

П. Я. ЧУДАКОВСКИЙ¹, канд. физ.-мат. наук.

¹Белорусско-Российский университет (Могилев, Беларусь)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МНОГОСЛОЙНОЙ ПЛАЗМОННОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Аннотация. Численно исследуется влияние параметров многослойной структуры, содержащей полимерный слой, на энергетический коэффициент отражения света в схеме возбуждения плазмонного резонанса. Используется модель Максвелла – Гарнетта для расчета эффективной диэлектрической проницаемости полимера с наноразмерными включениями. Анализируется возможность применения такой структуры в сенсорных системах неразрушающего контроля.

Ключевые слова: поверхностный плазмонный резонанс, коэффициент отражения, сенсор, тонкопленочная структура, неразрушающий контроль

Разработка сенсоров является одним из наиболее актуальных и быстроразвивающихся направлений современного приборостроения. Достижения материаловедения, нанотехнологий и микроэлектроники позволяют создавать сложные сенсорные системы. Особое место среди сенсоров занимают оптические, в частности, плазмонные сенсоры [1]. В основе принципа действия таких сенсоров лежит резонанс электромагнитных волн с коллективными колебаниями свободных электронов в металлах. Плазмонные сенсоры подразделяются на два класса: сенсоры поверхностного плазмонного резонанса и сенсоры локального поверхностного плазмонного резонанса. В сенсорах первого типа применяют тонкие металлические пленки, тогда как сенсоры локального поверхностного резонанса основаны на отдельных плазмонных резонансных наноструктурах (металлических наночастицах), что обеспечивает большую чувствительность и возможность осуществлять исследования одиночных молекул.

В настоящей работе проведено численное исследование отражательной способности слоистой структуры, содержащей тонкий металлический слой, на одной из границ которого расположен слой диэлектрика, а на другой – полимер. Проанализирован резонансный отклик в схеме возбуждения плазмонных мод, возникающий при различных значениях оптических параметров слоев исследуемой структуры, для выявления оптимальной конфигурации плазмонного сенсора.

Известно, что возбуждение поверхностного плазмона на плоской границе раздела возможно только в условиях полного внутреннего отражения. Поэтому для возбуждения плазмонов используют классические призмные схемы (схема Отто и Кречмана) или их модификации [2-5]. В нашем исследовании численное моделирование проведено для схемы Кречмана с использованием ТМ-поляризованного излучения. На рис. 1 представлена слоистая структура в схеме возбуждения плазмонного резонанса.

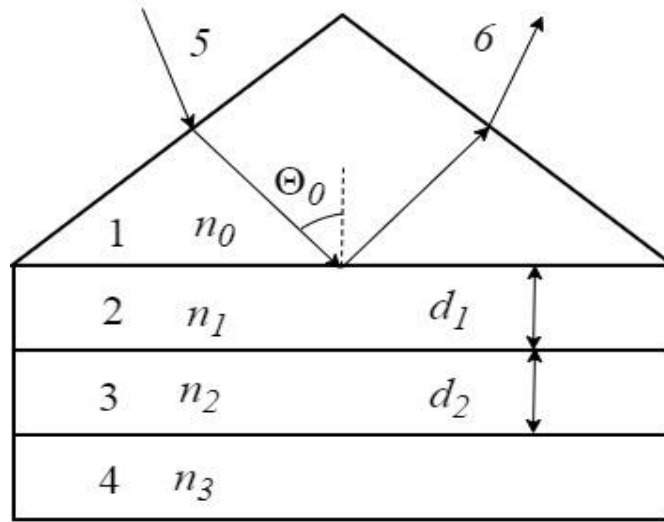


Рис. 1. Слоистая структура в схеме возбуждения плазмонного резонанса: 1 – призма с показателем преломления n_0 ; 2 – диэлектрический слой с показателем преломления n_1 толщиной d_1 ; 3 – металлическая пленка с показателем преломления n_2 толщиной d_2 ; 4 – полимерный слой с показателем преломления n_3 ; 5, 6 – падающий и отраженный световые лучи

Расчет энергетического коэффициента отражения R выполнен на основании формул Френеля в предположении, что призма и полимер являются полубесконечными средами по отношению к диэлектрическому и металлическому слоям [6]. В соответствии с формулами Френеля энергетический коэффициент отражения R имеет вид

$$R = \left| \frac{r_{01} + r_1 \exp(2id_1 k_{x1})}{1 + r_{01} r_1 \exp(2id_1 k_{x1})} \right|^2, \quad (1)$$

