left(\frac{i}{mk} \right) \nabla \times \nabla \times (\mathbf{r}\mathbf{u}) \\ \mathbf{H} &= m \left[-\nabla \times (\mathbf{r}\mathbf{u}) + \left(\frac{i}{mk} \right) \nabla \times \nabla \times (\mathbf{r}\mathbf{v}) \right] \end{aligned}$$

여기서 m 은 매질의 복합굴절률이다.

한편 미산란리론에 의하면 립자로부터의 산란파는 다음과 같다.[4]

$$\begin{aligned} u &= e^{i\omega t} \cos \varphi \sum_{n=1}^{\infty} \left[-a_n (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos \theta) h_n^{(2)}(kr) \right] \\ v &= e^{i\omega t} \sin \varphi \sum_{n=1}^{\infty} \left[-b_n (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} P_n^1(\cos \theta) h_n^{(2)}(kr) \right] \end{aligned}$$

여기서 r, θ, φ 는 구자리표계, ω 는 진동주파수, $P_n^1(\cos \theta)$ 는 르장드르다함식, a_n, b_n 은 모드의 진폭을 표시하는 결수, $h_n^{(2)}(x)$ 는 제2종의 베셀함수로부터 유도된 구베셀함수이다.

a_n 과 b_n 은 경계조건으로부터

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{m \psi_n(mx) \psi_n^2(x) - \psi_n(x) \psi_n^2(mx)}{m \psi_n(mx) \xi_n^2(x) - \xi_n(x) \psi_n^2(mx)}, \\ b_n &= \frac{\psi_n(mx) \psi_n^2(x) - m \psi_n(x) \psi_n^2(mx)}{\psi_n(mx) \xi_n^2(x) - m \xi_n(x) \psi_n^2(mx)}. \end{aligned}$$

여기서 $\psi_n(x)$ 와 $\xi_n(x)$ 는 베셀함수이다.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\pi\epsilon}{2}} J_{n+1/2}(x), \quad \xi_n(x) = \sqrt{\frac{\pi\epsilon}{2}} H_{n+1/2}^2(x)$$

이로부터 산란세기는 다음과 같이 표시된다.

$$F(\theta, \varphi) = |S_1^2(\theta)| \sin^2 \varphi + |S_2^2(\theta)| \cos^2 \varphi$$

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \theta) + b_n \tau_n(\cos \theta)]$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [b_n \pi_n(\cos \theta) + a_n \tau_n(\cos \theta)]$$

$$\pi_n(\cos \theta) = \frac{1}{\sin \theta} P_n^1(\cos \theta), \quad \tau_n(\cos \theta) = \frac{d}{d\theta} P_n^1(\cos \theta)$$

소광률은 $\theta=0$ 에서 다음과 같다.

$$Q_{\pm} = \frac{4}{x^2} \operatorname{Re}[S_1(0)] = \frac{4}{x^2} \operatorname{Re}[S_2(0)] = \frac{4}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}[b_n + a_n]$$

산란률은

$$Q_{\text{산}} = \frac{1}{x^2} \int_0^x [|S_1^2(\theta)| + |S_2^2(\theta)|] \sin \theta d\theta = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (a_n^2 + b_n^2).$$

흡수률은

$$Q_{\text{흡}} = Q_{\pm} - Q_{\text{산}}.$$

2. FDTD방법을 리용한 모의

우리는 Au와 CdTe의 크기가 가우스분포를 이루었다고 보고 모의하였다. 이때 Au의 크기는 30nm, CdTe의 크기는 3nm로 설정하였으며 Au의 주위에는 CdTe립자들이 둘러싸여있다고 보았다.

빛의 파장이 350~800nm인 경우에 미산란을 리용한 나노립자의 광학적특성모의결과는 그림과 같다.

