

УДК 535.341.08,53.043

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА В ПЕРИОДИЧЕСКИХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ХРОМА С ПОВЕРХНОСТНЫМ ОСТРОВКОВЫМ СЛОЕМ

И. Р. КОШЕЛЕВ¹⁾, А. И. МУХАММАД¹⁾, П. И. ГАЙДУК¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Методом конечных разностей во временной области проведено моделирование оптических свойств структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr с периодически расположенными островками хрома. Обнаружено, что для рассматриваемых структур характерно явление плазмонного резонанса. Определены зависимости интенсивности и положения пика плазмонного поглощения от толщины и радиуса островков. Отмечено, что при увеличении толщины островков до 120 нм интенсивность пика поглощения возрастает до 69 % для структуры Cr/Si/Cr и до 55 % для структуры Cr/CrSi₂/Cr. Установлено, что пик плазмонного поглощения в спектре структуры Cr/Si/Cr находится на меньшей длине волны (8,4 мкм для Cr/Si/Cr, 11,1 мкм для Cr/CrSi₂/Cr), а также имеет большую интенсивность (доля поглощенного излучения на 14 % выше по сравнению с пиком плазмонного поглощения в спектре структуры Cr/CrSi₂/Cr). Полученные зависимости указывают на возможность использования структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr в качестве детекторов ИК-диапазона.

Ключевые слова: плазмонный резонанс; периодические островковые структуры; спектры оптического поглощения.

Образец цитирования:

Кошелев ИР, Мухаммад АИ, Гайдук ПИ. Моделирование плазмонного резонанса в периодических многослойных структурах на основе хрома с поверхностным островковым слоем. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2021;1:26–32.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2021-1-26-32>

For citation:

Koshelev IR, Mukhammad AI, Gaiduk PI. Modeling of plasmon resonance in periodic multilayer structures based on chromium with a surface island layer. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2021;1:26–32. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2021-1-26-32>

Авторы:

Илья Романович Кошелев – студент факультета радиоп физики и компьютерных технологий. Научный руководитель – П. И. Гайдук.

Асия Имановна Мухаммад – магистрант кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий. Научный руководитель – П. И. Гайдук.

Петр Иванович Гайдук – доктор физико-математических наук; профессор кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Authors:

Ilya R. Koshelev, student at the faculty of radiophysics and computer technologies.

ikoselev77@gmail.com

Asiya I. Mukhammad, master's degree student at the department of physical electronics and nanotechnologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

rct.muhammadAI@bsu.by

Peter I. Gaiduk, doctor of science (physics and mathematics); professor at the department of physical electronics and nanotechnologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

gaiduk@bsu.by

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № Т18Р-190), а также государственной программы научных исследований «Фотоника, опто- и микроэлектроника» (проект 3.2.04, № ГР 20190644).

MODELING OF PLASMON RESONANCE IN PERIODIC MULTILAYER STRUCTURES BASED ON CHROMIUM WITH A SURFACE ISLAND LAYER

I. R. KOSHELEV^a, A. I. MUKHAMMAD^a, P. I. GAIDUK^a

^aBelarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

Corresponding author: I. R. Koshelev (ikoselev77@gmail.com)

The optical properties of Cr/Si/Cr and Cr/CrSi₂/Cr structures with periodically located chromium islands are modeled using the finite-difference time domain method. These structures are characterized by the phenomenon of plasmon resonance. The dependences of the intensity and position of the plasmon absorption peak on the thickness and radius of the islands are determined. It was observed that when the island thickness increases to 120 nm, the intensity of the absorption peak increases to 69 % for the Cr/Si/Cr structure and to 55 % for the Cr/CrSi₂/Cr structure. It was found that the peak of plasmon absorption in the spectrum of the Cr/Si/Cr structure is at a shorter wavelength (8.4 μm for Cr/Si/Cr, 11.1 μm for Cr/CrSi₂/Cr), and also has a higher intensity (the share of absorbed radiation is 14 % higher compared to the peak of plasmon absorption in the spectrum of the Cr/CrSi₂/Cr structure). The obtained dependences indicate that the Cr/Si/Cr and Cr/CrSi₂/Cr structures can be used as IR detectors.