где $r_1 = \frac{r_{12} + r_{23} \exp(2id_2 k_{x2})}{1 + r_{12} r_{23} \exp(2id_2 k_{x2})}$ – коэффициент отражения от трехслойной структуры (диэлектрик-металл-полимер). В свою очередь коэффициент отражения $r_{j(j+1)}$ на границе раздела между j и $j+1$ средами определяется по формуле (2)

$$r_{j(j+1)} = \frac{n_j^2 k_{x(j+1)} - n_{j+1}^2 k_{xj}}{n_j^2 k_{x(j+1)} + n_{j+1}^2 k_{xj}}, \quad (2)$$

где $k_{xj} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{n_j^2 - n_0^2 \sin^2 \Theta_0}$ – нормальная составляющая волнового вектора в j -й среде ($j=0, 1, 2, 3$), n_j – показатель преломления j -й среды ($j=0$ соответствует призме, $j=1$ – диэлектрику, $j=2$ – металлической пленке,

$j=3$ – полимеру), d_1 и d_2 – толщины диэлектрического и металлического слоев, Θ_0 – угол падения излучения на основание призмы, λ – длина волны в вакууме.

В модельных экспериментах длина волны принималась равной 0,550 мкм. Показатель преломления призмы составлял $n_0=1,7617$. В качестве металлического слоя выступала тонкая пленка серебра с комплексным показателем преломления $n_2 = 0,06 + i 3,586$ (диэлектрическая проницаемость $\epsilon_2 = -12,86 + i 0,430$). Для диэлектрического слоя показатель преломления $n_1 = 1,517$, для полимерного слоя $n_3 = 1,5$. Основными варьируемыми параметрами выступают толщины слоев и показатели преломления. В моделировании показатель преломления полимера изменялся за счет наличия наноразмерных включений в его матрице, в частности, частиц золота. В комплексных оптических величинах мнимая часть имеет положительный знак и характеризует поглощение, что обусловлено временной зависимостью поля плоской волны в виде $\exp(-\omega t)$.

На рис. 2 представлена угловая зависимость коэффициента отражения для волн ТМ-поляризации для серебряного слоя толщиной $d_2 = 35$ нм и диэлектрического слоя толщиной $d_1 = 450$ нм.

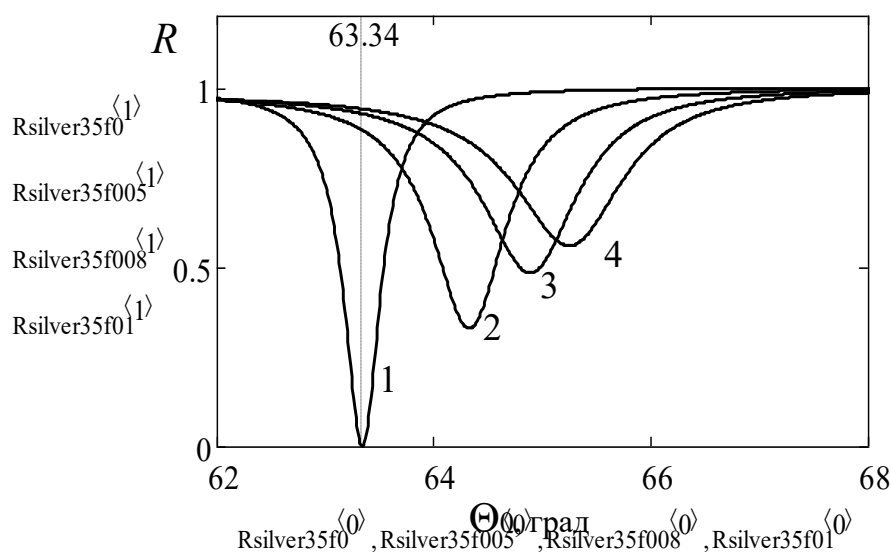


Рис. 2. Угловая зависимость коэффициента отражения для волн ТМ-поляризации от объемной доли f сферических частиц золота (радиуса 10 нм) в матрице полимера для слоистой структуры с толщинами: диэлектрик – $d_1 = 450$ нм, серебро – $d_2 = 35$ нм: 1 – плазмонный резонанс в отсутствие частиц золота ($f = 0$); 2 – 4 смещение резонансного минимума при увеличении f частиц золота: 2 – $f = 0,5\%$; 3 – $f = 0,8\%$; 4 – $f = 1\%$

