

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЗОПОРИСТЫХ ОДНОМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

В. С. Горелик, В. В. Щавлев

В статье приведены закономерности в спектрах отражения широкополосного оптического излучения от поверхности одномерных фотонных кристаллов на основе мезопористых структур. Установлена дисперсионная зависимость для электромагнитных волн в мезопористом одномерном фотонном кристалле. На её основе рассчитаны спектры отражения и пропускания в конкретных структурах и определены значения микроскопических параметров исследуемых образцов. Развитая теория использована для объяснения вида спектров отражения в мезопористых фотонных кристаллах, созданных на основе кремния, кварца и оксида алюминия.

Ключевые слова: фотонный кристалл, мезопористые структуры, спектр, отражение, дисперсионные кривые, групповая скорость, эффективная масса.

В настоящее время весьма актуальными являются исследования мезопористых структур, характеризующихся присутствием пор размером $\sim 1-10$ нм [1]. Важным примером такого типа структур являются мезопористые трёхмерные, двумерные и одномерные фотонные кристаллы [2, 3]. Одномерные фотонные кристаллы представляют собой слоистые периодические структуры, для которых в определённых спектральных интервалах присутствуют так называемые запрещённые фотонные зоны. Процесс изготовления такого рода периодических структур осуществляется, в частности, методом электрохимического травления [4–6]. К настоящему времени получены мезопористые структуры и одномерные фотонные кристаллы на основе кремния, оксида кремния, оксида алюминия, фосфида галлия и других [7, 8]. Выполнены экспериментальные исследования спектров отражения некоторых типов одномерных мезопористых фотонных кристаллов [9, 10]. В связи с этим весьма актуальным является создание теории оптических свойств мезопористых фотонных кристаллов. В данной работе решается

задача развития теоретического метода расчета дисперсионных зависимостей и спектров отражения широкополосного излучения для мезопористых одномерных фотонных кристаллов.

Для описания закона дисперсии $\omega(k)$ электромагнитных волн в одномерных периодических структурах может быть использовано известное соотношение [11]:

$$\cos(ka) = \cos(k_1 a_1) \cos(k_2 a_2) - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}} \sin(k_1 a_1) \sin(k_2 a_2). \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – диэлектрические проницаемости слоёв; a_1, a_2 – их толщины; $a = a_1 + a_2$ – период структуры; $k_1 = n_1 \frac{\omega}{c}$; $k_2 = n_2 \frac{\omega}{c}$; $n_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$, $n_2 = \sqrt{\varepsilon_2}$ – показатели преломления слоёв.

Так как $|\cos(ka)| \leq 1$, в спектре дисперсионных кривых $\omega(k)$ в соответствии с (1), присутствуют запрещённые энергетические зоны (“стоп-зоны”). Мы рассматриваем направление, перпендикулярное поверхности фотонного кристалла. Параметрами, влияющими на спектральное положение и ширину стоп-зон, являются показатели преломления n_1, n_2 и толщины a_1, a_2 слоёв. Центральное положение стоп-зон в спектре определяется известным соотношением Брэгга:

$$2an_{\text{eff}} = m\lambda_B, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_{\text{eff}} = \sqrt{n_1^2 \frac{a_1}{a} + n_2^2 \frac{a_2}{a}}. \quad (2)$$

Здесь n_{eff} – эффективный показатель преломления структуры, λ_B – брэгговская длина волны.

Зная закон дисперсии $\omega(k)$, можно рассчитать дисперсию показателя преломления исследуемой структуры:

$$|n(\omega)| = \frac{ck(\omega)}{\omega}. \quad (3)$$

Соответственно для дисперсионных зависимостей коэффициентов отражения и пропускания образца имеют место соотношения:

$$R(\omega) = \left| \frac{\frac{ck(\omega)}{\omega} - 1}{\frac{ck(\omega)}{\omega} + 1} \right|^2, \quad (4)$$

$$T(\omega) = 1 - R(\omega). \quad (5)$$

Спектральные зависимости для групповой скорости электромагнитных волн в фотонном кристалле и эффективной массы фотонов задаются соотношениями [8]:

$$V_g(\omega) = \frac{d\omega}{dk}; \quad m_{\text{эф}}(\omega) = \frac{\hbar}{\frac{d^2\omega}{dk^2}}. \quad (6)$$

На основе приведённых соотношений (1)–(5) можно при расчете подбирать показатели преломления и толщины слоёв в одномерных периодических структурах таким образом, чтобы расчётные спектры отражения и пропускания совпадали с экспериментальными данными.

