

# Оптические свойства фотонных кристаллов на основе наностержней оксида цинка, покрытых тонкой пленкой плазмонного материала

А.М. Лерер, П.Е. Тимошенко, Е.В. Головачева, Е.М. Кайдашев, А.С. Турчин

Южный федеральный университет

**Аннотация:** в данной работе исследовались зависимости оптических свойств фотонных кристаллов, представляющих двумерно-периодическую решетку наностержней оксида цинка от геометрических параметров и типов их тонкопленочного покрытия плазмонными материалами (Au, Ag, Cu, AZO, GZO, AGZO и т. п.). В расчетах учтены свойства металлов и диэлектриков в оптическом диапазоне. Характеристики двумерно-периодических структур, образованных бесконечно длинными слоистыми цилиндрами на основе ZnO, рассчитаны методом разделения переменных в цилиндрической системе координат. Проведено сравнение полученных численных данных с результатами конечноэлементного моделирования.

**Ключевые слова:** оптические наноантенны, дифракция, фотонный кристалл, фотонная запрещенная зона, плазмон-поляритон, оптические свойства, плазмонный резонанс, наностержни, оксид цинка

## 1. Введение

Фотонные кристаллы (ФК) — структуры, характеризующиеся периодическим изменением диэлектрической проницаемости в пространстве. Их оптические свойства сильно отличаются от сплошных сред. Распространение излучения внутри ФК благодаря периодичности среды становится похожим на движение электрона внутри обычного кристалла под действием периодического потенциала. В результате электромагнитные волны в ФК имеют зонный спектр и координатную зависимость, аналогичную блоховским волнам электронов в обычных кристаллах. В зонной структуре ФК при определенных условиях образуются щели, аналогично запрещенным электронным зонам в естественных кристаллах. В зависимости от свойств материала элементов, их размера и периода решетки в спектре ФК могут образовываться, как полностью запрещенные по частоте зоны, для которых распространение излучения невозможно независимо от его поляризации и направления, так и частично запрещенные (стоп-зоны), в которых распространение возможно лишь в выделенных направлениях.

Интерес к исследованию оптических свойств ФК вызван, как с фундаментальной точки зрения, так и для возможных многочисленных приложений. На основе ФК создаются и разрабатываются оптические фильтры, волноводы, устройства, позволяющие осуществлять управление тепловым излучением.

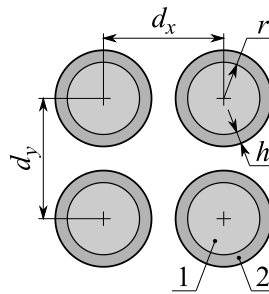
Помимо изменения спектров отражения, прохождения и поглощения металло-диэлектрические ФК обладают специфической плотностью фотонных состояний. Измененная плотность состояний может существенным образом влиять на время жизни возбужденного состояния атома или молекулы, помещенных внутрь ФК, и, следовательно, менять характер люминесценции. Например, если частота перехода в молекуле-индикаторе, находящейся в ФК, попадет в запрещенную зону, то люминесценция на этой частоте будет подавлена.

В данной работе, являющейся продолжением исследований оптических свойств массивов наноантенн [1], были изучены оптические свойства двумерных ФК,

состоящих из массивов бесконечных по длине наностержней (их поперечный размер много меньше продольного), покрытых тонкой пленкой плазмонного материала [2,3].

## 2. Теория

В работе проводилось исследование оптических свойств двумерных электромагнитных кристаллов, состоящих из цилиндрических неоднородностей, образованных бесконечно длинными цилиндрами ZnO (рис. 1) радиусом  $r$ , покрытыми тонкой пленкой толщины  $h$  материала, в котором может распространяться поверхностный плазмон-поляритон (Ag, Au, AZO, GZO, ZrN, TaN и др.) — плазмонного материала. Размер элементарной ячейки задается параметрами  $d_x$  и  $d_y$ , соответственно. При проведении расчетов были учтены дисперсионные свойства металлов [2,3] в оптическом диапазоне.



**Рисунок 1.** Фотонный кристалл, состоящий из массива бесконечных по длине цилиндров:  $r$  — радиус цилиндра,  $h$  — толщина его покрытия тонкой пленкой плазмонного материала,  $d_x$  и  $d_y$  — размеры элементарной ячейки.