Кривая 1 на рис. 2 характеризуется глубоким минимумом, расположенным за критическим углом ($\Theta_c = 59,44$ град), что свидетельствует о возбуждении поверхностного плазмона для слоистой структуры, в которой полимерный слой не содержал наноразмерных включений. Зависимости 2 – 4 демонстрируют чувствительность к малым изменениям объемной доли f частиц золота в

полимерной матрице, что проявляется в смещении резонансного минимума в сторону больших углов. Для моделирования этого эффекта показатель преломления полимера рассчитывался через эффективную диэлектрическую проницаемость ε_{eff} в рамках модели Максвелла – Гарнетта [7]

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_m + 3f\varepsilon_m \frac{\varepsilon_{incl} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{incl} + 2\varepsilon_m - f(\varepsilon_{incl} - \varepsilon_m)}. \quad (3)$$

В формуле (3) ε_m , ε_{incl} – диэлектрические проницаемости чистого полимера и наноразмерных включений, соответственно. Диэлектрическая проницаемость включений рассчитывалась по формуле

$$\varepsilon_{incl} = \varepsilon_{bulk} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\left(\gamma + A\frac{\vartheta_F}{R}\right)} + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}, \quad (4)$$

где ε_{bulk} – диэлектрическая проницаемость объемного золота, ω_p – плазменная частота, ω – циклическая частота электромагнитного излучения, γ – коэффициент затухания, ϑ_F – скорость Ферми, $A=1$ (для сферических частиц), R – радиус частиц, i – мнимая единица. Приведем справочно значения этих параметров для золота, используемые нами при моделировании: $\varepsilon_{bulk} = -5,84 + i 2,111$, $\omega_p = 9,01$ эВ, $\gamma = 0,072$ эВ, $\vartheta_F = 1,4 \cdot 10^6$ м/с, $R = 10$ нм.

Введение частиц золота в полимер позволило уменьшить толщину слоя серебра с 35 нм до 14 нм, что соответствует кривой 2, представленной на рис. 3.

