



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

工學碩士 學位論文

FDTD법을 이용한 금속 나노 구멍의  
전기장 집속에 관한 연구

**A study on the electric field enhancement in metal  
nanoholes by FDTD method**



指導教授 李三寧

2018年 2月

韓國海洋大學校 大學院

電子素材工學科

盧知衍

본 논문을 노지연의 공학석사 학위논문으로 인준함.



위원장 김 홍 승 (인)

위 원 안 지 훈 (인)

위 원 이 삼 녕 (인)

2018년 2월

한국해양대학교 대학원

# 목 차

List of Tables .....	3
List of Figures .....	4
Abstract .....	7
1. 서 론	
1.1 연구 배경 .....	9
1.1.1 나노 구멍의 연구 및 응용 .....	9
1.2 연구 목적 .....	20
2. 이 론	
2.1 전자기파 .....	21
2.2 표면 플라즈몬 .....	23
3. FDTD	
3.1 FDTD 알고리즘 .....	26
3.1.1 경계조건 .....	35
3.1.2 격자와 안전성 .....	36
3.2 FDTD 설치 시스템 .....	36
4. FDTD 시뮬레이션 데이터	
4.1 시뮬레이션 과정 .....	37
4.2 3D-CAD 모델링 .....	41
4.3 구멍 모양에 따른 FDTD 시뮬레이션 데이터 .....	42
4.4 금속 두께에 따른 FDTD 시뮬레이션 데이터 .....	50
5. 실험 결과 및 요약 .....	54
참고문헌 .....	55

## List of Tables

제 3장 FDTD

Table 1 전기장과 자기장의 공간좌표 ..... 31



## List of Figures

### 제 1장 서론

<b>Fig. 1.1</b> (a) FEB를 사용한 밴드갭 필터, (b) FIB를 사용하여 에칭한 광결정 구조, (c) FIB를 이용하여 제작한 플라즈몬 공명 구조 .....	10
<b>Fig. 1.2</b> 소프트-임프린트 리소그래피로 만든 30nm 스트랩의 SEM 사진 .....	10
<b>Fig. 1.3</b> (a) 단일층 콜로이드를 이용한 나노 닷 배열, (b) 이중층 콜로이드를 이용한 나노 닷 배열, (c) 수직 정렬된 나노 튜브, (d) 나노 스피어 리소그래피로 성장된 ZnO 나노 막대 .....	11
<b>Fig. 1.4</b> HF-H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> 용액에 5분 동안 에칭한 p-type Si (100)의 (a)윗면과 (b)단면, HF-H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> 용액에 15분 동안 에칭한 p-type Si (111)의 (c)윗면과 (d)단면 .....	12
<b>Fig. 1.5</b> (a) 바이오 센서의 전체적인 모식도, (b) 모식도 내부의 플로우 셀, (c) 항체 결합 실험의 모식도 .....	13
<b>Fig. 1.6</b> (a) 금속 나노 이중구조의 SEM 사진(inset 파장의 투과도), (b) 금속 나노 리본형태의 모식도와 SEM 사진 .....	14
<b>Fig. 1.7</b> (a) 금속 나노 구멍 밑에 유리 기관이 부착된 구조의 모식도, (b) (a)의 FDTD 시뮬레이션의 전계강도, (c) 금속 나노 구멍 밑에 공간이 있는 유리 기관 구조의 모식도, (d) (c)의 FDTD 시뮬레이션의 전계 강도 .....	15
<b>Fig. 1.8</b> (a) 실험 설정의 모식도 (b), (c), (d), (e) 편광된 빛과 기울어진 빛을 보내어 주었을 때의 NSOM 이미지(화살표는 편광 표시), (f) (b)에서와 같이 수평으로 편광된 빛을 나노 구멍에 보내주었을 때의 FDTD 시뮬레이션 결과 .....	17
<b>Fig. 1.9</b> (a) 0.1THz 빛을 500nm 슬릿에 보내주었을 때의 x축의 강도, 0.1THz의 빛을 70nm의 슬릿에 보내주었을 때의 (b) x축과 (c) z축의 전계강도 및 (d) y축의 자기장, (e) 70nm 슬릿을 통과하여 나오는 면의 전기장과 자기장, (f) 70nm 슬릿에서의 포인팅 벡터 성분 $\langle S_z \rangle$ .....	19

## 제 2장 이론

Fig. 2.1 선편광된 전자기파의 진행 방향 .....	21
Fig. 2.2 전자기파 스펙트럼 .....	22
Fig. 2.3 전자의 비탄성 산란에 의한 금속 박막에서의 플라즈몬 생성 .....	23
Fig. 2.4 금속과 유도체 계면에서의 표면 플라즈몬 이동 .....	23
Fig. 2.5 전파형 플라즈몬(Propagating Surface Plasmon)의 모식도 .....	24
Fig. 2.6 국부적 플라즈몬(Localized Surface Plasmon)의 모식도 .....	25
Fig. 2.7 Au 나노 입자크기에 따른 생상의 변화 .....	25

## 제 3장 FDTD

Fig. 3.1 (a) Yee가 제안한 단위 셀의 형태, (b) FDTD 시뮬레이션을 계산할 때 전기장과 자기장의 위치관계 .....	27
--	----

## 제 4장 FDTD 시뮬레이션 데이터

Fig. 4.1 (a) PEC 영역에서의 전기장과 자기장, (b) PMC 영역에서의 전기장과 자기장 .....	38
Fig. 4.2 파장에 따른 금의 굴절률 .....	39
Fig. 4.3 (a) FDTD 시뮬레이션 설정 조건의 x-z축에 대한 모식도, (b) mesh 영역과 mesh 사이즈 .....	40
Fig. 4.4 (a) 3D-CAD로 제작한 금속 나노 구멍의 지름의 크기가 10, 50, 100nm인 구조체, (b) 3D-CAD로 제작한 금속 나노 역사다리 구멍의 밑면의 아래쪽 구멍의 한 변의 길이 10, 50, 100nm인 구조체 .....	41
Fig. 4.5 지름이 다양한 금속 나노 구멍에 파장을 보내준 시뮬레이션 데이터. (a) 10nm 구멍에 450nm, (b) 10nm 구멍에 550nm, (c) 10nm 구멍에 650nm, (d) 50nm 구멍에 450nm, (e) 50nm 구멍에 550nm (f) 50nm 구멍에 650nm, (g) 100nm 구멍에 450nm, (h) 100nm 구멍에 550nm (i) 100nm 구멍에 650nm 파장을 보내주었을 때의 $ E ^2$ 의 강도 .....	43

<b>Fig. 4.6</b> 아래쪽 구멍의 한 변의 길이 다양한 금속 나노 역사다리에 파장을 보내준 시뮬레이션 데이터. (a) 10nm 구멍에 450nm, (b) 10nm 구멍에 550nm, (c) 10nm 구멍에 650nm, (d) 50nm 구멍에 450nm, (e) 50nm 구멍에 550nm (f) 50nm 구멍에 650nm, (g) 100nm 구멍에 450nm, (h) 100nm 구멍에 550nm (i) 100nm 구멍에 650nm 파장을 보내주었을 때의 $ E ^2$ 의 강도 ...	44
<b>Fig. 4.7</b> (a) 100nm 금속 박막에 10, 50, 100nm 원통형 구멍에 파장을 보내 주었을 때와 10nm 원통형 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때의 $ E ^2$ 의 그래프, (b) 원통형 구멍의 크기가 10nm인 구멍에 선편광된 빛을 보내주었을 때, (c) 원편광된 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터 .....	46
<b>Fig. 4.8</b> (a) 두께가 100nm 금속 박막 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 10, 50, 100nm 역사다리꼴 모양 구멍에 파장을 보내주었을 때와 10nm 역사다리꼴 모양 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때의 $ E ^2$ 의 그래프, (b) 역사다리꼴 모양 구멍이 10nm인 구멍에 선편광된 빛을 보내주었을 때, (c) 원편광된 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터 .....	48
<b>Fig. 4.9</b> 금속 나노 역사다리의 구멍의 아래쪽 한 변의 길이를 다르게 하였을 때의 $ E ^2$ 의 강도 .....	49
<b>Fig. 4.10</b> (a) 10nm 원통형 구멍에 파장을 보내주었을 때 두께가 40, 60, 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때 $ E ^2$ 의 그래프, (b) 원통형 구멍의 크기가 10nm에 두께가 40nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터, (c) 원통형 구멍의 크기가 10nm에 두께가 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터 .....	51
<b>Fig. 4.11</b> (a) 10nm 역사다리꼴 모양 구멍에 파장을 보내주었을 때 두께가 40, 60, 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때 $ E ^2$ 의 그래프, (b) 역사다리꼴 모양 구멍의 크기가 10nm에 두께가 40nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터, (c) 역사다리꼴 모양 구멍의 크기가 10nm에 두께가 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터 .....	53



<영문초록>

A study on the electric field enhancement in metal nanoholes by FDTD method

Noh, Ji-Yeon

Department of Electronic Materials Engineering,  
Graduate School of Korea Maritime and Ocean University

**Abstract**

Recently, the research for the relationship between nanostructures and light has given rise to considerable interest due to their possible numerous applications. Especially, surface plasmon provides an attractive method to study the phenomena of the transmission enhancement of optics. The finite-difference time-domain (FDTD) simulation is a method that provides accurate prediction of field motion for a variety of electromagnetic interaction with metal. The simulation is carried out to elucidate the nature of surface plasmon generated by nanoholes in metallic film interacting with the light. We performed the FDTD simulation to see how well the plasmon phenomenon occurs depending on the size of the metal nanoholes. To run the FDTD simulation, we drew the empty reversed nano trapezoidal shape and cylindrical nanohole with aid of 3D-CAD. The wavelength of the irradiated light were 400 ~ 1000nm and the mesh size was set as 0.2nm. We have analysed the plasmon phenomena in the surface of metal according to the size of the hole, the thickness of metal thin film, and wavelength. As a result of FDTD simulation, we could see strong  $|E|^2$  in empty reversed nano trapezoidal shape than in the cylindrical nanoholes. In empty reversed nano trapezoidal shape, strong  $|E|^2$  appears when the bottom side of reversed trapezoid size is smaller and the thickness is thicker. It can be applied to various fields, and can be used for sensors and optical transmission filters.

**KEY WORDS:** FDTD; cylindrical nanohole; empty reversed nano trapezoidal shape; surface plasmon; electromagnetic field.

<국문초록>

FDTD법을 이용한 금속 나노 구멍의  
전기장 집속에 관한 연구

노지연

한국해양대학교 대학원, 전자소재공학과

초록

최근 나노 구조와 빛 사이의 관계에 대한 연구가 활발하게 이루어지고 있는데 특히 표면 플라즈몬 현상에 대한 관심이 증가되고 있다. 이의 이론적 해석은 FDTD(유한차분 시간영역법) 시뮬레이션을 이용하여 해석 가능하다. 이 시뮬레이션을 통하여 원통형 구멍과 역사다리꼴 모양 구멍에서 금속구멍의 크기를 10, 50, 100nm로 변화시켰을 때와 금속의 두께를 40, 60, 80nm로 변화시켰을 때의 전기장의 강도를 확인하였다. 이때 조사광의 파장은 400 ~ 1000nm를 주었고, 메쉬 크기는 0.2nm로 설정하였으며 구멍의 크기, 금속 박막의 두께 및 파장에 따른 금속 표면에서의 플라즈몬 현상을 분석하였다. FDTD 시뮬레이션의 결과로 나노 구멍보다 나노 역사다리에서 전기장의 강도가 강하게 나타나고 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 짧고 두께가 두꺼울 때 전기장의 강도가 더 강해짐을 볼 수 있었다. 이러한 방법은 다양한 분야에 응용이 가능하며, 특히 센서 및 광전송 필터 등에 적용할 수 있을 것이다.

**KEY WORDS:** 유한차분시간영역법; 원통형 나노구멍; 역사다리꼴 나노구멍; 표면 플라즈몬; 전자기장.

# 제 1 장 서 론

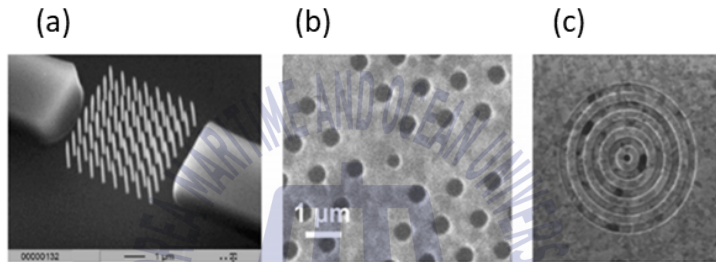
## 1.1 연구 배경

최근 나노 기술에 대한 관심이 높아지고 기술이 발전하면서 나노 크기의 구조체와 빛과의 상관관계에 대한 연구가 활성화되고 있다. 이러한 연구가 활발하게 진행되면서 금속 표면과 빛 사이에서 일어나는 현상인 표면 플라즈몬 현상을 분석하고 이를 다양하게 응용하는 실험이 많이 나오고 있다. 하지만 이러한 실험이 진행되기 위해서는 금속의 종류나 구조에 따른 이론적인 해석과 현상에 대한 정확한 파악이 중요하다. 그래서 본 논문에서는 나노 구조체의 형태를 바꾸어 전기장의 집중이 어떻게 달라지는지 FDTD(Finite-Difference Time-Domain) 시뮬레이션을 사용하여 분석하고자 한다.

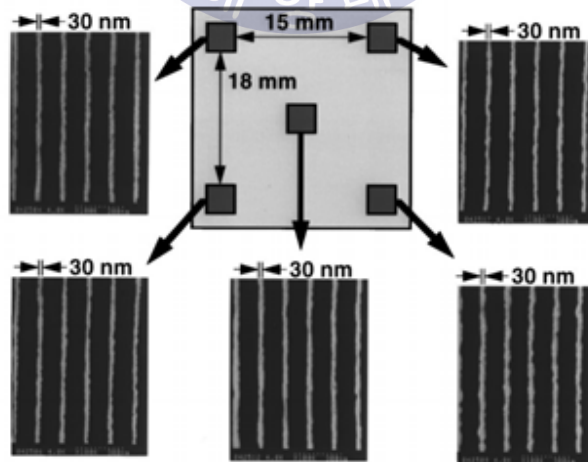
### 1.1.1 나노 구멍의 연구 및 응용

최근 나노 기술이 발전함으로써 나노 사이즈의 구멍을 만드는 방법이 다양해졌다. 첫 번째는 집중 이온 빔(Focused Ion Beam, FIB)과 집중 전자 빔(Focused Electron Beam, FEB)이다. 이것들은 나노미터 범위의 공정에 다양하게 이용되고 있으며 직접 재료의 표면에 빔을 입사시켜 나노 구조를 제작한다[1]. 두 번째로 소프트-임프린트 리소그래피(soft - imprint lithography)는 FIB와는 다르게 대면적화 된 나노 구멍 배열을 만들 수 있고, 결함이 작고 균일한 나노 구멍을 만들 수 있고 가격이 저렴하다는 장점이 있다[2]. 소프트-임프린트 리소그래피는 열 또는 UV를 이용하여 투명한 몰드를 경화시킨 후, 투명한 몰드를 마스크로 사용하여 리소그래피를 하는 방법이다. 세 번째는 콜로이드 리소그래피(colloidal lithography, CL)로 콜로이드 입자(1nm ~ 100nm)를 자가 정렬(self-assembly)로 배열하여 에칭 및 스퍼터링의 마스크로 사용하는 방법이다. 이는 나노스피어 리소그래피(nanosphere lithography, NSL)로도 불린다. 두 리소그래피는 가격이 저렴하고 간단하게 콜로이드 입자의 크기를 제어하여 수십 나노미터를 제어할 수 있고, 복잡한 3차원 구조를 제작할 수 있는 장점이 있다.

