УДК 535.354,539.186.3

ЦИФРОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМОННЫХ СХЕМ

© 2020 г. А. В. Шестериков¹, А. Ю. Лексин¹, Т. В. Прохорова¹, Н. М. Воронова¹, А. В. Прохоров^{1, *}

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых", Владимир, Россия

**E-mail: avprokhorov33@mail.ru* Поступила в редакцию 20.09.2019 г. После доработки 15.11.2019 г. Принята к публикации 27.11.2019 г.

Рассмотрены вопросы применения численных методов и алгоритмов для проектирования плазмонных схем на основе двумерных материалов и полупроводниковых квантовых точек. Описываются математические подходы как основа для системы автоматизированного расчета параметров полупроводниковых квантовых точек сферической формы, а также особенности применения метода конечных разностей во временной области для полного полевого моделирования вблизи поверхности наноструктурированного графена.

DOI: 10.31857/S0367676520030242

введение

Вопросы создания и использования программного обеспечения для расчета гибридных схем резонансного взаимодействия между отдельными эмиттерами и электромагнитным полем является слабым местом практически всех доступных коммерческих программ. В контексте рассматриваемых задач гибридными являются такие схемы взаимодействия. в которых квантовый эмиттер (атом, молекула, квантовая точка (КТ), квантовый провод (КП)) испытывает одновременное воздействие как свободного электромагнитного поля, так и локализованных электромагнитных волн. Такие волны – поверхностные плазмон-поляритоны (ППП) – формируются в волноводных интерфейсах на границе материалов с резким контрастом диэлектрической проницаемости (металл/диэлектрик); их преимущество перед свободно распространяющимися волнами заключается в возможности пространственной локализации на масштабах порядка нескольких нанометров, существенно меньше длины волны света. Одновременно с этим характерные частоты таких возбуждений могут соответствовать терагерцевому, инфракрасному и даже оптическому диапазонам, что позволяет добиться беспрецедентных скоростей отклика и нанометровых масштабов vстройств на их основе.

В настоящей работе рассматриваются вопросы разработки и реализации математических моделей для проектирования плазмонных схем на основе полупроводниковых квантовых точек и наноструктурированного графена. Для этого, была создана база данных характеристик КТ на основе соединений АЗВ5 и А2В6, вмещающая в себя информацию о параметрах энергий потолка валентной зоны, дна зоны проводимости, ширины запрещенной зоны и т.д. Разработанные математические методы позволили производить автоматизированный расчет энергетической структуры уровней, частот и дипольных моментов, скоростей релаксации и др.

На следующем этапе были проведены работы по реализации метода конечных разностей во временной области для моделирования распространения ППП в плазмонных волноводах на основе проводящих структур как перспективных сред для реализации межузловых соединений в плазмонных схемах. Составлена математическая модель по реализации метода конечных разностей во временной области (FDTD) для моделирования плазмон-поляритонных мод в графеновых двумерных структурах. Проведено тестирование на примере сравнения результатов расчета с результатами известных работ по моделированию распространения ППП в графеновых схемах [1, 2]. Получено полное согласие результатов работы авторских методов как с коммерческими программами, так и с практическими работами зарубежных авторов на оригинальном коде.

МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ЗАВИСИМОСТЕЙ ПОЛОЖЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ ДЛЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КТ ЗАДАННОГО РАЗМЕРА

Для расчета размерных зависимостей ограниченного числа энергетических уровней дырки в валентной зоне КТ может быть использовано оценочное соотношение [3–6]

$$E_{nl} = E_V e - \frac{\hbar^2 \chi_{nl}^2}{2m_h a^2}, n = 1, 2, 3, ..., n_{max};$$
(1)
$$l = 0, 1, ..., l_{max},$$

где E_V — энергия для потолка валентной зоны КТ (выраженной в эВ); $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ — заряд электрона (Кл); m_h — эффективная масса дырки; a — радиус КТ (м); $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с — постоянная Планка; n — главное квантовое число для дырки; l — орбитальное квантовое число для дырки; l — орбитальное квантовое число для дырки; λ — орбитальное квантовое число для дырки; L — орбитальное квантовое число для дырки; L — орбитальное квантовое число для дырки, χ_{nl} корни сферического уравнения Бесселя 1-го рода. Для расчета размерных зависимостей энергетических уровней электрона в зоне проводимости КТ может быть использовано оценочное соотношение [5, 6]:

$$E_{n'l'} = E_c e + \frac{\hbar^2 \chi_{n'l'}^2}{2m_e a^2}, \ n' = 1, 2, \dots n'_{max};$$

$$l' = 0, 1, 2, \dots l'_{max},$$
(2)