Keywords: plasmon resonance; periodic island structures; optical absorption spectra.

Acknowledgements. This work was supported by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research and Russian Foundation for Basic Research (project No. T18R-190) and by the state program of scientific research «Photonics, opto- and microelectronics» (project 3.2.04, No. GR 20190644).

Введение

Современные достижения материаловедения, позволяющие наноструктурировать различные материалы, дали большой толчок новым исследованиям плазмонных эффектов. Такие эффекты возникают из-за коллективных колебаний электронов проводимости (плазмонов) относительно кристаллической решетки. Плазмоны обладают резонансной частотой и могут быть возбуждены на этой частоте внешней электромагнитной волной (плазмонный резонанс) [1]. Явление плазмонного резонанса может наблюдаться, например, в структурах с периодически расположенными островками металла [2]. Для подобных структур плазмонный резонанс сопровождается увеличением коэффициента поглощения, максимум которого при этом находится на частоте плазмонного резонанса. Отдельная их ячейка может быть настроена на поглощение излучения определенных длин волн путем изменения размеров составляющих ее слоев. Это обеспечивает возможность использования таких структур в качестве чувствительных элементов детекторов излучения [3].

В настоящей работе методами компьютерного моделирования было изучено явление плазмонного резонанса в многослойных периодических структурах Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr.

Материалы и методы исследования

В данной работе моделировались оптические свойства структуры, отдельный пиксел которой представлен на рис. 1. Исследуемая структура включает три слоя:

- хром;
- кремний (дисилицид хрома);
- хром.

Поверхностный слой представляет собой массив дискообразных островков, расположенных с периодом 1,1 мкм. В качестве промежуточного слоя взят нелегированный кремний (дисилицид хрома). Были исследованы структуры с различными параметрами верхнего слоя: радиус островков (r) изменялся от 300 до 530 нм, а толщина (d) – от 40 до 120 нм. При этом толщины сплошного слоя хрома и промежуточного полупроводникового нелегированного слоя были одинаковы для всех структур и составляли 40 и 80 нм соответственно. Таким образом, общая толщина структуры не превышала 240 нм.

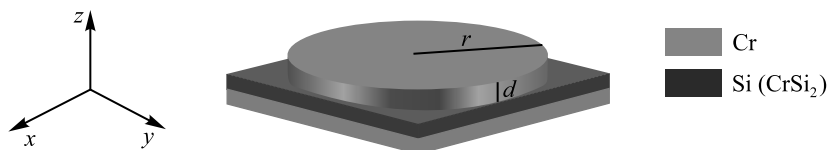


Рис. 1. Пиксел моделируемой структуры
 Fig. 1. Pixel of the simulated structure

Моделирование плазмонных свойств исследуемых структур проводилось методом конечных разностей во временной области (FDTD) с помощью программы *FDTD Solution*¹. На границы, перпендикулярные оси z , накладывались условия идеально согласованных слоев (PML), которые позволяют избежать появления переотраженных волн, а на границы, перпендикулярные осям x и y , накладывалось условие периодичности. Такие граничные условия дают возможность исследовать оптические свойства всей структуры, проводя моделирование трехслойной ячейки, содержащей только один островок. Моделирование выполнялось в диапазоне 5–20 мкм с использованием сетки с шагом 0,25 нм. Зависимости диэлектрической проницаемости от длины волны для Cr, Si и CrSi₂ были взяты из литературы [4; 5]. Коэффициент поглощения определялся как

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda),$$

где $R(\lambda)$ – доля отраженного излучения, а $T(\lambda)$ – доля прошедшего излучения.

Результаты и их обсуждение

На рис. 2 приведены кривые коэффициентов поглощения, отражения и пропускания структуры Cr/Si/Cr с периодически расположенными поверхностными островками хрома радиусом 450 нм и толщиной 80 нм. Можно заметить, что падающее излучение почти полностью отражается от структуры, за исключением диапазона длин волн 6–11 мкм, в котором наблюдается довольно сильное поглощение излучения (около 58 %). Коэффициент пропускания близок к нулю практически на всем исследуемом интервале, кроме небольшого пика в диапазоне 7,5–10,5 мкм. Похожее поведение кривых поглощения, отражения и пропускания характерно и для структуры Cr/CrSi₂/Cr.

