



ИНТЕГРИРОВАННЫЕ В СТРУКТУРЫ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ ВОЛНОВОДЫ НА ДИСКРЕТНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

WAVEGUIDES INTEGRATED INTO MICROELECTRONIC STRUCTURES USING DISCRETE NANO-SIZED ELEMENTS

УДК 581.787

САПЕГИН АЛЕКСАНДР АНДРЕЕВИЧ^{1,2}

SAPEGHIN ALEXANDER A.^{1,2}

БАРАБАНЕНКОВ МИХАИЛ ЮРЬЕВИЧ^{1,3}

BARABANENKOV MIKHAIL YU.^{1,3}

ИТАЛЬЯНЦЕВ АЛЕКСАНДР ГЕОРГИЕВИЧ¹

ITALYANTSEV ALEXANDER G.¹

¹ ПАО «НИИ молекулярной электроники»

¹ “Research Institute of Molecular Electronics” JSC

² Московский физико-технический институт

² Moscow Institute of Physics and Tehnology (State University)

(Государственный университет)

³ ФГБУН Институт проблем технологии микроэлектроники
и особочистых материалов РАН

³ Institute of Microelectronics Technology RAS

Приведены результаты теоретических расчетов частотной зависимости собственных мод, их ширин, добротности дискретных резонаторов, состоящих из одной или нескольких металлических наночастиц в зависимости от их взаимного расположения, формы и размера. Исследованы частотные фильтрующие свойства конечной линейной цепочки наночастиц золота в видимом диапазоне длин волн.

Ключевые слова: кластер наночастиц; собственная мода; рассеяние Ми; резонатор; добротность; частотный фильтр.

The report presents the results of theoretical calculations of the frequency dependence of the eigenmodes, their widths, Q-factor of discrete resonators consisting of a single or a few metal nanoparticles on their mutual arrangement, shape and size. Frequency filtering properties of a finite linear chain of gold nanoparticles in the visible wavelength range have been investigated.

Keywords: nanoparticle cluster; eigenmode; Mie scattering; resonator; Q-factor; frequency filter.

ВВЕДЕНИЕ

Прогресс во многих областях современной науки и техники связан с проблемой увеличения скорости обработки и передачи информации. Решение проблемы с помощью электронных интегральных схем (ИС), очевидно, достигает физического предела [1]. Действительно, характерные размеры логических элементов составляют несколько нанометров. Дальнейшее уменьшение размера канала транзистора приближает его к размеру нескольких атомов, что обуславливает существенный вклад квантовых флуктуаций в свойства транзисторов. Кроме того, при уменьшении элементов и увеличении быстродействия возрастают тепловые потери при ограниченности теплоотвода от ИС. Одним из альтернативных путей является разработка гибридных фотонных ИС (ФИС), так как (а) скорость передачи электромагнитного (ЭМ) сигнала происходит со скоростью переноса энергии ЭМ поля в среде распространения; (б) при передаче и обработке сигнала выделяется меньше тепла; (в) в используемом диапазоне плотности энергии ЭМ поля отсутствует фотон — фотонное рассеяние; (г) существенно шире динамический частотный диапазон (несущая частота, составляющая 10^{15} Гц для видимого диапазона, превосходит предел электронных технологий, с максимальной частотой 10^{11} Гц, на 3–4 порядка). Перечисленные факторы объясняют существенный интерес к ФИС как к перспективной замене ИС лидирующих технологических корпораций (Fujitsu, Intel, IBM) [2].

Одним из основных компонентов ФИС, в частности, интегральных устройств радиофотоники (взаимодействие

субмикронных систем с СВЧ радиосигналом), являются микро-, нанорезонаторы и волноводы, служащие как для передачи ЭМ сигнала, так и для его обработки. Отметим, что расчет и оптимизация резонаторов и волноводов ФИС невозможна на основе известных методов расчета электронных ИС. Необходимо учитывать ряд новых волновых параметров, таких как длина ЭМ волн, ее фаза и поляризация, а также профиль моды в поперечном сечении волноводов.

