

01

## Теоретическое исследование резонансно поглощающих дифракционных решеток

© А.М. Лерер, Е.А. Цветянский

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

E-mail: lerer@sfedu.ru

Поступило в Редакцию 8 июня 2012 г.

Теоретически исследована новая оптическая металлодиэлектрическая дифракционная решетка, которая при резонансе поверхностной волны, распространяющейся на границе металл (плазма твердого тела)–диэлектрик, поглощает почти 100% падающей на нее энергии.

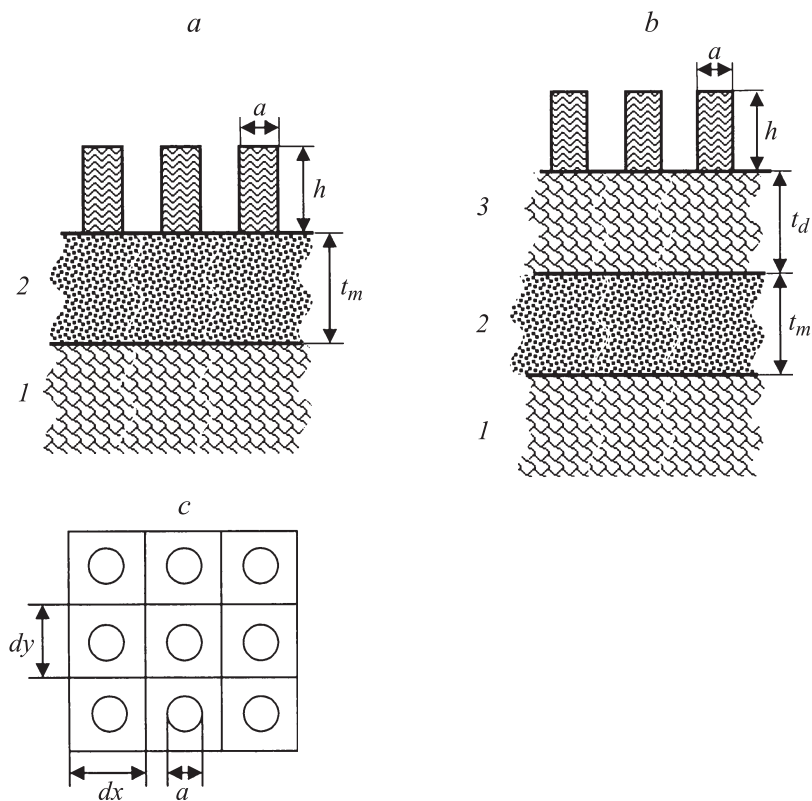
Металл в оптическом диапазоне не является идеальным проводником, а имеет свойства плазмы твердого тела, обусловленные наличием газа из свободных электронов. Наличие поверхностной волны (поверхностного плазмона), распространяющейся на границе металл (плазмы твердого тела)–диэлектрик, приводит к появлению новых уникальных свойств металлодиэлектрических устройств и привело к созданию нового направления в оптике — наноплазмоники [1].

К наноплазмонным устройствам относятся, в частности, металлические наноструктурированные дифракционные решетки (ДР). Экспериментально обнаруженное [2] значение прохождения света через металлическую решетку апертур, меньших, чем длина волны, дало толчок к исследованию этого явления, его физических причин и возможных областей применения. Установлено, что металлические решетки с отверстиями, меньшими длины волны или соизмеримыми с ней, в оптическом диапазоне обладают коэффициентом прохождения, существенно превышающим значения, предсказываемые теорией дифракции для решетки в идеально проводящем экране (так называемый эффект усиленного прохождения света) [2–6]. Это явление находит практическое применение в полупроводниковых и органических светодиодах и лазерах [3,7], обеспечивая прозрачность для световых волн, с одной стороны, и выполняя функцию управления потенциалом — с другой. В развитии данного направления предложены гибридные материалы, которые соче-

тают свойства наноструктурированных металлических поверхностей с полупроводниковыми или молекулярными материалами. Это открывает новые функциональные возможности с большим потенциалом [8–12]. В частности, обнаружено, что благодаря взаимодействию некоторых молекул и металла возможно увеличение коэффициента прохождения через наноструктурированную металлическую решетку путем нанесения поглощающего материала [13]. Данный эффект демонстрирует так называемую обусловленную поглощением прозрачность наноструктуры и обнаруживается, когда молекулы поглотителя находятся очень близко (порядка 20 nm) к металлу.