Fig. 1.1은 FIB와 FEB로 제작한 다양한 형태의 광결정을 나타내었다. 여기서 광결정은 주기적인 나노구조를 이용하여 광자의 움직임에 영향을 줄 수 있는 구조를 말한다. Fig. 1.1 (a)는 금/탄소 배열을 FEB를 이용하여 제작된 밴드갭 필터를 나타내고 있다[3]. Fig. 1.1 (b)는 FIB를 이용하여 국부적인 부분을 건식 에칭으로 제거한 이후 백금을 증착한 것이고[4], Fig. 1.1 (c)는 FIB를 이용하여 금과 은을 에칭하여 플라즈몬 공진 구조를 제작한 것이다[5]. Figure 1.2는 소프트-임프린트 리소그래피를 이용하여 만든 30nm의 스트립의 균일성을 조사하기 위하여 18mm와 15mm의 간격차이로 몰드를 제작하였다. Fig. 1.2에서는 광범위한 영역에서도 균일성을 유지하는 것을 보여준다[6].

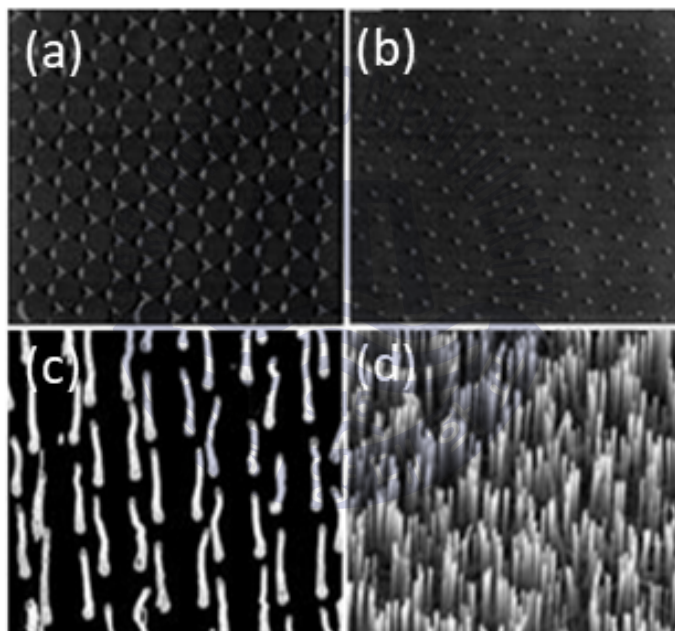


**Fig. 1.1** (a) FEB를 사용한 밴드갭 필터, (b) FIB를 사용하여 에칭한 광결정 구조, (c) FIB를 이용하여 제작한 플라즈몬 공명 구조



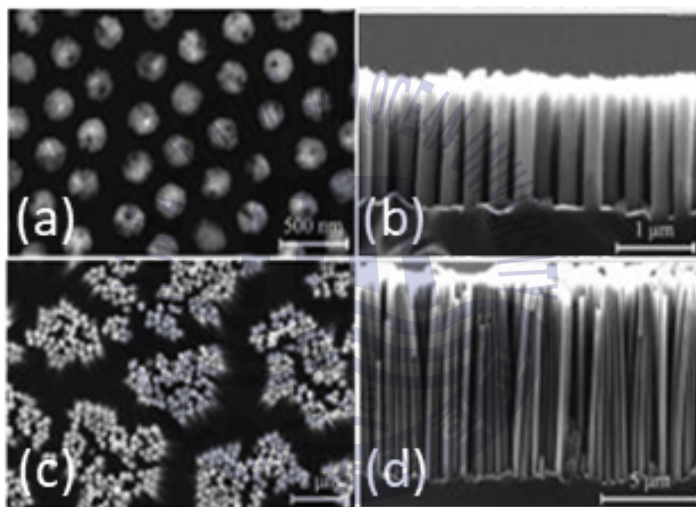
**Fig. 1.2** 소프트-임프린트 리소그래피로 만든 30nm 스트립의 SEM 사진

Fig. 1.3은 콜로이드 리소그래피를 사용하여 패턴형성 후 금속을 성장시킨 이미지이다. Fig. 1.3의 (a)는 콜로이드가 육각형으로 정렬된 단일층의 콜로이드 마스크에 금속을 증착시켜 삼각형의 나노 구조 배열을 만든 것이고, Fig. 1.3 (b)는 콜로이드를 이중층의 콜로이드 마스크로 만들어 금속을 증착하여 구형의 나노 구조 배열을 만든 것이다. Fig. 1.3 (c)는 콜로이드 마스크로 니켈 구를 증착시켜 만든 구조인 (a)위에 PECVD를 이용하여 탄소 나노 튜브를 성장시킨 것이고, Fig. 1.3 (d)는 금 나노 구조 배열인 (b)를 시드(seed)로 사용하여 ZnO 나노 막대 배열을 만든 것이다[7].



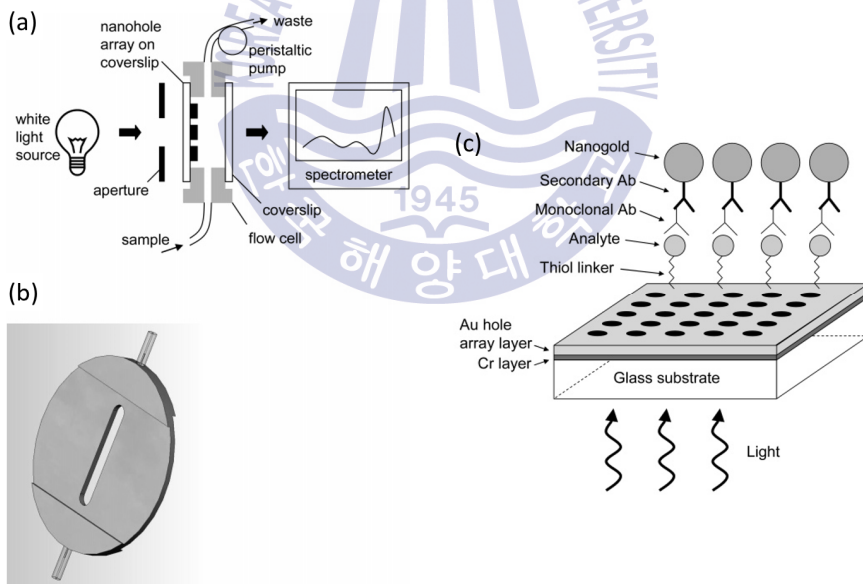
**Fig. 1.3** (a) 단일층 콜로이드를 이용한 나노 닷 배열, (b) 이중층 콜로이드를 이용한 나노 닷 배열, (c) 수직 정렬된 나노 튜브, (d) 나노 스피어 리소그래피로 성장된 ZnO 나노 막대

Fig. 1.4는 실리콘 나노 와이어 배열을 만들기 위해 실리카 콜로이드를 기판위에 증착한 후 불산 용액을 이용하여 화학적 에칭을 한 후 금속을 증착하고 그리고 콜로이드를 제거하였다. HF-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 용액에 습식 식각을 할 때 남은 금속이 촉매로 사용되어, 금속 아래의 실리콘이 에칭 된 모습을 볼 수 있다. Fig. 1.4 (a), (b)는 실리카 콜로이드를 이용하여 p-type의 Si (100) 기판의 표면을 HF-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 용액으로 5분 동안 에칭한 기판의 윗면과 단면이고, Fig. 1.4 (c), (d)는 p-type의 Si (111) 기판 표면을 15분동안 에칭한 윗면과 단면이다[8].



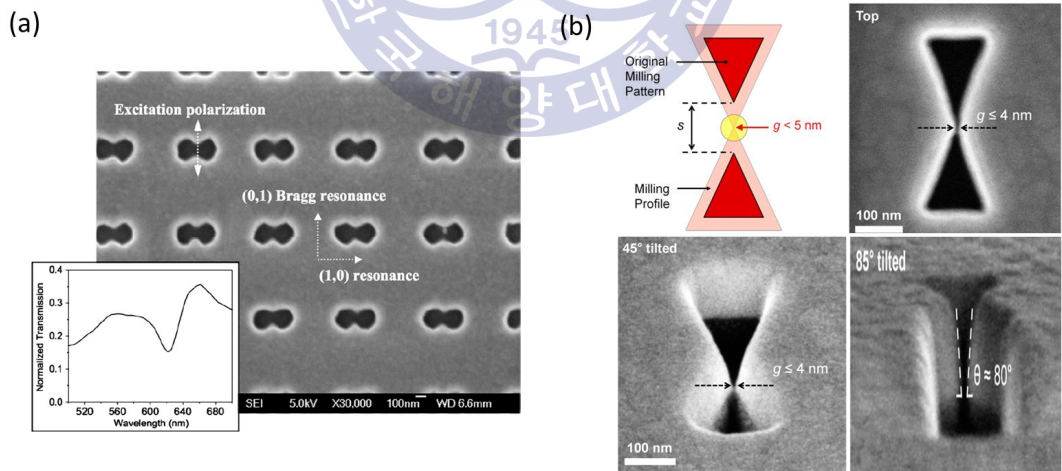
**Fig. 1.4** HF-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 용액에 5분 동안 에칭한 p-type Si (100)의 (a)윗면과 (b)단면, HF-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 용액에 15분 동안 에칭한 p-type Si (111)의 (c)윗면과 (d)단면

Fig. 1.1 ~ 1.4에서 소개한 것과 같은 다양한 방법으로 제작한 100nm 이하의 나노 구멍은 유기분자와 생물 분자가 금속의 표면에서 결합하는 원리를 바이오 센서로 사용할 수 있다. 즉 금속 표면에 항체를 고정시켜놓고 항원과 결합을 유도하는 광을 조사하면, 금속 박막과 유전물질의 경계에서 입사한 광의 굴절률이 변화하고 파장의 곁에 따라 항원이 이동하면서 실시간으로 농도와, 결합반응도를 측정할 수 있다[9, 10]. 그중 나노 구멍을 이용한 바이오센서는 크기를 작게 만들 수 있어 휴대가 가능한 센서를 만들 수 있는 장점이 있다. Figure 1.5 (a)는 바이오 센서의 모습과 광원, 유체의 이동경로, 광전송을 이용한 측정 시스템을 보여준다. 나노 구멍의 직경은 0.7mm이고, 플로우 셀은 측정하고자 하는 용액(항원 등)을 30uL를 안에 담을 수 있다. 광원 반대편에는 현미경을 장착하여 데이터를 측정한다. Fig. 1.5 (b)는 (a)의 모식도 안의 플로우 셀의 모습이다. Fig. 1.5 (c)는 항체 결합 실험의 모식도이다.



**Fig. 1.5** (a) 바이오 센서의 전체적인 모식도, (b) 모식도 내부의 플로우 셀, (c) 항체 결합 실험의 모식도

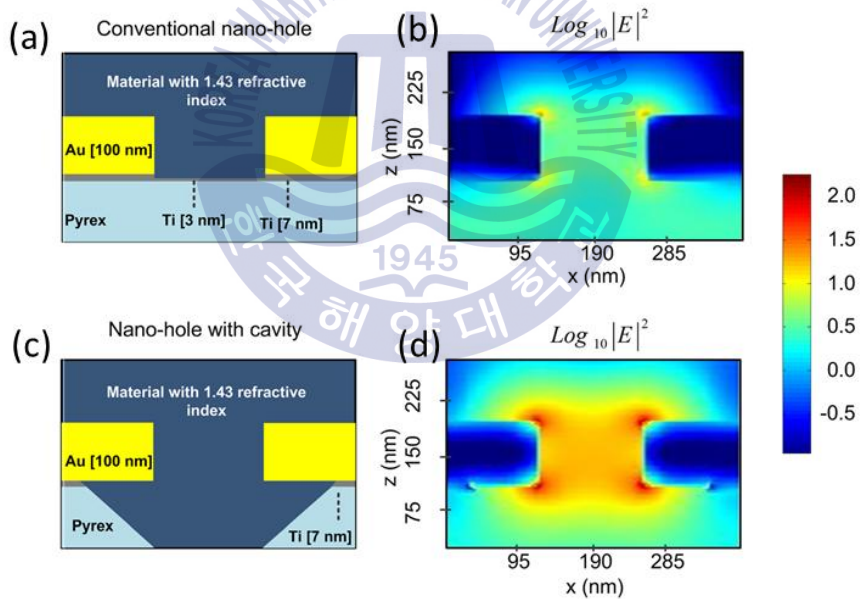
Figure 1.6의 (a)는 바이오 센서에서 항원과 항체 검출을 최적화하기 위하여 나노 구멍의 구조를 바꾸어 금속 나노 구멍 두 개를 결합하여 더블 나노 구멍을 만들었고, 빛을 보내주었을 때 원이 겹치는 부분에 빛의 강도가 더욱 상승하여 흡착이 잘 일어나는 현상을 보였다[11]. Fig. 1.6 (a)에서는 유리 기판위에 5nm 크롬 박막과 100nm 금속 박막을 증착한 후 FIB을 이용하여 직경이 200nm이고 구멍중심 간의 간격이 190nm, 주기가 800nm인 이중 구멍의 배열을 보여준다. Fig. 1.6 (a) inset 이미지에서는 주기가 600nm 나노 구멍 배열에서 통과한 빛의 스펙트럼을 보여주는데 540nm와 645nm에서 강한 피크를 보여주고 있다. Figure 1.6의 (b)에서는 금속 나노 구조를 안테나로 응용한 사례를 나타내었다. 100nm 두께의 금속 박막에 중간의 간격이 4nm인 리본 형태의 구멍을 구멍에 빛을 보내주면 100nm 간격의 안테나보다 제 2고조파 신호가 27000배 이상으로 강하게 관찰된다[12]. 제 n고조파는 기본 주파수의 n배가 되는 주파수이고, 제 2고조파는 기본주파수의 2배의 주파수를 가지고 있다. Fig. 1.6 (b)는 에칭 패턴사이의 간격을 제어하여 5nm이하의 패턴을 제작하기 위한 모식도와 SEM 이미지이다.



