

Тема работы:

«Моделирование оптических характеристик диэлектрических микро- и нанорезонаторов на основе кремния и германия».

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),
- Ненашев Алексей Владимирович (с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н., nenashev@isp.nsc.ru);
- Зиновьева Айгуль Фанизовна (с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н., aigul@isp.nsc.ru);
- Шкляев Александр Андреевич (в.н.с. НГУ, д.ф.-м.н., shklyaev@isp.nsc.ru);

Информация о гранте.

Грант РФФИ № 23–72–30003

Аннотация.

С помощью программного комплекса COMSOL Multiphysics проведены расчёты распределения компонент ближнего и дальнего поля собственных мод для структур с метаповерхностями в виде квадратных решёток из дисков Ge, расположенных на Si подложках. Получено хорошее согласие результатов модельного расчёта с данными экспериментальных измерений, проведённых методом спектроскопии на отражение света в ближнем инфракрасном диапазоне. Установлено, что оптический отклик сильно зависит от диаметра дисков. Для решёток с субволновым диаметром дисков лежащем в диапазоне от 370 до 580 нм наблюдаются ярко выраженные минимумы в спектрах отражения в диапазоне 1000–2000 нм. В отличие от этого, решётки с большим диаметром диска (1160–1490 нм) демонстрируют спектральную модуляцию отражения в том же диапазоне длин волн. Проведенные расчёты позволили установить, что для малых дисков эффект связан с резонансами Ми, тогда как для больших дисков эффект обусловлен возбуждением круговых резонансов Фабри-Перо. Моделирование показало, что круговые моды Фабри-Перо способствуют перенаправлению падающего света вдоль поверхности подложки. Способность решёток из микродисковых резонаторов изменять направление распространения света может быть использовано для ввода света в оптический волновод.

Научное содержание работы.**Постановка задачи.**

Предлагается, с помощью программного комплекса COMSOL Multiphysics провести моделирование оптических резонансов в ближнем инфракрасном диапазоне для структур с решётками дисков Ge, расположенных на Si подложках в зависимости от их размеров.

Современное состояние проблемы.

В настоящее время одним из активно развиваемых направлений фотоники, является создание одиночных резонаторов и метаповерхностей, в которых происходит значительное усиление взаимодействия излучения со средой [1]. Развитие технологий формирования нано- и микрорезонаторов 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 для широкого класса полупроводниковых структур. В то же время основным материалом современной электроники является кремний. В этой связи в настоящее время актуально стоит задача использования развитых теоретических и экспериментальных подходов для модификации оптических свойств структур, сформированных на кремниевых подложках [6].

Список цитируемой литературы:

- [1] I. Staude, A. E. Miroshnichenko, M. Decker, N. T. Fofang, S. Liu, E. Gonzales, J. Dominguez, T. S. Luk, D. N. Neshev, I. Brener, and Y. Kivshar, Tailoring directional scattering through magnetic and electric resonances in subwavelength silicon nanodisks, *ACS Nano* **7**, 7824 (2013).
- [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).
- [6] I. Staude and J. Schilling, Metamaterial - inspired silicon nanophotonics. *Nature Photonics* **11**, 274 (2017).

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Оптические свойства, включая отражение, поглощение и диаграммы рассеяния, были рассчитаны с помощью моделирования электромагнитных волновых процессов с использованием трёхмерного метода конечных элементов в частотной области, реализованного в программном пакете COMSOL Multiphysics. Параметры модельных объектов соответствовали экспериментальным структурам и представляли собой, два набора решёток Ge дисков, расположенных на Si подложках, различающихся диаметром D дисков и зазором g между ними. В первом наборе значение D варьировалось от 370 до 580 нм при одинаковом значении $g = 840$ нм, а во втором наборе значение D варьировалось от 1160 до 1390 нм, а $g = 70$ нм. Высоты дисков составляла 260 нм. Зависимости показателей преломления и коэффициентов поглощения от длины волны для Si и Ge были взяты согласно данным из работ [C. Schinke et al. *AIP Adv.* **5**, 67168 (2015), T. N. Nunley et al. *J. Vac. Sci. Technol. B* **34**, 061205 (2016)].