где E_c – энергия дна зоны проводимости КТ (эВ); m_e – эффективная масса электрона; n' – главное квантовое число для электрона, l' – орбитальное квантовое число для электрона; $\chi_{n'l'}$ – корни сферического уравнения Бесселя 1-го рода. Для расчета частоты внутризонного дырочного перехода может быть использовано соотношение [7]:

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m_h a^2} \left(\left| \chi^2_{mk} - \chi^2_{nl} \right| \right) \right), \tag{3}$$

где *m*,*n* и *k* задаются произвольным образом в рамках пользовательских диапазонов, параметр *l* подчиняется правилу отбора $l = k \pm 1$. На основе частоты перехода может быть рассчитана длина волны межуровневого перехода в виде: $\lambda_{mn} = \frac{2\pi c}{\omega_{mn}}$. Для расчета частоты внутризонного (электронного) перехода может быть использовано соотношение [7]:

$$\omega_{m'n'} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} \left(\left| \chi^2_{m'k'} - \chi^2_{n'l'} \right| \right) \right), \tag{4}$$

где m',n' и k' задаются произвольным образом в рамках интересующих диапазонов, параметр l' подчиняется правилу отбора $l' = k' \pm 1$. На основе

ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ том 84 № 3 2020

частоты перехода может быть рассчитана длина волны межуровневого перехода в виде $\lambda_{m'n'} = \frac{2\pi c}{\omega_{m'n'}}$.

Тогда, для расчета частоты межзонного перехода используется соотношение [7]:

$$\omega_{m'n} = \frac{1}{\hbar} \left(e E_{g1} + \frac{\hbar^2}{2a^2} \left(\frac{\chi^2_{m'k'}}{m_e} + \frac{\chi^2_{nl}}{m_h} \right) \right).$$
(5)

Правило отбора в данном случае имеет вид k' - l = 0. Длина волны соответствующего перехода имеет вид $\lambda_{m'n} = \frac{2\pi c}{\omega_{m'n}}$. Дипольный момент внутризонного перехода в КТ, согласно [8], может быть рассчитан следующим образом:

$$\mu_{i-f} = e \left\langle \psi_i \left| r \right| \psi_f \right\rangle = e \int_V \psi_i^*(r) r \psi_f(r) dV.$$
 (6)

При переходе к тройному интегралу в сферических координатах данный параметр может быть рассчитан так:

$$\mu_{i-f} = e \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{R} \psi_{i}^{*}(r,\theta,\phi) r \psi_{f}(r,\theta,\phi) r^{2} \sin\theta dr d\theta d\phi, (7)$$

где є — диэлектрическая проницаемость КТ, r — радиус-вектор, определяющий расстояние носителя заряда до центра КТ, θ — азимутальный угол, φ — полярный угол, ψ_i , ψ_f — волновые функции уровней, с которого и на который осуществляется переход соответственно; R — радиус КТ; $\psi_i^*(r, \theta, \varphi)$ — сопряженная волновая функция уровня, с которого осуществляется переход. Согласно [9] волновая функция для сферической КТ определяется следующим образом:

$$\Psi_{nlm}(r) = \sqrt{\frac{2}{R^3}} \frac{j_l(k_{nl}r)}{j_{l+1}(\chi_{nl})} Y_{lm}(\Theta, \phi), \qquad (8a)$$

либо

$$\Psi_{nlm}(r) = \sqrt{\frac{2}{r}} \frac{1}{R} \frac{J_{l+1/2}(k_{nl}r)}{J_{l+3/2}(\chi_{nl})} Y_{lm}(\Theta, \phi), \qquad (86)$$