**Fig. 1.6** (a) 금속 나노 이중구조의 SEM 사진(inset 파장의 투과도), (b) 금속 나노 리본 형태의 모식도와 SEM 사진

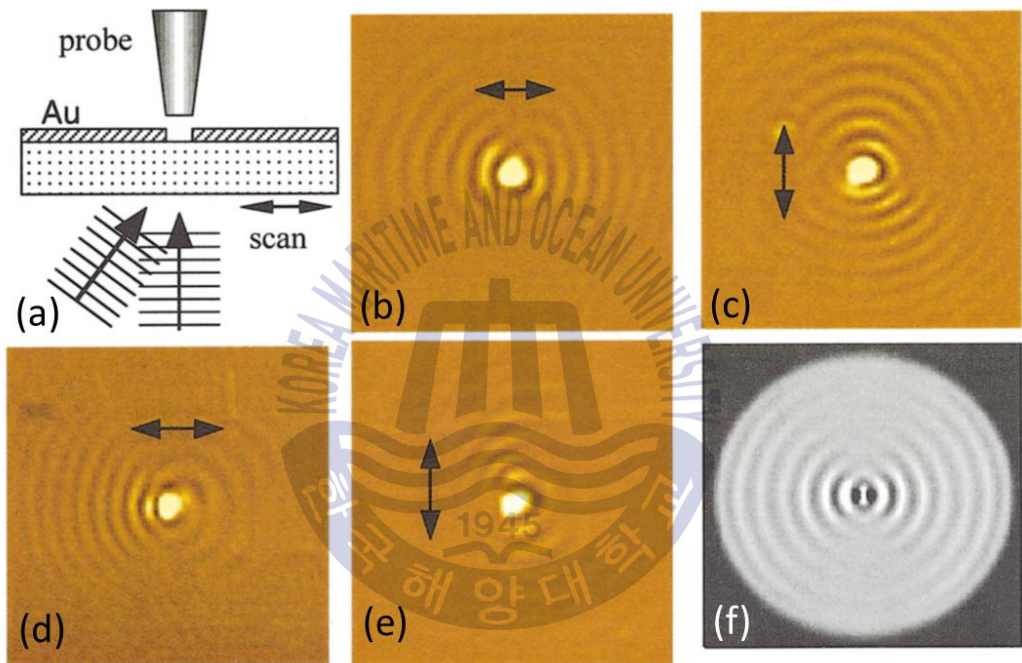


Figure 1.7에는 나노 구멍 밑에 유리 기판이 부착된 구조와 유리 기판을 에칭하여 공간이 있는 구조에 대해 FDTD 시뮬레이션을 통해 비교하였다[13]. 유리 기판위에 티타늄 박막을 얇게 증착한 후 금 박막을 증착하고 전자빔 리소그래피를 통해 금속 나노 구멍 배열을 제작하였다. 여기서 티타늄은 금 박막의 접착층으로 사용되었다. 이후 30% 농도의 불산을 이용하여 나노 구조체와 유리를 제외한 공간에는 공기가 아닌 굴절률이 유리기판과 일치하는 유전체로 채웠다. 유리 기판을 에칭하고 2개의 구조에 빛을 보내주었을 때, 유리 기판을 에칭하여 아래쪽에 공간을 확보한 나노 구멍에서 더 높은 전기장의 세기가 향상됨을 볼 수 있다. Fig. 1.7 (b)와 (d)의 FDTD 시뮬레이션 결과에서 전계강도가 강한 부분은 금속의 구멍의 모서리 부분에서 관찰되었고, 평균 전계강도는 유리를 에칭하여 구멍 아래쪽에 공간이 있는 구조가 그렇지 않은 것보다 더 높게 나타남을 볼 수 있다.



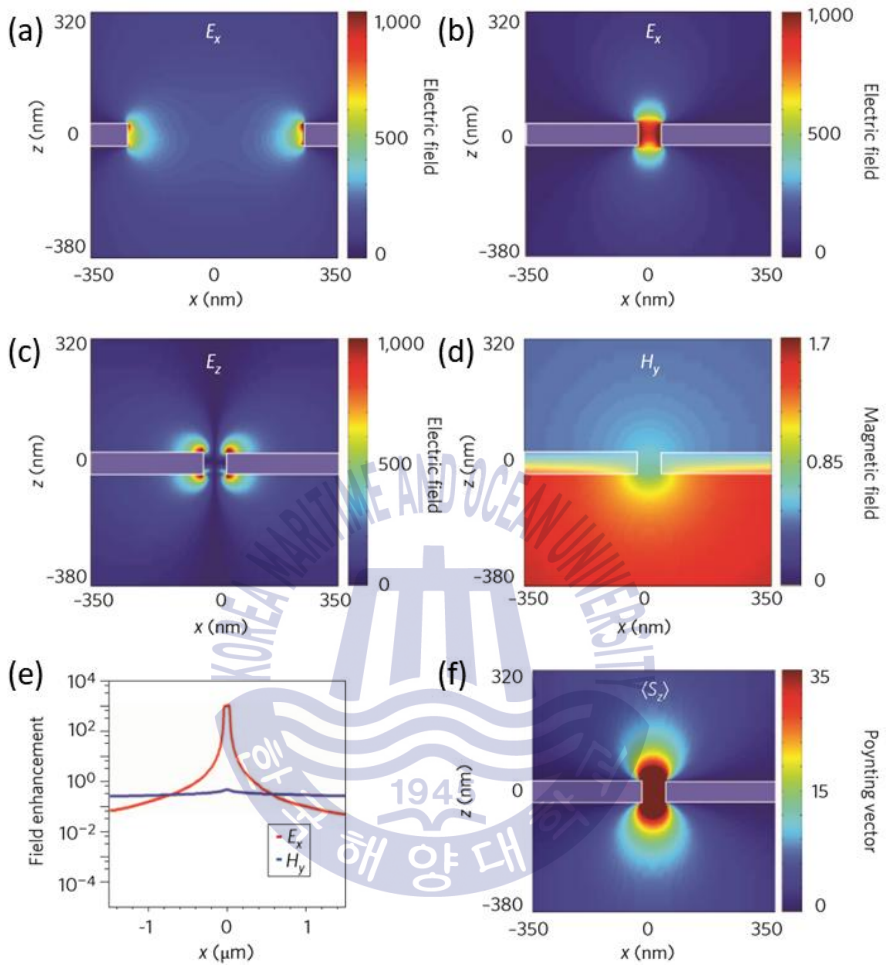
**Fig. 1.7** (a) 금속 나노 구멍 밑에 유리 기판이 부착된 구조의 모식도, (b) (a)의 FDTD 시뮬레이션의 전계강도, (c) 금속 나노 구멍 밑에 공간이 있는 유리 기판 구조의 모식도, (d) (c)의 FDTD 시뮬레이션의 전계강도

이와 같이 금속 나노 구멍 속에서 빛이 증폭되는 이유는 표면 플라즈몬(Surface Plasmons, SPs) 때문인데 이에 대해서는 2장 이론 부분에서 자세히 설명하였다. Figure 1.8에는 금 박막에 나노 구멍을 한 개를 만들어서 표면 플라즈몬 폴라리톤(surface plasmon polaritons, SPPs)를 측정하기 위해 NSOM(Near-field Scanning Optical Microscopy)를 사용하였고, FDTD 시뮬레이션 계산 방법으로 실험 결과와 동일한지 확인하였다. Fig. 1.8 (a)는 300nm Quartz 기판 위에 증착된 100nm의 금 박막에 집중 이온 빔을 이용하여 크기가 200nm인 나노 구멍을 만들었다. 그리고 NSOM을 이용하여 나노 구멍에 532nm의 레이저를 보내주었을 때의 주변의 전자기장을 이미지화 하였다. Fig. 1.8 (b)는 켈츠 기판위에 밑에서 빛을 보낼 때 편광이 수평으로 되어있는 것을 보내준 이미지이다. 구멍 주변에 광학적 패턴이 확인되고 간섭무늬는 475nm로 보내준 파장보다 작은 간섭무늬가 생긴다. Fig. 1.8 (c)는 (b)와 다르게 편광을 수직으로 시킨 빛을 보내주었다. 편광이 수직이 되면서 광학적 패턴도 90° 회전한 475nm의 간섭무늬가 만들어졌다. Fig. 1.8 (d)는 켈츠 기판 밑에서 빛을 13°로 기울여서 편광이 수평으로 된 빛을 주었을 때, 간섭무늬의 주기가 405nm로 만들어진 이미지이고, Fig. 1.8 (e)도 각도를 기울여 광을 수직으로 편광된 빛을 주었을 때, 간섭무늬의 주기가 600nm로 늘어나게 된다. Fig. 1.8 (f)는 (b)와 같은 빛을 보내주었을 때의 FDTD 시뮬레이션의 결과이다. Fig. 1.8 (b)와 (f)는 일치한 형태의 결과를 보이므로 측정값과 FDTD 시뮬레이션 값이 일치한다는 것을 알 수 있다[14].



**Fig. 1.8** (a) 실험 설정의 모식도 (b), (c), (d), (e) 편광된 빛과 기울어진 빛을 보내어 주었을 때의 NSOM 이미지(화살표는 편광 표시), (f) (b)에서와 같이 수평으로 편광된 빛을 나노 구멍에 보내주었을 때의 FDTD 시뮬레이션 결과

Figure 1.9에는 나노 구멍이 아닌 나노 슬릿에 빛을 집중시키는 연구결과를 나타내었는데 이는 파장( $\lambda$ )/30000 크기의 나노 슬릿에 광이 유도되어 전계를 향상시켰고, 이러한 나노 슬릿과 파장의 관계를 분석하기 위해서 FDTD 시뮬레이션을 사용하였다. 시뮬레이션을 할 때, 2.5nm의 격자 크기가 사용되었고, 파장은 0.1THz로 하였다. 이때 투과깊이가 250nm이다. 금속 슬릿의 간격인 70nm이고, 이는 필름의 두께인 60nm 보다 크다. Fig. 1.9 (a)는 0.1THz(파장의 길이 3mm)에서 두께가 60nm이고 슬릿의 간격이 500nm인 샘플의 x축 전계강도를 보여준다. 슬릿의 중심의 전계강도가 200에 가까운 색을 띄고 있다. Fig. 1.9 (b)는 슬릿의 크기를 500nm에서 70nm로 줄였다. 슬릿 중심의 전계강도가 500nm일 때 보다 강하고 1000에 가까운 색을 띤다. 이 두 개를 비교해 보았을 때 슬릿이 작아질수록 테라헤르츠가 더 잘 집중된다는 것을 알 수 있다. 이는 투과깊이인 250nm 보다 작은 금속 두께를 가지더라도 광자가 집중된다는 것을 알 수 있다. Fig. 1.9 (c)는 z축의 전계강도를 보여주며 슬릿 바로 근처에 집중된다는 것을 알 수 있다. Fig. 1.9 (d)는 y축의 자기장강도를 보여주고 있으며, 전계강도보다 강하지는 않지만 훨씬 많이 확산된 것을 알 수 있다. 이때 자기장은 전기장과 달리 투과깊이에 영향을 받고 금속박막을 투과하여 슬릿의 윗부분보다는 아랫부분이 더 강도가 강하게 나타난다. Fig. 1.9 (e)는 빛이 나오는 면에서 2.5nm 떨어진 위치에서  $E_x$ 와  $H_y$ 를 프로 나타내었다.  $H_y$ 는 많은 차이를 보이지 않았지만  $E_x$ 는 가장 높은 점과 낮은 점의 차이가 확실하게 드러난다. Fig. 1.9 (f)는 에너지의 흐름을 설명하기 위한 포인팅 벡터(Poynting vector)인  $\langle S_z \rangle$ 를 나타내었고, 슬릿 사이에서 광 에너지가 집중된 것을 알 수 있다[15].



**Fig. 1.9** (a) 0.1THz 빛을 500nm 슬릿에 보내주었을 때의 x축의 강도, 0.1THz의 빛을 70nm의 슬릿에 보내주었을 때의 (b) x축과 (c) z축의 전계강도 및 (d) y축의 자기장강도, (e) 70nm 슬릿을 통과하여 나오는 면의 전기장과 자기장, (f) 70nm 슬릿에서의 포인팅 벡터 성분  $\langle S_z \rangle$

## 1.2 연구 목적

연구 배경에서 알아본 것처럼 나노 기술이 발전하면서 금속 나노 구멍에 대한 연구가 활발하게 이루어지고 있다. 이러한 연구의 흐름에 맞춰 금속 구멍의 모양, 크기, 금속 박막의 두께에 따른 플라즈몬 현상의 형태나 세기를 알아보고 이를 분석하여 변수들의 상관관계와 물성을 보려고 한다.



## 제 2 장 이 론

### 2.1 전자기파

전자기파(electromagnetic wave)는 주기적으로 세기가 변화하는 전기장과 자기장으로 된 파동이다. 맥스웰 방정식을 통해 변화하는 전기장은 자기장을 만들어 내고, 페러데이의 법칙을 이용하여 변화하는 자기장은 전기장을 만들어 낸다. 전자기파는 횡파이고 전기장과 자기장은 서로 수직을 이루고, 전기장과 자기장이 수직을 이루는 면에 수직으로 전자기파가 진행한다. Fig. 2.1은 선편광된 전자기파의 진행방향을 보여주다. 전자기파가 진행할 때 매질이 없이도 진행이 가능하다. 속력은  $3 \times 10^8 m/s$ 로 파장, 진동수, 진폭과는 상관없이 일정하다[16, 17].

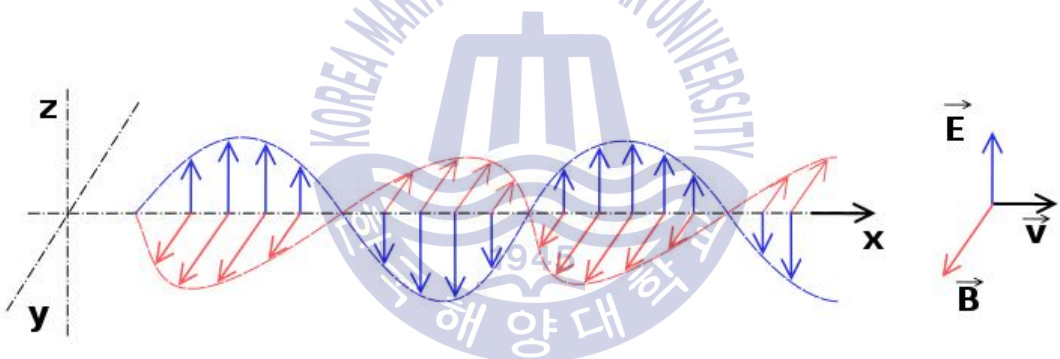


Fig. 2.1 선편광된 전자기파의 진행 방향

전자기파는 진동수가 크거나 작은 순서대로 전자기파 스펙트럼을 형성하는데 이것의 예로는 라디오파, 마이크로파, 적외선, 가시광선, 자외선, X선, 감마선이 있다. 이것들은 각각 다른 특징을 가지고 있다. Fig. 2.2는 전자기파의 전체적인 스펙트럼을 볼 수 있다. 파장이 길수록 왼쪽, 파장이 짧을수록 오른쪽 영역의 전자기파에 위치한다. 전자기파가 짧은 것부터 긴 것으로 분류해 보면 감마선, X-선, 자외선, 가시광선, 적외선, 마이크로파로 나뉘게 된다. 감마선은 방사성 핵에서 방출되고, 투과성이 강해 인체 조직에 흡수되면 심각한 손상을 입힌다. X-선은 가속된 전자를 금속 표면에 충돌

시켰을 때 발생하고, 의학분야나 물질의 격자구조를 확인할 때 많이 사용된다. 자외선은 태양에서 오는 빛 중에 가시광선 보다 짧은 파장으로 눈에 보이지 않는 빛이다. 가시광선은 사람 눈에 보이는 빛으로 색을 구분할 수 있는 빛이다. 적외선은 리모콘에, 마이크로파는 선박과 항공운항이나 기상관측에 필요한 레이더와 위성통신에 이용된다.