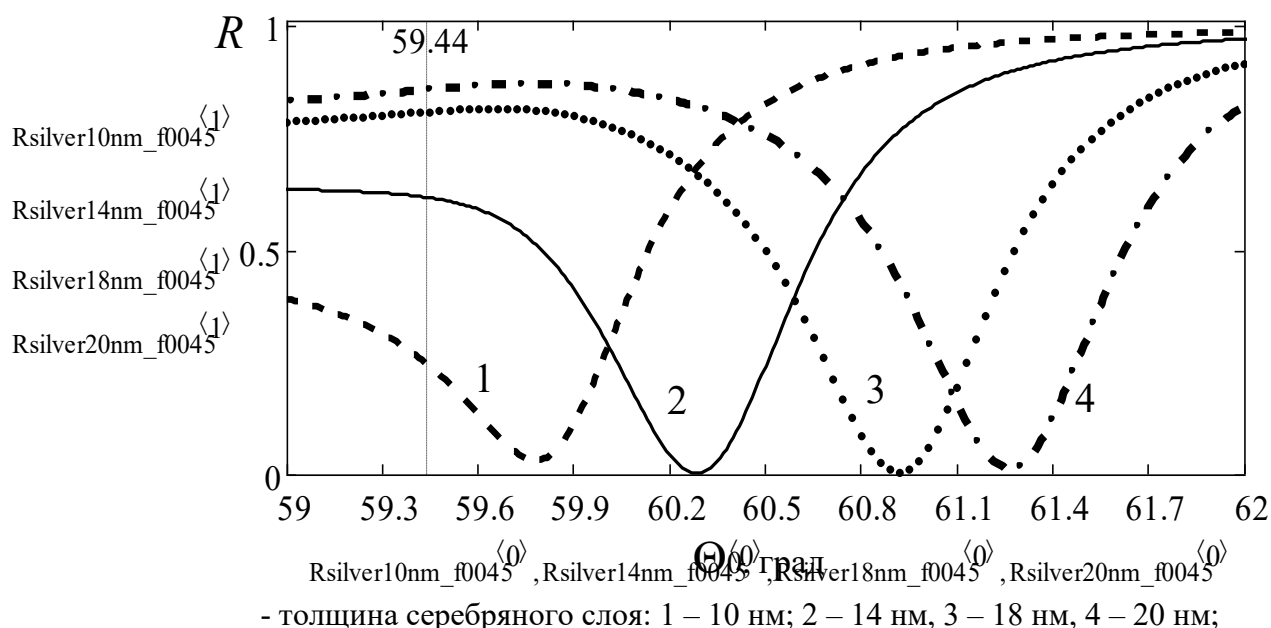


Рис. 3. Угловая зависимость коэффициента отражения для волн ТМ-поляризации для структуры с различной толщиной серебряного слоя при фиксированной объемной доле ($f = 0,45\%$) частиц золота в полимерной матрице

Кроме того, на рис. 3 видны еще несколько глубоких резонансных минимумов при толщинах серебра 18 и 20 нм, но смещенных в сторону больших углов.

Если увеличить толщину диэлектрического слоя до 845 нм, а толщину серебряного слоя принять равной 14 нм, то можно заметить два минимума в угловой зависимости коэффициента отражения, что представлено на рис. 4.