Спектральные положения основных дипольных мод в первом наборе дисковых решёток определялись путём решения задачи рассеяния для одиночного дискового резонатора Ge с геометрическими параметрами, соответствующими экспериментальным. Также приводился расчёт диаграмм направленности излучения выходящего из диска. В отличие от задачи рассеяния, которая включает внешнюю плоскую волну, падающую на диск, диаграмма направленности излучения была рассчитана для источника, встроенного в диск. Это приближение с одним диском оправдано, учитывая, что расстояние между дисками в массиве значительно превышает диаметр диска, тем самым минимизируя связь ближнего поля. Для дальнейшей проверки положений резонансных мод были также рассчитаны спектры поглощения одиночного диска Ge. Для второго набора дисковых решёток были рассчитаны спектры отражения и поглощения света для модельной

структуры, представляющей собой бесконечную квадратную решетку из дисков Ge. Использовались периодические граничные условия в плоскости решётки.

Полученные результаты.

Результаты моделирования показали, что для дисковых решёток из первого набора с D от 370 до 580 нм наблюдаемые максимумы (минимумы) в спектрах отражения, в диапазоне 1000–2000 нм, связаны с резонансами Ми (Рис.1). Тогда как для дисковых решёток из второго набора с D от 1160 до 1390 нм эффект спектральной модуляции отражения (Рис.2) обусловлен возбуждением циркулярных (круговых) резонансов Фабри-Перо (Рис.3 и Рис.4). Возбуждение коллективных мод Фабри-Перо происходит в направлениях вдоль рядов и диагоналей дисковой решётки. Моделирование диаграмм рассеяния в дальней зоне и диаграмм излучения для одного большого германиевого диска показали, что круговые моды Фабри-Перо способствуют перенаправлению падающего света вдоль поверхности подложки (Рис.4). При выстраивании дисков в цепочку или решётку за счёт коллективных эффектов такая способность может усиливаться.

Таким образом, полученные результаты продемонстрировали, что решётки Ge дисков с оптимальными параметрами способны направлять падающий свет вдоль плоскости решётки и могут служить эффективным инструментом для ввода световой волны в оптические волноводы.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Исследование зависимости оптических свойств от геометрических и материальных параметров структур с микро- и нанорезонаторами 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. A. A. Shklyayev, D. E. Utkin, V. A. Zinovyev, S. A. Rudin, A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, N. A. Tashkeev, S. L. Veber. Resonances in Ge Disk Lattices on Si at Telecommunication Wavelengths, Phys. Rev. A. 112, 063528 (2025); DOI: 10.1103/9rk1-6rhv
2. Зиновьева А.Ф., Шкляев А.А., Зиновьев А.В., Уткин Д.Е., Рудин С.А., Ташкеев Н.А., Вебер С.Л. Циркулярные резонансы Фабри-Перо в решетках Ge дисков в телекоммуникационном диапазоне длин волн. Тезисы Российской конференции и школы молодых ученых «Фотоника-2025», 8-12 сентября 2025, с.75

Иллюстрации, визуализация результатов.