В данной работе проведен анализ экспериментальных данных, полученных в работах [9, 10], характеризующих оптические свойства мезопористых одномерных фотонных кристаллов, созданных на основе кремния (Si), оксида кремния (SiO₂) и оксида алюминия (Al₂O₃). В работе [9] исследовались образцы мезопористых одномерных фотонных кристаллов на основе кремния и оксида кремния. Параметры полученных образцов определялись двумя способами: прямыми измерениями с помощью сканирующего электронного микроскопа и посредством анализа спектральной интерференционной картины отраженного от слоев излучения. Согласно данным, приведённым в этой работе, период структуры и толщины слоёв исследуемых образцов соответственно равны: $a = 190$ нм, $a_1 = 90$ нм, $a_2 = 100$ нм. Вид спектров отражения широкополосного из-

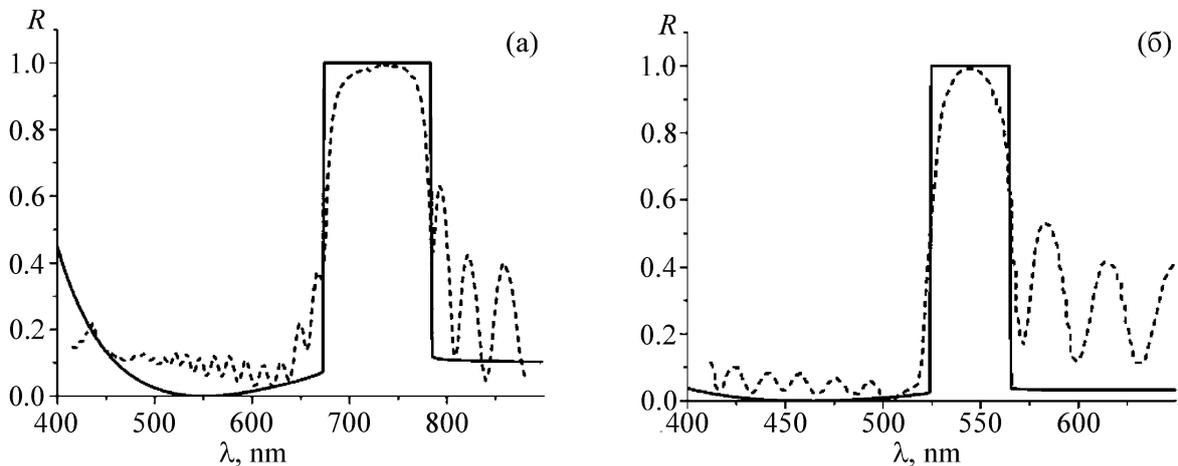


Рис. 1: Спектры отражения образцов мезопористых одномерных фотонных кристаллов на основе кремния (а) и оксида кремния (б), полученные экспериментально (пунктирная линия) и расчетом (сплошная линия) при специально подобранных значениях параметров образцов.

лучения от поверхности обсуждаемых фотонных кристаллов при нормальном падении, полученный в работе [9], приведён на рис. 1 ((а), (б)) пунктирной линией.

Сплошная линия на рис. 1 ((а), (б)) соответствует спектрам отражения, рассчитанным на основании соотношений (1)–(4). При этом толщины слоёв фотонного кристалла соответствовали значениям, приведенным в работе [9]. Показатели преломления слоёв n_1 и n_2 подбирались таким образом, чтобы обеспечить наилучшее согласие границ стоп-зон экспериментальных спектров отражения (пунктирные кривые на рис. 1((а),(б)) с рассчитанными зависимостями (сплошные кривые на рис. 1((а), (б))). Подобранные значения расчётных параметров исследуемых образцов приведены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Значения показателей преломления, периода структуры и толщины слоёв образцов мезопористых одномерных фотонных кристаллов (ФК) на основе кремния и оксида кремния, при которых совпадают границы стоп-зон расчетных и экспериментальных спектральных кривых отражения