Следует также отметить, что дифракционные решетки — основа метаматериалов, в том числе и оптического диапазона [14].

При решении задач распространения и дифракции электромагнитной волны оптического диапазона в структурах с металлическими включениями необходимо учитывать поле внутри образца. Существует широкий спектр методов для моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Для ограниченного числа краевых задач, допускающих применение метода разделения переменных, существует аналитическое решение. Для дифракции на сфере это теория Ми [15]. Для моделирования оптической металлической нанопланшетной теории Ми применена в работе [16]. Большинство численных методов расчета электромагнитного поля в резонансной области частот можно разбить на две большие группы. Первая группа — методы, основанные на непосредственном решении волновых уравнений для компонент электромагнитного поля при заданных граничных условиях — метод конечных разностей в частотно-пространственном и пространственно-временном представлениях (FDTD), метод конечных элементов (МКЭ). Для моделирования наноплазмонных устройств эти методы использовались, в частности, в работах [17] (FDTD), [18] (МКЭ). Во второй группе методов краевая задача сводится к решению интегральных, интегродифференциальных, парных интегральных, парных сумматорных уравнений. Несомненное достоинство первой группы методов — универсальность. Недостатки — высокие требования к компьютеру, большое время счета, необходимость дискретизации не только рассеивателя, но и окружающего пространства, трудности при расчете объекта, содержащего мелкомасштабные элементы. Кроме того, возникают проблемы при переходе к открытому пространству с удовлетворением условия излучения. Эти проблемы отсутствуют при решении



**Рис. 1.** Два вида дифракционных решеток:  $a, b$  — вид сбоку,  $c$  — вид сверху; 1 — диэлектрическая подложка; 2 — металлическая пленка; 3 — дополнительный диэлектрический слой.

интегральных и интегродифференциальных уравнений (ИДУ). Выбор вида ИДУ, прежде всего, определяется структурой объекта. Поэтому методы, основанные на решении ИДУ, не столь универсальны, как методы первой группы, но созданные на их основе специализированные компьютерные программы в основном работают на несколько порядков быстрее. Существуют несколько типов ИДУ, описывающих дифракцию на диэлектрических телах [19]. Большинство из этих ИДУ можно

разбить на две группы — поверхностные ИДУ (ПИДУ) и объемные ИДУ (ОИДУ). В ПИДУ неизвестной является поле на границе раздела диэлектриков, а в ОИДУ — во всех внутренних точках тела. ОИДУ имеют ряд преимуществ: они более простые, неоднородность и нелинейность диэлектрика не усложняет существенно решение, в результате решения непосредственно находится электрическое поле в диэлектрике. Применения ИДУ для плазмонных структур описаны, например, в [20] (ПИДУ), [21,22] (ОИДУ). Следует учесть, что ОИДУ — бисингулярное. Эффективные численные методы его решения должны обязательно учитывать эту особенность [23,24].

В данном сообщении описывается новый вид двумерно-периодичных дифракционных решеток, у которых при резонансе отсутствуют как отраженная, так и прошедшая волны. Практически 100% энергии поглощается в металлической пленке. Исследованы два типа дифракционных решеток (рис. 1). В первом (рис. 1, *a*) на полубесконечной диэлектрической подложке расположена металлическая пленка, на которую нанесена двумерно-периодическая система диэлектрических цилиндров. Во втором (рис. 1, *b*) — между металлической пленкой и диэлектрическими цилиндрами расположен тонкий диэлектрический слой. Поперечное сечение диэлектрических цилиндров — круг диаметром  $a$  (рис. 1, *c*).

В основу теоретических исследований положено строгое решение объемного интегродифференциального уравнения. Неизвестными в ИДУ являются декартовы компоненты напряженности электрического поля  $E_r(x, y, z)$  внутри диэлектрической неоднородности.