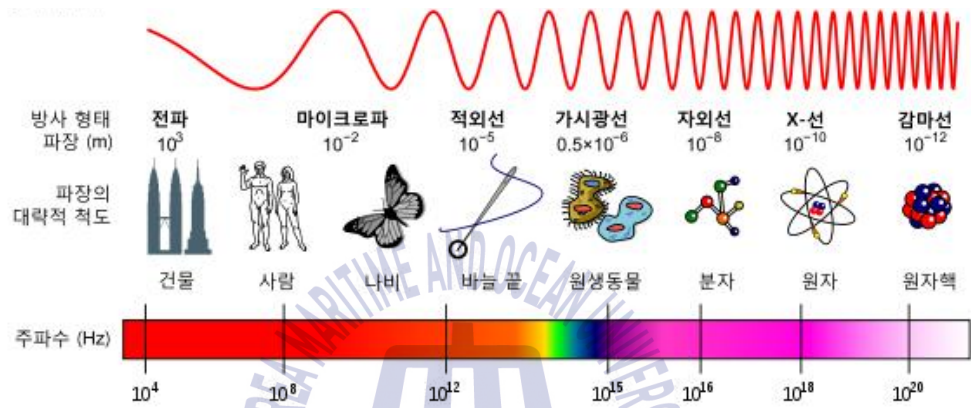


Fig. 2.2 전자기파 스펙트럼[18]



## 2.2 표면 플라즈몬(Surface Plasmons)

표면 플라즈몬은 유전함수가 음인 금속과 양인 유전체의 계면에서 발생하는 전자들의 집단적인 진동 현상을 말한다. 얇은 금속 박막에 전자 또는 광자를 반사 및 통과시킴으로써 플라즈몬을 여기시킬 수 있다[19]. Fig. 2.3에는 금속 박막에 보내준 전자의 비탄성 산란을 이용하여 금속 박막에 표면 플라즈몬을 생성하는 모식도를 나타내었는데 왼쪽은 전자가 산란되면서 산란된 전자는 박막 밖으로 빠져나가고 부딪힌 힘으로 한쪽만 플라즈몬이 생성되고, 오른쪽은 전자가 산란되면서 양쪽에 플라즈몬이 생성되는 경우이다. Fig. 2.4는 표면 플라즈몬이 금속 유전체와 금속 사이의 경계면의 x축 방향으로 전파할 때의 모습이다. 표면 플라즈몬이 계면을 따라서 이동하고 계면으로부터 거리가 멀어질수록 exp 함수에 따라 감소한다.

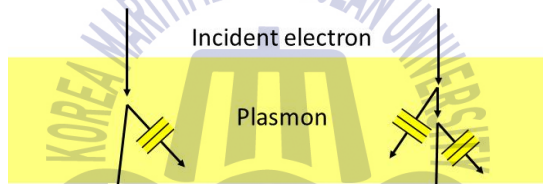


Fig. 2.3 전자의 비탄성 산란에 의한 금속 박막에서의 플라즈몬 생성

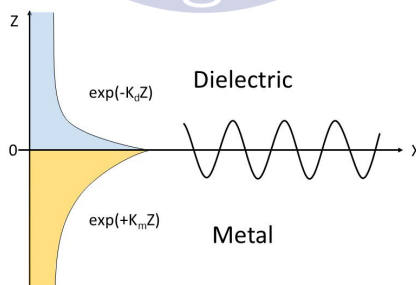


Fig. 2.4 금속과 유전체 계면에서의 표면 플라즈몬의 이동

이때 표면 플라즈몬은 두 가지 종류가 있는데 첫 번째는 전자 및 광자와 같은 전자기파가 평평한 금속 평판과 유전체의 계면 사이에서 수십에서 수백 마이크로미터 정도의 거리에서 x 및 y축 방향으로 이동하며 전자가 진동하여 일어나는 소멸파인 전파형 표면 플라즈몬(Propagating Surface Plasmon)이 있다[20]. 이것은 z축 방향으로 10~100um 정도 나아가다가 1/e 함수로 소멸되고, 근적외선 영역의 빛을 보내주면 1mm까지도 증가한다[21, 22]. 전파형 표면 플라즈몬은 유전체 층의 굴절률 변화에 민감하게 반응한다. Fig. 2.5는 전파형 플라즈몬을 모식도로 표현한 것이다.

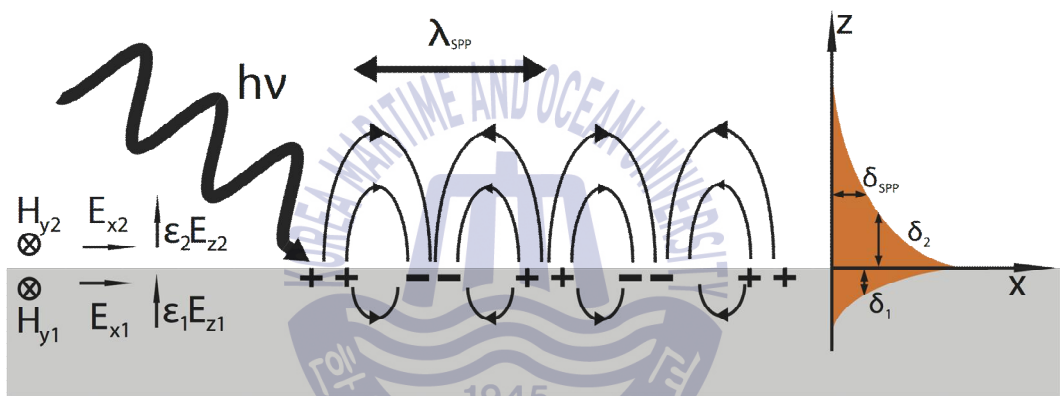


Fig. 2.5 전파형 플라즈몬(Propagating Surface Plasmon)의 모식도

두 번째로는 빛보다 작은 금속 나노 구조 또는 나노 입자와 빛이 결합을 할 때 생성되는 플라즈몬을 국부적 표면 플라즈몬(Localized Surface Plasmon)이라 한다. 국부적 표면 플라즈몬은 나노 구조의 조성, 크기, 기하학적인 구조, 유전율, 입자와 입자의 거리에 크게 의존하는 공진 주파수를 가진다[23]. Fig. 2.6은 국부적 플라즈몬을 모식도로 나타낸 것이다. Fig. 2.7은 금 나노입자의 크기를 다르게 하여 다양한 색상의 용액을 만든 것이다. 나노 입자의 크기와 모양을 다르게 하여 가시광선, 근적외선영역에서 파장을 조절할 수 있으며, 특정 파장에 의해 진동하여 다양한 색상의 용액을 만드는 것이 가능하다 [24]. 생물학적, 화학적 센서와 리소그래피 제작을 포함한 다양한 분야에 응용되고 있다.

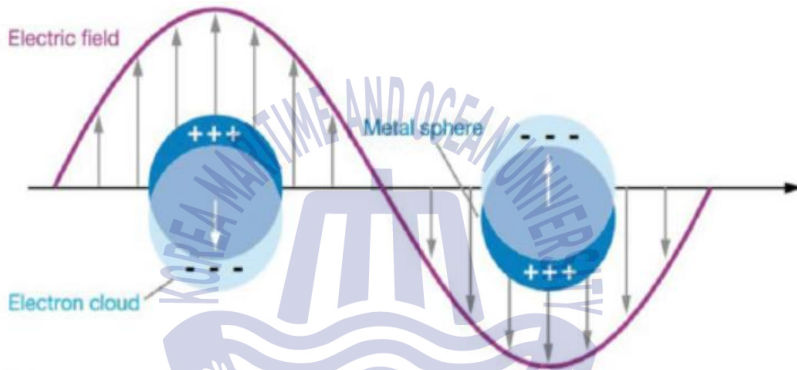


Fig. 2.6 국부적 플라즈몬(Localized Surface Plasmon)의 모식도

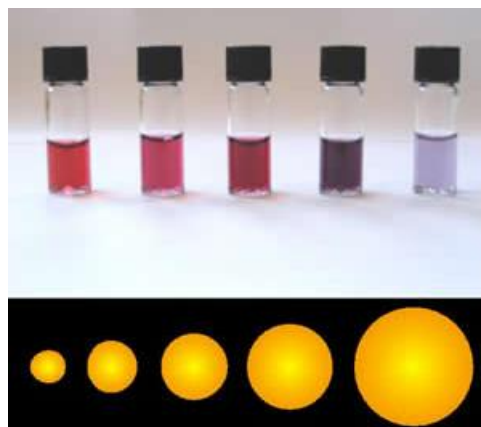


Fig. 2.7 Au 나노 입자크기에 따른 색상의 변화

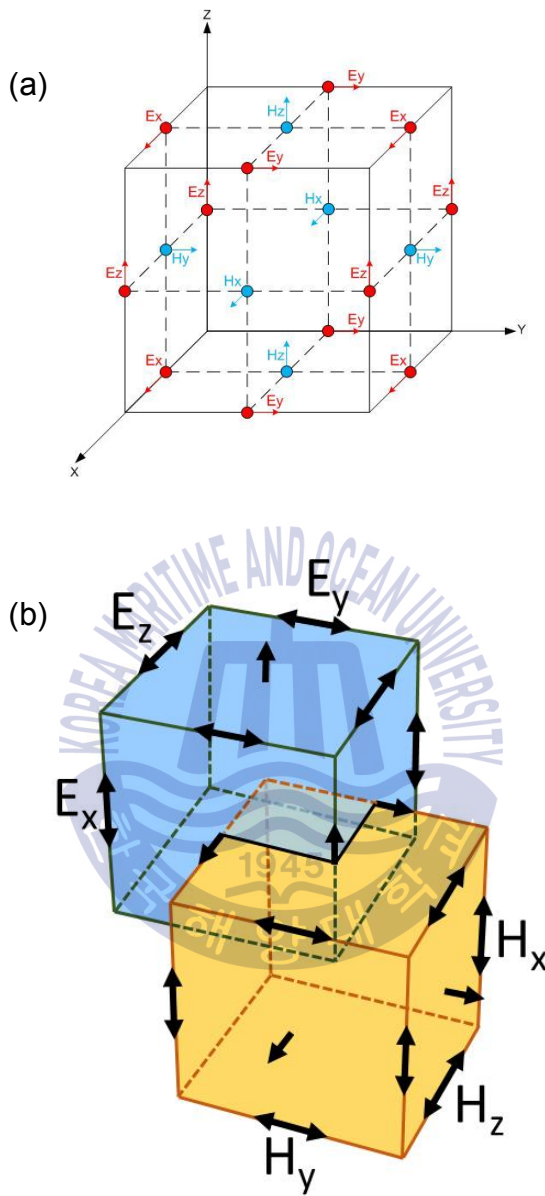
## 제 3 장 FDTD

FDTD는 유한차분 시간영역법으로, 수치계산 방법 중 하나이며 실제 재료의 매개변수가 있는 금속 구조에 대하여 시뮬레이션 할 수 있다. FDTD는 시간영역에서 Maxwell 방정식을 미분영역을 차분으로 바꿔서 계산해주는 프로그램이다. 여기서 차분은 편미분 방정식 수치 해법으로 미분 몫(dx/dt)을 차분 몫( $\Delta x/\Delta t$ )으로 바꿔주어 근사해를 구하는 방법이다. 이것은 1966년 K.Yee에 의해 도입되었다[25]. 또 밴드구조, 결합구조, 도파관 구조, 표면구조 등 복잡한 구조를 쉽게 만들고 연구할 수 있으며, 전자나 광자를 보내주었을 때 전자기장이 변화하는 모습을 시각적으로 볼 수 있고, 다양한 파장에 대한 결과를 얻을 수 있다[26, 27].

본 논문에서는 금속 나노 구멍의 모양과 크기와 금속 박막의 두께를 변화시켜 빛을 보내주었을 때를 FDTD를 통해 연구하였다.

### 3.1 FDTD 알고리즘

FDTD는 3차원에서 전자기장의 전개를 계산하고 분석하는 법을 Yee의 논문을 통해 알려졌다. Fig. 3.1은 전기장, 자기장을 3차원 단위 셀에 공간적으로 표현하였다. 전기장은 자기장에 둘러 쌓여있고, 자기장은 전기장에 둘러 쌓여있다. Fig. 3.1 (a)는 Yee의 논문에서 전기장의 x, y, z값을 각 성분의 모서리의 가운데에 위치해있고, 자기장의 x, y, z값은 각 면의 가운데 위치해 있는 것을 3차원인 단위 셀을 통해 보여주는 것이다. Fig. 3.1 (b)는 전기장 단위 셀과 자기장의 단위 셀이 어떠한 모습으로 위치해 있는지 보여준다. 시뮬레이션을 처음 구동할 때, 계산 영역이 지정이 되면 보내주는 파장의 조건에 맞추어서 샘플이 모델링 된다.



**Fig. 3.1** (a) Yee가 제안한 단위 셀의 형태,  
 (b) FDTD 시뮬레이션을 계산할 때 전기장과 자기장의 위치관계

Yee는 전기장과 자기장을 Maxwell 방정식을 기하학적으로 미분과 적분을 이용하여 분석하였다[28]. 식(1)은 페러데이 방정식이고, 식(2)는 맥스웰이 고친 앙페르 법칙이다.

페러데이 방정식 : 변화하는 자기장은 전기장을 만든다.

$$\nabla \times E = -\mu \frac{\partial H}{\partial t}, \quad B = \mu H \quad (1)$$

맥스웰이 고친 앙페르 법칙 : 변화하는 전기장은 자기장을 만든다.

$$\nabla \times H = J + \epsilon \frac{\partial E}{\partial t}, \quad D = \epsilon E, \quad (2)$$

( E : 전기장, Volt / meter

D : 전속 밀도, coulombs / meter<sup>2</sup>

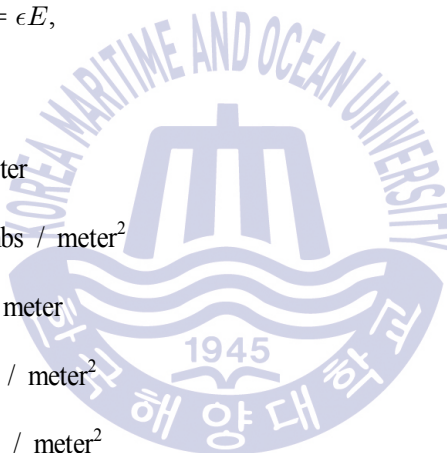
H : 자기장, amperes / meter

B : 자속 밀도, webers / meter<sup>2</sup>

J : 전류 밀도, amperes / meter<sup>2</sup>

$\mu$  : 투자율, farads / meter

$\epsilon$  : 유전율, henrys /meter)



이러한 맥스웰 방정식은 회전(curl)을 이용하여 각각의 x, y, z축을 중심으로 맴돌고 있는 전기장과 자기장을 표현한다(식 3~8).

$$\nabla \times E = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix}$$

$$\nabla \times E = -\mu \frac{\partial H}{\partial t} \text{ 의}$$

$$x \text{ 성분} : \frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \quad (3)$$

$$y \text{ 성분} : \frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \quad (4)$$

$$z \text{ 성분} : \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \quad (5)$$

$$\nabla \times H = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_x & H_y & H_z \end{vmatrix}$$

$$\nabla \times H = J + \epsilon \frac{\partial E}{\partial t} \text{ 의}$$

$$x \text{ 성분} : \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - J_x \right) \quad (6)$$

$$y \text{ 성분} : \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - J_y \right) \quad (7)$$

$$z \text{ 성분} : \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - J_z \right) \quad (8)$$

이러한 식은 3차원 물체와 전자기파 사이의 상호작용을 분석하는 각 축에서의 기본식이다.

Fig 3.1 (a)의 격자점( $i, j, k$ )을 위의 (식3 ~ 8)의 좌표인  $A = (A_x, A_y, A_z)$ 를 차분 방정식으로 바꾸어 준다면

$$(i, j, k) \Rightarrow (i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z) \quad (9)$$

로 표현할 수 있다.

차분방정식을 시간과 공간의 식으로 식(9)를  $F(x, y, z, t)$ 로 확장을 하면

$$F(i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z, n \Delta t) = F^n(i, j, k) \quad (10)$$

로 변화할 수 있다. 여기서  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 는 공간의 증감을 이야기하고  $\Delta t$ 는 시간의 증감을 이야기한다.

$F^n(i, j, k)$  식을 완벽한 경계조건에서 테일러급수전계를 사용할 때 정확한 공간 및 시간의 계산을 위하여 부분미분을 해준다.

x축의 공간 증가에 대한 미분 :

$$\frac{\partial F^n(i, j, k)}{\partial x} = \frac{F^n(i + \frac{1}{2}, j, k) - F^n(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (11)$$

시간의 증가에 대한 미분 :

$$\frac{\partial F^n(i, j, k)}{\partial t} = \frac{F^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - F^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k)}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (12)$$

전기장과 자기장의 단위 셀에 대입하기 전에 전기장과 자기장에서  $x, y, z, n$ 의 공간좌표를 나타내는 방법을 살펴보면 다음과 같다[30--29].



