

## ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНОЙ ПЛЕНОЧНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ НА КОЭФФИЦИЕНТ ОТРАЖЕНИЯ ОТ ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА ИЗ ИСКУССТВЕННОГО ОПАЛА

*Разработана теоретическая модель для анализа коэффициента отражения от глобулярного фотонного кристалла с использованием резонансного приближения для эффективной среды. Выполнено численное моделирование для пленочной наноструктуры включений углерода в фотонном кристалле из искусственного опала. Получено удовлетворительное согласие теории и эксперимента.*

**E-mail:** nikyurasov@yandex.ru

**Ключевые слова:** наноструктура, фотонный кристалл, брэгговское отражение, амплитудный коэффициент отражения от кристаллической плоскости, эффективный показатель преломления, углеродные нановключения.

Фотонные кристаллы (ФК) обладают брэгговским отражением как периодические структуры. Наиболее совершенные ФК для оптического диапазона синтезированы на основе искусственного опала [1]. Они структурированы из шаров диаметром порядка 100 нм. Шары состоят из аморфного SiO<sub>2</sub>. Если этот ФК при завершении синтеза отжигается в аргоне, то при разложении остатков базового компонента синтеза — ТЭОСа — происходит выделение углерода [2]. В случае нормального падения света у таких ФК обнаружен аномально высокий коэффициент отражения, сопровождаемый металлическим блеском. Коэффициент отражения достигает 30...50 % [3].

При отжиге в атмосфере кислорода или на воздухе весь углерод выгорает и коэффициент отражения при нормальном падении обычно меньше. Целью работы было выяснение влияния выделения углерода на коэффициент отражения ФК на основе искусственного опала.

В результате выделения углерода получается не свободный ФК, а ФК с включениями. Поэтому необходимо предложить модель ФК и провести численный анализ модели.

Для построения модели ФК с углеродными включениями предположим сначала, что в результате отжига в аргоне углерод выделялся равномерно в объем пустот ФК и покрыл шары (глобулы) слоем толщиной  $\delta$ , определяемой по формуле

$$\delta = \frac{2}{3\pi} \left( \frac{2}{3} \right)^{1/2} \eta_c D, \quad (1)$$

где  $\eta_c$  — объемная доля покрытия шаров (включений),  $D$  — диаметр шара. Для оценки толщины слоя используем следующие числовые

значения:  $\eta_C = 0,0024$  и  $D = 290$  нм [1]. В итоге получаем, что величина  $\delta$  равна 0,1 нм.

Приведенная оценка позволяет рассматривать углеродные включения как небольшое возмущение и применять простейшую модель эффективной среды для расчета эффективного показателя преломления ФК. Согласно этой модели комплексная диэлектрическая проницаемость многокомпонентной среды определяется формулой

$$\varepsilon_{eff} = \sum \varepsilon'_j \eta_j + i \sum \varepsilon''_j \eta_j, \quad (2)$$

где  $\eta_j$  — объемная доля компонента с индексом  $j$ .

Рассмотрим в качестве модели ФК слой толщиной, равной межплоскостному расстоянию для кристаллических плоскостей, на которых происходит брэгговская дифракция. Амплитудный коэффициент отражения  $r$  от первой кристаллической плоскости, на которую падает луч света, согласно формуле Френеля равен

$$r_1 = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}, \quad (3)$$

где  $n_1$  — показатель преломления среды, в которой находится ФК,  $n_2$  — комплексный эффективный показатель преломления среды, заполняющей ФК.