В силу периодичности структуры ОИДУ решается только внутри объема  $V$  одной неоднородности:

$$\frac{D_r(x, y, z)}{\tau} = E_r^e(x, y, z) + \frac{1}{d_x d_y} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \sum_{s=1}^3 \int_V \exp[i(\alpha_p \bar{x} + \beta_1 \bar{y})] \tilde{g}_{rs}(z, z') D_s(z') dv', \quad (1)$$

$$r = 1, 2, 3, \quad x, y, z \in V,$$

где  $d_x, d_y$  — периоды ДР по осям  $x$  и  $y$  (ось  $z$  перпендикулярна ДР),  $\bar{x} = x - x'$ ,  $\bar{y} = y - y'$ ,  $D_r(x, y, z) = E_r(x, y, z)\tau(x, y, z)$ ,  $E_r^e(x, y, z)$  —

напряженность внешнего электрического поля,

$$\tau(x, y, z) = \varepsilon_b(x, y, z)/\varepsilon_n(z) - 1, \quad \alpha_p = \frac{2p\pi}{d_x} + k_x, \quad \beta_q = \frac{2q\pi}{d_y} + k_y,$$

$k_x, k_y$  — проекции волнового вектора падающей волны,  $\varepsilon_b(x, y, z)$ ,  $\varepsilon_n(z)$  — диэлектрические проницаемости неоднородности и окружающего ее слоя в точке наблюдения  $(x, y, z)$ ,  $\bar{g}_{rs}$  — элементы тензорной функции Грина для решетки с произвольным числом диэлектрических слоев. Число слоев с неоднородностями также произвольное.

ИДУ (1) решены методом Галеркина. Решение ищем в виде

$$D_r(x, y, z) = \sum_{i=-N_\varphi}^{N_\varphi} \sum_{m=1}^{N_r} \sum_{n=1}^{N_z} X_{lmm}^r V_{lmm}(x, y, z), \quad (2)$$

где  $X_{lmm}^r$  — неизвестные коэффициенты,  $V_{lmm}(x, y, z)$  — базисные функции (БФ),

$$V_{lmm}(x, y, z) = \exp(il\varphi) J_l \left( \xi_m^{(l)} r(z) \right) Z_n(z), \quad (3)$$

$J_l$  — функции Бесселя первого рода,  $\xi_m^{(l)}$  — нули производной функции Бесселя, т.е.  $J_l'(\xi_m^{(l)}) = 0$ , координаты  $r, \varphi$  выражаются через  $x, y, z = a_x(z)r \sin \varphi, y = a_y(z)r \cos \varphi, 2a_x(z), 2a_y(z)$  — оси эллипса в поперечном сечении с координатой  $z, Z_n(z)$  — БФ по координате  $z$ . Реализовано два вида функций  $Z_n(z)$ :

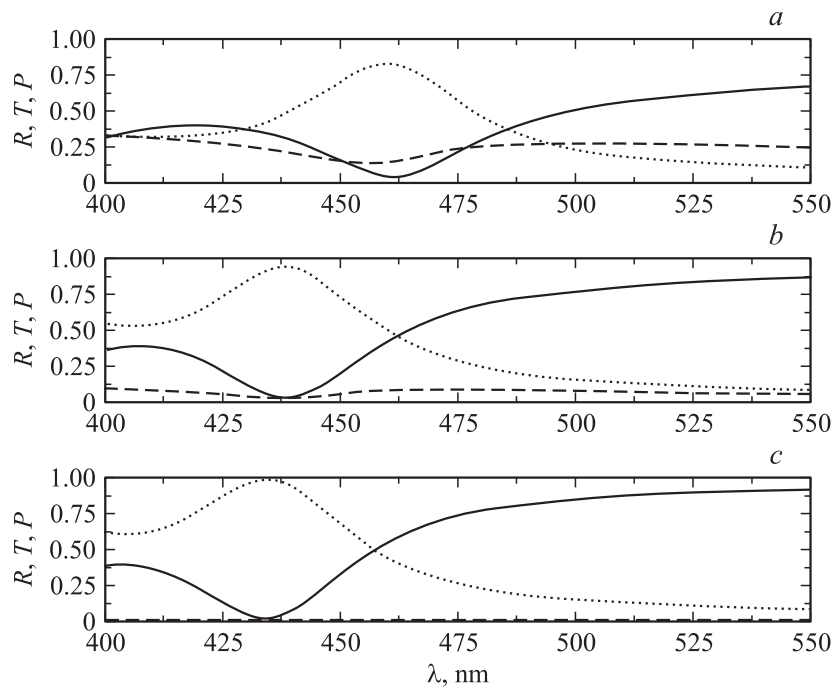
1) для неоднородностей с вертикальными стенками  $Z_n(z) = \cos \frac{(n-1)\pi z}{h}$ ,  $h$  — толщина слоя с неоднородностью;