**Table 1.** 전기장과 자기장의 공간 좌표

	전기장 $E_\alpha$ , ( $\alpha=x$ or $y$ or $z$ or $t$ )	자기장 $H_\alpha$ , ( $\alpha=x$ or $y$ or $z$ or $t$ )
중심 공간 좌표( $\alpha$ )	반정수 (+1/2)	정수
나머지 공간 좌표	정수	반정수 (+1/2)
시간 좌표	정수	반정수 (+1/2)

위의 표를 바탕으로 식 (3)을 예로 들어 방정식의 좌편이  $H_x$ 이기 때문에  $x$ 는 중심 공간 좌표이기 때문에 정수이고 나머지 공간 좌표는 반정수이다. 방정식의 우변의 시차중심은  $E_y$ 와  $E_z$ 의 시간은 정수이다.

식 (3)의 좌표

$$x = i\Delta x, y = (j + \frac{1}{2})\Delta y, z = (k + \frac{1}{2})\Delta z, t = n\Delta t$$

식 (4)의 좌표

$$x = (i + \frac{1}{2})\Delta x, y = j\Delta y, z = (k + \frac{1}{2})\Delta z, t = n\Delta t$$

식 (5)의 좌표

$$x = (i + \frac{1}{2})\Delta x, y = (j + \frac{1}{2})\Delta y, z = k\Delta z, t = n\Delta t$$

로 표현할 수 있다.

식 (6)은 방정식의 좌변이  $E_x$ 이기 때문에  $x$ 는 중심 공간 좌표이기 때문에 반정수이고 나머지 공간좌표는 정수이다. 방정식의 우변의 시차중심은  $H_y$ 와  $H_z$ 의 시간은 반정수이다.

식 (6)의 좌표

$$x = (i + \frac{1}{2})\Delta x, y = j\Delta y, z = k\Delta z, t = (n + \frac{1}{2})\Delta t$$

식 (7)의 좌표

$$x = i\Delta x, y = (j + \frac{1}{2})\Delta y, z = k\Delta z, t = (n + \frac{1}{2})\Delta t$$

식 (8)의 좌표

$$x = i\Delta x, y = j\Delta y, z = (k + \frac{1}{2})\Delta z, t = (n + \frac{1}{2})\Delta t$$

로 표현할 수 있다.

전기장과 자기장을 완벽한 경계조건에서 공간과 시간으로 미분을 할 때, 좌변에 자기장이 있는 식 (3)을 예로 들면 좌변은  $x$ 와  $t$ 는 정수이고,  $y$ 와  $z$ 는 반정수이고 시간에 따라 미분하는 것이기 때문에  $\pm 1/2$ 를 해주어

$$\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})}{\Delta t}$$

로 표시하고 우변은  $y$ 축과  $z$ 축으로 미분하기 때문에  $y$ 와  $z$ 에는  $\pm 1$ 를 해주어

$$-\frac{1}{\mu} \left( \frac{E_y^n(i, j + \frac{1}{2}, k + 1) - E_y^n(i, j + \frac{1}{2}, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j + 1, k + \frac{1}{2}) - E_z^n(i, j, k + \frac{1}{2})}{\Delta y} \right)$$

로 표현할 수 있다.

이러한 계산을 나머지 식 (3) ~ (5)까지 식 (13) ~ (15)로 나타낸다.

식 (3) =

$$\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2})}{\Delta t} = \quad (13)$$

$$-\frac{1}{\mu} \left( \frac{E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k+1) - E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta z} - \frac{E_z^n(i, j+1, k+\frac{1}{2}) - E_z^n(i, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta y} \right)$$

식 (4) =

$$\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta t} = \quad (14)$$

$$-\frac{1}{\mu} \left( \frac{E_z^n(i+1, j, k+\frac{1}{2}) - E_z^n(i, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k+1) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta z} \right)$$

식 (5) =

$$\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_x^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta t} = \quad (15)$$

$$-\frac{1}{\mu} \left( \frac{E_y^n(i+1, j+\frac{1}{2}, k) - E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i+\frac{1}{2}, j+1, k) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta y} \right)$$

전기장이 좌변에 있는 식 (6)을 예로 들면 y와 z는 정수이고, x는 반정수로  $\pm 1/2$ 를 해주어야 하고, t는 원래 반정수로 1/2에  $\pm 1/2$ 을 해주어 +1, 0로 바뀌면서

$$\frac{E_x^{n+1}(i+\frac{1}{2}, j, k) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta t}$$

로 표시하고, 우변은 y축과 z축으로 미분하기 때문에 y와 z에는  $\pm 1$ 를 해주어

$$-\frac{1}{\epsilon} \left( \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y} + J_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k) \right)$$

로 표현할 수 있다.

이러한 계산을 나머지 식 (6) ~ (8)까지 식 (16) ~ (18)로 나타낸다.

식 (6) =

$$\frac{E_x^{n+1}(i+\frac{1}{2}, j, k) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta t} = -\frac{1}{\epsilon} \left( \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y} + J_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k) \right) \quad (16)$$

식 (7) =

$$\frac{E_x^{n+1}(i+\frac{1}{2}, j, k) - E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta t} = -\frac{1}{\epsilon} \left( \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta x} + J_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k) \right) \quad (17)$$

식 (8) =

$$\begin{aligned}
 & \frac{E_x^{n+1}(i + \frac{1}{2}, j, k) - E_x^n(i + \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta t} = \\
 & -\frac{1}{\epsilon} \left( \frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2})}{\Delta x} - \right. \\
 & \left. \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})}{\Delta y} + J_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k + \frac{1}{2}) \right)
 \end{aligned} \tag{18}$$

이 결과는 전기장(E)과 자기장(H)의 새로운 FDTD 시뮬레이션 값을 계산할 때 인접한 지점의 벡터 성분의 값과 이전의 전기장, 자기장의 값에 의존한다는 것을 알 수 있다.

### 3.1.1 경계조건

FDTD 시뮬레이션을 하기 위해서 계산 영역의 경계조건을 정해야 한다. 시뮬레이션을 하기 위하여 격자의 간격을 줄여 전기장과 자기장의 셀의 개수를 늘리게 되다 보면 컴퓨터의 메모리가 모자라기 때문에 시뮬레이션을 수행하는 것이 불가능하게 된다. 그래서 적당한 크기에 분석이 가능한 공간을 만들어 주어야 한다. 이때 경계조건에 흡수 조건을 추가하여 경계에서 충돌과 반사가 없고 흡수를 잘할 수 있도록 하여야 한다.

### 3.1.2 격자와 안전성

FDTD를 시뮬레이션 하기 위해서는 격자의 크기를 정해야 한다. 격자를 작게 할 수록 더 정확한 데이터가 나오지만. 너무 격자를 작게하면 시간이 기하급수적으로 늘어나게 된다. 이때 경계조건을 확인하여 시뮬레이션에 영향을 주지 않도록 하여야 한다.

식 (19)에서는 이러한 격자는 전기장의 영향을 받아서 크기가 변화하지 않아야 한다. 이때 공간의 증가분인  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 는 동일하게 해준다. 안전성을 만족시키기 위해서는 공간 증가량과 시간 증가량인  $\Delta t$ 사이의 관계를 확인하여야 하는데,  $\epsilon, \mu$ 가 변수일 때 안전성을 얻기가 어렵다[25].

$$\sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2} > c \Delta t = \sqrt{\frac{1}{\epsilon \mu}} \Delta t \quad (19)$$

(c : 빛의 속도)

식 (20)에서 시뮬레이션 하는 영역의 빛의 속도가  $c_{\max}$ 로 최대 광속이라면,  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 를 알맞게 선택하여  $\Delta t$ 를 제한할 수 있다.

$$\sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2} > c_{\max} \Delta t \quad (20)$$

### 3.2 FDTD 설치 시스템

FDTD를 실행하기 위해서는 FDTD 프로그램과 FDTD를 구동하기 위한 work station이 있어야 한다. work station에는 한 번에 많은 양의 정보를 처리하기 위해서 램(RAM)을 8개를 설치하였고, 저장 공간인 하드디스크를 TB(terabyte) 단위로 설치하였다. 이러한 work station으로 시뮬레이션을 하다가 보면 열이 많이 발생하게 되는데 이로 인한 과부하를 줄이기 위해 물을 통해 냉각하는 수냉 쿨러를 설치하였다.

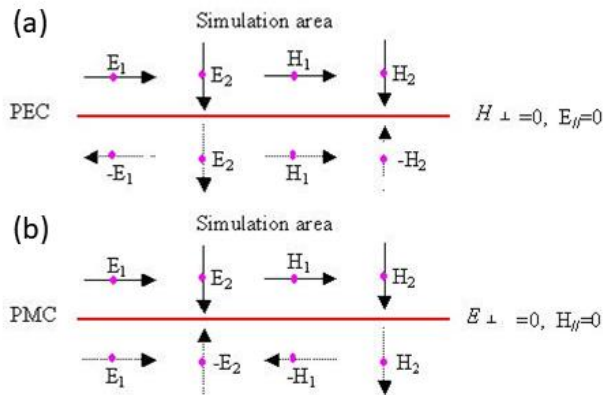
## 제 4 장 FDTD 시뮬레이션 데이터

### 4.1 FDTD 시뮬레이션

나노 구조체와 빛의 상관관계를 알아보기 위하여 FDTD 시뮬레이션을 이용해서 전기장과 자기장의 분포도를 얻은 이후 데이터를 해석한다. 이러한 데이터를 얻기 위한 시뮬레이션 과정을 순서대로 나열해 보았다[30].

첫 번째로는 나노 구조체를 만들어서 FDTD 프로그램 내부에 추가하게 된다. FDTD 프로그램 내부에서도 만드는 것이 가능하나 복잡한 구조를 만들기 위해서는 3D-CAD를 이용하기도 한다. 구조체를 프로그램 내부에 추가한 후에 물질과 그 물질의 굴절률을 측정하여 데이터를 추가하거나 프로그램 안에 있는 상용적인 데이터를 선택할 수 있다.

두 번째로는 만들어 놓은 구조체보다 크게 FDTD 영역을 지정한다. FDTD 영역과 구조체 사이의 공간은 보내주는 가장 긴 파장의 1/4이상의 공간을 가지고 있어야 신뢰할 수 있는 시뮬레이션이 가능하다. 이때 FDTD 영역과 밖의 영역 사이의 경계조건이 필요하다. 많이 사용되는 경계조건으로는 아래 3가지가 있다. ① PML(perfectly matched layer)은 경계조건에서 전자기파를 100% 투과하는 것으로 설정한다. ② 금속 경계조건(PEC, perfect electric conductor)은 경계조건에서 수평인 전기장만 남기고 나머지는 다 없애준다. PEC 경계에서는 수평한 전기장 성분이 0이 되고, 수직인 자기장의 성분이 0이 된다. Fig 4.1의 (a)는 금속 경계조건 PEC의 두께가 0이라고 가정할 때, 전기장과 자기장의 각 성분을 나타낸 것이다. 수평한 전기장과 수직인 자기장은 경계부분에서 0이 되고, 수직인 자기장은 시뮬레이션 영역 안으로 튕겨서 들어오게 되며, 수평한 자기장은 방해없이 진행하게 된다. ③ PMC(perfect magnetic conductor)는 금속 경계조건(PEC)과 반대로 수평인 자기장 성분이 0이고 수직인 전기장 영역이 0이다. Fig. 4.1 (b)는 수직인 전기장과 수평인 자기장은 경계부분에서 0이 되고, 수직인 자기장은 시뮬레이션 영역 안으로 들어오게 되며, 수평인 전기장 영역은 방해 없이 진행하게 된다.



**Fig. 4.1** (a) PEC 영역에서의 전기장과 자기장, (b) PMC 영역에서의 전기장과 자기장

따라서 본 실험에서 채택한 샘플의 구조를 분석하기에는 PML 방법이 가장 적합하여 이 방법으로 시뮬레이션을 실시하였다.

세 번째로는 mesh 사이즈가 적용되는 범위를 지정하여야 한다. 이는 앞의 FDTD 알고리즘에서 이야기하였던 단위 셀과 연관된다. x, y, z의 mesh 사이즈를 정하게 되면 단위 셀의 한 변의 길이가 정해지게 된다. 이때 mesh 사이즈를 너무 작게 하면 단위 셀의 개수가 너무 많아져 work station의 램을 많이 사용하게 되어 시간이 오래 걸리기 때문에, 나노 구조체 크기와 mesh 사이즈를 적절하게 맞추어야 한다. mesh 사이즈를 정한 후에는 mesh가 적용되는 범위를 정해야 한다. 본 시뮬레이션에서는 mesh 영역을 모니터 영역과 동일하게 두었으면 mesh 사이즈는  $0.2 \times 0.2 \text{ nm}$ 로 두었다. Fig. 4.3 (b)에 mesh 사이즈를 표시하였다.

네 번째로는 나노 구조체에 보내줄 광원을 지정한다. 광원의 파장은 가시광선, 자외선, 적외선, 테라헤르츠 등 다양한 파장을 보내줄 수 있다. 광원의 종류도 여러 가지가 있다. 시뮬레이션에서 택할 수 있는 광원 중 첫째, 점광원은 쌍극자를 소스로 하여 생성된 전자기장을 이용하는 것이며 둘째, 가우시안 광원은 광대역의 주파수 성분을 포함하며 특정 방향으로 전파하는 조건을 가지며 셋째, 평면파 소스는 한쪽 면에서 반대쪽 면까지 균일한 전자기장을 주는 것이다. 2차원일 때는 선으로 3차원일



때는 면으로 소스를 보내준다. 이러한 소스 중 원하는 소스를 하나 선택하여 구조체에 보내주고 싶은 방향에 맞는 곳에 설치를 해준다. 본 실험에서는 평면파 소스를 선택하여 실험하였다.

다섯 번째로는 재료 탐색기(material explorer)을 이용하여 시뮬레이션에 사용될 재료와 실험에서의 재료가 일치하는지 확인해 준다. 이 과정에서는 모든 재료의 특성을 확인할 수 있다. 만약 이 과정에서 재료를 탐색하기 위한 충분한 파장을 주지 않은 상태일 때, 원하는 파장의 범위를 재설정하여 재료의 데이터를 충분히 얻을 수 있다. 본 실험에서의 대상금속인 금의 굴절률은 Fig. 4.2의 그래프에 따라 정해진다[31].

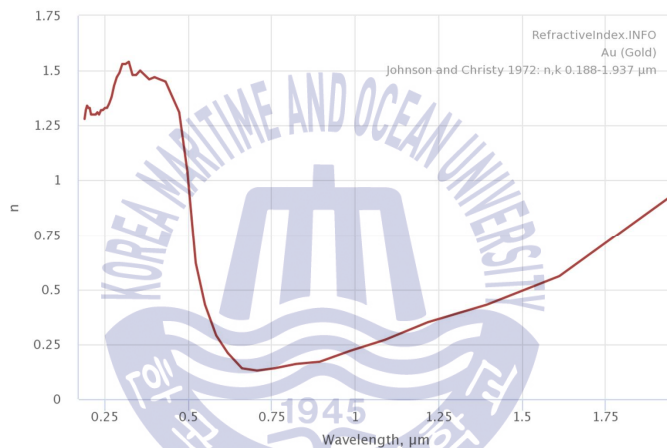


Fig. 4.2 파장에 따른 금의 굴절률

여섯 번째로는 FDTD 시뮬레이션 결과를 확인할 수 있는 모니터의 위치와 종류를 정해준다. 모니터의 위치는 mesh 사이즈보다 작거나 비슷하게 만든다. 왜냐하면 mesh로 분석을 자세하게 해준 부분을 모니터로 봐야 선명하게 보이기 때문이다. 본 실험에서는 동일하게 설정하였다. 모니터의 종류에는 시간-영역 모니터, 영화 모니터, 주파수-영역 필드 모니터 등이 있는데, 본 실험에서 주파수-영역 필드 모니터를 선택하여 데이터를 분석하였다. Fig. 4.3 (a)는 모니터 위치를 보여주고 있다.