Волноводное распространение ЭМ излучения происходит, как известно, в режиме полного внутреннего отражения (например, оптоволокно), или брегговского рассеяния (рентгеновский волновод в 1D брегговском зеркале), или обусловлено сочетанием многократного рассеяния брегговского типа и микроскопического резонансного рассеяния Ми в фотонных кристаллах. Каждый резонансный рассеиватель (например, фотонного кристалла), обычно это стержень, пора или сфера, может быть рассмотрен как резонатор. В 1998 году было предложено использовать цепочку волновым образом связанных резонаторов в качестве оптического волновода [3], с существенно субволновым поперечным сечением. Потери в таких волноводах могут быть ничтожно малы, а форма изменчива, что существенно при конструировании ФИС. В настоящее время известно, что ЭМ свойства цепочек наночастиц-резонаторов определяются рядом параметров, таких как материал, форма, размер частиц, величина зазора между частицами, количество частиц в цепочке, форма цепочки, наличие подложки и окружающей среды. Кроме ФИС, применение резонаторов



и волноводов из наночастиц рассматривается в таких отраслях, как современная медицина, нанобиотехнологии, фотохимия, спектроскопия. Наличие ряда параметров, определяющих ЭМ свойства кластеров наночастиц, в совокупности с разнообразием их возможного практического применения объясняет значительное количество публикаций на данную тему в мировой научной периодике.

В настоящей работе приведены результаты теоретических расчетов собственных мод, их ширины, добротности дискретных резонаторов, состоящих из одной или нескольких наночастиц, в планарной геометрии в зависимости от их взаимного расположения, формы, материала и размера, а также расчеты фильтрующих свойств цепочки сферических наночастиц в видимом диапазоне длин волн в зависимости от длины цепочки частиц золота. Расчеты проведены на основе метода квантовомеханического квази-сепарабельного Т-оператора рассеяния для решения задач многократного рассеяния ЭМ волн на ансамблях диэлектрических частиц с учетом их проводимости [4]. Физически, Т-оператор рассеяния ансамбля частиц непосредственно связан с электрическими токами, возбуждаемыми в частицах падающей ЭМ волной. Поэтому метод [4] позволяет рассчитать и частотные зависимости собственных мод произвольного кластера частиц произвольной формы, и самосогласованные токи, возбуждаемые в частицах кластера внешним ЭМ полем.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Пусть на кластере из N малых частиц рассеивается монохроматическая плоская волна

$$E^{(0)}(\mathbf{r}) = E^{(0)} \mathbf{e}^{(0)} \exp(ik_0 s^{(0)} \mathbf{r}) \quad (1)$$

с амплитудой $E^{(0)}$, единичными векторами поляризации $\mathbf{e}^{(0)}$ и направления распространения $\mathbf{s}^{(0)}$, соответственно, и волновым числом k_0 в свободном пространстве. В приближении электрического дипольного рассеяния в частицах с номерами $j = 1, 2, \dots, N$ падающая волна возбуждает самосогласованные токи со скалярными амплитудами [4]

$$I^{(j)} = t_a E^{(0)}(\mathbf{r}_j) + t_a \sum_{j' \neq j} e^{(0)} G^{(0)}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}) e^{(0)} I^{(j')}, \quad (2)$$

где $G^{(0)}(\mathbf{r})$ — электрическая тензорная функция Грина свободного пространства, $t_a = -4\pi k_0^2 \eta$ — амплитуда электрического дипольного рассеяния уединенной частицы, $\eta = (3i/2k_0^3) a_{(M)}$ — поляризуемость частицы, которая выражается через парциальный коэффициент рассеяния теории Ми [5]. Если кластер находится в плоскости xu прямоугольной системы координат xuz и падающая волна (1) распространяется параллельно этой плоскости, а поляризована перпендикулярно ей, то система алгебраических уравнений (2) упрощается к виду

$$\sum_{j'=1}^N A_{jj'} I^{(j')} = t_a E^{(0)}(\mathbf{r}_j) \equiv a_j, \quad A_{jj'} = \delta_{jj'} - a_{jj'}, \quad a_{jj} = 0, \quad (3)$$

где $E^{(0)}(\mathbf{r}_j)$ обозначает скалярную часть плоской падающей волны (1). Безразмерная величина $a_{jj'}$ описывает волновое взаимодействие частиц j и j' , находящихся на расстоянии $r_{jj'}$ в плоскости их расположения. В частности, $a_{j2} = t_a G_0^1(\mathbf{r}_{j2})$, где $G_0^1(\mathbf{r})$ — поперечная по отношению к вектору \mathbf{r}_2 составляющая функции Грина. На расстояниях, малых по сравнению с длиной волны, эта составляющая имеет асимптотику

$$G_0^1(\mathbf{r})|_{k_0 r \rightarrow 0} \approx (k_0 / 4\pi) (1 / k_0^3 r^3 - i2 / 3). \quad (4)$$

Мнимый член в правой части (4) связан с потерями энергии на излучение.

