

УСЛОВИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОННЫХ ВОЛН В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ «ГРАФЕН/SiO₂»

Гвоздовский Д. Ч.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь*

Стемпицкий В. Р. – канд. техн. наук, доцент

Проведено квантово-механическое моделирование структурных и оптических свойств графена, диэлектрической подложки SiO₂ и гетероструктур на их основе. Расчеты проводились на основе теории функционала плотности DFT с использованием методов, включающих силы Ван-дер-Ваальса. Программный пакет VASP использовался в качестве среды моделирования. Отрицательные участки действительной части диэлектрической проницаемости для чистого графена наблюдаются на частотах от 4,05 до 5,28 эВ. Контакт графена с диэлектрической подложкой может привести к образованию двумерного электронного газа. Величина заряда, который возникает вследствие контакта, составляет 0,07 е/атом.

Основной идеей наноплазмоники является использование поверхностных плазмонных волн (ППВ), которые индуцируются возбужденными зарядами посредством оптического излучения. ППВ существуют на границе раздела диэлектрика и проводника. Данное физическое явление может применяться в качестве различных приложений: химические сенсоры, рамановская спектроскопия с поверхностным усилением (способной обнаруживать одиночную молекулу), оптимизация ячейки солнечного элемента для повышения КПД. Одна из наиболее привлекательных особенностей ППВ заключается в том, что они концентрируют и направляют электромагнитное излучение на субволновых масштабах.

Поверхностные плазмоны (ПП) представляют собой связанные колебания электромагнитного поля и электронов проводимости, распространяющиеся вдоль поверхности проводника. Их можно интерпретировать как электромагнитные волны, захваченные поверхностью металла вследствие взаимодействия со свободными электронами. В ходе этого взаимодействия электроны проводимости коллективно реагируют на электромагнитное воздействие, осциллируя в резонансе со световой волной.

Наиболее распространенными механизмами возбуждения плазмонных волн являются: ослабленное полное отражение, рассеяние на топологическом дефекте на поверхности проводника и брэгговское рассеяние с использованием дифракционных решеток или периодической гофрировки. В графене длина волны ППВ может быть примерно в 40 раз короче, чем длина волны падающего излучения в свободном пространстве. Также графен обладает сильным плазмонным откликом в ТГц диапазоне частот при комнатной температуре.

В [1-3] экспериментально и теоретически изучено распространение поверхностных плазмон-поляритонных волн (ПППВ) на границе раздела двух сред: графена и

диэлектрической подложки. ПППВ проявляют сильную волновую локализацию, умеренную потерю энергии, а их частота может изменяться посредством внешнего электромагнитного поля или химического легирования. В отличие от металлических сред, на границе которых распространение волн ППП происходит в диапазоне инфракрасного и оптического спектра, графен обеспечивает распространение волн в терагерцовом диапазоне. В [4] предложена конструкция плазмонной графеновой нанополоски. Показано, что габаритные размеры таких устройств могут измеряться в нанометрах, но при этом иметь диапазон резонансных частот в терагерцовом диапазоне. Таким образом, гетероструктура, которая состоит из графена и диэлектрической подложки может быть функциональной частью нанополоски, которая базируется на ПППВ, что позволяет при нанометровых геометрических размерах иметь терагерцовый диапазон рабочих частот.

Условием существования ППП на плоской границе двух сред является отрицательное значение диэлектрической или магнитной проницаемости [5]. Исследование возможности реализации в планарной периодической структуре на основе графеновых монослоев и диэлектрической подложки поверхностных волн сводится к поиску частотных областей, где действительная часть эффективной диэлектрической проницаемости принимает значения меньше нуля.

Моделирование структурных и электронных свойств наноразмерных объектов, в частности системы «графен/SiO₂(0001)», является неотъемлемым инструментарием при оптимизации не только состава соединения, но и при получении оптимальных свойств материалов нанoeлектроники. Использование численного эксперимента позволяет удешевить, упростить и ускорить процесс поиска оптимального решения, а в некоторых случаях, дать объяснение возникающим низкоразмерным эффектам.

В качестве среды моделирования структурных и электронных свойств системы «графен/SiO₂(0001)» использовался программный пакет VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [6], который предназначен для выполнения ab initio расчетов квантово-механическими методами [7]. Расчеты выполнялись на основании теории функционала плотности DFT (Density functional theory) [8].

Отклик материала на воздействие электрического поля световой волны полностью определяется его диэлектрической проницаемостью при этой частоте. Диэлектрическая проницаемость материала с любой конечной (не равной нулю) электрической проводимостью является комплексной величиной, то есть её можно записать как сумму действительной и мнимой частей. Для расчета обеих этих компонент для графена в настоящей работе учитываются разные поляризации электрического поля относительно оси *c* (которая перпендикулярна плоскости листа графена). Это среднее значение рассчитывается как для плоской поляризации света ($E_{\perp c}$), так и для поляризации вне плоскости или параллельно оси *c* ($E_{\parallel c}$).

На рисунке 1 представлены результаты моделирования оптических свойств, в частности диэлектрической проницаемости чистого графена. Чистый графен в частотном диапазоне от 4,05 эВ до 5,28 эВ имеет отрицательную диэлектрическую проницаемость в плоскости листа графена. При частотах более 6 эВ мнимая часть диэлектрической проницаемости устремляется к нулю, что говорит о значительных потерях в электропроводности.