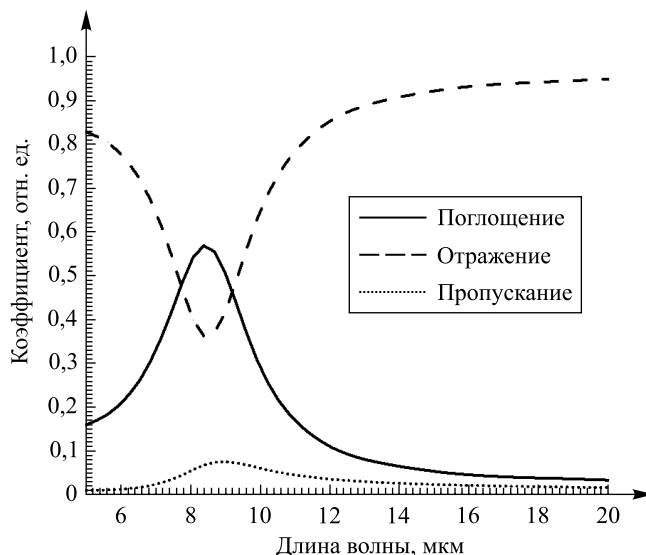


Рис. 2. Спектры поглощения, отражения и пропускания для структуры Cr/Si/Cr с толщиной островков 80 нм
 Fig. 2. Absorption, reflection and transmission spectra for the Cr/Si/Cr structure with an island thickness of 80 nm

На рис. 3, а и б, приведены спектры поглощения структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr с различными радиусами островков. Сравнение спектральных кривых, полученных в результате изменения r от 300 до 530 нм, свидетельствует о том, что радиус островков влияет на максимум коэффициента поглощения. По мере

¹Lumerical FDTD Solutions [Electronic resource] / Lumerical Solut. Inc., 2003–2020. URL: <http://www.lumerical.com/> (date of access: 05.04.2020).

увеличения r от 300 до 450 нм в структуре Cr/Si/Cr наблюдается незначительное увеличение пика поглощения с 55,7 до 56,9 %, а в структуре Cr/CrSi₂/Cr – с 42,8 до 43,5 %. Дальнейший рост r от 450 до 530 нм сопровождается небольшим падением максимума поглощения – с 56,9 до 55,3 % в структуре Cr/Si/Cr и с 43,5 до 42,5 % в структуре Cr/CrSi₂/Cr. Ширина на полувысоте для структуры Cr/Si/Cr изменяется от 2,2 мкм ($r = 300$ нм) до 4,7 мкм ($r = 530$ нм), для структуры Cr/CrSi₂/Cr – от 2,8 мкм ($r = 300$ нм) до 5,9 мкм ($r = 530$ нм). Мы предполагаем, что подобная зависимость пика поглощения от радиуса островков (см. рис. 3, в) обусловлена возникновением в таких структурах явления плазмонного резонанса. Следует отметить, что увеличение радиуса островков при неизменном периоде ведет к уменьшению расстояния между ними. Это, в свою очередь, приводит к взаимодействию между плазмонами, возникающими в соседних островках. Можно предположить, что именно в результате такого взаимодействия происходит уменьшение интенсивности пика поглощения для структур с радиусом островков свыше 450 нм [2; 6]. Более детально влияние взаимодействия плазмонов соседних островков на уровень поглощения структуры будет рассмотрено в дальнейших работах. Помимо этого, увеличение радиуса островков сопровождается увеличением длины волны (см. рис. 3, г), на которую приходится пик коэффициента поглощения, что означает уменьшение частоты плазмонного резонанса. Рост r от 300 до 530 нм вызывает смещение пика поглощения по длине волны с 5,3 на 10,5 мкм и с 7,1 на 13,9 мкм в структурах Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr соответственно.