Матрица A_N алгебраической системы уравнений (3) имеет равные элементы вдоль каждой диагонали, параллельной главной, т. е. является теплицевой. Кроме того, сумма элементов каждой строки этой матрицы имеет одно и то же значение, что является характерным свойством стохастических матриц. Хотя истинно стохастическая матрица имеет положительные элементы, указанное стохастическое свойство матрицы (3) позволяет автоматически указать ее собственный вектор-моду, которую назовем стохастической или основной. В основной моде у всех частиц возбуждаются одинаковые токи и ей отвечает собственное значение, совпадающее с суммой элементов матрицы в каждой строке. Наряду с основной модой, у матрицы (3) существуют другие моды-обертоны, для которых возбуждаемые в частицах токи имеют разные значения. Все собственные моды матрицы (3) находятся как аналоги волн Блоха в периодических структурах [5] с правилом согласования токов в соседних частицах кольцевой цепочки с естественным условием периодичности

$$I^{(j)} = p I^{(j-1)}, \quad I^{(N+1)} = I^{(1)}. \quad (5)$$

Параметр согласования токов p в соседних частицах находится из условия периодичности (3) и определяется как

$$p^N = 1, \quad p = \exp(i2\pi m / N), \quad (6)$$

где $m = \pm 1, \pm 2, \dots$. Условия (3, 4) позволяют выписать все N собственных мод матрицы (2), которые удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{j \neq j'=1}^N A_{jj'} I^{(j')} = \lambda I^{(j)}. \quad (7)$$

После этого удастся выписать явно соответствующие этим модам собственные значения λ_j матрицы (7), не решая фактически детерминантного уравнения $\det(A_N - \lambda I) = 0$.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО СЧЕТА

На рис. 1. приведена частотная зависимость обратной величины собственного значения $\lambda_1 = t_a / \Gamma_0$ единственной собственной моды сферической уединенной частицы Au разного размера. В численных расчетах данные о частотной дисперсии диэлектрической проницаемости заимствованы из [6, 7]. Частота ЭМ волны нормирована на плазменную частоту золота $\omega_{pl}(Au) = 12,9936 \cdot 10^{15}$ рад/сек [6]. Отметим, что при $r_0 < 150$ нм частотная зависимость $1/\lambda_1$ гладкая и экстремумов не имеет, т. е. частицы не являются резонаторами в видимом и ближнем ИК диапазонах. Как видно из рис. 1, с укрупнением частицы и ростом частоты ЭМ волны, последовательно возбуждаются моды частицы. Мы ограничимся первыми двумя модами (рис. 1, пики 1 и 2). Добротность мод Q определим как обычно $Q = \omega / \Delta\omega$ через отношение частоты максимума к ширине пика.

Как видно из рис. 2, низкочастотная мода (рис. 2, кривая 1) имеет два пика добротности (рис. 2, пики 1' и 1'') в рассматриваемом диапазоне размеров частиц. Первый пик (1') соответствует радиусу частицы, равному половине длины падающей волны $r_0 \sim \lambda_0 / 2$ ($r_0 = 350$ нм, $\lambda_0 = 712$ нм), второй пик (1'') соответствует $r_0 \sim \lambda_0$ ($r_0 = 700$ нм, $\lambda_0 = 1540$ нм). Вторая, более высокочастотная