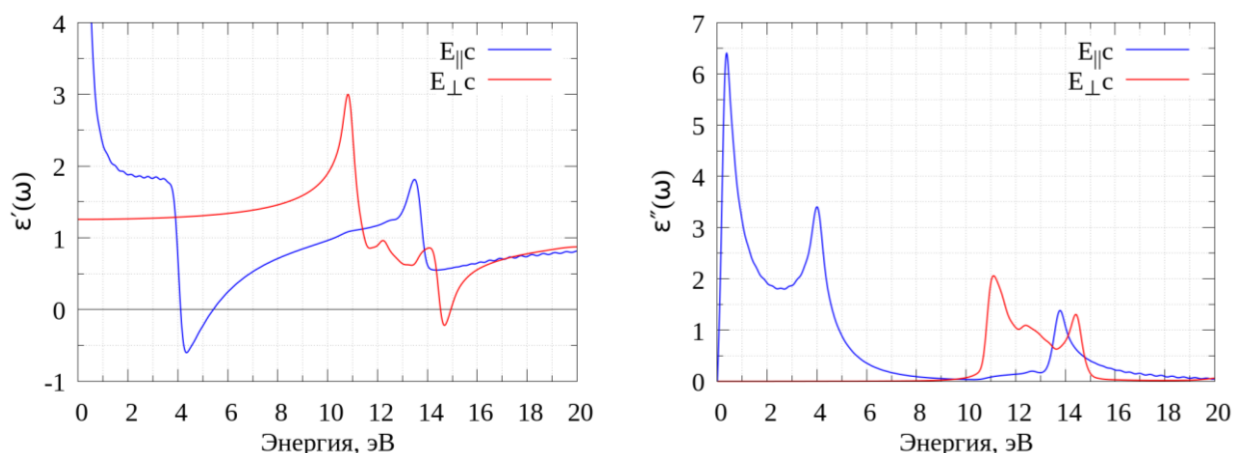


Рисунок 1 – Действительная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости графена

Результаты расчетов квантово-механического моделирования электронных и оптических свойств системы «графен/ α -SiO₂» позволил сделать выводы, что перспективной гетероструктурой для изучения ПППВ является графен, который расположен на поверхности

кварцевой подложки с оборванными связями кислорода O^{unsat} . При этом механизм абсорбции является физическим, что способствует сохранению графеном его электронных свойств. В частности энергетический спектр графена вблизи уровня Ферми и в интервале энергий от -1,3 до 0,7 эВ остается линейным. Расчёты оптических свойств выбранной гетероструктуры позволили установить по спектральной зависимости действительной части диэлектрической проницаемости, что система обладает несколькими участками в частотном спектре, где возможно формирование поверхностных плазмонных волн: 0,4-0,5 эВ (I), 1,25-1,5 эВ (II), 4,5-5,5 эВ (III). При этом, наиболее перспективным является частотный участок от 4,5 до 5,5 эВ, поскольку в этом случае графен обладает наибольшей проводимостью. Оценка зарядовой плотности позволила установить, что в структуре «графен/ SiO_2 » происходит перераспределение заряда и возможно формирование двумерного электронного газа. Величина заряда, который возникает вследствие контакта, составляет 0,07 е/атом. При этом основной заряд со стороны подложки локализован на атомах кислорода.

Таким образом, перераспределение зарядовой плотности вблизи границы раздела двух материалов (графена и кварца) можно отнести к одному из механизмов возникновения поверхностных плазмон-поляритонных волн.

Список использованных источников:

1. Dubinov A.A., Terahertz surface plasmons in optically pumped graphene structures / A.A. Dubinov, V.Y. Aleshkin, V. Mitin // *J. Physics: Condensed Matter*. – 2011. – V. 23 (14). – P. 145302.
2. Koppens F.H.L., Graphene plasmonics: A platform for strong light matter interactions / F.H.L. Koppens, D.E. Chang, F.J. Garcia de Abajo // *Nano Lett.* – 2011. – V. 11 (8). – Pp. 3370-3377.
3. Bludov Yu.V., Mechanism for graphene-based optoelectronic switches by tuning surface plasmon-polaritons in monolayer graphene / Yu.V. Bludov, M.I. Vasilevskiy, N.M.R. Peres // *Europhysics Letters Association*. – 2011. – V. 92 (6). – P. 152.
4. Jornet J.M., Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nanocommunications in the terahertz band / J.M. Jornet, I.F. Akyildiz // *Proc. 4th European Conf. Antennas Propag. (EUCAP)*. – 2010.
5. И.П. Шейнман // *Журнал технической физики : журнал*. – 2001. – № 71(5). – С. 28-34.
6. Kresse G., Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Computational Materials Science*. – 1996. – V. 6(1). – P. 15-50.
7. Hafner J., The Vienna Ab-Initio Simulation Program VASP: An Efficient and Versatile Tool for Studying the Structural, Dynamic, and Electronic Properties of Materials / J. Hafner, G. Kresse // *Properties of Complex Inorganic Solids*. – 1997. – P. 69-82.
- Parr R. G., Density-Functional Theory of Atoms and Molecules / R.G. Parr, W. Yang // Oxford University Press. – 198