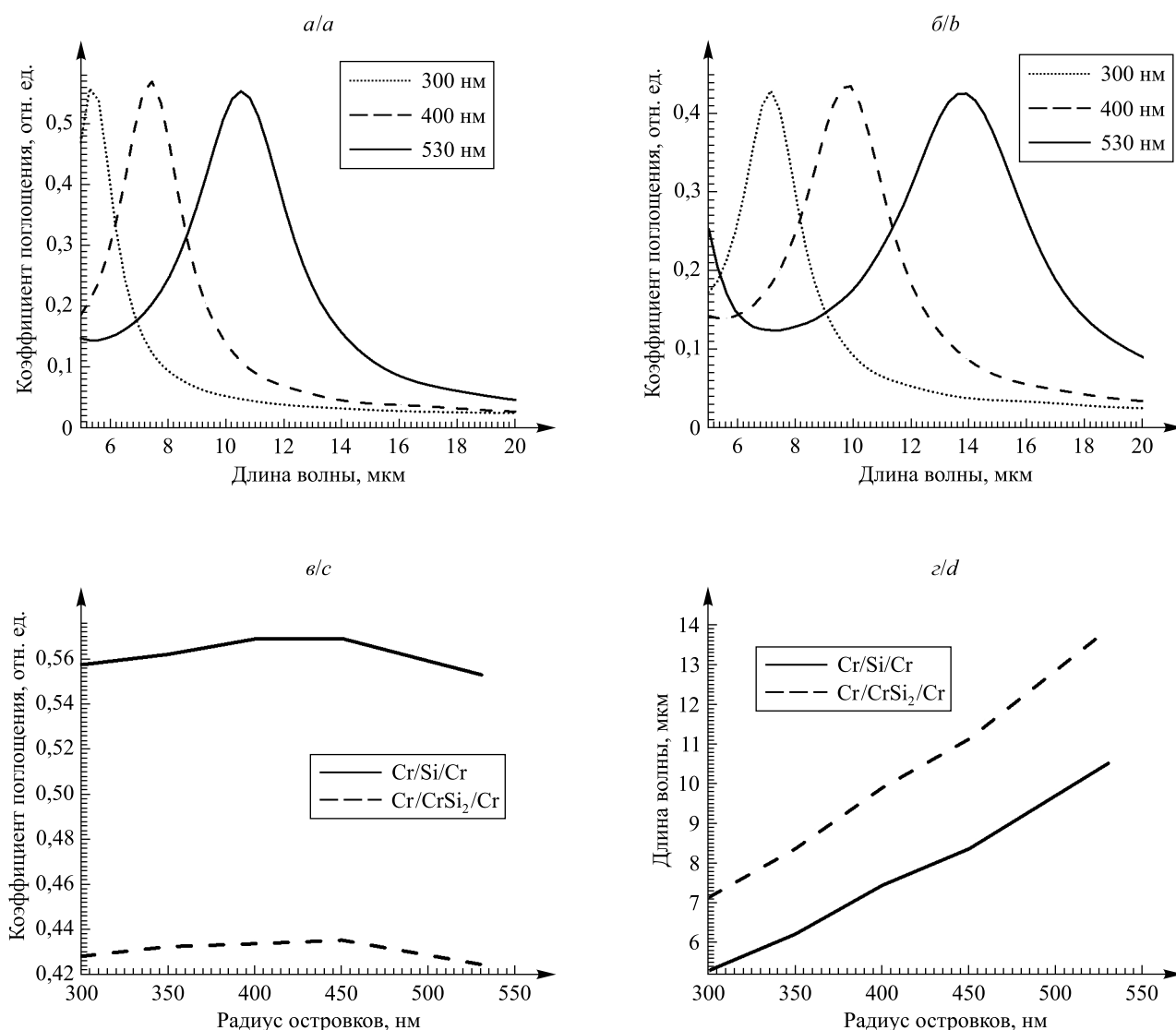


Рис. 3. Спектральные зависимости коэффициента поглощения структур Cr/Si/Cr (а) и Cr/CrSi₂/Cr (б) с различными радиусами островков, а также зависимость высоты (в) и положения (г) пика коэффициента поглощения от радиуса островков

Fig. 3. Spectral dependences of the absorption coefficient of Cr/Si/Cr (a) and Cr/CrSi₂/Cr (b) structures with different island radii, dependence of the absorption coefficient peak height (c) and position (d) on the island radius