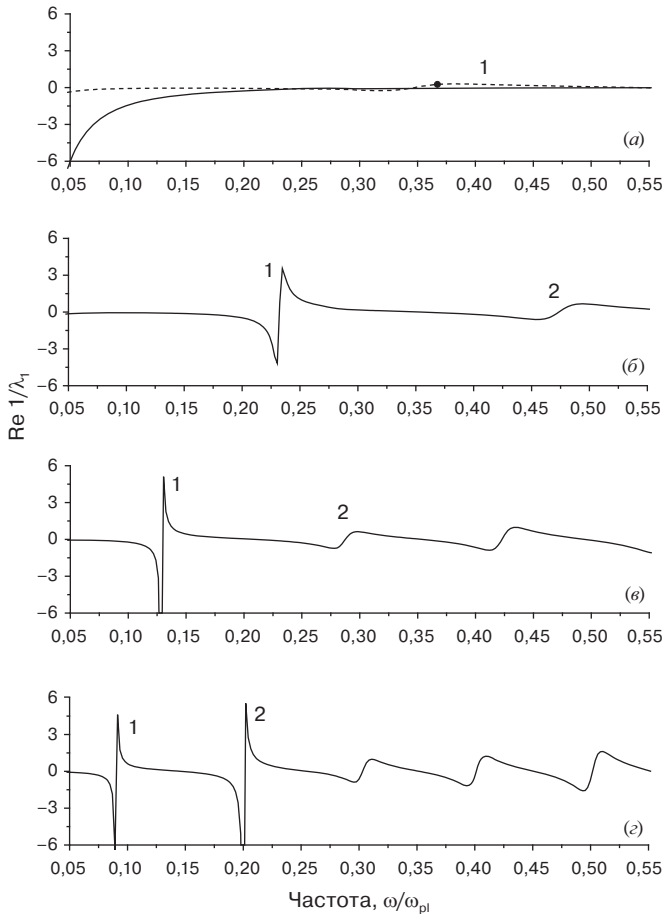


Рис. 1. Частотная зависимость обратной величины собственного значения $\lambda_1 = t_a/r_0$ единственной собственной моды уединенной частицы A_1 радиусом $r_0 = 50$ и 200 нм (сплошная и пунктирная линии панели а), 300 нм (б), 500 нм (в) и 700 нм (г). Цифрами 1 и 2 обозначены локальные пики на кривых. На панели (а) пик 1 на пунктирной кривой обозначен черной точкой

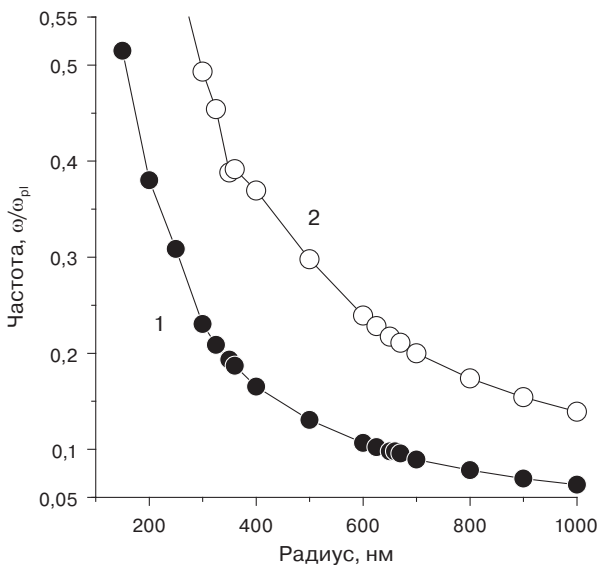


Рис. 3. Частотное положение пиков 1' (кривая 1, ●) и 2' (кривая 2, ○), изображенных на рис. 2

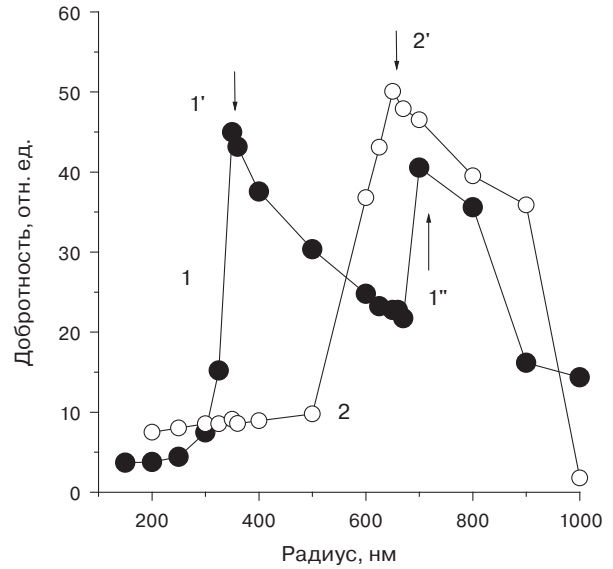


Рис. 2. Зависимость добротности Q уединенной A_1 сферической частицы от ее радиуса. Кривые 1 (●) и 2 (○) соответствуют аналогичным пикам на рис. 1