Рассматривая интерференцию амплитуд двух лучей, отраженных от первой и второй кристаллических плоскостей, получаем формулу для амплитудного коэффициента отражения от выбранной системы плоскостей:

$$r = r_1 + r_2(1 - r_1) \exp\left(\frac{4\pi i n_2 a}{\lambda}\right), \quad (4)$$

где  $r_2$  — амплитудный коэффициент отражения от второй кристаллической плоскости,  $a$  — межплоскостное расстояние в ФК,  $\lambda$  — длина волны света в вакууме, причем

$$n_2^2 = n_{\text{SiO}_2}^2 \eta_1 + (n_C^2 - K_C^2) \eta_C + 1 - \eta_1 - \eta_C + i 2 n_C K_C \eta_C, \quad (5)$$

где  $n_{\text{SiO}_2}$  — показатель преломления и  $\eta_1$  — объемная доля аморфного  $\text{SiO}_2$ ;  $n_C$ ,  $K_C$  и  $\eta_C$  — показатель преломления, показатель поглощения и объемная доля углерода. При выводе формулы (4) учитывалась непрерывность амплитуды на границе первой кристаллической плоскости. Второе граничное условие состояло в задании амплитудного коэффициента отражения на второй кристаллической плоскости  $r_2$ . После подстановки формулы (3) в формулу (4) и учета того, что волна падает на кристалл из среды с показателем преломления, равным единице,

была получена следующая формула:

$$r = \frac{1 - n_2 + 2n_2r_2 \exp\left(\frac{-4\pi a(-n_2'' + in_2')}{\lambda}\right)}{1 + n_2}, \quad (6)$$

где  $n_2'$ ,  $n_2''$  — вещественная и мнимая части эффективного показателя преломления, определяемые из формулы (5).

Измеряемый коэффициент отражения  $R$  равен:

$$R = |r|^2. \quad (7)$$

По формуле (7) с учетом формулы (6) было выполнено моделирование зависимости коэффициента отражения от энергии фотона, падающего нормально на ФК. В числовых расчетах использовались данные, приведенные в работе [2] для значений постоянной кристаллической решетки ( $a$ ) в направлении [111], а также значение  $\eta_1$ , равное пористости исходного кристалла ( $P_{01}$  в работе [2]), и значение объемной концентрации углерода, которая определялась двумя способами. При первом способе массовое содержание углерода пересчитывалось в объемное. Во втором способе из пористости после отжига в атмосфере кислорода вычиталась пористость после отжига в атмосфере аргона. Результаты этого анализа приведены в табл. 1. Различие в значениях данных из колонок I и II, по-видимому, связано с недостаточной точностью измерений. В числовых расчетах были использованы значения оптических констант ( $n$ ,  $k$ ) аморфного углерода, взятые из [4].

Обобщенные результаты численного моделирования приведены в табл. 2. Для наилучшего согласия с экспериментом значение параметра  $r_2$  было принято равным  $-0,5$ .

Таблица 1

**Объемные пористость и доля углерода в образцах ФК из искусственного опала**

Образец	$P_{01} = \eta_1$ [2]	$P_{02}$ [2]	(I): $\eta_C$	(II): $P_{01} - P_{02} = \eta_C$
Фиолетовый	0,422	0,417	0,0018	0,005
Зеленый	0,373	0,353	0,0023	0,02
Красный	0,458	0,452	0,0024	0,006

Таблица 2

**Сопоставление расчетных и экспериментальных результатов.**

Образец	$\lambda_m$ , нм		$R$	
	теория	эксперимент [2]	теория	эксперимент [3]
Фиолетовый	422–444	443	0,3–0,5	0,32
Зеленый	515–533	530	0,3–0,5	0,35
Красный	605–617	617	0,3–0,5	0,48