На рис. 4, *a* и *б*, приведены спектральные зависимости коэффициента поглощения для структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr с различной толщиной островков хрома. Радиус островков в обеих структурах был равен 450 нм, поскольку предыдущие расчеты показали, что это значение соответствует наилучшему поглощению излучения (см. рис. 3, *a* и *б*). Согласно приведенным кривым пики коэффициентов поглощения, соответствующие, по нашему предположению, плазмонному резонансу, находятся на одной длине волны – 8,4 мкм для Cr/Si/Cr, 11,1 мкм для Cr/CrSi₂/Cr. При этом закономерно уменьшается ширина на полувысоте: в структуре Cr/Si/Cr – с 4,9 мкм ($d = 40$ нм) до 3,0 мкм ($d = 120$ нм), а в структуре Cr/CrSi₂/Cr – с 5,2 мкм ($d = 40$ нм) до 3,9 мкм ($d = 120$ нм). При изменении d от 40 до 120 нм максимум коэффициента поглощения в структуре Cr/Si/Cr возрастает с 48 до 69 %, в структуре Cr/CrSi₂/Cr – с 36 до 55 %. Эти зависимости наглядно представлены на рис. 4, *в*.

Результаты моделирования спектров поглощения структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr показывают, что увеличение толщины островков (поверхностного слоя) исследуемой структуры закономерно вызывает рост коэффициента поглощения. Аналогичный результат был получен в работе [2] для структуры Au/Si/Au. Большее увеличение уровня поглощения происходит в области плазмонного пика: в диапазоне до 7 мкм кривые ведут себя практически идентично, а после 11 мкм разница в уровне поглощения составляет несколько процентов. Исходя из этого, можно предположить, что за увеличение уровня поглощения отвечают плазмонные эффекты.