мода, имеет один пик (2') в том же диапазоне размеров частицы, соответствующий $r_0 \sim \lambda_0$ ($r_0 = 650$ нм, $\lambda_0 = 634$ нм). Частотное положение пиков добротности показано на рис. 3.

В случае димера с радиусом частиц r_0 матрица A_2 имеет две собственные моды с собственными значениями $\lambda_1 = 1 - a_{12}$ и $\lambda_2 = 1 + a_{12}$. Собственные значения стохастической моды и обертона даются выражениями

$$t_a / \lambda_1 = 4\pi k_0^2 r_0^3 \omega_p^2 \left[\omega^2 - \omega_+^2 + i(\Delta\omega_+)^2 \right]^{-1} \quad (8)$$

$$t_a / \lambda_2 = 4\pi k_0^2 r_0^3 \omega_p^2 \left[\omega^2 - \omega_-^2 + i(\Delta\omega_-)^2 \right]^{-1} \quad (9)$$

соответственно. Здесь использованы обозначения

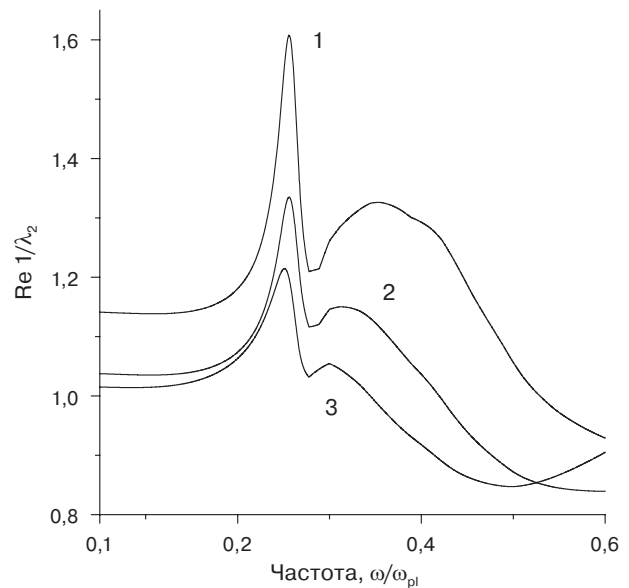


Рис. 4. Частотная зависимость обратной величины собственного значения λ_2 оберточной моды димера A_1 частиц радиусом $r_0 = 51$ нм без зазора (кривая 1) и с зазором между частицами 50 (2) и 100 (3) нм

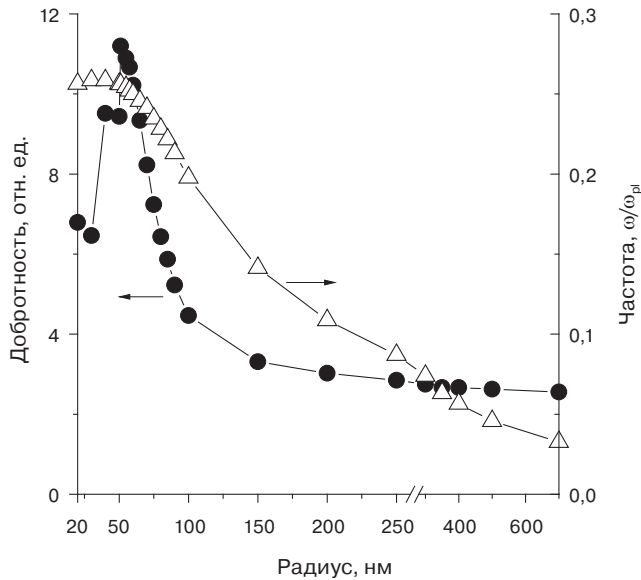


Рис. 5. Добротность обертона (λ_2) плотного димера сферических Au частиц различного радиуса (символы ●, левая ось ординат) и соответствующая частота (Δ , правая ось ординат)