Наименование	n_1	n_2	n_{ef}	a_1 , нм	a_2 , нм	a , нм	Центр стоп-зоны λ_B , нм	Ширина стоп- зоны, нм
ФК на основе кремния	2.15	1.69	1.93	90	100	190	733	105
ФК на основе оксида кремния	1.52	1.35	1.44	90	100	190	547	40

Согласно данным, приведённым в работе [9], показатели преломления слоёв мезопористых одномерных фотонных кристаллов на основе кремния и оксида кремния соответственно равны: $n_1 = 2.1$; $n_2 = 1.8$ для кремния и $n_1 = 1.48$; $n_2 = 1.32$ для оксида кремния. Таким образом, подобранные значения показателей преломления слоёв близки к значениям, полученным экспериментально.

В работе [10] приведены спектральные зависимости коэффициентов отражения и пропускания мезопористых одномерных фотонных кристаллов на основе оксида алюминия [12], полученные экспериментально (пунктирные линии на рис. 2, 3 для двух образцов).

Мезопористые одномерные фотонные кристаллы на основе оксида алюминия изготавливались методом электрохимического травления с различным режимом пропускания электрического тока и временем травления образца. В результате получились од-

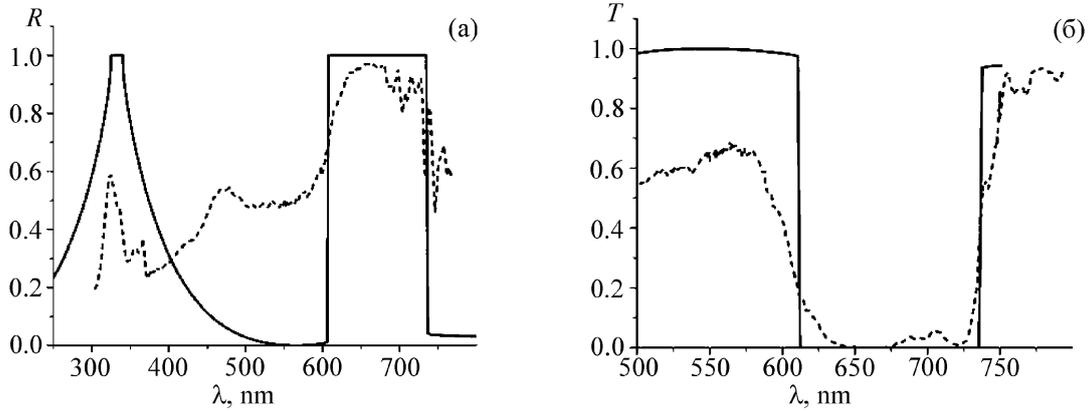


Рис. 2: Экспериментально полученные [10] спектры отражения (а) и пропускания (б) образца мезопористого одномерного фотонного кристалла на основе оксида алюминия с периодом травления $T_1 = 1170$ с (пунктирная линия), и расчётные данные по формулам (4), (5) (сплошная линия).