2) для неоднородностей с невертикальными стенками БФ — сплайны первого порядка —  $Z_n(z) = \sigma_n^{(1)}(z)$  [25].

Подставим (2), (3) в (1) и проектируем на

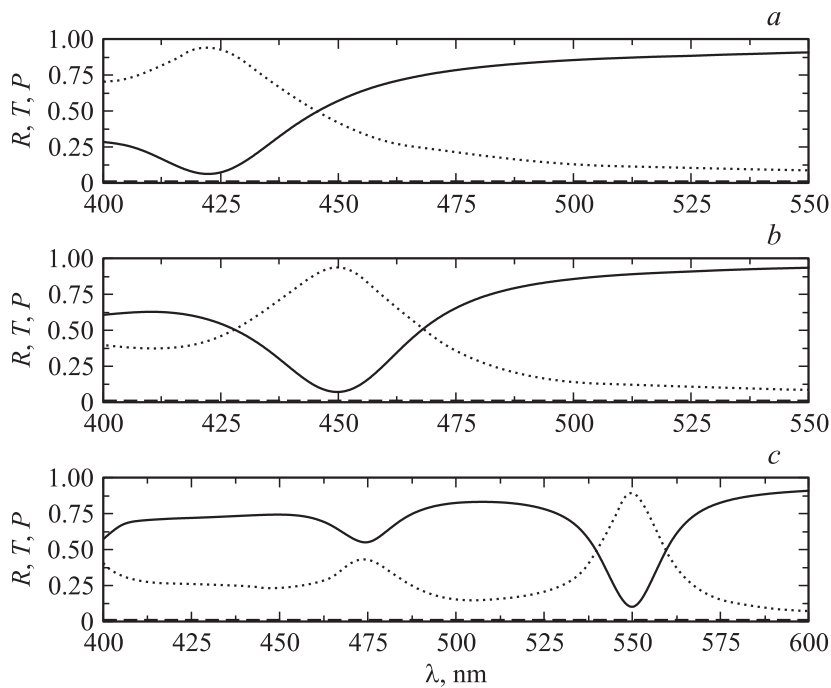
$$V_{lmm}^*(x, y, z); \quad l = 0, \pm 1, \dots; \quad m = 1, 2, \dots; \quad n = 1, 2, \dots$$

В результате получена система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных  $X_{lmm}^r$ . Решение имеет быструю внутреннюю сходимость и высокую точность — погрешность не более 0.1%.



**Рис. 2.** Зависимости параметров ДР от длины волны при различных толщинах серебряной пленки  $t_m$ :  $a$  —  $t_m = 30$  nm;  $b$  —  $t_m = 50$  nm;  $c$  —  $t_m = 150$  nm.  $d = 150$  nm,  $a = 100$  nm.

Основные результаты исследований приведены на рисунках, на которых отображены зависимости от длины волны коэффициентов отражения (по мощности) плоской электромагнитной волны  $R$  (сплошные кривые), прохождения  $T$  (по мощности, штриховые кривые) и относительных потерь  $P$  (пунктирные кривые, кроме рис. 4,  $c$ ). Показатель преломления диэлектрических цилиндров  $n_b = 2.1$ , подложки  $n_s = 1.495$ . На всех рисунках, кроме рис. 4,  $b$ , приведены результаты для решеток с серебряной пленкой, ДР первого типа, кроме ДР на рис. 3,  $c$ , 4,  $a$ . Волна падает на решетку нормально (угол падения  $\theta = 0$ ), кроме рис. 4,  $c$ . Элементарная ячейка решетки — квадратная  $d_x = d_y = d$ . В расчетах использовались параметры металлов, взятых из электронного справочника [26].

