

### **Тема работы:**

«Моделирование оптических характеристик диэлектрических микро- и нанорезонаторов на основе кремния со встроенными в них излучателями (квантовыми точками)».

Владимир Анатольевич Зиновьев, Сергей Алексеевич Рудин, ИФП СО РАН, 21.6.2024

### **Состав коллектива.**

- Зиновьев Владимир Анатольевич (с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н., zinoviev@isp.nsc.ru),
- Рудин Сергей Алексеевич (м.н.с. ИФП СО РАН, rudin@isp.nsc.ru),
- Смагина Жанна Викторовна (с.н.с. ИФН СО РАН, к.ф.-м.н., smagina@isp.nsc.ru);
- Шкляев Александр Андреевич (в.н.с. НГУ, д.ф.-м.н., shklyaev@isp.nsc.ru);
- Армбристер Владислав Андреевич (инженер ИФП СО РАН, armer@isp.nsc.ru).

### **Информация о гранте.**

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 21-72-20184).

### **Аннотация.**

С помощью программного комплекса COMSOL Multiphysics были проведены расчёты распределения компонент ближнего и дальнего поля, а так же дисперсионные зависимости излучательной способности собственных мод для структур с линейными периодическими цепочками Si нанодисков со встроенными в них GeSi квантовыми точками. Результаты теоретических расчётов были сопоставлены данными экспериментальных измерений, проведённых методом микро – фотолюминесценции. Сравнительный анализ позволил заключить, что формирование линейных цепочек из дисковых резонаторов на поверхности эпитаксиальной структуры с квантовыми точками приводит к усилению интенсивности и направленности излучения квантовых точек. В спектрах фотолюминесценции исследованных структур обнаружены узкие пики, связанные с высокодобротными коллективными модами в линейных цепочках. Теоретический анализ зависимости добротности мод от параметров линейных цепочек показал, что при определенных параметрах могут реализоваться состояния близкие по природе к симметрично-защищенным связанным состояниям в континууме.

### **Научное содержание работы.**

#### **Постановка задачи.**

Предлагается, с помощью программного комплекса COMSOL Multiphysics провести теоретический расчёт оптических свойств линейных периодических цепочек кремниевых дисковых резонаторов, расположенных на SiO<sub>2</sub> подложке, со встроенными в них излучателями (квантовыми точками) в зависимости от размеров резонаторов и периода линейной цепочки.

#### **Современное состояние проблемы.**

В настоящее время одним из активно развиваемых направлений фотоники, является создание искусственных резонансных микро- и наносистем, в которых происходит значительное усиление взаимодействия излучения со средой [1]. Развитие диэлектрических и плазмонных резонаторов на базе полупроводниковых структур привело к созданию мощных, вертикально излучающих лазеров [2], однофотонных источников [3], наноантенн для управления распространением излучения [4], волноводов и лазеров субволнового размера [5]. Можно отметить, что вышеперечисленные результаты были получены на широком классе полупроводниковых структур. В то же время основным материалом современной электроники является кремний. Ожидается, что использование микро- и нанорезонаторов позволит решить одну из главных проблем кремниевой оптоэлектроники – создание на кремниевой подложке эффективного

источника излучения ближнего инфракрасного диапазона, совместимого с кремниевой интегральной технологией.

### Список цитируемой литературы:

- [1] Kerry J. Vahala, Optical microcavities. Nature **424**, 839–846 (2003).
- [2] K. Hirose et al., Watt-class high-power, high-beam-quality photonic-crystal lasers. Nature Photonics **8**, 406 (2014).
- [3] P. Senellart, High-performance semiconductor quantum-dot single-photon sources. Nature Nanotechnology **12**, 1026 (2017).
- [4] L. Tong et al., Highly directional bottom-up 3D nanoantenna for visible light. Scientific Reports **3**, 2311 (2013).
- [5] Mark I Stockman et al., Roadmap on plasmonics. Journal of Optics **20**, 043001 (2018).

### Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Для проведения теоретического исследования оптических свойств линейных периодических цепочек кремниевых нанодисков со встроенными в них квантовыми точками в программе COMSOL Multiphysics была создана модельная структура. Данная структура представляла собой подложку SiO<sub>2</sub> с расположенной на ней цепочкой из Si нанодисков. Над структурой располагалась внешняя среда с показателем преломления воздуха. Рассматривалось два случая: линейная цепочка с конечным количеством дисков и бесконечная цепочка. В первом случае использовались граничные условия обеспечивающие затухание амплитуды электрического поля на бесконечности. Во втором случае на боковых гранях модельной ячейки, ориентированных перпендикулярно направлению цепочки дисков, использовались периодические граничные условия, а во всех других направлениях граничные условия соответствовали затуханию амплитуды электрического поля на бесконечности. Подложка SiO<sub>2</sub> предполагалась полубесконечной, так же как и слой воздуха над структурой. Параметры модельных цепочек дисковых резонаторов соответствовали экспериментальным структурам (рис.1). Диаметры Si дисков в цепочках варьировались от 660 до 770 нм и период от 1 до 3 мкм. Высота Si дисков составляла 440 нм. Количество дисков  $N$  в цепочке менялось от 2 до 51.