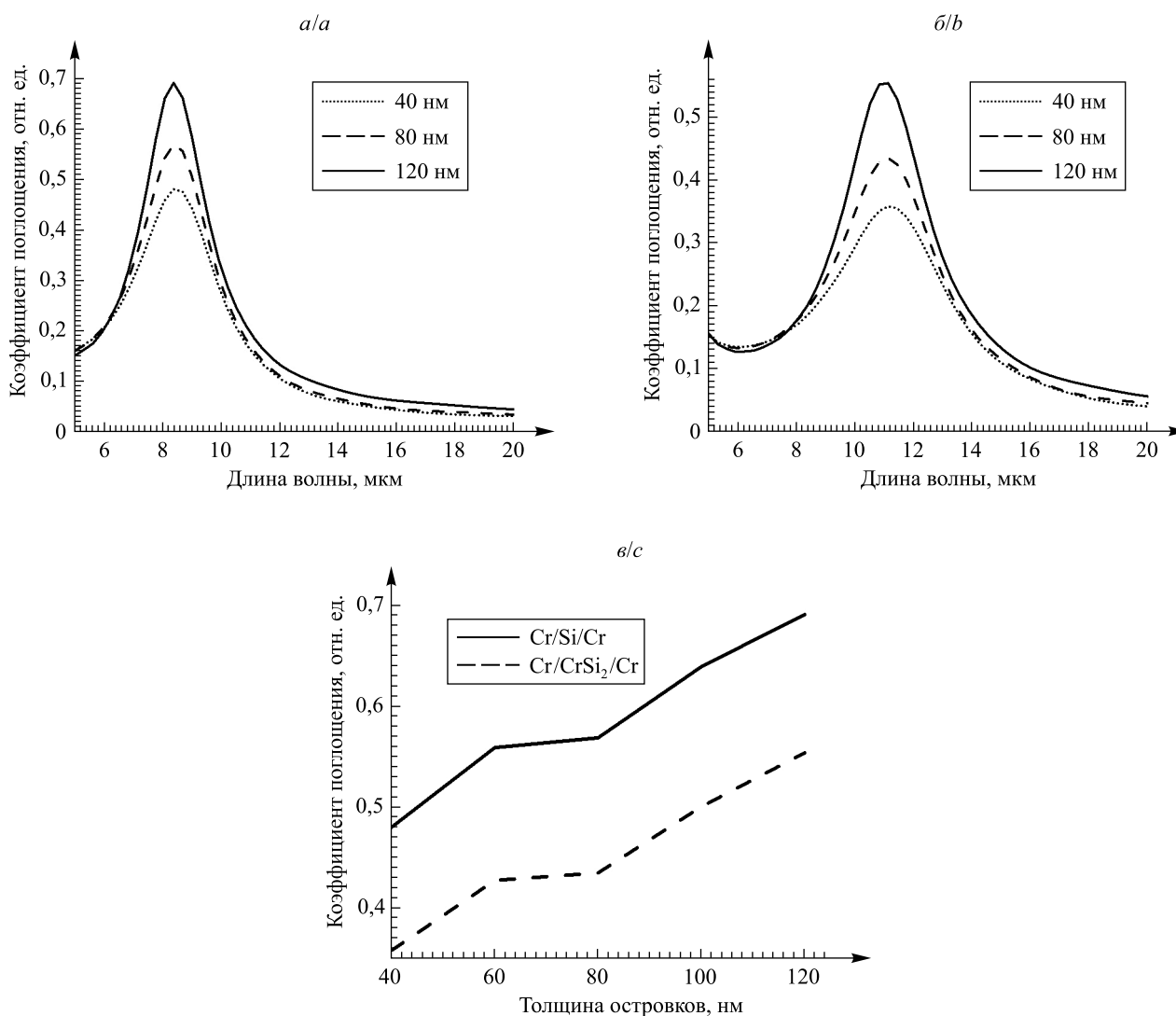


Рис. 4. Спектральные зависимости коэффициента поглощения структур Cr/Si/Cr (*a*) и Cr/CrSi₂/Cr (*б*) с различной толщиной островков, а также зависимость высоты пика коэффициента поглощения от толщины островков (*в*)

Fig. 4. Spectral dependences of the absorption coefficient of Cr/Si/Cr (*a*) and Cr/CrSi₂/Cr (*б*) structures with different island thickness, dependence of the peak height of the absorption coefficient on the island thickness (*в*)

Стоит отметить схожесть графиков зависимости для структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr. Их отличие заключается лишь в величине и положении пика коэффициента поглощения. На параметры плазмонного резонанса существенно влияют диэлектрические свойства промежуточного слоя [6]. Положение плазмонного резонанса в спектрах поглощения структуры Cr/CrSi₂/Cr смещено в направлении больших длин волн, что означает уменьшение частоты плазмонного резонанса. Это может быть связано с тем, что по своим свойствам дисилицид хрома ближе к проводникам, чем к диэлектрикам, в отличие от кремния, который является полупроводником: ширина запрещенной зоны дисилицида хрома составляет около 0,35 эВ, а кремния – 1,12 эВ [5; 7].

Было проведено моделирование оптических свойств структуры Cr/SiO₂/Cr с радиусом островков 450 нм и толщиной поверхностного слоя 80 нм, в которой в качестве промежуточного слоя взят диэлектрик с широкой запрещенной зоной. Спектр поглощения такой структуры оказался очень похож на спектры структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr, приведенные выше (см. рис. 4, а и б). Однако пик в спектре поглощения структуры Cr/SiO₂/Cr наблюдается на длине волны 4,1 мкм, а его интенсивность превышает 90 %. Определенные с помощью компьютерного моделирования максимумы поглощения имеют следующие значения: 90 % на длине волны 4,1 мкм, 57 % на длине волны 8,4 мкм и 44 % на длине волны 11,1 мкм для структур с промежуточным слоем из SiO₂, Si и CrSi₂ соответственно. Исходя из полученных результатов, можно предположить, что уменьшение концентрации свободных носителей заряда в промежуточном слое сопровождается увеличением максимума коэффициента поглощения и его смещением в сторону меньших длин волн.

Заключение

Путем FDTD-моделирования рассчитаны спектры поглощения структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr. Показано, что для них характерно явление плазмонного резонанса. Определены зависимости интенсивности и положения пика плазмонного поглощения от толщины и радиуса островков. Установлено, что при увеличении толщины островков от 40 до 120 нм максимум коэффициента поглощения изменяется от 48 до 69 % для структуры Cr/Si/Cr и от 36 до 55 % для структуры Cr/CrSi₂/Cr. Показано, что увеличение толщины островков не влияет на положение пика плазмонного поглощения.