где $j_l(x)$, $j_{l+1}(x)$ – сферические функции Бесселя 1-го рода и *l*-го и *l* + 1-го порядков соответственно; $J_{l+1/2}(x)$, $J_{l+3/2}(x)$ – функции Бесселя 1-го рода *l* + 1/2-го и *l* + 3/2-го порядков соответственно; $Y_{lm}(\Theta, \phi)$ – сферические функции; $k_{nl} = \frac{\chi_{nl}}{R}$; χ_{nl} – *n*-ый корень функции Бесселя 1-го порядка; *n*, *l*, *m* – главное, орбитальное, магнитное квантовые числа частицы, соответственно. Подставляя (8) для двух различных уровней в (7), получим:

$$\mu_{i-f} = \frac{2}{R^2 J_{l+\frac{3}{2}}(\chi_{n'l'}) J_{l+\frac{3}{2}}(\chi_{nl})} \times \\ \times \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} Y_{l'm'}(\Theta, \phi) Y_{lm}(\Theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi \times$$
(9)
$$\times \int_{0}^{R} J_{l'+\frac{1}{2}}(k_{n'l'}r) J_{l+1/2}(k_{nl}r) r^2 dr,$$

где *n*', *l*', *m*' и *n*, *l*, *m* — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа уровней, между которыми осуществляется переход. В общем виде сферические функции представляют собой следующие выражения:

$$Y_{lm}\left(\Theta,\phi\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Theta_{lm}\left(\theta\right), \tag{10}$$

где ϕ – азимутальный угол; θ – телесный угол; $\Theta_{lm}(\theta)$ – радиальные функции, имеющие вид:

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos(\theta)), \quad (11)$$

где $P_l^m(\cos(\theta))$ – присоединенные полиномы Лежандра (см. [10]) в виде:

$$P_l^m(\cos(\theta)) = \sin^m \theta \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta), \qquad (12)$$

При m = 0 полином P_l^m совпадает с полиномом Лежандра P_l вида:

$$P_l^0(\cos(\theta)) = P_l(\cos\theta) =$$

= $\frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos\theta)^l} (\cos^2\theta - 1)^l.$ (13)

Далее мы полагаем, что магнитное квантовое число равно m = 0, тогда:

$$Y_{l0}(\Theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{l0}(\Theta), \qquad (14a)$$

$$\Theta_{l0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos(\theta)).$$
(146)

Дипольный момент межзонного перехода может быть приблизительно оценен исходя из соотношения [11]:

$$\mu_{bb}^{2} = \frac{e^{2}}{6m_{0}\omega_{m'n}^{2}} \left(\frac{m_{0}}{m_{e}} - 1\right) \frac{E_{m'n} \left(E_{m'n} + \Delta_{0}\right)}{E_{m'n} + 2\Delta_{0}/3}, \quad (15)$$

где $\omega_{m'n}$ — частота перехода; $E_{m'n}$ — расстояние между уровнями *m*' и *n*, Δ_0 — спин-орбитальное расщепление. Для расчета энергий, частот и дипольных моментов переходов в KT, использова-

лись формулы (1)—(14), объединенные в единый программный модуль [12]. В частности, результаты расчетов зависимостей энергии межзонного перехода в диапазоне радиусов от 3 до 6 нм для КТ на основе п/п CdSe представлены на рис. 1. Полученная с помощью аналитических выражений зависимость совпадает с той, что была получена в работе [6]. Однако для КТ с радиусом менее 3 нм будет наблюдаться расхождение с результатами наилучшей аппроксимации из работы [6]. Это связано с необходимостью учета эффектов кулоновского взаимодействия в режиме сильного конфаймента [9] при условии $a < a_{ex}$, где $a_{ex} -$ боровский радиус экситона.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОВОДИМОСТИ ГРАФЕНА И МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ВО ВРЕМЕННОЙ ОБЛАСТИ

В качестве основы для формирования межузловых соединений в плазмонных схемах могут быть выбраны как металлические, так и более перспективные, графеновые волноводы. Графен [13] является двумерным материалом на основе гексагональной решетки атомов углерода толщиной в один атом. Уникальной особенностью такой структуры является возможность наблюдения высокотемпературной проводимости как в чистом материале [14], так и его допированных модификациях [15], что может сделать графен основой интегральных схем будущего. Преимущество графена как основы для плазмонных схем заключается в возможности достижения предельной локализации электромагнитной волны на масштабах в несколько нм [16]. Электропроводность графена на частоте ω может быть описана на основе формализма Кубо [17] и определяется выражением:

$$\sigma(\omega,\mu_{c},\tau,T) = i \frac{8\sigma_{0}kT}{\omega+i\frac{1}{\tau}} \left(\frac{\mu_{c}}{kT} + 2\ln\left(e^{-\frac{\mu_{c}}{kT}} + 1\right) \right) + i\frac{\sigma_{0}}{\pi} \ln\left(\frac{2|\mu_{c}| - \left(\omega+i\frac{1}{\tau}\right)\hbar}{2|\mu_{c}| + \left(\omega+i\frac{1}{\tau}\right)\hbar}\right),$$
(16)