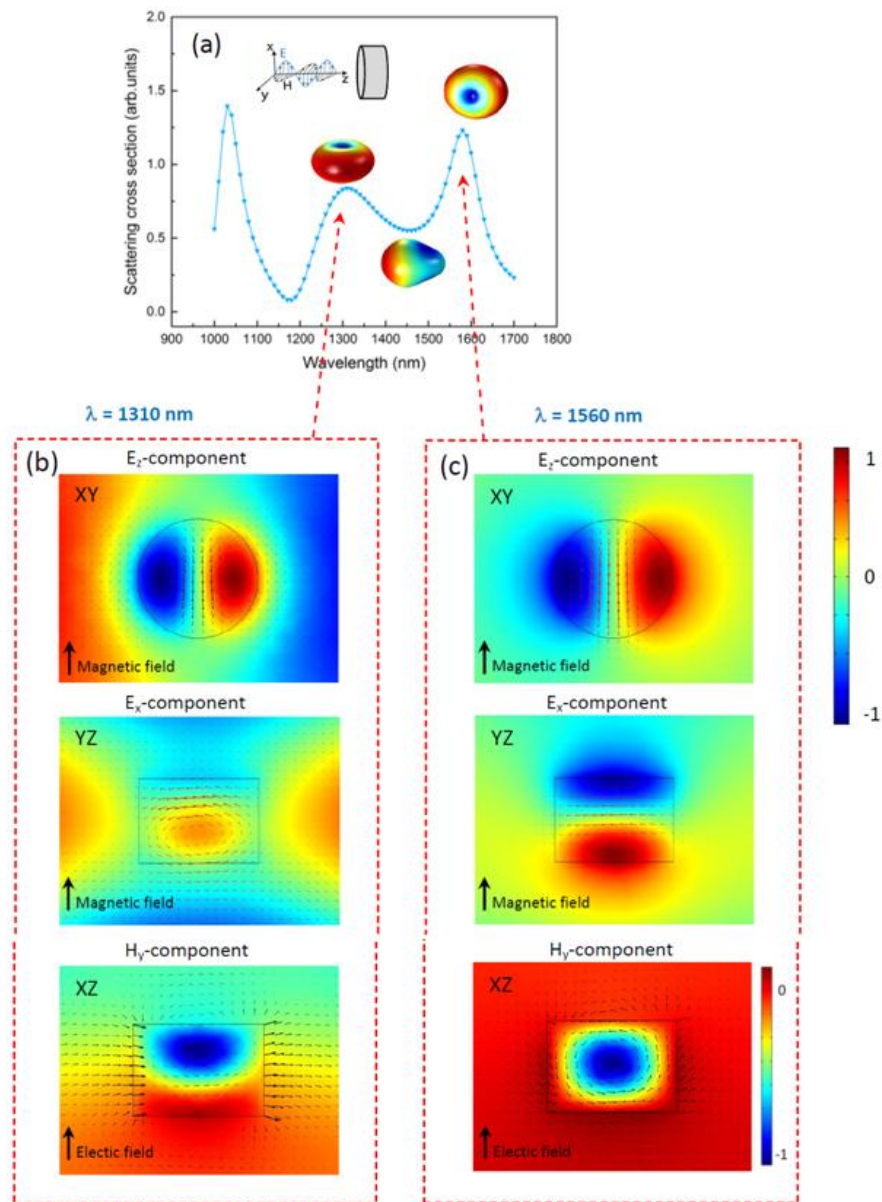


Рисунок 1. (a) - Спектральная зависимость сечения рассеяния для одиночного диска Ge диаметром $D = 370$ нм и высотой $h = 260$ нм. На вставках показаны диаграммы направленности рассеянного излучения в экстремальных точках спектральной зависимости, соответствующих возбуждению электрического диполя (≈ 1310 нм) и магнитного диполя (≈ 1560 нм) модам, а также в точке их перекрытия (≈ 1450 нм); (b) - Распределения электромагнитных полей для электрических (правая колонка) и (c) - магнитных (левая колонка) дипольных мод.

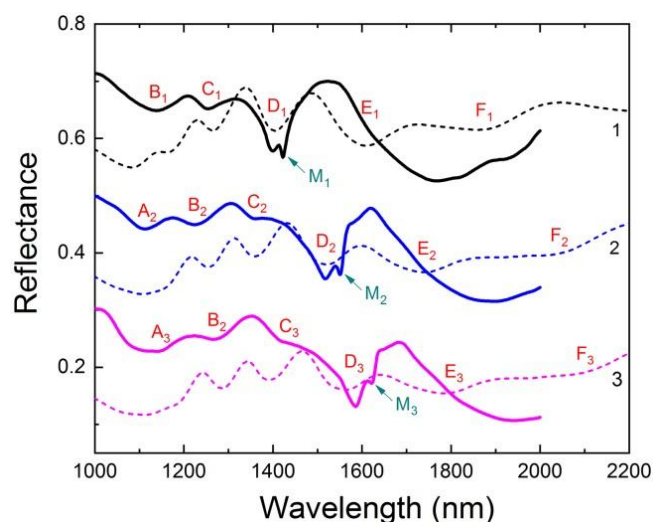


Рисунок 2. Рассчитанные спектры отражения (сплошные линии) для модельных структур, состоящих из дисков Ge, упорядоченных в квадратные решётки. Пунктирные линии представляют соответствующие им экспериментальные спектры. Диаметры дисков D для спектров 1 - 3 составляют 1160 нм (1), 1275 нм (2) и 1340 нм (3), соответственно.