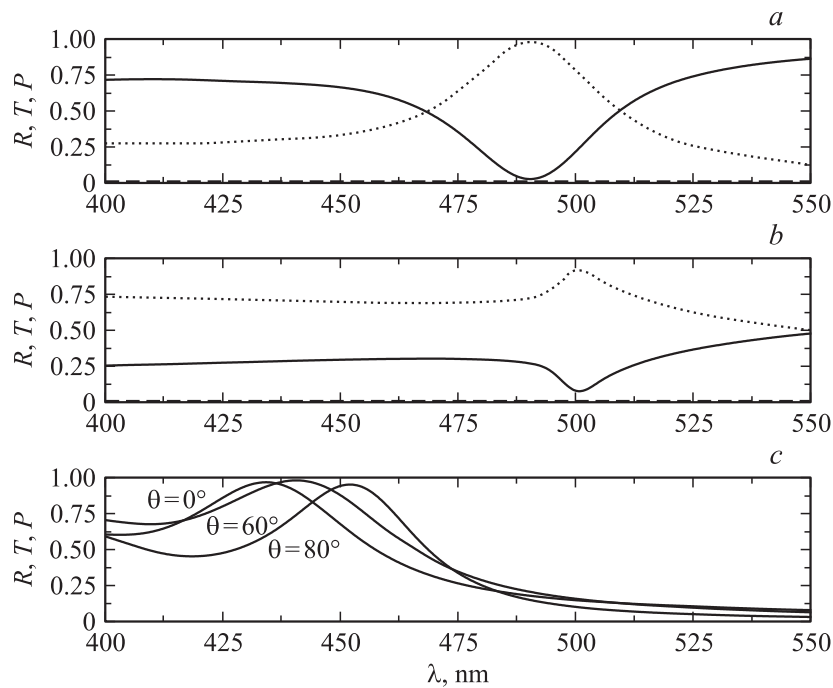


**Рис. 3.** Зависимости параметров ДР от длины волны при различных периодах  $d$ :  $a$  —  $d = 140$  nm,  $a = 100$  nm;  $b$  —  $d = 250$  nm,  $a = 100$  nm;  $c$  —  $d = 400$  nm,  $a = 120$  nm; толщина диэлектрического слоя  $t_d = 18$  nm, его показатель преломления  $n_d = 2.1$ .  $t_m = 100$  nm.

#### Основные свойства.

1. Резонансная частота не зависит от высоты диэлектрических цилиндров  $h$  и слабо зависит от их диаметров  $a$ . Размеры цилиндра определяют значения коэффициентов  $R$ ,  $T$ , и  $P$ . Таким образом, резонансные свойства ДР определяются плазмонным резонансом, а не резонансом диэлектрических цилиндров. Все решетки посчитаны при оптимальном размере  $h = 90$  nm.

2. При небольших толщинах металлической пленки  $t_m$  резонансная длина волны  $\lambda_r$  уменьшается с ростом  $t_m$  (рис. 2,  $a, b$ ). При  $t_m > 90$  nm  $\lambda_r$  от  $t_m$  не зависит (рис. 2,  $c$ ). Это объясняется тем, что при малых толщинах пленки поверхностные волны, бегущие по противоположным



**Рис. 4.** Зависимости параметров двух типов ДР от длины волны: *a* —  $d = 150$  nm,  $a = 110$  nm, параметры диэлектрического слоя (см. подпись к рис. 3, *c*); *b* —  $d = 500$  nm,  $a = 240$  nm, медная пленка,  $t_m = 100$  nm; *c* —  $d = 180$  nm,  $a = 100$  nm,  $t_m = 100$  nm.

границам пленки, взаимодействуют между собой. Поэтому их скорость, а значит, и  $\lambda_r$  зависят от  $t_m$ . При  $t_m > 90$  nm волна бежит по верхней границе пленки. Ее скорость не зависит от диэлектрической проницаемости подложки.