이러한 여섯 가지의 상황을 끝내면 work station을 이용하여 FDTD 시뮬레이션을 구동할 수 있는지 확인하여야 한다. 메모리 요구 사항 확인(check memory

requirements)을 실행하여 시뮬레이션을 구동하기 위한 메모리 용량을 예측하고, 실제의 메모리 용량보다 크지 않은지 확인한다. 용량이 더 크다면 FDTD 시뮬레이션 범위나 mesh 셀의 크기나 모니터 크기 등을 변화시켜 용량을 낮추도록 하여야 한다. 마지막 과정을 한 이후에 FDTD 시뮬레이션을 구동(run)할 수 있다.

Fig. 4.3은 FDTD 시뮬레이션의 영역과 mesh의 크기와 역사다리꼴 모양의 Au 박막을 보여준다. mesh는 0.2nm이고, 빛 소스는 400 ~ 700nm를 보내주었다. 모니터는 주파수-영역 필드 프로파일 모니터와 주파수-영역 필드 및 전력 모니터를 사용하여 전계강도를 보았다.

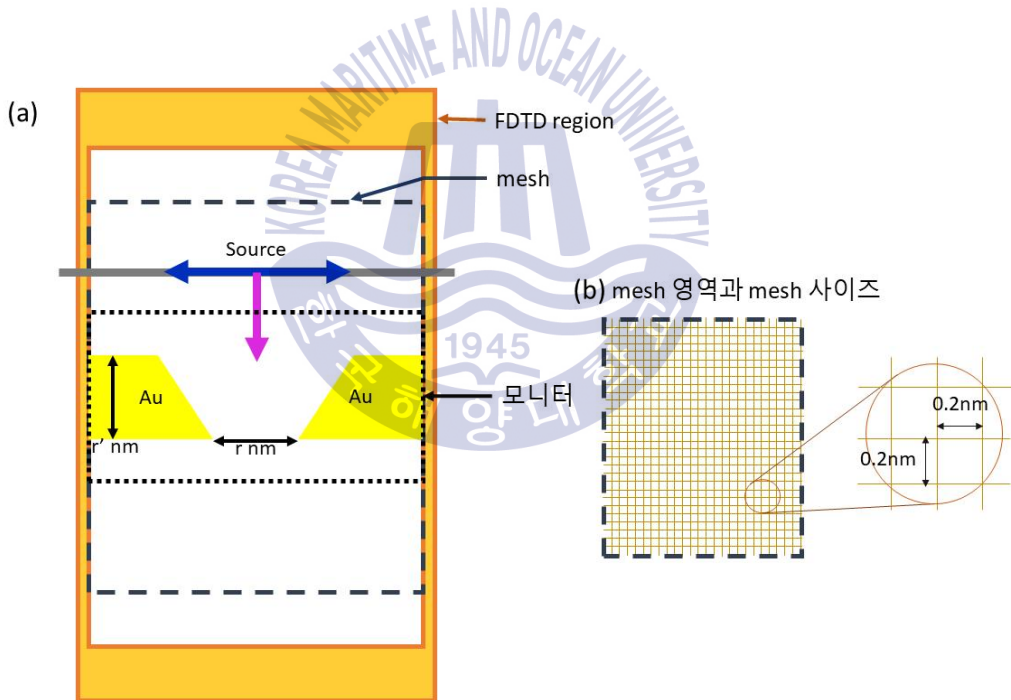


Fig. 4.3 (a) FDTD 시뮬레이션 설정 조건의 x-z축에 대한 모식도, (b) mesh 영역과 mesh 사이즈

## 4.2 3D-CAD 모델링

FDTD 시뮬레이션에 프로그램을 구동하려면 표면 플라즈몬을 만들기 위한 구조체가 필요하다. 구조체는 단일 구멍으로 형태는 위와 아래의 구멍의 크기가 같은 원통형 구멍과 위쪽 구멍의 한 변의 길이와 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 다른 역사다리 형태의 구멍이다. 이러한 구조를 만든 이유는 구멍 안에서 빛이 모이기 위하여 역사다리꼴 모양 구조를 만들었다. 위의 구멍과 아래의 구멍의 각도는 45도이다. Fig. 4.4의 (a)는 3D-CAD로 제작한 금속 나노 구멍의 지름의 크기가 10, 50, 100nm인 원통형 구조체이고, (b)는 3D-CAD로 제작한 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 10, 50, 100nm인 나노 역사다리의 금속 구조체이다.

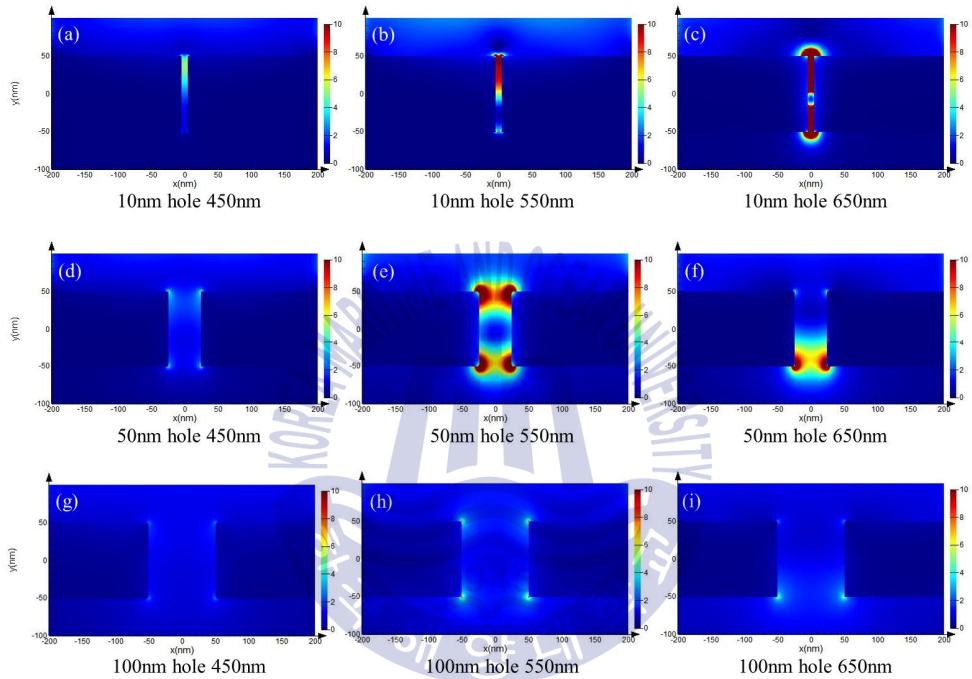


**Fig. 4.4** (a) 3D-CAD로 제작한 금속 나노 구멍의 지름의 크기가 10, 50, 100nm인 구조체, (b) 3D-CAD로 제작한 금속 나노 역사다리 구멍의 밑면의 아래쪽 구멍의 한 변의 길이 10, 50, 100nm인 구조체

### 4.3 구멍 모양에 따른 FDTD 시뮬레이션 데이터

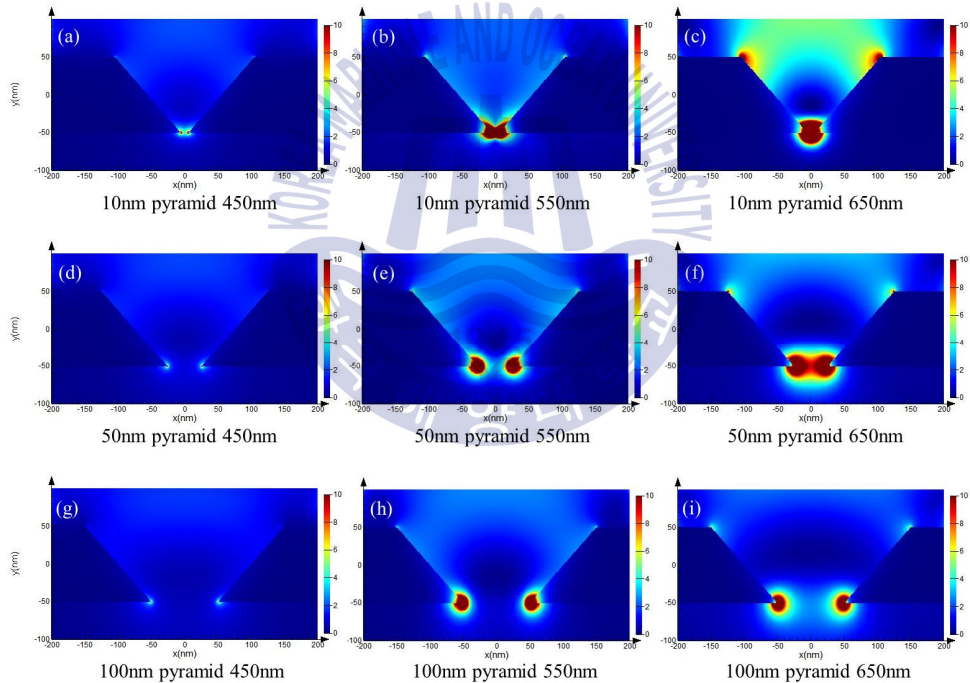
우리는 FDTD 시뮬레이션을 하기 위하여 2가지의 구멍모양과 3가지의 구멍의 크기를 가진 구조체를 제작하였다. 구멍의 모양은 원통형과 역사다리꼴 모양 2가지를 사용하였다. 구멍의 크기는 10, 50, 100nm로 3가지로 하였으며, 길이(R)는 원은 지름의 크기이기도 하고 역사다리 구멍의 아래쪽 구멍의 한 변의 길이로 정하였다. 그리고 금속은 표면 안전성이 우수한 금으로 선택하였다.

Figure 4.5는 두께가 100nm인 금 박막에 지름이 10, 50, 100nm의 금속 나노 구멍에 450, 550, 650nm 파장을 기관의 윗면에서 보내주었다. 주파수-영역 필드 및 전력 모니터로 전계강도  $|E|^2$ 을 계산하였고, 이때 전계강도를 나타내는 스케일바의 최고값은 10으로 설정하였다. 전계강도를  $|E|^2$ 로 환산한 이유는 두 가지가 있다. 첫 번째로는  $E = F/q$  는 방향이 있는 벡터이기 때문에 절댓값으로 방향을 없애고 한 방향으로 맞춰주는 것이다. 두 번째로는 전자기파의 에너지의 평균 비율, 또는 단위 넓이당 평균 일률을 파동의 세기(I)로 하고  $I = E^2/2\mu_0$ 로 나타낼 수 있으므로,  $|E|^2$ 은 전자기파의 에너지를 나타낸 것이다. Fig. 4.5에서 붉은색 쪽으로 파장이 이동할수록  $|E|^2$ 이 더 강하게 나타는 것을 볼 수 있다. 금속 나노 구멍의 중심보다는 구멍의 양쪽 끝부분에 더욱 강한  $|E|^2$ 가 나타났다.



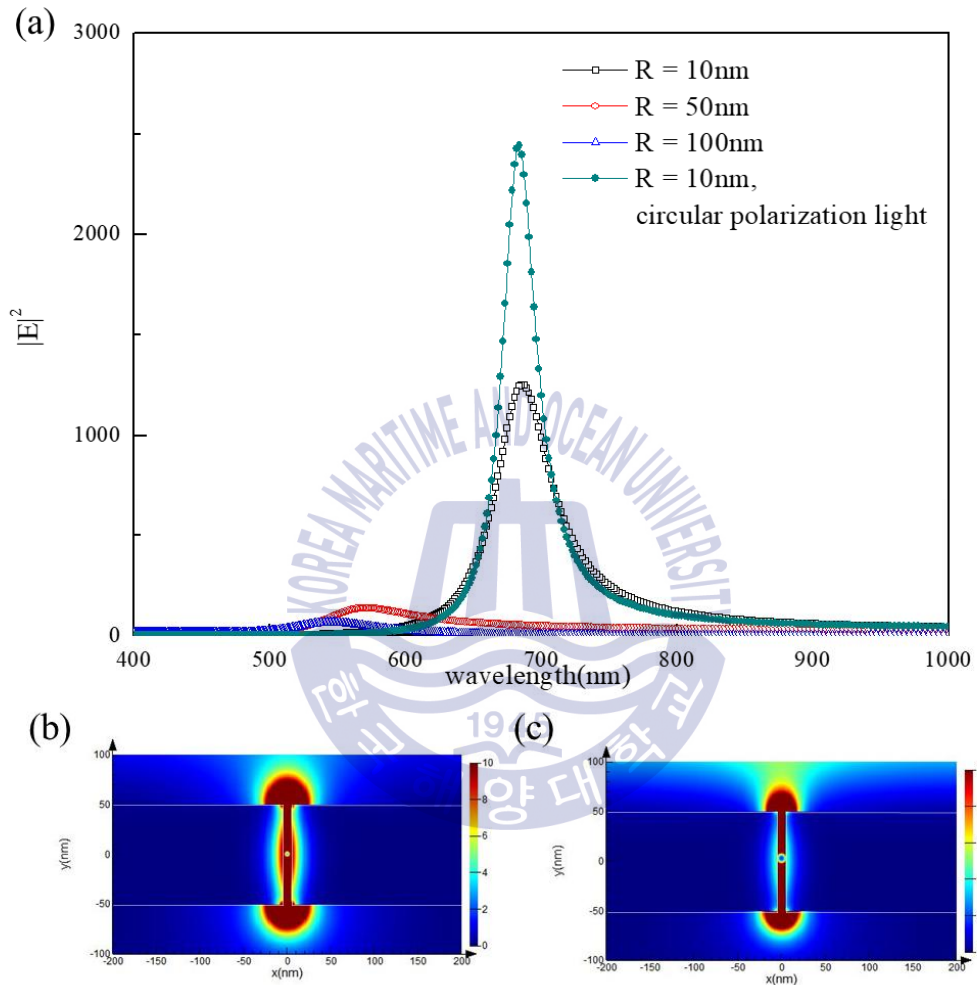
**Fig. 4.5** 지름이 다양한 금속 나노 구멍에 파장을 보내준 시뮬레이션 데이터. (a) 10nm 구멍에 450nm, (b) 10nm 구멍에 550nm, (c) 10nm 구멍에 650nm, (d) 50nm 구멍에 450nm, (e) 50nm 구멍에 550nm (f) 50nm 구멍에 650nm, (g) 100nm 구멍에 450nm, (h) 100nm 구멍에 550nm (i) 100nm 구멍에 650nm 파장을 보내주었을 때의  $|E|^2$ 의 강도

Fig. 4.6은 두께가 100nm인 금 박막에 구멍의 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 10, 50, 100nm인 금속 나노 역사다리에 450, 550, 650nm 파장을 기판의 윗면에서 보내주었다. Fig. 4.6은 주파수-영역 필드 및 전력 모니터로  $|E|^2$ 을 계산한 것이며, 이때 전계강도를 나타내는 스케일바의 최고값은 10으로 설정하였다. 금속 나노 구멍모양과 동일하게 붉은색 쪽으로 파장이 이동할수록  $|E|^2$ 이 더 강하게 나타난다. 금속 나노 역사다리에서  $|E|^2$ 가 가장 강하게 나타나는 부분은 역사다리꼴 모양 구멍과 밑면이 만나는 부분이다. 하지만 구멍 부분만이 아니라 윗면에서도  $|E|^2$ 가 강하게 나타나는 것을 Fig. 4.6 (c)에서 볼 수 있다.