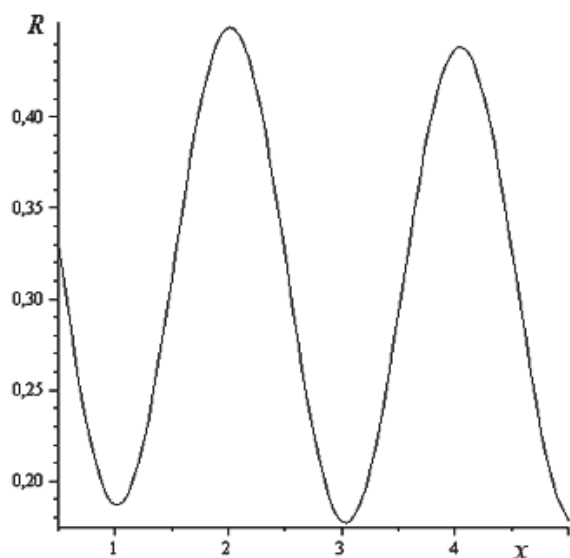


Рис. 1. Геометрические (брэгговские) резонансы для красного образца ( $a = 240$  нм) в видимой и ультрафиолетовой областях ( $\lambda_{m1} = 615$  нм и  $\lambda_{m2} = 307$  нм)

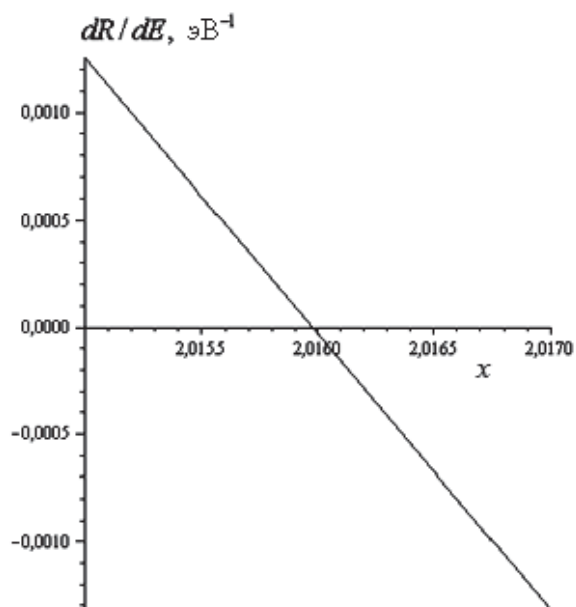


Рис. 2. Определение энергии резонансного фотона для красного образца ( $a=240$  нм) в видимой области спектра ( $\lambda_m = 615$  нм)