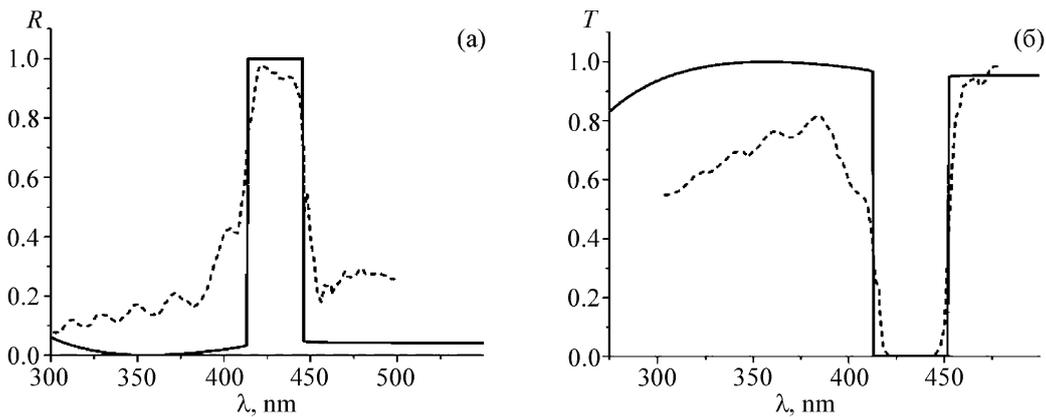


Рис. 3: Экспериментально полученные [10] спектры отражения (а) и пропускания (б) образца мезопористого одномерного фотонного кристалла на основе оксида алюминия с периодом травления $T_2 = 675$ с (пунктирная линия), и расчётные данные по формулам (4), (5) (сплошная линия).

номерные периодические структуры с одинаковым количеством, но с разной толщиной слоёв. Для первого образца период травления составлял $T_1 = 1170$ с и общим временем травления $t_1 = 44$ ч, а для второго – $T_2 = 675$ с и $t_2 = 28$ ч соответственно. Конкретные значения показателей преломления и толщин слоёв исследуемых образцов в работе [10] не приводятся.

На основе использования соотношений (4), (5) были подобраны параметры и расчи-

таны спектры отражения и пропускания (сплошные линии на рис. 2, 3), а также дисперсионные кривые и спектральные зависимости эффективного показателя преломления, групповой скорости и эффективной массы фотонов для второго образца (рис. 4). Значения параметров для расчётов подбирались таким образом, чтобы наблюдалось наилучшее соответствие рассчитанных и экспериментально полученных спектральных кривых отражения и пропускания. Подобранные значения параметров приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2

Значения параметров образцов № 1 и № 2 мезопористых одномерных фотонных кристаллов (ФК) на основе оксида алюминия, использовавшиеся для расчёта спектральной зависимости коэффициентов отражения и пропускания

Наименование спектра и кристалла	n_1	n_2	n_{ef}	a_1 , нм	a_2 , нм	a , нм	Центр стоп-зоны λ_B , нм	Ширина стоп-зоны, нм
Спектр отражения; ФК № 1	1.31	1.75	1.55	109	109	218	676	120
Спектр пропускания; ФК № 1	1.31	1.76	1.55	109	109	218	676	120
Спектр отражения; ФК № 2	1.42	1.60	1.51	71	71	142	429	30
Спектр пропускания; ФК № 2	1.28	1.70	1.51	71	71	142	429	35

Как видно из рис. 2(а), для первого образца в спектре отражения присутствуют сразу два пика, соответствующие положениям первой и второй стоп-зон. В спектре отражения, рассчитанном на основе предложенной теоретической модели, также присутствуют эти пики; положение каждого из них совпадает с положением пиков, полученных экспериментально.

Оксид алюминия (Al_2O_3) характеризуется нормальной дисперсией в видимой области спектра. Зависимость показателя преломления оксида алюминия от длины волны представлена в табл. 3.

Т а б л и ц а 3

Зависимость показателя преломления оксида алюминия (Al_2O_3) от длины волны

λ , нм	$n(\lambda)$						
193	1.93	266	1.83	442	1.78	670	1.76
213	1.89	280	1.82	458	1.78	694	1.76
222	1.88	308	1.81	488	1.78	755	1.76
226	1.87	325	1.80	515	1.77	780	1.76
244	1.85	337	1.80	532	1.77	800	1.76
248	1.85	351	1.80	590	1.77	820	1.76
257	1.84	355	1.80	633	1.77	980	1.76

Из табл. 3 видно, что в исследуемом диапазоне частот показатель преломления Al_2O_3 варьируется от 1.76 до 1.93; подобранные в табл. 2 значения показателей преломления слоёв укладываются в этот диапазон.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о правомерности использования описанной теории для расчёта дисперсионных кривых, а также спектров отражения и пропускания мезопористых одномерных фотонных кристаллов.

На рис. 4. приведены рассчитанные по соотношениям (1)–(6) дисперсионные кривые и спектральные зависимости показателя преломления, групповой скорости и эффективной массы фотонов для образца № 2 мезопористого одномерного фотонного кристалла на основе оксида алюминия (табл. 2).