где μ_c – химический потенциал, $1/\tau$ – скорость рассеяния носителей заряда (электронов), T = 300 К – температура, k – постоянная Больцмана. Первое слагаемое в уравнении (16) описывает вклад внутризонной проводимости, а второе – межзонной. Формирование ППП на поверхности графен-диэлектрик возможно в случае $\hbar\omega < 2\mu_c$, когда мнимая часть проводимости Im ($\sigma(\omega, \mu_c, \tau, T)$) переходит от положительных к отрицательным значениям. В частности, для



Рис. 1. a – Вид окна программного модуля для расчета параметров полупроводниковых KT; δ – зависимости энергии межзонного перехода $1S(e) \rightarrow 1S(h)$ CdSe KT от радиуса, рассчитанные в сравнении с [6].

того чтобы ППП существовали при 1.55 мкм, химический потенциал графена должен составлять не менее 0.5 эВ. В случае представления проводимости в виде $\sigma(\omega) = \sigma_r(\omega) + i\sigma_i(\omega)$ диэлектрическая проницаемость графена задается в виде:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) - \sigma_i(\omega) / (\varepsilon_0 \omega \Delta) + i\sigma_r(\omega) / (\varepsilon_0 \omega \Delta),$$
(17)

где $\varepsilon_r(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость диэлектрика, в котором находится лист графена, Δ — толщина графена (обычно, выбирают $\Delta \sim$ ~ 1 нм). Таким образом, формирование ППП в листе графена возможно лишь при условии $\varepsilon_r(\omega) - \sigma_i(\omega)/(\varepsilon_0 \omega \Delta) < 0$. Относительная диэлектрическая проницаемость листа графена в вакууме определяется следующим уравнением [1]:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \sigma_{v} / (i\omega\varepsilon_{0}) = 1 + \sigma_{0} / (i\omega\varepsilon_{0} (1 + i\omega\tau)), \quad (18)$$

где $\sigma_0 = e^2 k T \tau / (\pi \hbar^2 \Delta) (\mu_c / (kT) + 2 \ln (e^{-\mu_c / (kT)} + 1))$

и ε_0 — диэлектрическая проницаемость воздуха. При этом формируемая в одиночном листе ПППволна характеризуется следующим значением волнового вектора:

$$\beta_{\Pi\Pi\Pi}(\omega) = k_0 \sqrt{1 - \left(2c\varepsilon_0/\tilde{\sigma}_{intra}\right)^2},$$
 (19)

где $\tilde{\sigma}_{intra} = \sigma_0 \Delta / (1 + i\omega \tau)$. При выборе значений $\mu_c = 0.5 \Rightarrow B$, $\tau = 3.85$ пс и частоте источника $3 \cdot 10^{12}$ Гц длина волны ППП составит $\lambda_{\Pi\Pi\Pi} \approx 51$ мкм, а эффективная длина пробега $L_{\Pi\Pi\Pi} = \lambda_0 / (4\pi \text{Im} (\beta_{\Pi\Pi\Pi} / k_0))$ составит 396 мкм.

ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ том 84 № 3 2020

Для численного моделирования формирования ППП на графене использовался метод FDTD для уравнений Максвелла вида [1]:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \nabla \times H, \ \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times E,$$
 (20a)

$$D(\omega) = c_0 \varepsilon_r^*(\omega) E(\omega), \qquad (206)$$

где ε_r^* и c_0 – относительная диэлектрическая проницаемость среды и скорость света, D – плотность потока, E – напряженность электрического поля, H – напряженность магнитного поля, μ – магнитная проницаемость среды. При переходе к нормированным параметрам $\tilde{E} = \sqrt{\varepsilon_0/\mu_0}E$ и $\tilde{D} = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}D$ уравнения Максвелла перепишутся в следующей форме:

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \nabla \times H = c_0 \nabla \times H, \qquad (21a)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \tilde{E} = c_0 \nabla \times \tilde{E}, \qquad (216)$$

$$\tilde{D}(\omega) = \varepsilon_r^*(\omega) \tilde{E}(\omega).$$
 (21b)

Уравнения Максвелла для поперечной (TEM) моды, когда поляризованная волна распространяется в направлении *z*, имеют вид:

$$\frac{\partial D_y}{\partial t} = c_0 \frac{\partial H_x}{\partial z}, \qquad (22a)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = c_0 \frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial z}.$$
(226)

+



Рис. 2. Сетки для двумерного случая FDTD.