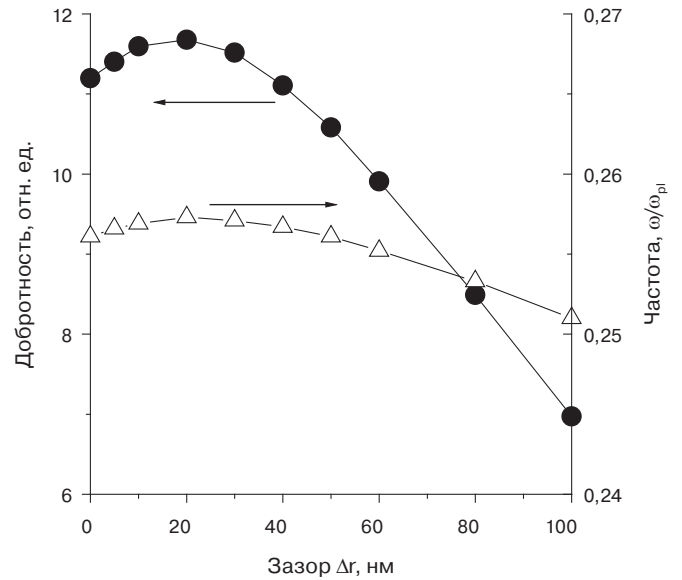


Рис. 6. Добротность обертона (λ_2) димера сферических Au частиц радиуса 51 нм (символы ●, левая ось ординат) и соответствующая частота (Δ , правая ось ординат)

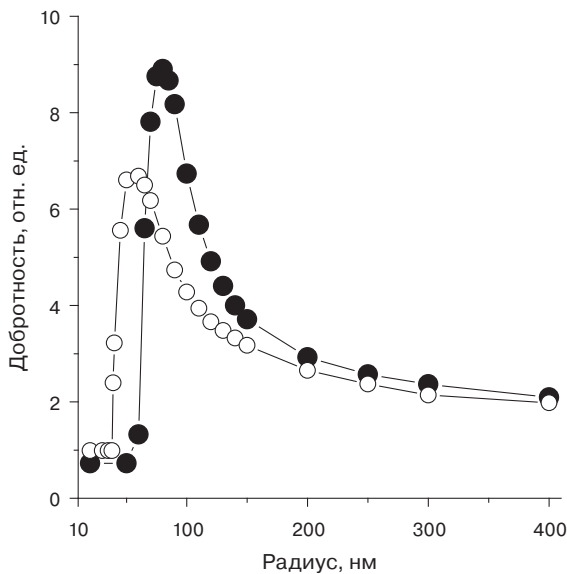


Рис. 7. Добротность обертона (λ_3) плотного кластера из 4 сферических частиц Au (символы ●) и Ag (○) различного радиуса

$$(\omega_+/\omega_p)^2 = 1 + (r_0/r)^3 r_0^3 (1 - k_0^2 r^2/2), \quad (\Delta\omega_+/\omega_p)^2 = 2(\Delta\omega_p/\omega_p)^2 \quad (10)$$

Плазменная резонансная частота ω_p связана с диэлектрической проницаемостью частицы ϵ соотношением $\epsilon/\epsilon_0 = 1 - 3\omega_p^2/\omega^2$. Через ϵ_0 обозначена диэлектрическая проницаемость свободного пространства. Полуширина плазменного резонанса $\Delta\omega_p$ дается соотношением $(\Delta\omega_p/\omega_p)^2 = (2/3)(k_0 r_0)^3$. Расстояние между центрами частиц димера обозначено как g . При вычислении собственных значений $\lambda_{1,2}$ мод димера использовано асимптотическое выражение для параметра волнового взаимодействия двух частиц

$$a_{12} = \left\{ \omega_p^2 - \omega_-^2 - i \left[(\Delta\omega_p)^2 - (\Delta\omega_-)^2 \right] \right\} \left[\omega^2 - \omega_p^2 + i(\Delta\omega_p)^2 \right]^{-1}, \quad (11)$$