**Fig. 4.6** 아래쪽 구멍의 한 변의 길이 다양한 금속 나노 역사다리에 파장을 보내준 시뮬레이션 데이터. (a) 10nm 구멍에 450nm, (b) 10nm 구멍에 550nm, (c) 10nm 구멍에 650nm, (d) 50nm 구멍에 450nm, (e) 50nm 구멍에 550nm (f) 50nm 구멍에 650nm, (g) 100nm 구멍에 450nm, (h) 100nm 구멍에 550nm (i) 100nm 구멍에 650nm 파장을 보내주었을 때의  $|E|^2$ 의 강도

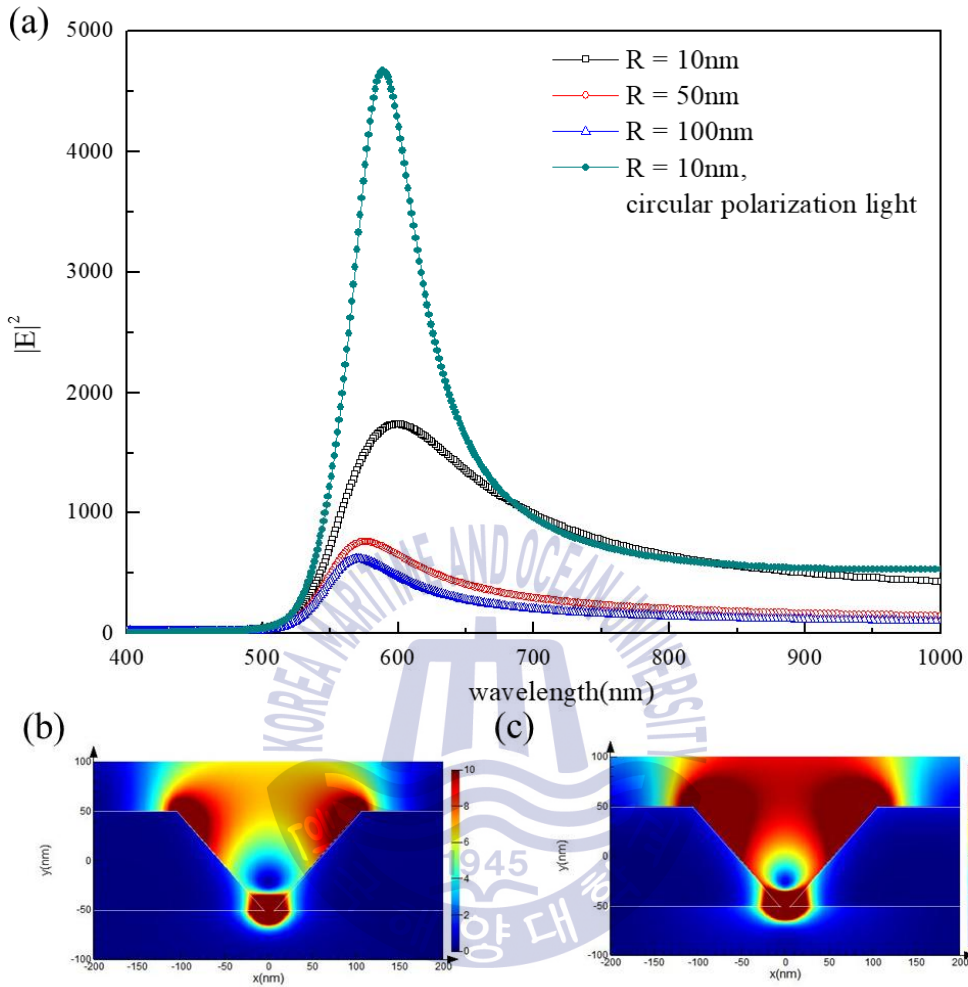
Figure 4.7 (a)에는 두께가 100nm 금속 나노 박막에 10, 50, 100nm 원통형 구멍에 400 ~ 1000nm의 여러 가지 파장을 보내어 주었을 때와 10nm 원통형 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때의 전계강도인  $|E|^2$ 의 그래프이다. 그래프를 통해 볼 수 있듯이 구멍의 크기와 파장의 길이에 따라  $|E|^2$ 이 달라진다는 것을 알 수 있다. 10nm 금속 나노 구멍 같은 경우에는 680nm 부근에서 가장 강한  $|E|^2$ 이, 50nm 금속 나노 구멍에서는 570nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이, 100nm 금속 나노 구멍에서는 545nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이 나타나는 것을 알 수 있다. 이는 구멍이 작아질수록  $|E|^2$ 는 증가하지만, 각 파장에 따르면 구멍이 작아도  $|E|^2$ 가 가장 강하지 않을 수 있다. 예를 들어 570nm에서  $|E|^2$ 를 보았을 때는 구멍이 큰 50nm의 금속 나노 구멍에서 10nm 금속 나노 구멍보다 더 높은  $|E|^2$ 가 나타났다. 이로 보았을 때 각 구멍의 크기별로 특정한 파장을 보내주었을 때,  $|E|^2$ 가 가장 강하게 나타나는 것을 알 수 있다. Fig. 4.7 (b)는 구멍의 크기가 10nm인 원통형 구멍에 선편광된 680nm의 빛을 보내주었을 때, (c)는 원편광된 680nm의 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터이다. 그리고  $|E|^2$ 이 가장 높게 나온 구멍크기인 10nm 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때, 선편광된 빛을 보내주었을 때보다  $|E|^2$ 가 더 강하게 나타남을 알 수 있다. 이는 선편광된 빛을 보내어줄 때는 소스를 1개로 보내주지만 원편광된 빛을 보내줄 때는 소스 2개를 수직으로 겹쳐 보내주기 때문일 것이다.



**Fig. 4.7** (a) 100nm 금속 박막에 10, 50, 100nm 원통형 구멍에 파장을 보내주었을 때와 10nm 원통형 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때의  $|E|^2$ 의 그래프, (b) 원통형 구멍의 크기가 10nm인 구멍에 선편광된 빛을 보내주었을 때, (c) 원편광된 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터



Figure 4.8에서는 두께가 100nm 금속 박막 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 10, 50, 100nm 인 역사다리 구조에 여러 가지의 파장을 보내주었을 때와 한 변의 길이가 10nm인 구조에 원편광된 빛을 보내주었을 때의 전계강도  $|E|^2$ 을 나타내고 있다. Fig. 4.7과 비교하였을 때 역사다리꼴 모양 구멍이 원통형 구멍보다 높은  $|E|^2$ 를 보였고, 구멍의 크기가 작아질수록 더욱 높은  $|E|^2$ 를 보였다. 10nm 금속 나노 구멍 같은 경우에는 600nm 부근에서 가장 강한  $|E|^2$ 이, 50nm 금속 나노 구멍에서는 575nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이, 100nm 금속 나노 구멍에서는 570nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이 나타나는 것을 알 수 있다. Fig. 4.7과 Fig. 4.8에 따르면  $|E|^2$ 이 가장 강하게 나타나는 형태는 금속 나노 역사다리 10nm 구멍이었고, 파장은 600nm 부근이었다. Fig. 4.7과 마찬가지로 Fig. 4.8도 각 구멍의 크기별로 특정한 파장을 보내주었을 때,  $|E|^2$ 가 가장 강하게 나타나는 것을 알 수 있다. Fig. 4.8 (b)는 구멍의 크기가 10nm인 원통형 구멍에 선편광된 680nm의 빛을 보내주었을 때, (c)는 원편광된 680nm의 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터이다. 이때  $|E|^2$ 이 가장 크게 나온 구멍인 10nm 역사다리꼴 모양 구멍에 원편광된 파장을 보내주었을 때  $|E|^2$ 이 선편광된 빛의  $|E|^2$ 보다 큰 것을 알 수 있다. 10nm 크기의 역사다리꼴 모양 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때 600nm 파장 근처에서 표면 플라즈몬이 가장 잘 일어날 수 있다는 것을 관찰하였다.



**Fig. 4.8** (a) 두께가 100nm 금속 박막 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 10, 50, 100nm 역사다리꼴 모양 구멍에 파장을 보내주었을 때와 10nm 역사다리꼴 모양 구멍에 원편광된 빛을 보내주었을 때의  $|E|^2$ 의 그래프, (b) 역사다리꼴 모양 구멍이 10nm인 구멍에 선편광된 빛을 보내주었을 때, (c) 원편광된 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터

Fig. 4.7과 Fig. 4.8에서 FDTD 시뮬레이션을 통해 원통형 구멍보다는 역사다리꼴 모양 구멍에서 전계강도인  $|E|^2$ 가 더 강하게 나왔음을 확인할 수 있었다. 따라서 금속 나노 역사다리의 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 10nm 보다 더욱 작아졌을 때의 FDTD 시뮬레이션의 값이 어떻게 달라지는지 확인하고자 역사다리의 구멍의 크기를 0.5, 1, 5nm로 하여 살펴보았다. Figure 4.9에서는 그 결과를 보여주고 있다. 그래프를 보면 역사다리 구멍의 아래쪽 구멍의 한 변의 길이가 짧아질수록 최대  $|E|^2$ 가 더욱 강해지는 것을 볼 수 있다. 0.5nm 금속 나노 역사다리에서 700nm 부근에서의 빛에서  $|E|^2$ 가 가장 높게 나왔다. 이는 역사다리 구멍에 따라 최대  $|E|^2$ 를 만드는 파장이 서로 다를 수 있다.

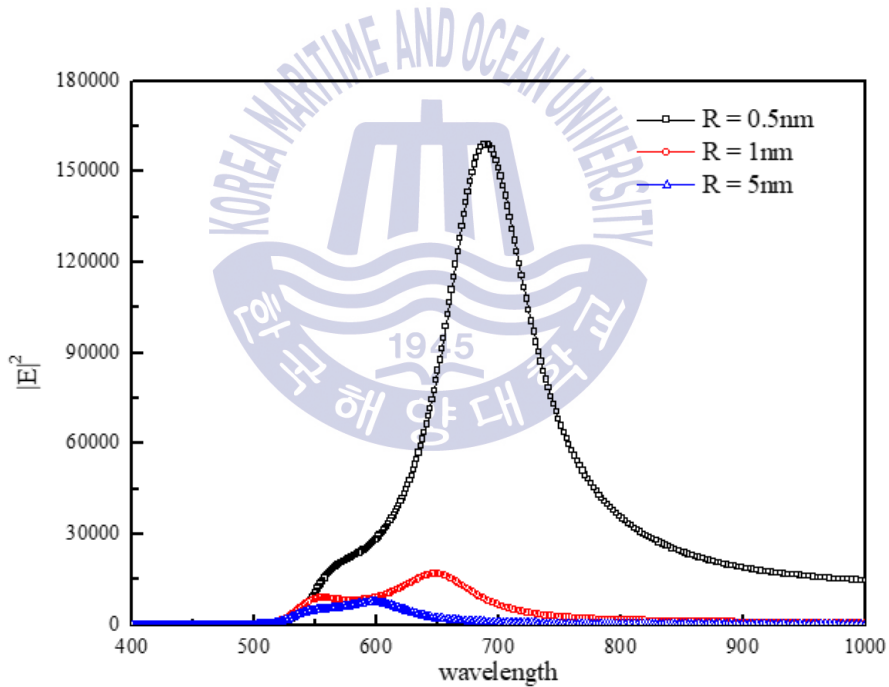
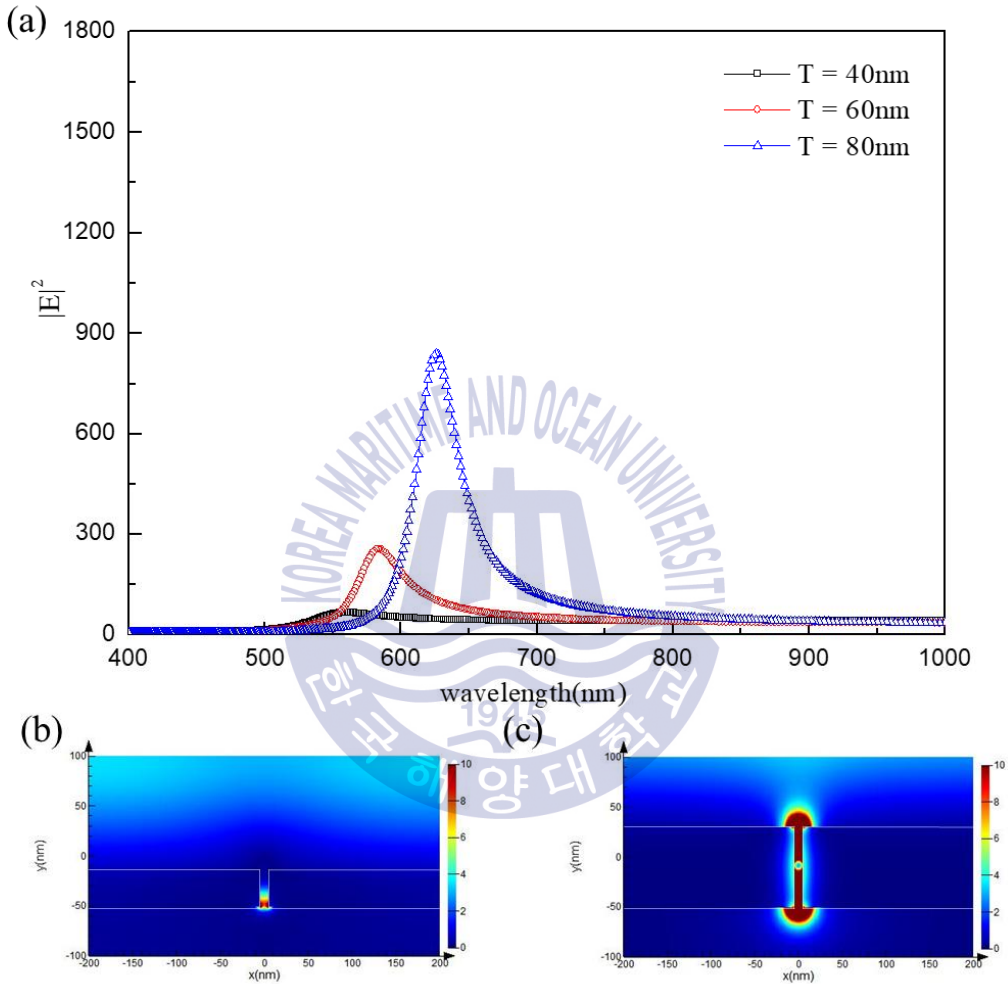