Дискретизация уравнения Максвелла с использованием метода центральной производной и шагом $\Delta t = \Delta z/2c_0$, где Δz — пространственный размер (рис. 2), дает:

$$\tilde{D}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k) = \tilde{D}_{y}^{n-\frac{1}{2}}(k) + \frac{1}{2} \left[H_{x}^{n} \left(k + \frac{1}{2} \right) - H_{x}^{n} \left(k - \frac{1}{2} \right) \right],$$
(23a)

$$H_{x}^{n+1}\left(k+\frac{1}{2}\right) = H_{x}^{n-1}\left(k+\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\left[\tilde{E}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k+1) - \tilde{E}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k)\right].$$
(236)

Электрическое поле вычисляется по формуле (21в). Объединив уравнения (18) и (21в), получим:

$$D_{y}(\omega) = \left\{1 + \sigma_{0}/(j\omega\varepsilon_{0}) - B/(1+j\omega\tau)\right\}\tilde{E}_{y}, \quad (24)$$

где $B = \tau \sigma_0 / \epsilon_0$. Уравнение (24) зависит от частоты, которую можно преобразовать во временную зависимость и получить набор уравнений:

$$\tilde{E}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k) = \left(\tilde{D}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k) + I^{n-\frac{1}{2}}(k) + e^{-\Delta t/\tau}S^{n-\frac{1}{2}}(k)\right) / M(k),$$
(25a)

$$I^{n+\frac{1}{2}}(k) = I^{n-\frac{1}{2}}(k) + N(k)\tilde{E}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k), \qquad (256)$$

$$S^{n+\frac{1}{2}}(k) = S^{n-\frac{1}{2}}(k)e^{-\Delta t/\tau} + L(k)\tilde{E}_{y}^{n+\frac{1}{2}}(k), \quad (25B)$$

где, $M(k) = \Delta t \sigma_0 / \varepsilon_0 - \Delta t B / \tau$, $N(k) = \Delta t \sigma_0 / \varepsilon_0$ и $L(k) = \Delta t B / \tau$, i, j – индексы по пространственным координатам, n – индекс по временной координате, Δx – шаг по пространственной оси, Δt – шаг по временной оси. После приведения дискретные уравнения Максвелла примут вид:

$$\begin{split} \tilde{D}_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j) &= \tilde{D}_{z}^{n-\frac{1}{2}}(i,j) + \\ \frac{1}{2} \bigg[H_{y}^{n} \bigg(i - \frac{1}{2}, j \bigg) - H_{x}^{n} \bigg(i, j + \frac{1}{2} \bigg) - H_{x}^{n} \bigg(i, j - \frac{1}{2} \bigg) \bigg], \end{split}$$
(26a)
$$\begin{split} H_{x}^{n+1} \bigg(i, j + \frac{1}{2} \bigg) &= H_{x}^{n} \bigg(i, j + \frac{1}{2} \bigg) - \\ - \frac{1}{2} \bigg[\tilde{E}_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i, j + 1) - \tilde{E}_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i, j) \bigg], \end{aligned}$$
(26b)
$$\begin{split} H_{y}^{n+1} \bigg(i + \frac{1}{2}, j \bigg) &= H_{y}^{n} \bigg(i + \frac{1}{2}, j \bigg) + \\ + \frac{1}{2} \bigg[\tilde{E}_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i + 1, j) - \tilde{E}_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i, j) \bigg]. \end{split}$$
(26a)

Предварительное моделирование формирования и распространения поверхностных электромагнитных волн проводилось с использованием в качестве источника магнитного диполя в виде:

$$H(t, x = 0, y = 0, z) =$$

= $H_0 \sin(2\pi f t) = H_0 \sin(\omega_1 t).$ (27)

Изначально была проведена калибровка реализованного метода FDTD по известным результатам работ [1, 2, 16]. Далее было проведено полное моделирование поля с источником (27) на длинах волн 2, 4 и 8 мкм для структуры из двух графеновых листов и показано формирование ППП в системе (рис. 3). Для удобства было разработано онлайн-приложение, в котором на стороне пользователя находится построитель макета двумерных плазмонных схем, в то время как блок численного расчета и моделирования электромагнитного поля реализован на стороне сервера. Разработанные полхолы и их реализация в настоящем варианте не позволяют проводить полномасштабное моделирование процессов резонансного взаимодействия КТ и ППП в графене, т.е. моделирование для нескольких КТ вблизи графена, что является темой последующих исследований.