На рис. 4(а) представлены: дисперсионные ветви (кривые 1–3) мезопористого одномерного фотонного кристалла на основе оксида алюминия с периодом травления $T_2 = 675$ с. Кроме того, на этом же рисунке пунктиром показана дисперсионная зависимость $\omega(k)$ для электромагнитного излучения в вакууме (кривая 4). Спектральные положения первой и второй стоп-зоны фотонного кристалла показаны горизонтальными прямыми в интервалах $\Delta\lambda_1 = 414 - 445$ нм и $\Delta\lambda_2 = 214 - 215$ нм соответственно. Точка A ($\lambda_A = 356$ нм) соответствует пересечению дисперсионных кривых 2 и 4; при этом показатель преломления $n(\omega_A) = -1$ (см. рис. 4((а), (б))). Согласно соотношениям (3)–(4), для точки A коэффициент отражения $R(\omega_A) = 0$ (см. работы [13–15]).

Анализ графика зависимости групповой скорости от длины волны (рис. 4(в)) показывает, что на границах фотонных стоп-зон групповая скорость фотонов близка к нулю. В этом случае резко возрастает эффективность комбинационных оптических процессов в связи с аномальным увеличением плотности фотонных состояний в области края

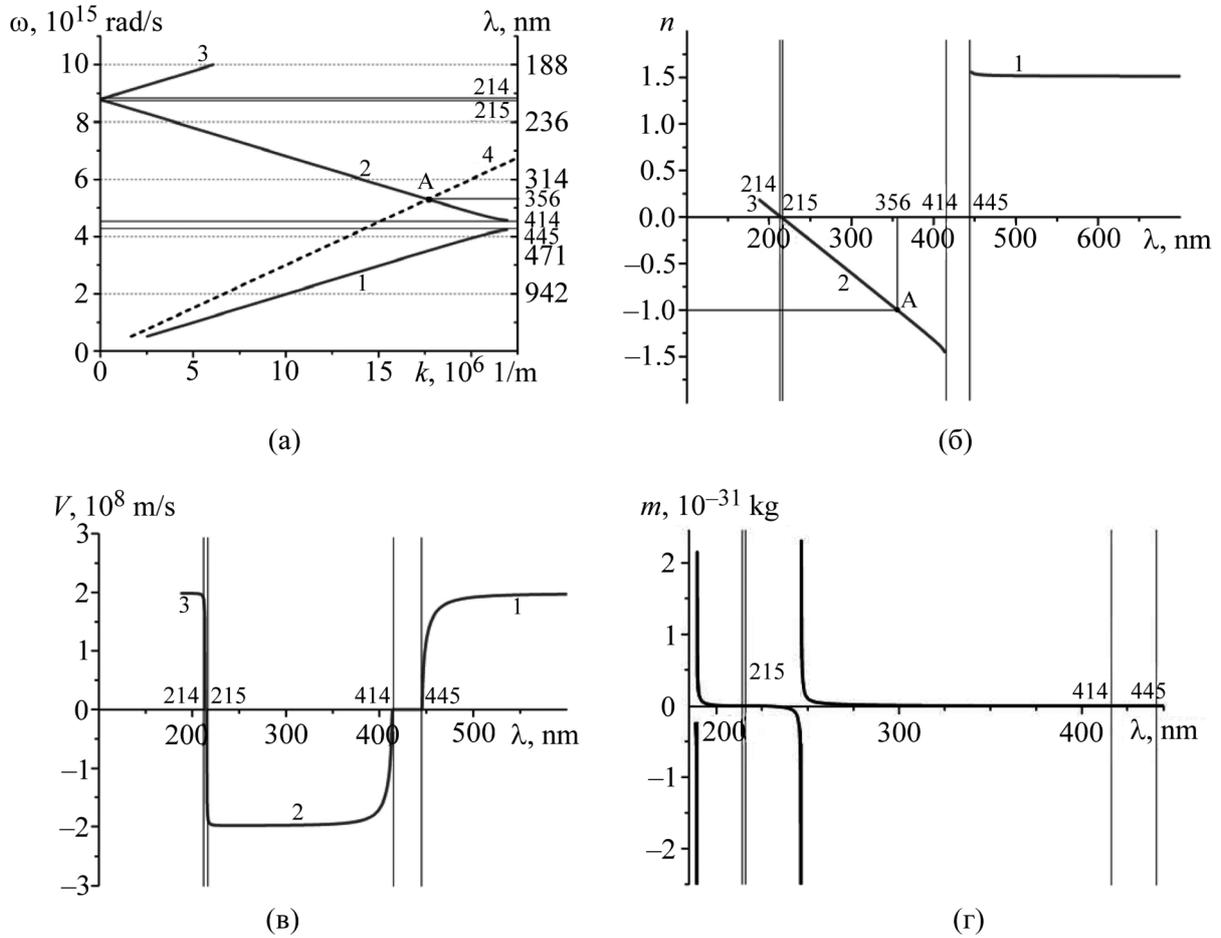


Рис. 4: Дисперсионные кривые $\omega(k)$ (а), спектральные зависимости показателя преломления $n(\omega)$ (б), групповой скорости $V_g(\omega) = \frac{d\omega}{dk}$ (в) и эффективной массы фотонов $m_{\text{ef}}(\omega) = \frac{\hbar}{\frac{d^2\omega}{dk^2}}$ (г) образца № 2 мезопористого фотонного кристалла на основе оксида алюминия.

стоп-зоны [16]. Из зависимости эффективной массы фотонов от длины волны падающего излучения (рис. 4(г)) следует, что масса покоя фотонов может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Наибольшие по модулю значения эффективной массы фотонов соответствуют точкам перегиба дисперсионных кривых. При этом эффективная масса фотонов на несколько порядков превышает массу фотонов в других областях спектра.

Таким образом, в данной работе предложен метод определения микроскопических характеристик мезопористых одномерных фотонных кристаллов на основе сравнения