Fig. 4.9 금속 나노 역사다리의 구멍의 아래쪽 한 변의 길이를 다르게 하였을 때의  $|E|^2$ 의 강도

#### 4.4 금속의 두께에 따른 FDTD 시뮬레이션 데이터

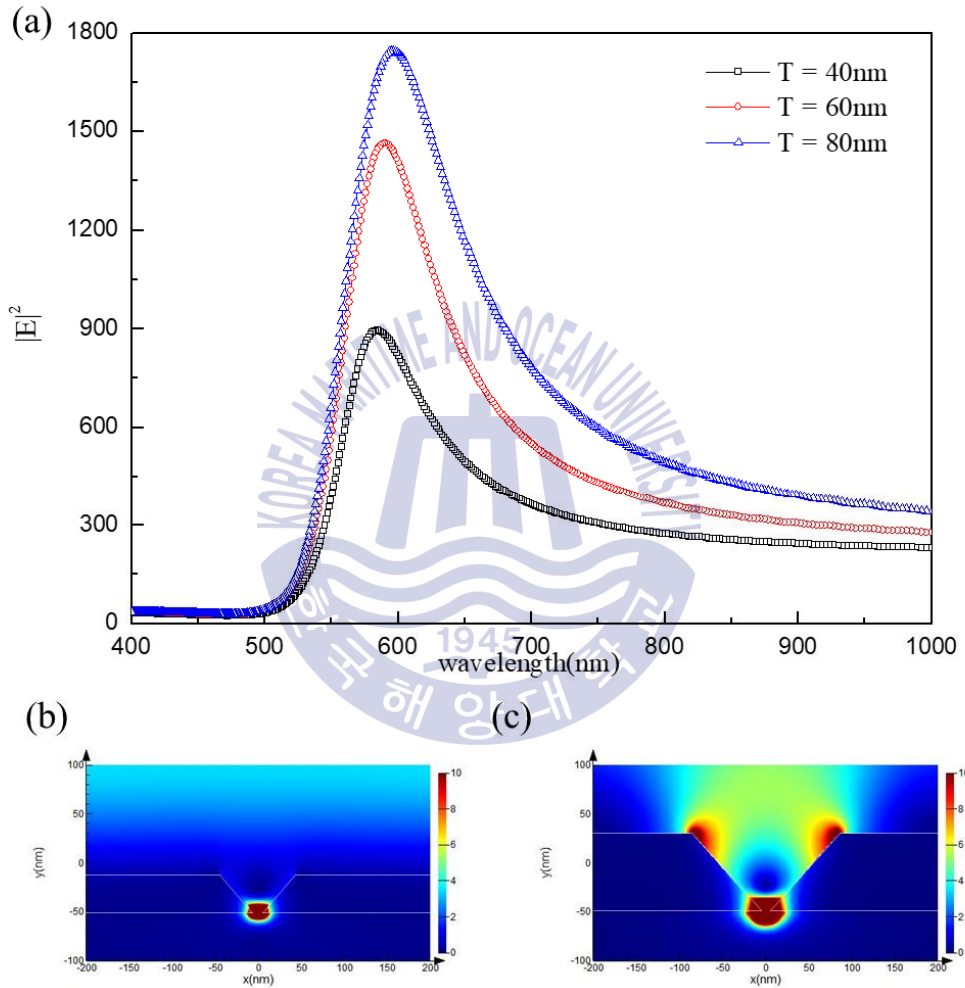
우리는 FDTD 시뮬레이션을 하기 위하여 2가지의 구멍모양과 3가지의 금속의 두께인 구조체를 제작하였다. 구멍의 모양은 원통형과 역사다리꼴 모양 2가지를 사용하였다. 금속의 두께는 40, 60, 80nm로 3가지로 하였으며, 길이(T)는 금속의 두께를 나타낸 것이다. 이때 금속은 표면 안전성이 우수한 금으로 하였다.

Fig. 4.10의 (a)는 원통형 구멍의 크기를 10nm로 고정해놓은 상태에서 금속 박막의 두께를 40, 60, 80nm로 변화시켜 파장을 400 ~ 1000nm를 주었을 때의  $|E|^2$ 의 그래프이고, (b)는 원통형 구멍에 크기가 10nm이고, 두께가 40nm인 박막에서 가장 강하게 나타난 561nm 파장에서의  $|E|^2$ 의 시뮬레이션 결과를 보여주고, (c)는 원통형 구멍에 크기가 10nm이고, 두께가 80nm인 박막에서 가장 강하게 나타난 680nm 파장에서의  $|E|^2$ 의 시뮬레이션 결과를 보여준다. Fig. 4.10의 (a)를 보게 되면 구멍의 두께가 얇아질수록  $|E|^2$ 이 약해진다는 것을 알 수 있다. 두께가 40nm 금속 박막의 경우에는 561nm 부근에서 가장 강한  $|E|^2$ 이, 두께가 60nm 금속 박막의 경우에는 583nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이, 두께가 80nm 금속 박막의 경우에는 625nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이 나타나는 것을 알 수 있다. (b)와 (c)를 비교하였을 때 금속 박막의 두께가 두꺼운 (c)의 시뮬레이션 결과에서  $|E|^2$ 가 강하게 나타나는 것을 볼 수 있었다. 이는 금속이 두꺼워질수록 자유전자가 더 많아지기 때문이라고 볼 수 있다. Fig. 4.10에서는 각 금속 박막의 두께에 따라 최댓값을 보이는 파장이 다름을 알 수 있다.



**Fig. 4.10** (a) 10nm 원통형 구멍에 파장을 보내주었을 때 두께가 40, 60, 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때  $|E|^2$ 의 그래프, (b) 원통형 구멍의 크기가 10nm에 두께가 40nm 인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터, (c) 원통형 구멍의 크기가 10nm에 두께가 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터

Fig. 4.11의 (a)는 역사다리꼴 모양 구멍의 크기를 10nm로 고정해놓은 상태에서 금속 박막의 두께를 40, 60, 80nm로 변화시켜 파장을 400 ~ 1000nm을 주었을 때의  $|E|^2$ 의 그래프이고, (b)는 역사다리꼴 모양 구멍에 크기가 10nm이고, 두께가 40nm인 박막에서 가장 강하게 나타난 587nm 파장에서의  $|E|^2$ 의 시뮬레이션 결과를 보여주고, (c)는 역사다리꼴 모양 구멍에 크기가 10nm이고, 두께가 100nm인 박막에서 가장 강하게 나타난 600nm 파장에서의  $|E|^2$ 의 시뮬레이션 결과를 보여준다. Fig. 4.11의 (a)를 보게 되면 두께가 두꺼워질수록  $|E|^2$ 이 강해진다는 것을 알 수 있다. 두께가 40nm 금속 박막의 경우에는 587nm 부근에서 가장 강한  $|E|^2$ 이, 두께가 60nm 금속 박막의 경우에는 589nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이, 두께가 80nm 금속 박막의 경우에는 596nm 부근에서 가장 높은  $|E|^2$ 이 나타나는 것을 알 수 있다. (b)와 (c)를 비교하였을 때 금속 박막의 두께가 두꺼운 (c)의 시뮬레이션 결과에서  $|E|^2$ 가 강하게 나타나는 것을 볼 수 있었다. Fig. 4.10과 Fig. 4.11을 비교하였을 때 역사다리꼴 모양인 Fig. 4.11의  $|E|^2$ 가 더 강하게 나타난다는 것을 확인할 수 있다. 그리고 원통형 구조와 역사다리꼴 모양 구조에서 금속 박막의 두께가 80nm일 때가  $|E|^2$ 이 가장 강하게 나타났고, 파장은 596nm 부근이다. Fig. 4.10과 마찬가지로 Fig. 4.11도 각 금속 박막의 두께에 따라 최댓값을 보이는 파장이 다를 수 있다.



**Fig. 4.11** (a) 10nm 역사다리꼴 모양 구멍에 파장을 보내주었을 때 두께가 40, 60, 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때  $|E|^2$ 의 그래프, (b) 역사다리꼴 모양 구멍의 크기가 10nm에 두께가 40nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터, (c) 역사다리꼴 모양 구멍의 크기가 10nm에 두께가 80nm인 금속 박막에 빛을 보내주었을 때의 시뮬레이션 데이터

## 제 5 장 실험 결과 및 요약

제 4장에서는 금속 박막에 하나의 나노 구멍을 두 가지 형태와 다양한 크기와 다양한 두께로 만들어 FDTD 시뮬레이션을 통하여 실험하였다.

첫 번째 실험은 원통형 구멍과 역사다리꼴 모양 구멍에 구멍의 크기를 10, 50, 100nm로 다르게 하였을 때 파장인 400 ~ 1000nm을 보내주었을 때의 전계강도  $|E|^2$ 를 살펴보았다. 역사다리꼴 모양 구조에서 원통형 구조보다 강한  $|E|^2$ 이 나타났고, 역사다리꼴 모양 구조의 크기가 10nm일 때,  $|E|^2$ 가 600nm에서 가장 높게 나타났고, 원편광된 파장을 보내주었을 때가 선편광된 빛을 보내주었을 때보다  $|E|^2$ 가 더 높게 나타난 것을 알 수 있다. 이후 역사다리꼴 모양 구멍의 크기를 더욱 작게 한 0.5, 1, 5nm로 실험에서도 구멍의 크기가 가장 작은 0.5nm에서  $|E|^2$ 가 가장 높게 나왔고, 700nm 부근에서  $|E|^2$ 가 가장 강하게 나타났다.

두 번째 실험은 앞의 실험에서 결과 값이 가장 좋게 나온 구멍의 크기인 10nm로 고정하고 금속 박막의 두께를 변화시켜 파장인 400 ~ 1000nm을 조사하였을 때의 전계강도인  $|E|^2$ 를 보았다. 역사다리꼴 모양 구조에서 원통형 구조보다 강한  $|E|^2$ 가 나타났고, 금속 박막의 두께가 80nm일 때,  $|E|^2$ 가 596nm에서 가장 높게 나타났다. 원통형 구멍과 역사다리꼴 모양 구멍의 크기와 금속 박막의 두께에 따라 최대  $|E|^2$ 는 다른 파장에서 만들어지는 현상을 보았고,  $|E|^2$ 를 최대로 만들어주는 특정한 파장이 각각 존재한다. 이는 금속이 두꺼워지면서 자유전자가 많아졌기 때문이라고 볼 수 있다.  $|E|^2$ 를 가장 강하게 만들어 주는 파장은 금속 구조체에 표면 플라즈몬을 발생시킬 수 있는 파장이 된다. 이번 시뮬레이션을 바탕으로 파장, 구멍의 모양, 금속의 두께에 관한 상관관계를 알 수 있었고 이를 응용하여 센서 및 광전송 필터와 같은 다양한 분야에 응용할 수 있을 것으로 기대한다.



## 참고문헌

- [1] Ivo Utke, Patrik Hoffmann, and John Melngailis. 2008. Gas-Assisted focused electron beam and ion beam processing and fabrication. *Journal of Vacuum science and Technology B*, 26(4), pp.1197-1276
- [2] Jing Chen et al. 2009. Gold nanohole arrays for biochemical sensing fabricated by soft UV nanoimprint lithography. *Microelectronic Engineering*, 86, pp632-635
- [3] H. W. Pkoops et al. 2001. Two-dimensional photonic crystals produced by additive nanolithography with electron beam-induced deposition act as filters in the infrared. *Microelectronic Engineering*, 57-58, pp.559-1001
- [4] V. Callengare et al. 2007. Focused ion beam iodine-enhanced etching of high aspect ratio holes in InP photonic crystals. *Journal of Vacuum science and Technology B*, 25(6), pp.2175-2179
- [5] H. J. Lezec et al. 2002. Beaming Light from a Subwavelength Aperture. *SCIENCE*, 297, pp820-822
- [6] Stephen Y. Chou, Peter R. Krauss, and Preston J. Renstrom. 1996. Nanoimprint lithography. *Journal of Vacuum science and Technology B*, 14(6), pp.4129-4133
- [7] Seung-Man Yang et al. 2006. Nanomachining by Colloidal Lithography. *small*. 2(4), pp. 458-475
- [8] Kuiqing Peng et al. 2012. Ordered silicon nanowire arrays via nanosphere lithography and metalinduced etching. *Applied physics Letters*, 90, pp163123
- [9] 정채일, 2006, *광학적 방법을 이용한 생체 광학 센서 연구*. 석사학위논문. 광주:전남대학교

- [10] 함원규, 2017, *표면 플라즈몬 공명과 이상 광학 투과 현상을 활용한 DNA 뉴클레오타이드 박막의 광학적 분석*. 석사학위논문. 인천:인하대학교
- [11] Antoine Lesuffleur et al. 2007. Periodic nanohole arrays with shape-enhanced plasmon resonance as real-time biosensors. *Applied Physics Letters*, 90m pp.243110
- [12] Myung-Ki Kim et al. 2015. Squeezing Photons into a Point-Like Space. *Nano Letters*, 15(6), pp.4102-4107
- [13] Mohamadreza Najiminaini, Fartash Vasefi, Bozena Kaminska, and Jeffrey J. L. Carson. 2012. Nano-hole array structure with improved surface plasmon energy matching characteristics. *Applied Physics Letters*, 100, pp.043105
- [14] L. Yin et al. 2004. Surface plasmons at single nanoholes in Au films. *Applied Physics Letter*, 85(3), pp.467-469
- [15] M. A. Seo et al. 2009. Terahertz field enhancement by a metallic nano slit operating beyond the skin-depth limit, *nano photonics*, 3, pp. 152-156
- [16] 정희정. 2009. *시 자기 차폐소재를 이용한 철도공사 근무복의 차폐성능 비교연구*, 석사학위논문, 서울:이화여자대학교
- [17] 위키백과, 2016. *전자기파* [Online] (Update 16 September 2017) Available at : <https://ko.wikipedia.org/wiki/전자기파> [Accessed 25 October 2017]
- [18] 위키백과. 2019. *전자기 스펙트럼* [Online] (Update 23 May 2016) Available at : [https://ko.wikipedia.org/wiki/파일:EM\\_Spectrum\\_Properties\\_edit.svg](https://ko.wikipedia.org/wiki/파일:EM_Spectrum_Properties_edit.svg) [Accessed 25 October 2017]
- [19] Charless Kittel et al. 2007. *고체물리학*. 8th ed. 범한서적.
- [20] Chanda Yonzon and Richard P. Van Duyne. 2005. Localized and Propagating Surface Plasmon Resonance Sensors: A Study Using Carbohydrate Binding Protein. *Materials Research Society*, 876E, pp.7.3.1-7.3.6

- [21] Katherine A. Willets and Richard P. Van Duyne. 2007. Localized Surface Plasmon Resonance Spectroscopy and Sensing. *Annual Review of physical Chemistry*, 58, pp.267-297
- [22] William L. Barnes, Alain Dereux and Thomas W. Ebbesen. 2003. Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424, pp.824-830
- [23] Eleonora Petryayeva and Ulrich J. Krull. 2011, Localized surface plasmon resonance : Nanostructures, bioassays and biosensing - A review. *Analytica Chimica Acta*, 706, pp.8-24
- [24] Wikipedia. 2017. *Colloidal gold* [Online] (Update 30 October 2017) Availavle at : [https://en.wikipedia.org/wiki/Colloidal\\_gold](https://en.wikipedia.org/wiki/Colloidal_gold) [Accessed 23 October 2017]
- [25] KANE S. YEE. 1966. Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell' s Equations in Isotropic Media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(3), pp.302-307
- [26] Min Qiu. 2001. ANALYSIS OF GUIDED MODES IN PHOTONIC CRYSTAL FIBERS USING THE FINITE-DIFFERENCE TIME-DOMAIN METHOD. *MICROWAVE AND OPTICAL TECHNOLOGY LETTERS*, 30(5), pp.327-330
- [27] Ngoc Hai Vu. 2010. *Finite Difference Time Domain Method for Full Analyses of Micro-Structured Fibers*, 박사학위논문. 광주:전남대학교
- [28] Allen Taflove, and Susan C Hagness. 2005. *Computational Electrodynamics The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House
- [29] Kenji Kawano. 2004. *Introduction to Optical Waveguide Analysis*. Wiley-Interscience
- [30] Lumerical. 2017. *Knowledge Base* [Online] (Update 2017) Availavle at : [https://kb.lumerical.com/en/index.html?knowledge\\_base.html](https://kb.lumerical.com/en/index.html?knowledge_base.html) [Accessed 5 May 2017]

[31] Refractiveindex.INFO. 2008. RefractiveIndex.INFO [Online] (Upeate 2017)  
Availiavle at : <https://refractiveindex.info/?shelf=main&book=Au&page=Johnson> [Accessed 7 October]