3. При увеличении периода решетки, как и следовало ожидать, увеличивается  $\lambda_r$  (рис. 3, *a, b*). Возможно наблюдение двух и более плазмонных резонансов (рис. 3, *c*).

4. Так как скорость поверхностной волны зависит от свойств металлической пленки и прилегающих к ней диэлектриков, то  $\lambda_r$  изменяется:

- а) при введении дополнительного диэлектрического слоя (рис. 4, *a*);
- б) при замене материала металлической пленки (рис. 4, *b*).



Наблюдается также слабая зависимость  $\lambda_r$  от диаметра диэлектрических цилиндров  $a$  в основном при больших значениях  $a/d$ .

5. Эффект полного резонансного поглощения наблюдается в широком диапазоне углов падения  $\theta$  при достаточно небольшой зависимости  $\lambda_r$  от  $\theta$  (рис. 4, с).

Таким образом, почти 100%-е поглощение энергии при плазмонном резонансе говорит о сильной локализации электромагнитного поля вблизи металлической пленки. Это свойство может быть использовано, в частности, в солнечных батареях.

## Список литературы

- [1] Климов В.В. Наноплазмоника. М.: Физматлит, 2009. 480 с.
- [2] Salomon L., Grillot F., Zayats A.V., Fornel F. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. N 6. P. 1110.
- [3] Garcia-Vidal F.J., Sanchez-Dehesa J., Dechelette A. et al. // J. Lightwave Technology. 1999. V. 17. N 11. P. 2191.
- [4] Garcia-Vidal F.J., Martin-Moreno L., Pendry J.B. // J. Optics. A. 2005. V. 7. N 2. P. S97.
- [5] Martin-Moreno L., Garcia-Vidal F.J., Lezec H.J. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. N 6. P. 1114.
- [6] Harries M.D., Summers H.D. // IEEE Photonics Technology Lett. 2006. V. 18. N 21. P. 2197.
- [7] Zhmakin A.I. // Phys. Reports. 2011. V. 498. N 3–4. P. 189.
- [8] Dintinger J., Robel I., Kamat P.V. et al. // Advanced Materials. 2006. V. 18. N 13. P. 1645.
- [9] Padilla W.J., Taylor A.J., Highstrete C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. N 10. P. 107401.
- [10] Degiron A., Mock J.J., Smith D.R. // Optics Express. 2007. V. 15. N 3. P. 1115.
- [11] Chen H.-T., O'Hara J.F., Azad A.K. et al. // Nature Photonics. 2008. V. 2. N 5. P. 295.
- [12] Vasa P., Pomraenke R., Schwieger S. et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. N 11. P. 116801.
- [13] Degiron A., Ebbesen T.W. // J. Optics. A. 2005. V. 7. N 2. P. S90.
- [14] Khardikov V.V., Iarko E.O., Prosvirnin S.L. // J. Optics. 2010. V. 12. N 4. P. 045102.
- [15] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973.
- [16] Li J., Salandrino A., Engheta N. // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 245403.
- [17] Hyang J.S., Feichtner T., Biagioni P., Hecht B. // Nano Lett. 2009. V. 9. N 5. P. 1897.

- [18] *Li J., Engheta N.* // IEEE Trans. on Anten. and Prop. 2007. V. 55. N 11. P. 3018.
- [19] *Хижняк Н.Г.* Интегральные уравнения макроскопической электродинамики. Киев: Наукова думка, 1986.
- [20] *Kern M., Martin J.F.* // J. Opt. Soc. Am. 2009. V. 26. N 4. P. 732.
- [21] *Лерер А.М., Махно В.В., Махно П.В., Ячменов А.А.* // Радиотехника и электроника. 2007. V. 52. N 4. С. 424.
- [22] *Головачева Е.В., Лерер А.М., Пархоменко Н.Г.* // Вестн. МУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2011. № 1. С. 6.
- [23] *Самохин А.Б.* Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии. М.: Радио и связь, 1998.
- [24] *Кравченко В.Ф., Лабунько О.С., Лерер А.М., Сиявский Г.П.* Вычислительные методы в современной радиофизике. М.: Физматлит, 2009.
- [25] *Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж.* Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972.
- [26] <http://www.luxprop.com>.