Электромагнитная волна распространяется поперек цилиндров. В этом случае возможно существование волн двух типов — с поляризацией электрического поля вдоль цилиндров (ТЕ-волна или Е-поляризованная волна) и с поляризацией магнитного поля вдоль цилиндров (ТМ-волна или Н-поляризованная волна).

Решение краевой задачи о распространении волн в ФК сведено к решению интегро-дифференциального уравнения (ИДУ) [4, 5] относительно напряженности поля внутри цилиндров:

$$\vec{E} = \frac{1}{\varepsilon_{\text{ext}}} \{k^2 \varepsilon_{\text{ext}} \mu + \text{grad div}\} \int_S v(r) \vec{E}(x', y') g(x, x', y, y') ds', \quad (1)$$

где  $v(r) = \varepsilon(r) - \varepsilon_{\text{ext}}$ ,  $\varepsilon(r)$  и  $\varepsilon_{\text{ext}}$  — диэлектрические проницаемости слоистого цилиндра и окружающей их среды,  $g(x, x', y, y')$  — функция Грина фотонного кристалла:

$$g(x, x', y, y') = \frac{1}{d_x d_y} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} F_{pq} \exp[i(\alpha_p \bar{x} + \beta_q \bar{y})], \quad (2)$$

$$F_{pq} = \frac{1}{\rho_{pq^2} - k^2 \varepsilon_{\text{ext}}}, \alpha_p = \frac{2p\pi}{d_x} + k_x, \beta_q = \frac{2q\pi}{d_y} + k_y, \rho_{pq^2} = \alpha_p^2 + \beta_q^2.$$

В цилиндрической системе координат (ЦСК) ИДУ было преобразовано и сведено к решению относительно функций  $E_{\pm}$ , представленных в следующем виде:

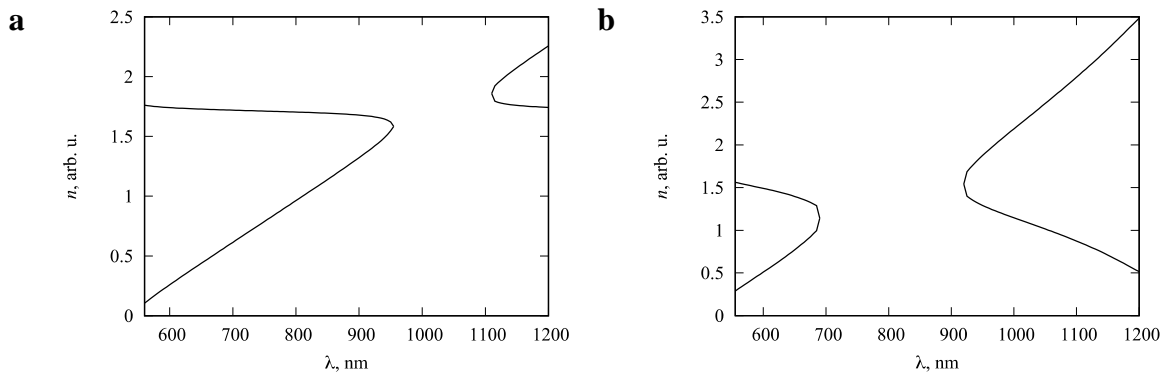
$$E_{\pm}(r, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} X_m e^{im\phi} P(r), \quad (3)$$

где  $P(r)$  — решение уравнения Гельмгольца в ЦСК внутри слоистого цилиндра,  $X_m$  — неизвестные коэффициенты, которые могут быть найдены из решения ИДУ методом Галеркина. В результате преобразований была получена однородная система линейных алгебраических уравнений с быстрой внутренней сходимостью.

Результаты численных расчетов методом построения функции Грина хорошо согласуются с конечноэлементным моделированием, выполненным в программном пакете COMSOL™, предоставляющим широкие возможности [5] для решения краевых электродинамических задач в оптическом диапазоне.