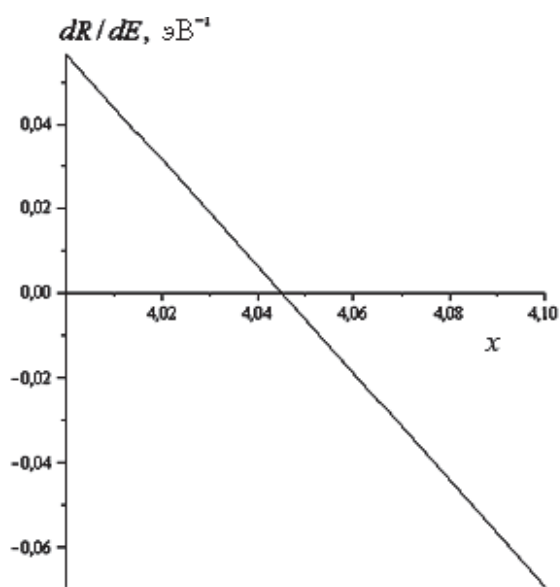


Рис. 3. Определение энергии фотона второго резонанса для красного образца

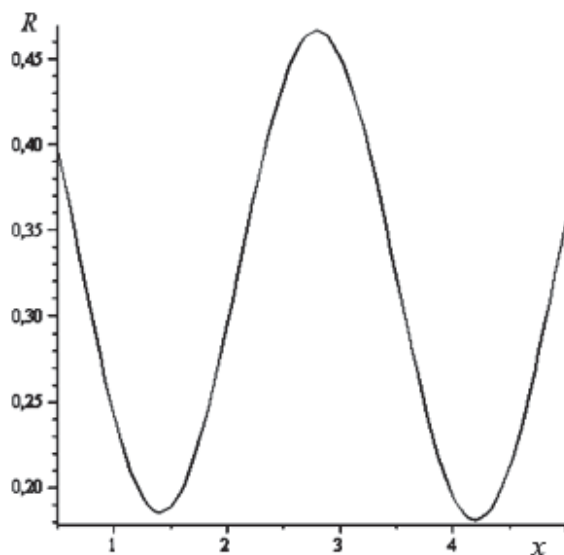


Рис. 4. Геометрический (брэгговский) резонанс для фиолетового образца ( $a=172$  нм) в видимой области ( $\lambda_{m1} = 443$  нм)

Типичные результаты компьютерного моделирования зависимостей коэффициента отражения от энергии фотонов для красного, фиолетового и зеленого образцов ФК приведены на рис. 1–7. Найдены брэгговские резонансные максимумы в видимой и ультрафиолетовой областях спектра. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, представленное в табл. 2, показывает, что разработанный метод позволяет получить хорошее согласие по положению брэгговского резонанса в видимой области спектра, а также по значению максимума коэффициента отражения в этой области. Для еще более

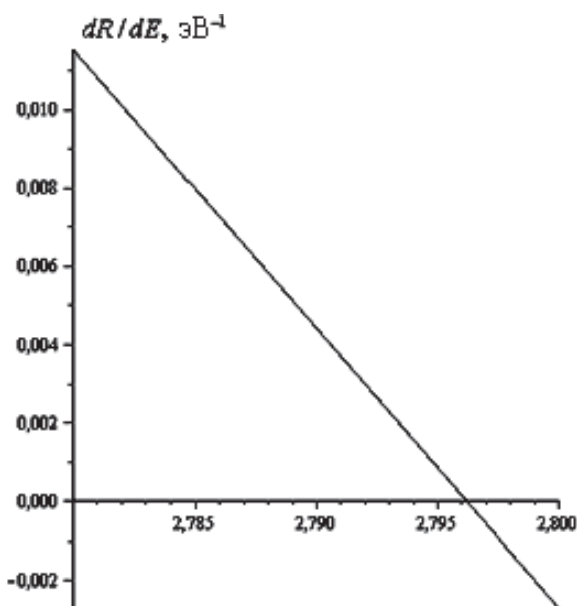


Рис. 5. Определение энергии резонансного фотона для фиолетового образца ( $a=172$  нм)

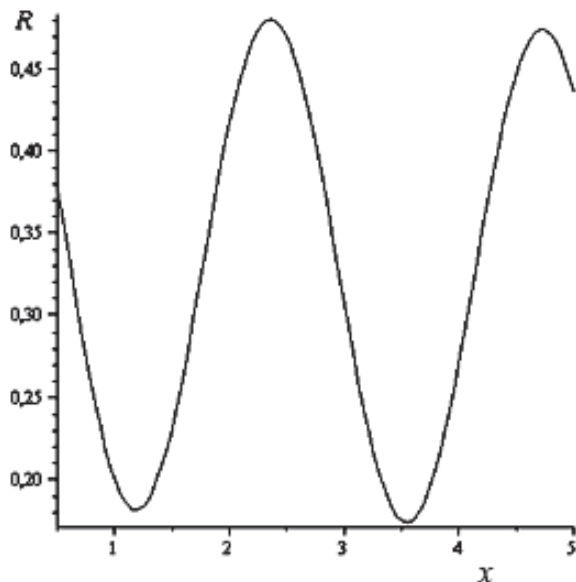


Рис. 6. Геометрические (брэгговские) резонансы для зеленого образца ( $a = 200$  нм) в видимой и ультрафиолетовой области ( $\lambda_{m1} = 526$  нм и  $\lambda_{m2} = 262$  нм)