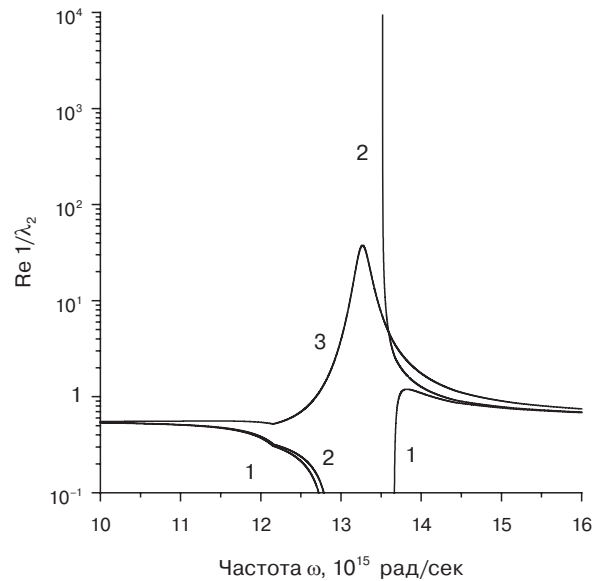


Рис. 8. Частотная зависимость обратной величины собственного значения λ_4 оберточной моды квадратного кластера Al цилиндров при радиусе упаковки $R = 290$ (кривая 1), 291.47 (2) и 300 (3) нм

в котором

$$(\omega_-/\omega_p)^2 = 1 - (r_0/r)^3 (1 - k_0^2 r^2/2) \quad (12)$$

$$\text{и} \quad (\Delta\omega_-/\omega_p)^2 = (k_0 r_0)^3 (k_0 r)^2/8 = (3/16)(\Delta\omega_p/\omega_p)^2 (k_0 r)^2 \quad (13)$$

Расчеты показывают, что более высокую добротность имеют пики на частотной зависимости обертона димера из частиц Au. Рис. 4 иллюстрирует такие частотные зависимости для плотного димера и димера с зазорами между частицами. Максимальная добротность соответствует радиусу частиц $r_0 = 51$ нм (см. рис. 5). Сравнение рис. 2 и 5 показывает, что добротность димера как резонатора в несколько раз меньше уединенной частицы и падает

с увеличением зазора между частицами (рис. 6). Димер имеет меньшую добротность вследствие больших потерь на излучение ЭМ поля.

Уменьшение добротности наблюдается и в случае кластера из 4 металлических частиц, центры которых находятся на окружности радиуса $R = 2\gamma_0/2^{1/2}$ (плотная упаковка). На рис. 7. приведены графики зависимости добротности для кластеров из 4 частиц Au и Ag при различных радиусах частиц.

Заметим, что существенно большую добротность могут иметь дискретные резонаторы, состоящие из цилиндрических частиц. Кривая 2 на рис. 4 иллюстрирует очень узкий пик на частотной зависимости обратной величины собственного значения λ_4 четвертой моды плотной квадратной упаковки цилиндрических частиц Al. Добротность такого резонатора может достигать тысячи.

Вернемся к системе уравнений (3) и рассчитаем самосогласованные токи, возбуждаемые в частицах кластера внешним ЭМ полем. Рассмотрим кластер сферических золотых частиц в виде их плотной свободно висающей линейной цепочки. Предположим, что ЭМ волна (1) поляризована перпендикулярно оси цепочки и возбуждает только первую частицу цепочки. Детали расчета приведены в [8]. Рис. 9. иллюстрирует фильтрующие свойства линейной цепочки из N сферических частиц Au радиусом 74 нм. Через N_f обозначен номер частицы в цепочке, в которой ток составляет более 10% от тока, наведенного в первой частице. Если для некоторой частоты $N_f = N$, значит цепочка прозрачна для этой частоты по указанному выше критерию.

НОВИЗНА РЕЗУЛЬТАТОВ

Авторы считают, что в данной работе новыми являются частотные характеристики собственных мод кластеров, образованных несколькими резонансными наночастицами, и численные значения добротности этих мод. Численно показано, что добротность дискретного резонатора, состоящего из нескольких наночастиц, существенно зависит от размерности наночастиц. В частности, впервые показано, что добротность резонаторов, состоящих из сферических и цилиндрических металлических наночастиц, может различаться на два порядка величины. Также, новыми являются расчеты фильтрующих свойств свободно висающей цепочки золотых частиц в видимом диапазоне длин волн.