## 2. Результаты

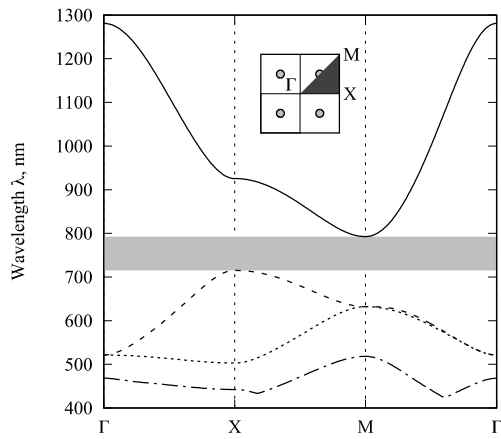
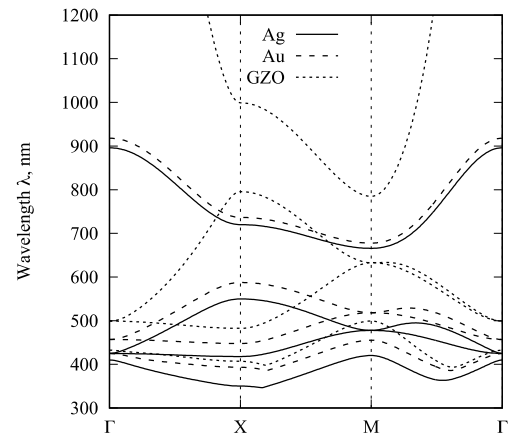
Предложенным выше методом были получены дисперсионные характеристики фотонных кристаллов, состоящих из стержней ZnO ( $n = 1.943575$ ,  $k = 0$ ) радиусом  $r = 140$  нм, без покрытия (рис. 2а) и с серебряным покрытием (рис. 2б) толщиной  $h = 5$  нм, обладающие широкой запрещенной зоной. Размер элементарной ячейки составляет  $d_x = d_y = 300$  нм. На дисперсионных зависимостях видно, что с увеличением толщины пленки ширина запрещенной зоны увеличивается и смещается в сторону коротких длин волн.



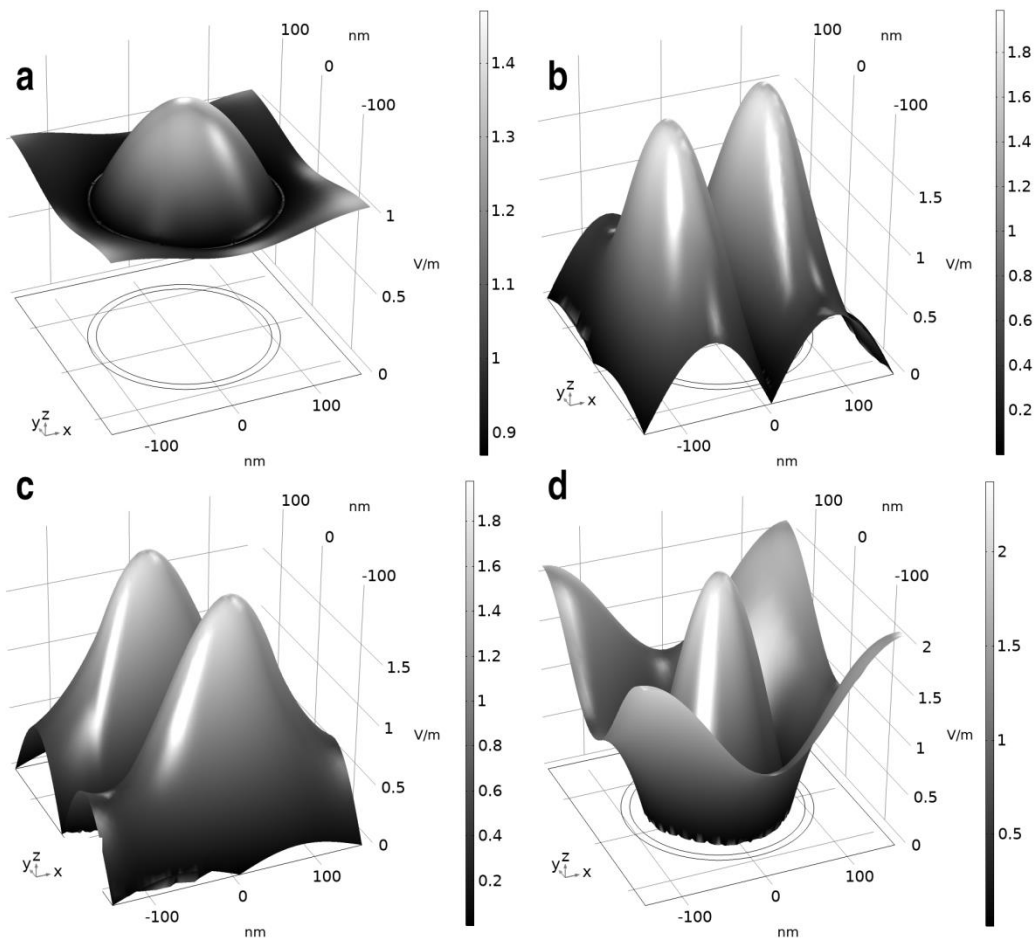
**Рисунок 2.** Дисперсионные кривые фотонного кристалла, состоящего из стержней ZnO радиусом  $r = 140$  нм, без учета потерь в ZnO ( $n = 1.943575$ ,  $k = 0$ ), с толщиной серебряного покрытия:  $a$  —  $h = 0$ ,  $b$  —  $h = 5$  нм. Размер элементарной ячейки —  $d_x = d_y = 300$  нм.