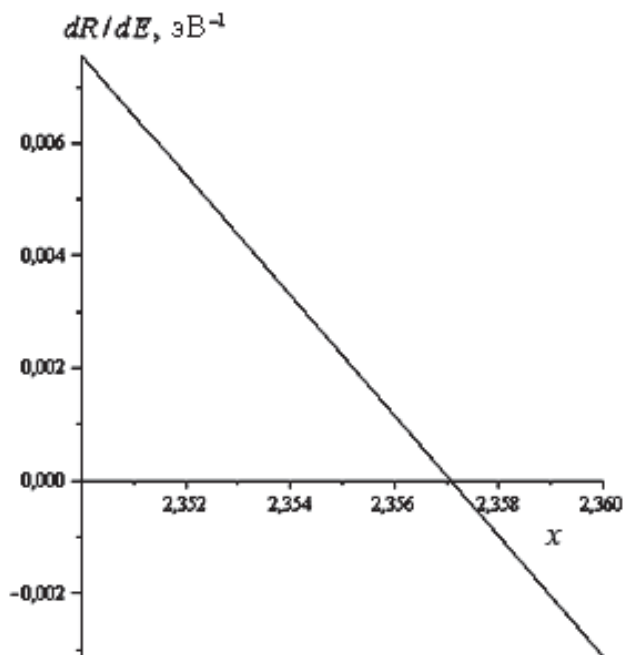


Рис. 7. Определение энергии резонансного фотона для зеленого образца в видимой области спектра ( $\lambda_{m1} = 526$  нм)

полного сопоставления теории и эксперимента необходимо повысить точность определения пористости, а также измерения межплоскостного расстояния в ФК. Следует отметить, что число геометрических или брэгговских резонансов в оптической области зависит от цвета ФК и диаметра шара, с которым однозначно связано межплоскостное расстояние в направлении оси  $\langle 111 \rangle$ .

Итак, развит резонансный метод расчета брэгговских или геометрических резонансов для случая нормального падения электромагнитной волны на фотонный кристалл, позволяющий по известному строению и заполнению ФК вычислять положение резонанса и максимальное значение коэффициента отражения при геометрическом ре-

зонансе. Выяснено влияние пленочной углеродной наноструктуры на коэффициент отражения от ФК.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самойлович С. М. Автореф. канд. дисс. – М.: МГУ, 1999.
2. Горелик В. С., Войнов Ю. П., Емельченко Г. А., Масалов В. М., Юрасов Н. И., Грязнов В. В. // Неорганические материалы. – 2009. – Т. 45, № 6. – С. 49–54.
3. Юрасов Н. И., Грязнов В. В. // Необратимые процессы в природе и технике. Сб. научных трудов. Вып. III. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. – С. 240–248.
4. Jung G. // Phys. Status solidi B. – 1975. – Vol. 67, no. 1. – P. 85–91.

Статья поступила в редакцию 25.04.2011

Николай Ильич Юрасов родился в 1943 г., окончил в 1966 г. МВТУ им. Н.Э. Баумана и в 1974 г. Московский инженерно-физический институт. Канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 70 научных работ в области физики конденсированного состояния: магнитных и кинетических явлений, интерференционных эффектов, квантовой гравитации и устойчивости тяжелых ядер.

N.I. Yurasov (b. 1943) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1966 and Moscow Engineering and Physics Institute in 1974. Ph. D. (Phys.-Math.), assoc. professor of “Physics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 70 publications in the field of condense matter physics: magnetic and kinetic phenomena, interference effects, quantum gravitation and heavy nuclei stability.

Ирина Игоревна Юрасова окончила в 1989 г. МХТИ им. Д.И. Менделеева. Канд. хим. наук, доцент кафедры “Химия” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 12 научных работ в области химии изотопов.

I.I. Yurasova graduated from the Mendeleev Moscow Institute of Chemical Technology in 1989. Ph. D. (Chem.), assoc. professor of “Chemistry” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 12 publications in the field of chemistry of isotopes.