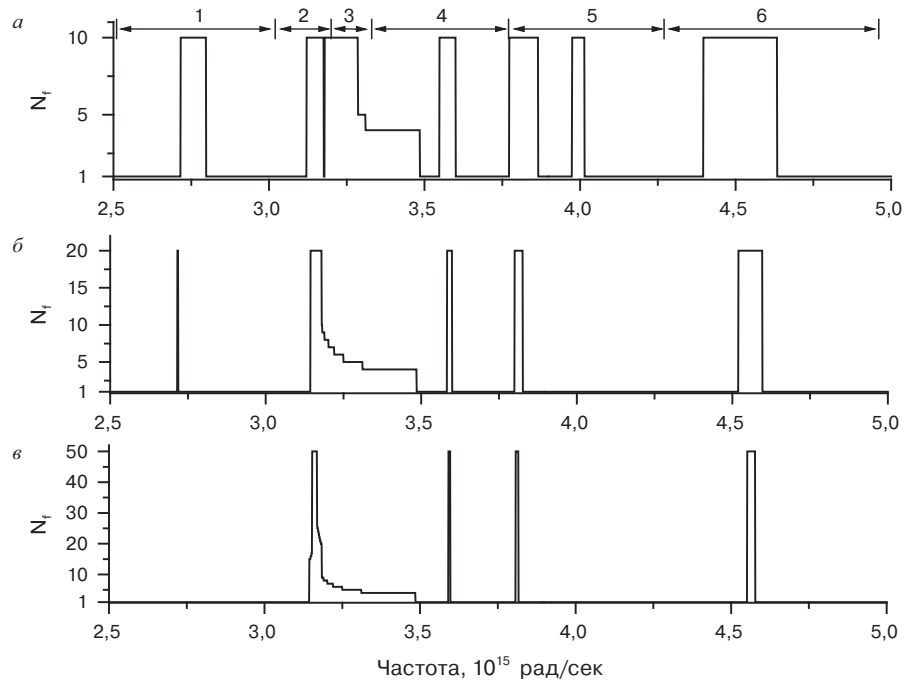


Рис. 9. Частотные спектры прозрачности линейных цепочек Au частиц радиусом 74 нм, состоящих из $N = 10$ (а), 20 (б) и 50 (в) частиц. Цифрами обозначены интервалы видимого спектрального диапазона: красный (1), оранжевый (2), желтый (3), зеленый (4), синий (5), фиолетовый (6)

ЛИТЕРАТУРА

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А. // Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития. — Нано- и микросистемная техника. 2009. № 1. — С. 2–5.
2. Макушин М., Хомчик А. // Современное состояние и перспективы развития фотонных ИС. Экспресс-информация по зарубежной электронной технике. 2017. Вып. 10.
3. Quinten M., Leitner A., Krenn J. R., Aussenegg F. R. // *Electromagnetic Energy Transport Via Linear Chains of Silver Nanoparticles*, Opt. Lett. 1998. Vol. 23, pp. 1331–1333.
4. Барабаненков Ю.Н., Барабаненков М.Ю. // Метод квазисепарабельного Т-оператора рассеяния для прямого вычисления локальных полей в задачах многократного рассеяния волн. Журнал радиоэлектроники, 2013 № 4. — С. 1.
5. Yariv A. // *Optical Waves in Crystals. Propagation and Control of Laser Radiation*. N.Y.: Wiley, 1984.
6. Blaber M. G., Arnold M. D., Ford M. J. // *Search for the Ideal Plasmonic Nanoshell: The Effects of Surface Scattering and Alternatives to Gold and Silver*, J. Phys. Chem. C. 2009. Vol. 113, pp. 3041–3045.
7. Weber M. J. (ed.) // *Handbook of Optical Materials, Laser and Optical Science and Technology Series*, N.Y., The CRC Press, 2003.
8. Barabanenkov Yu. N., Barabanenkov M. Yu. // *Radiation Losses and Dark Mode at Light Guiding by a Liner Chain of Nanoparticles*. JOSA A. 2017. Vol. 34, pp. 321–330.