экспериментально полученных спектров отражения и пропускания широкополосного излучения с результатами расчётов на основе приведенной теоретической модели. Установлены значения показателей преломления слоёв, их толщин, периода фотонного кристалла; построены дисперсионные зависимости показателя преломления, групповой скорости электромагнитных волн и эффективной массы фотонов в различных областях спектра. Установлено, что групповая скорость электромагнитных волн принимает аномально низкие значения вблизи краёв стоп-зон, что приводит к резкому возрастанию плотности фотонных состояний и к повышению эффективности соответствующих оптических процессов.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] H. Foll, M. Christophersen, J. Carstensen, and G. Hasse, *Mater. Sci. Eng. R.* **39**, 93 (2002).
- [2] J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, and S. H. Fan, *Nature (London)* **386**, 143 (1997).
- [3] P. K. Kashkarov, L. A. Golovan, A. B. Fedotov, et al., *J. Opt. Soc. Am. B* **19**, 2273 (2002).
- [4] L. Pavesi, *Rivista del nuovo cimento* **20**, № 10 (1997).
- [5] V. Lehmann, U. Gosele, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 856 (1991).
- [6] P. Kumar and P. Huber, *Journal of Nanomaterials* **2007**, 89718 (2007).
- [7] J. E. Lugo, *Journal of Applied Physics* **91**, № 8 (2002).
- [8] Л. А. Головань, В. Ю. Тимошенко, П. К. Кашкаров, *УФН* **177**, 619 (2007).
- [9] S. E. Svyakhovskiy, A. I. Maydykovsky, and T. V. Murzina, *J. Appl. Phys.* **112**, 013106 (2012).
- [10] Yi. Liu, Yi Chang, Zh. Ling, et al., *Electrochemistry Communications* **13**, 1336 (2011).
- [11] В. С. Горелик, *Квантовая электроника* **37**, 409 (2007).
- [12] B. Wang, G. T. Fei, M. Wang, et al., *Nanotechnology* **18**, 365601 (2007).
- [13] В. Г. Веселаго, *УФН* **92**, 517 (1967).
- [14] В. М. Агранович, Ю. Н. Гартштейн, *УФН* **176**, 1051 (2006).
- [15] В. С. Горелик, В. В. Щавлев, *Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана, серия: естественные науки*, № 1, 47 (2011).
- [16] В. С. Горелик, А. А. Исаков, А. Б. Фадюшин, *Краткие сообщения по физике ФИАН*, № 10, 12 (2006).

Поступила в редакцию 2 июня 2015 г.