Также обнаружено, что уменьшение радиуса островков приводит к смещению пика поглощения. Длина волны, соответствующая плазмонному резонансу, для структуры Cr/Si/Cr изменяется от 10,5 до 5,3 мкм, для структуры Cr/CrSi₂/Cr – от 13,9 до 7,1 мкм. Изменение радиуса островков практически не влияет на интенсивность пика плазмонного поглощения: рост радиуса от 300 до 450 нм вызывает увеличение доли поглощения всего на 1–2 %, а рост от 450 до 530 нм – уменьшение доли поглощения на те же 1–2 % для обеих структур.

Сравнение спектров поглощения структур Cr/Si/Cr и Cr/CrSi₂/Cr в диапазоне 5–20 мкм показало влияние состава промежуточного слоя на интенсивность и положение пика плазмонного поглощения. Максимальная интенсивность пика поглощения структуры с промежуточным слоем CrSi₂ принимает меньшие значения, разница составляет в среднем 13–16 %. Положение пика плазмонного поглощения структуры с промежуточным слоем Si смещено в область меньших длин волн (8,4 мкм).

Библиографические ссылки

1. Климов ВВ. *Наноплазмоника*. Москва: Физматлит; 2009. 480 с.
2. Kaikai Du, Qiang Li, Weichun Zhang, Yuanqing Yang, Min Qiu. Wavelength and thermal distribution selectable microbolometers based on metamaterial absorbers. *IEEE Photonics Journal*. 2015;7(3):6800908. DOI: 10.1109/JPHOT.2015.2406763.
3. Сотников ДВ, Жердев АВ, Дзантиев ББ. Детекция межмолекулярных взаимодействий, основанная на регистрации поверхностного плазмонного резонанса. *Успехи биологической химии*. 2015;55:391–420.
4. Palik ED, editor. *Handbook of optical constants of solids. Volume 3*. [S. l.]: Academic Press; 1998. 999 p.
5. Кривошеева АВ, Шапошников ВЛ, Кривошеев АЕ, Филонов АВ, Борисенко ВЕ. Полупроводниковые свойства CrSi₂ с деформированной решеткой. *Физика и техника полупроводников*. 2003;37(4):402–407.
6. Noguez C. Surface plasmons on metal nanoparticles: the influence of shape and physical environment. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2007;111(10):3806–3819. DOI: 10.1021/jp066539m.
7. Шалимова КВ. *Физика полупроводников*. Санкт-Петербург: Лань; 2010. 390 с.

References

1. Klimov VV. *Nanoplasmonika* [Nanoplasmonics]. Moscow: Fizmatlit; 2009. 480 p. Russian.
2. Kaikai Du, Qiang Li, Weichun Zhang, Yuanqing Yang, Min Qiu. Wavelength and thermal distribution selectable microbolometers based on metamaterial absorbers. *IEEE Photonics Journal*. 2015;7(3):6800908. DOI: 10.1109/JPHOT.2015.2406763.

3. Sotnikov DV, Zherdev AV, Dzantiev BB. [Detection of intermolecular interactions based on surface plasmon resonance registration]. *Uspekhi biologicheskoi khimii*. 2015;55:391–420. Russian.
4. Palik ED, editor. *Handbook of optical constants of solids. Volume 3*. [S. l.]: Academic Press; 1998. 999 p.
5. Krivosheeva AV, Shaposhnikov VL, Krivosheev AE, Filonov AB, Borisenko VE. Semiconducting properties of a CrSi₂ with the strained lattice. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 2003;37(4):402–407. Russian.
6. Noguez C. Surface plasmons on metal nanoparticles: the influence of shape and physical environment. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2007;111(10):3806–3819. DOI: 10.1021/jp066539m.
7. Shalimova KV. *Fizika poluprovodnikov* [Physics of semiconductors]. Saint Petersburg: Lan'; 2010. 390 p. Russian.

Статья поступила в редакцию 31.10.2020.
Received by editorial board 31.10.2020.