### Полученные результаты.

Моделирование показало, что для одиночного резонатора ( $N=1$ ) с радиусом 385 нм в области 790-870 мэВ существует двукратно-вырожденная высокодобротная мода с азимутальным числом  $m=3$  (магнитный октуполь). Обнаружено, что даже для очень короткой цепочки ( $N=2$ ) происходит снятие вырождения и образуются две коллективные моды с различным направлением электрического поля относительно линии цепочки. Одна из мод, с большей амплитудой электрического поля в зазоре между дисками, смещается по шкале энергии вниз, а другая — вверх. В дальнейшем мы будем называть первую моду с преимущественным распространением электрического поля вдоль цепочки - «продольной» (см. верхнюю вставку на рис. 2), а вторую моду с преимущественным распространением электрического поля поперек цепочки - «поперечной» (нижнюю вставку на рис. 2). Было получено, что добротность «поперечной» моды возрастает с увеличением длины цепочки, в то время как добротность «продольной» моды имеет тенденцию стабилизироваться на уровне 200 после начального роста. Для «поперечной» моды расчётная добротность достигает значения  $\sim 2900$  при  $N = 51$ . Для случая бесконечной цепочки дисковых резонаторов был проведён расчёт теоретических значений добротности «продольной» (кривая 1, рис.3) и «поперечной» (кривая 2, рис.3) коллективных мод от зависимости от волнового числа  $k_x a/\pi$ , где  $k_x$  – проекция волнового вектора на ось  $x$  направленную вдоль цепочки и проходящую через центры дисков на их полувывоте,  $a$  – период цепочки. Из полученных зависимостей следует, что «поперечная» мода ведет себя подобно симметрично-защищенному связанному состоянию в

континууме (ССК) [Z. F. Sadrieva et al. Phys. Rev. A **99**, 053804 (2019)], поскольку добротность этой моды достигает максимума при нулевом значении волнового вектора ( $k_x = 0$ ). Тогда, как «продольная» мода оказалась подобна другому типу высокодобротного состояния, а именно параметрическому ССК [M.S. Sidorenko et al. Phys. Rev. A. **15**, 034041 (2021)], поскольку добротность этой моды достигает максимума при ненулевом значении волнового вектора. Интересным результатом теоретического исследования является изменение картины излучения в дальнее поле с увеличением длины цепочки. Для обеих мод было получено, что доля излучения, направленного вверх (по нормали к поверхности структуры) заметно возрастает с увеличением  $N$  (рис. 3). Тогда как, для  $N=1$  излучение вверх практически отсутствует.

### **Эффект от использования кластера в достижении целей работы.**

Исследование зависимости оптических свойств от геометрических и материальных параметров структур с микро- и нано-резонаторами подразумевает проведение большого количества вычислительных экспериментов. Использование кластера позволяет проводить одновременно десятки модельных расчётов, значительно сокращая время требуемое на проведение исследования.

### **Перечень публикаций, содержащих результаты работы.**

[1] В.А. Зиновьев, Ж. В. Смагина, А.Ф. Зиновьева, Е. Е. Родякина, А. В. Кацюба, К. Н. Астанкова, К. В. Барышникова, М. И. Петров, М.С. Михайловский, В. А. Вербус, М. В. Степихова, А. В. Новиков. Высокодобротные состояния в спектрах излучения линейных периодических цепочек Si нанодисков со встроенными GeSi квантовыми точками. Труды XXVIII Международного симпозиума «Нанозлектроника» (Нижний Новгород, 11–15 марта 2024 г.) Н-25 В 2 томах. Том 2-й. — Нижний Новгород : ИПФ РАН, 2024. с. 669 -670. ISBN 978-5-8048-0124-4.

[2] В.А. Зиновьев, Ж. В. Смагина, А.Ф. Зиновьева, Е. Е. Родякина, А. В. Кацюба, К. Н. Астанкова, К. В. Барышникова, М. И. Петров, М.С. Михайловский, В. А. Вербус, М. В. Степихова, А. В. Новиков. Высокодобротные состояния в спектрах излучения линейных периодических цепочек Si нанодисков со встроенными GeSi квантовыми точками. Журнал «Физика и техника полупроводников» №4 (2024) (*принята к публикации*).