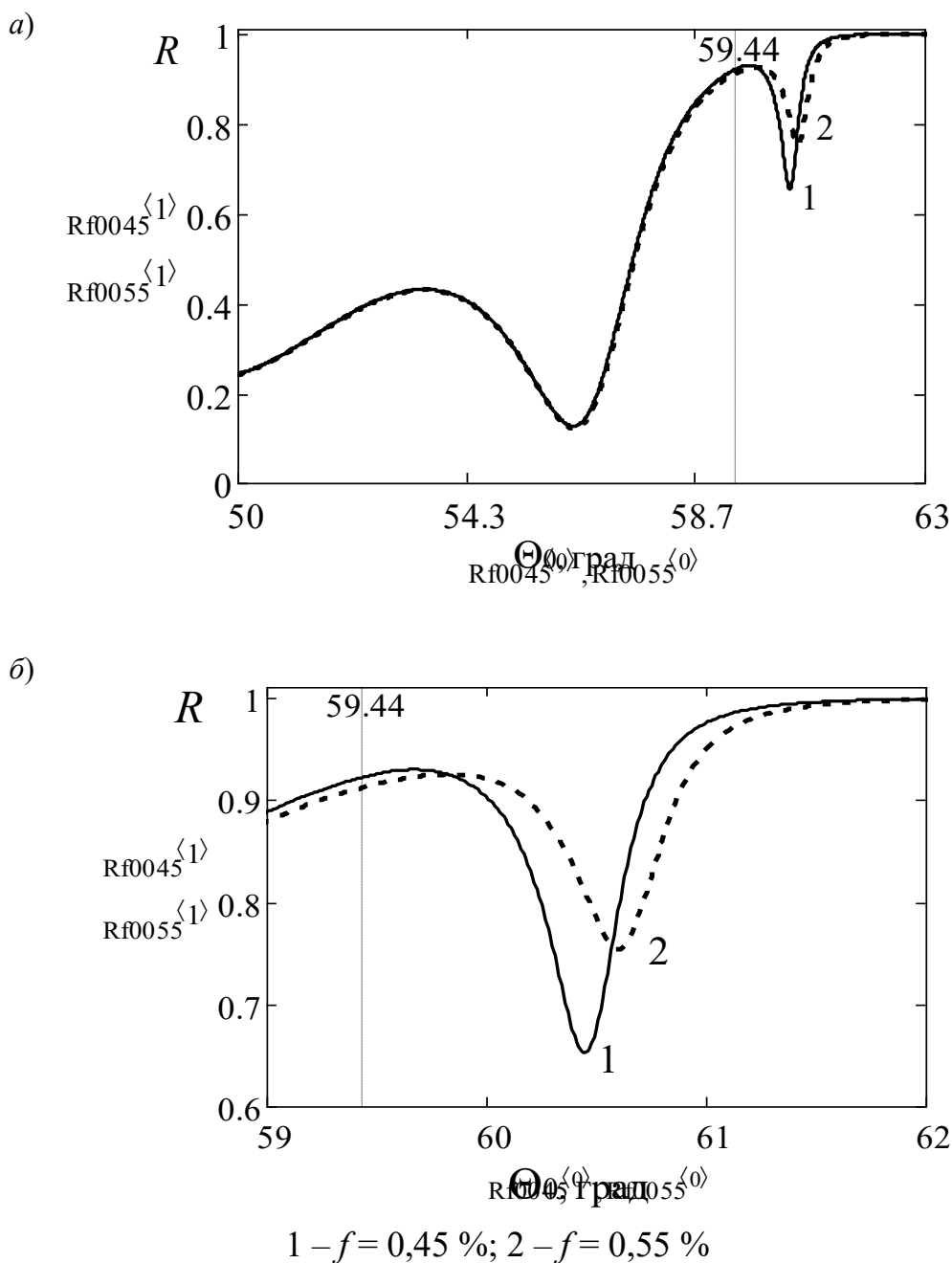


Рис. 4. Угловая зависимость коэффициента отражения для волн ТМ- поляризации от объемной доли f сферических частиц золота (радиуса 10 нм) в матрице полимера для слоистой структуры с толщинами: диэлектрик – $d_1 = 845$ нм, серебро – $d_2 = 14$ нм (а) и увеличенный фрагмент этой зависимости (б)

Один из них расположен до критического угла $\Theta_c = 59,44$ град, второй после. Оба минимума не достигают нуля. Однако если создать разную объемную долю частиц золота в полимере, то минимум за критическим углом Θ_c испытывает смещение в область больших углов и становится менее глубоким. Эта особенность заметна на кривых 1 и 2. Минимум до критического угла не изменяет своего положения, что указывает на то, что этот минимум соответствует вытекающей моде диэлектрического слоя, а минимум после критического угла поверхностному плазмону. При этом минимум плазмонного резонанса можно сделать более глубоким, если исключить частицы золота из матрицы полимера, или приблизить к нулю, добавив частицы с объемной долей около 0,065%. Структура с такими параметрами имеет перспективы для создания двуканального сенсора. Минимум коэффициента отражения для вытекающей моды может быть использован как опорный канал, нечувствительный к процессам в полимерной среде, а минимум плазмонного резонанса – в качестве измерительного канала. Одновременное смещение двух минимумов укажет на наличие паразитных эффектов (например, температурных, несовершенства измерительной системы).

Таким образом, полученные результаты представляют интерес для сенсорных систем неразрушающего контроля.

Список литературы

1. **Ziai, Y.** Smart plasmonic hydrogels based on gold and silver nanoparticles for biosensing application / Y. Ziai, C. Rinoldi, P. Nakielski, L. De Sio, F. Pierini // Current Opinion in Biomedical Engineering. – 2022. – Vol. 24. – Art. ID 100413.
2. **Otto, A.** Excitation of Nonradiative Surface Plasma Waves in Silver by the Method of Frustrated Total Reflection/ A. Otto// Zeitschrift fur Physik. – 1968. – Vol. 216. – P. 398 – 410.
3. **Horn, N.** Plasmon Spectroscopy: Methods, Pitfalls and How to Avoid Them / N. Horn, M. Kreiter // Plasmonics. – 2010. – Vol. 5. – P. 331 – 345.
4. **Petrin, A. B.** On the Electron Emission from the Focal Region of a Symmetrically Convergent Surface Plasmonic Wave on the Free Surface of a Metal Film / A. B. Petrin // Optics and Spectroscopy. – 2020. – Vol. 128, № 8. – P. 1211 – 1220.
5. **Хило, Н. А.** Модифицированная схема Отто возбуждения поверхностных плазмонов / Н. А. Хило // Доклады НАН Беларуси. – 2016. – Т. 60. – № 4. – С. 56 – 60.
6. **Shi, X.** All-optical modulator with long range surface plasmon resonance / X. Shi [et.al] // Optics & Laser Technology. – 2013. – Vol. 49. – P. 316 – 319
7. **Nadal, E.** Gold nanocomposites: fabrication and optical properties modeling / E. Nadal, N. Barros, H. Glénat, H. Kachkachi // Materials. – 2018. – Vol. 11, №. 3. – P. 1– 13.

Контакты:

rawel206265@mail.ru (Чудаковский Павел Яковлевич)