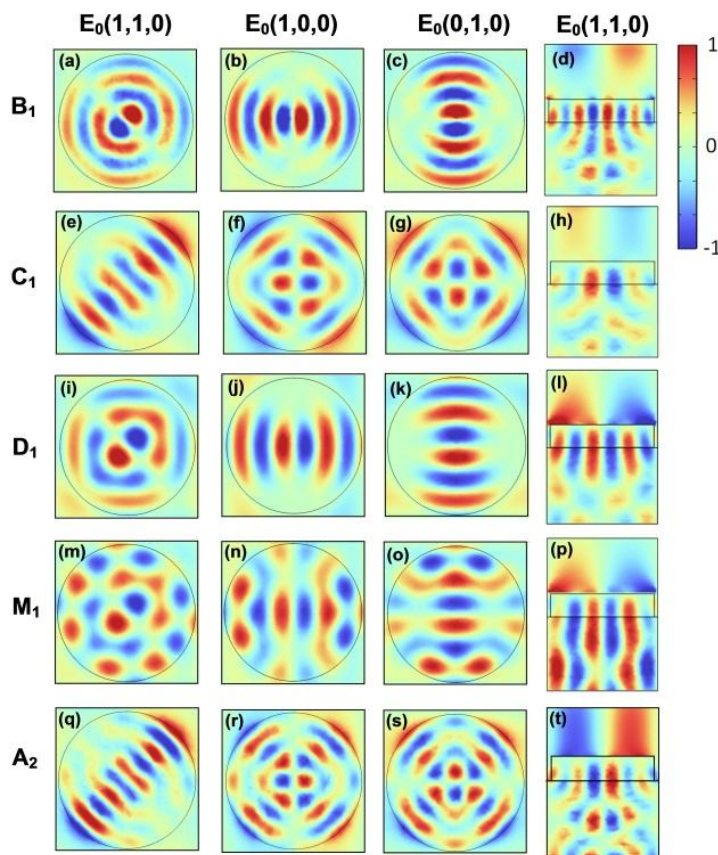


Рисунок 3. Пространственные распределения компоненты электрического поля E_z в плоскости (x, y) на резонансных длинах волн 1140 нм (B_1), 1250 нм (C_1), 1400 нм (D_1), 1425 нм (M_1), 1112 нм (A_2). Сечение (x, y) взято на полувысоте Ge диска. Показан случай нормального падения света с поляризацией $E_0(1,1,0)$ вдоль диагонали решетки (1-й столбец), $E_0(1,0,0)$ в направлении x (2-й столбец) и $E_0(0,1,0)$ в направлении y (3-й столбец). Правый 4-й столбец соответствует распределению поля в сечении (x, z) , проходящем через центр диска.

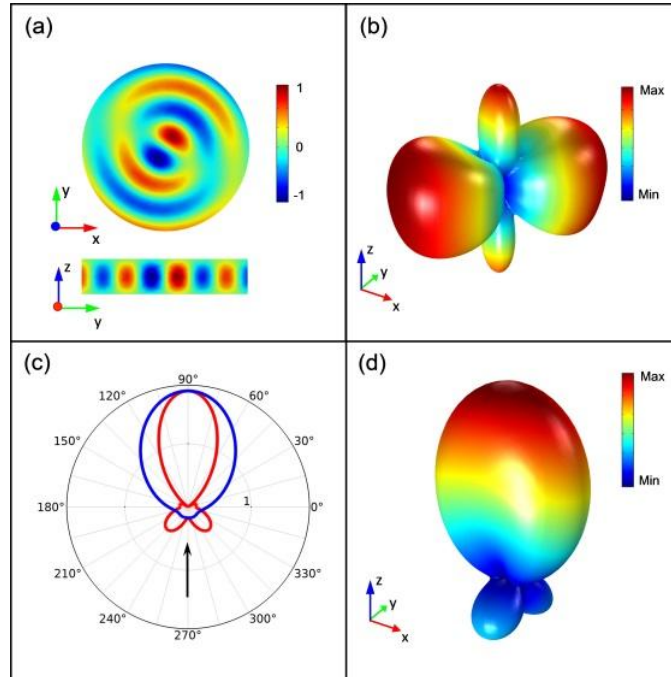


Рисунок 4. (a) - Расчётное пространственное распределение электрической компоненты E_z в плоскостях (x, y) и (y, z) ; (b) - Диаграмма направленности излучения в дальней зоне для циркулярного (кругового) резонанса Фабри-Перо (длина волны 1254.75 нм) в одиночном диске с $D = 1160$ нм и $h = 260$ нм. (c, d) - Двумерные и трёхмерные диаграммы рассеяния в дальней зоне для диска Ge с теми же геометрическими параметрами, что и выше. На панели (c) синяя и красная кривые показывают полярные зависимости для плоскостей XZ и YZ , соответственно. Электромагнитная плоская волна распространяется вдоль оси z . Направление распространения волны на полярной диаграмме указано стрелкой.