### **Иллюстрации, визуализация результатов.**

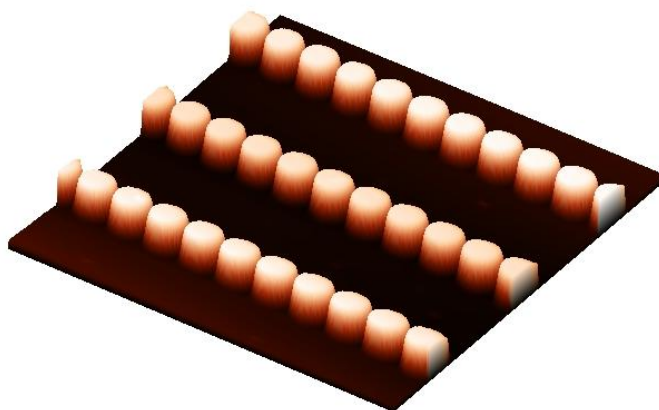


Рисунок 1. Микроскопическое изображение экспериментальной структуры с линейными периодическими цепочками кремниевых дисковых резонаторов со встроенными в них GeSi квантовыми точками, полученное методом атомно-силовой микроскопии. Размер области сканирования составляет  $10 \times 10$  мкм<sup>2</sup>. Диаметр дисков 770 нм, высота 440 нм, период 1 мкм, расстояние между цепочками 3 мкм.

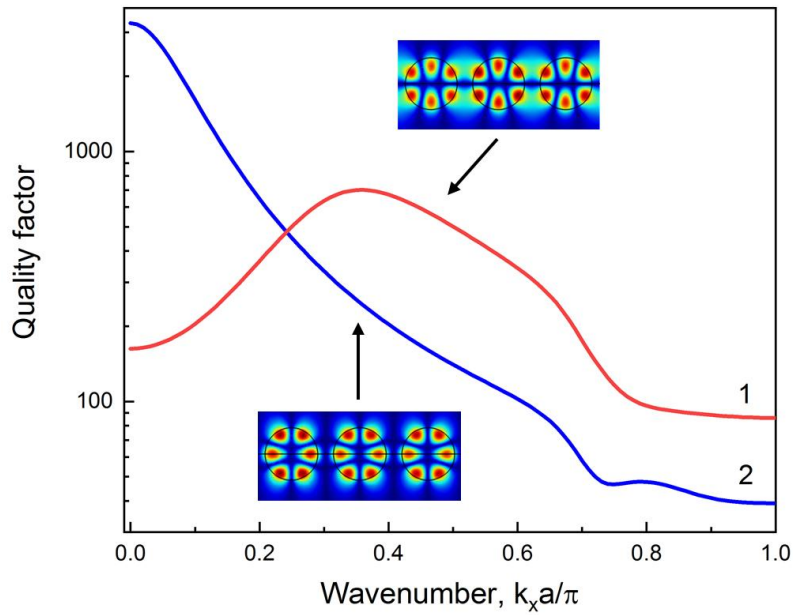


Рисунок 2. Зависимости добротности от волнового вектора  $k_x$  (вдоль линии цепочки), рассчитанные для «продольной» моды (кривая 1) и «поперечной» моды (кривая 2) для случая бесконечной цепочки Si нанодисков. Радиус дисков составлял 385 нм, период – 1 мкм. Расчеты проводились без учёта подложки, а показатель преломления окружающей среды принимался равным 1. Показатель преломления и коэффициент экстинкции Si выбирались согласно данным работы [C. Schinke et al. AIP Advances **5**, 67168 (2015)]. На верхней вставке рисунка показано характерное распределение электрического поля для «продольной» коллективной моды, на нижней вставке - для «поперечной» моды.

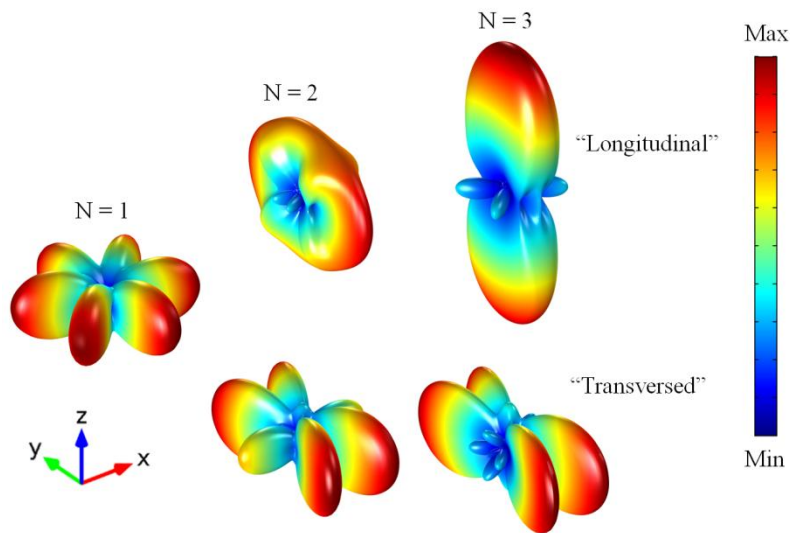


Рисунок 3. Распределение излучения в дальнее поле для цепочки из двух ( $N=2$ ) и трёх ( $N=3$ ) дисков. Картины в верхней части рисунка соответствуют «продольной» коллективной моде, в нижней части рисунка - «поперечной» моде. Распределение с  $N=1$  соответствует случаю одиночного изолированного диска (основная мода - магнитный окуполь).