Вместе с тем, версия программы, адаптированная для работы с тонкими пленками произвольных проводящих материалов, позволила провести полное полевое моделирование процессов формирования и выявить особенности управления поверхностными плазмон-поляритонами в планарных устройствах на основе наноструктурированных пленок золота. В перспективе запланировано расширение программы для реализа-

ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ том 84 № 3 2020



Рис. 3. Вид части основной рабочей html-страницы программного модуля в режиме построения распределения интенсивностей для TE-мод. Пространственное распределение E_y для ППП, формируемых на паре графеновых листов с параметрами $\mu_c = 0.6$ эВ, $\tau = 0.9$ пс, длина волны источника $\lambda_0 = 8.0$ мкм, диэлектрическая проницаемость окружения $\varepsilon_d = 1$.

ции трехмерного моделирования и анализа как отдельных локализованных плазмон-поляритонных структур [18], так и целых массивов на их основе [19].

жана грантом Российского научного фонда № 19-72-20154.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены математические модели и численные алгоритмы, необходимые для проектирования функциональных устройств на основе двумерных материалов и полупроводниковых квантовых точек. В частности, разработаны модели для расчета основных оптических характеристик КТ на основе полупроводниковых соединений АЗВ5 и А2В6. Составлена и программно реализована численная модель метода конечных разностей во временной области для моделирования распространения плазмон-поляритонных мод в плазмонных структурах на основе графена. Проведена проверка корректности работы алгоритмов на основе сравнения результатов симуляции с данными экспериментальных и теоретических работ.

Работа выполнена в рамках договора 2226ГС1/ 37022 с фондом содействия инновациям и поддер1. Sarker P.C., Rana Md.M., Sarkar A.K. // Optik. Int. J. Light Electron. Opt. 2017. V. 144. P. 1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 2. Hossain Md.B., Rana Md.M. // ICEEICT. 2015. P. 1.
- Bel Haj Mohamed N., Haouari M., Zaaboub Z. et al. // J. Nanopart. Res. 2014. V. 16. P. 2242.
- 4. von Grunberg H.H. // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 2293.
- Дроздов К.А. Оптические и фотоэлектрические свойства композитных структур на основе пористой матрицы SnO₂ и гетероэпитаксиальных нанокристаллов CdSe/CdS. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Москва: МГУ, 2015.
- Abd A.N. // Quantum dots CdSe/PSi/Si photodetector. Dr. Phil. on Phys. thesis. Baghdad: University of Al-Mustansiriyah, 2015.
- Koole R., Groeneveld E., Vanmaekelbergh D. et al. Size effects on semiconductor nanoparticles. Berlin, Heidelberg: Springer, 2014. P. 13.
- 8. *Weber A.* Intraband spectroscopy of semiconductor quantum dots. Dr. Phil. thesis. Würzburg: Julius-Max-imilians Universität, 1998.

- 9. Гапоненко С.В., Розанов Н.Н., Ивченко Е.Л. и др. Оптика наноструктур. СПб.: Недра, 2005. 326 с.
- Градитейн И.С., Рыжик И.М. Табл. интегралов, сумм, рядов и произведений. 4-е изд. М.: Физматгиз, 1963. 1100 с.
- 11. *Melikyan A.O., Minasyan G.R.* // Semiconductors. 2000. V. 34. № 4. P. 386.
- 12. http://plazm.expertpro.online.
- 13. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. // Science. 2004. V. 306. № 5696. P. 666.
- 14. Di Bernardo A., Millo O., Barbone M. et al. // Nat. Commun. 2017. V. 8. Art. № 14024.

- 15. *Ichinokura S., Sugawara K., Takayama A. et al.* // ACS Nano. 2016. V. 10. № 2. P. 2761.
- Wang B., Zhang X., Yuan X. et al. // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100. Art. № 131111.
- 17. *Aliofkhazraei M., Ali N., Milne W.I. et al.* Graphene science handbook. Electrical and optical properties. Boca Raton: CRC Press, 2016. 720 p.
- Dzedolik I.V., Pereskokov V. // J. Opt. Soc. Amer. A. 2016. V. 33. № 5. P. 1004.
- Dzedolik I.V., Lapayeva S., Pereskokov V. // J. Opt. 2016.
 V. 18. № 7. Art. № 074007.