На рис. 3 представлены дисперсионные диаграммы электромагнитных волн в фотонном кристалле (схемы расширенных зон), состоящие из стержней ZnO, покрытых пленкой толщиной  $h = 5$  нм серебра  $r = 140$  нм (рис. 3а) и Ag, Au, GZO  $r = 100$  нм (рис. 3б). Распределение электрического поля для первых 4 собственных мод в элементарной ячейке фотонного кристалла представлено на рис. 4.

На рис. 3а для наностержня ZnO радиусом  $r = 140$  нм покрытого тонкой пленкой серебра выделена запрещенная зона шириной 77.5 нм в области длин волн 715 нм-792.5 нм. При уменьшении радиуса стержня (рис. 3б) до  $r = 100$  нм ширина запрещенной зоны увеличивается до 116 нм и смещается в сторону коротких волн 549 нм-665 нм. В случае золотого тонкопленочного покрытия ширина запрещенной зоны составляет 90 нм (587.5 нм - 677.5 нм). Для пленки GZO толщины  $h = 5$  нм запрещенная зона отсутствует, а дисперсионные кривые первых 4 мод смещены в длинноволновую область.

**a****b**

**Рисунок 3.** Закон дисперсии электромагнитных волн в фотонном кристалле (схема расширенных зон), состоящего из стержней ZnO радиусом  $r$ , покрытые пленкой толщиной  $h = 5$  нм: *a* — Ag,  $r = 140$  нм, *b* — Ag, Au, GZO,  $r = 100$  нм.



**Рисунок 4.** Распределение электрического поля для первых 4 собственных мод в элементарной ячейке фотонного кристалла, состоящего из стержней ZnO радиусом  $r = 140$  нм, покрытые пленкой Ag толщиной  $h = 5$  нм.

### 3. Заключение

В настоящей работе был выполнен расчет дисперсионных характеристик оптических волноводов на основе наностержней ZnO, покрытых тонкой металлической пленкой. При расчетах учитывалась дисперсия комплексной диэлектрической проницаемости материалов.

В работе исследовано влияние геометрических параметров и комплексной диэлектрической проницаемости материалов на дисперсионные характеристики одиночных и периодических оптических наноструктур.

Для численного расчета применялись разработанные на C++ пакеты программ, решающие методом Галеркина интегрально-дифференциальные уравнения в векторной форме, описывающие распространение электромагнитной волны в слоистых оптических структурах с комплексной диэлектрической проницаемостью.

Работа выполнена в рамках реализации базовой части госзадания, проект 3.5398.2017/8.9 и гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00512).

#### Список литературы

1. Кайдашев Е.М., Лянгузов Н.В., Лерер А.М., Распопова Е.А. // ПЖТФ. 2014. Т. 40. Вып. 7. С. 79.
2. Rakic A.D., Djuricic A.B., Elazar J.M., Majewski M.L. // Appl. Opt. 1998. V. 37. PP. 5271.
3. Dai Z.H., Zhang R.J., Shao J., Chen Y.M., Zheng Y.X., Wu J.D., Chen L.Y. // J. Korean Phys. Soc. 2009. V. 55. No. 3. PP. 1227.
4. Lerer A.M., Donets I.V., Kalinchenko G.A., Mahno P.V. // Proc. ICATT-2013. 2013. PP. 184-186.
5. Hoffmann J., Hafner C., Leidenberger P., Hesselbarth J., Burger S. // Proc. SPIE 7390, Modeling Aspects in Optical Metrology II, 73900J (June 15, 2009).