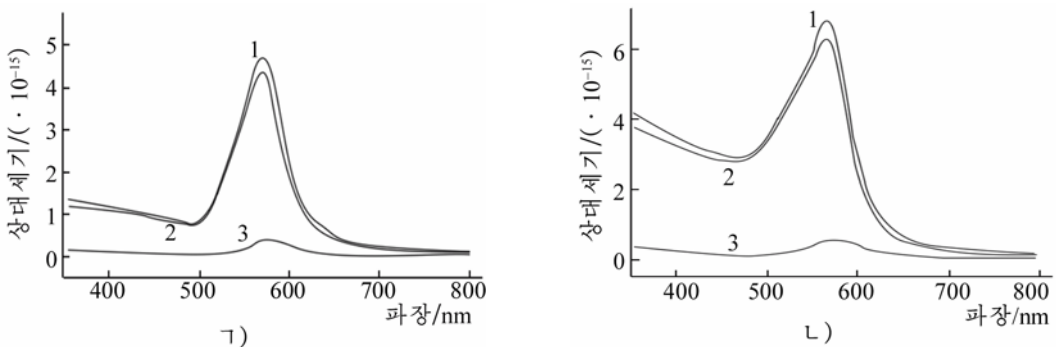


그림. CdTe양자점(Γ)과 Au-CdTe복합재료(L)에서의 광학적특성모의결과
1-3은 소광, 흡수, 산란세기

그림에서 보는바와 같이 CdTe의 산란세기는 578nm에서 3.732×10^{-16} 으로서 가장 크다.

Au-CdTe복합재료인 경우에는 576nm에서 산란세기가 5.511×10^{-16} 으로서 CdTe의 1.48배 정도이다. 이것은 선행연구자료[4]와 비교적 일치하였다.

일반적으로 금나노립자에 강한 빛이 쏘여지면 나노립자의 표면에 있는 자유전자들이 편극을 일으켜 립자의 내부에 전기쌍극자가 형성되게 된다. 이렇게 형성된 전기쌍극자는 주위에 새로운 전자기마당을 형성하며 이것은 외부마당에서 가해지는 빛의 자기마당의 세기와 주파수에 따라 변하게 된다. 즉 플라스몬효과가 나타나게 된다. 금나노립자의 결면에 CdTe가 있는 경우에는 복합나노립자가 외부마당속에 놓여있을 때 금나노립자의 전기쌍극자가 만드는 보충적인 마당의 영향을 받아 그 광학적특성이 변하게 된다. 이 변화는 금이나 은과 같이 플라스몬효과가 강하게 나타나는 금속과 반도체재료로 이루어진 복합나노재료인 경우에 더 세게 나타난다.

모의결과 Au와 CdTe로 이루어진 복합나노재료에서는 순수한 CdTe량자점보다 산란세기가 더 커진다는것을 알수 있다.

맺 는 말

1) 미산란리론을 리용하여 시공간유한계차법(FDTD)으로 나노립자의 광학적특성을 고찰하는 방법론을 확립하였다.

2) CdTe량자점과 Au-CdTe복합나노재료의 광학적특성을 모의하여 복합나노재료의 산란세기가 CdTe량자점보다 1.48배 커진다는것을 밝혔다.

참 고 문 헌

- [1] Y. Wang et al.; J. Phys. Chem., C 112, 4, 996, 2008.
- [2] F. Hao et al.; Chemical Physics Letters, 446, 1, 115, 2007.
- [3] 刘丽炜 等; 强激光与粒子束, 25, 2, 350, 2013.
- [4] 刘丽炜 等; 纳米科技, 12, 3, 40, 2015.

주체105(2016)년 12월 5일 원고접수

On the Scattering Characteristics of Au-CdTe Composite Nanomaterials by FDTD Method

An Yong Sin, Ri Myong Il and Han Yong Su

The scattering property of Au-CdTe composite nanoparticles was simulated by FDTD (Finite Difference Time Domain). As comparing with CdTe quantum dots, the Au-CdTe composite nanoparticles have stronger scattering intensity.

And the scattering intensity of Au-CdTe composite nanomaterials is enhanced about 1.5 times than CdTe quantum dots.

Key words: FDTD, Au-CdTe composite material