#### ОЛИМПИАДА ШКОЛЬНИКОВ «ШАГ В БУДУЩЕЕ»

#### НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ СОРЕВНОВАНИЕ «ШАГ В БУДУЩЕЕ, МОСКВА»

ШМ0587

### Фундаментальные науки Физика и познание мира (ФН-4)

# ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ ГФК НА ЕГО ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Автор:

Радько Петр Игоревич

СОШ №446 с углубленным изучением экологии

Научный руководитель:

Юрасов Николай Ильич МГТУ им. Н.Э. Баумана Доцент кафедры ФН-4, к. ф.-м. н.

#### **ВВЕДЕНИЕ**

Термин "фотонные кристаллы" был введен в работе Э. Яблоновича [1] и относится к периодическим структурам, в которых формируются фотонные запрещенные зоны. Различные оптические структуры (дифракционные решетки, интерференционные фильтры, многослойные диэлектрические зеркала) также относятся к фотонным кристаллам.

На их основе разрабатываются новые оптические устройства: высокодобротные резонаторы, спектральные фильтры, селективные зеркала, нелинейные оптические элементы [2]. Особый интерес представляют трехмерные фотонные кристаллы, построенные из глобул одинакового диаметра [3]. Такие структуры называются глобулярными фотонными кристаллами (далее — ГФК).

#### ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

В настоящее время исследования во многих областях проводятся с широким применением вынужденного излучения на p-n переходах (светодиоды). Точность получаемых результатов зависит от ширины спектра излучения. Поэтому актуальны способы повышения монохроматичности излучения.

Так как ГФК, в зависимости от длины волны и строения кристалла, поразному отражают свет [4], то возможно избирательно управлять оптическими характеристиками кристалла.

Такие свойства ГФК позволяют использовать их в системах со светодиодами при получении монохроматического излучения с меньшей шириной спектра и для создания зеркал с избирательным отражением света.

2

#### ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Целью работы являлось исследование влияния структуры ГФК (пористости и диаметра глобул) на его оптические характеристики: эффективный коэффициент преломления, коэффициенты отражения и пропускания в зависимости от длины волны света, что даст возможность предсказывать отражательную способность кристаллов.

#### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

- 1. Провести моделирование сечения ячейки ГФК с гранецентрированной кристаллической решеткой в направлениях <111>, <100>, <110>.
- 2. Вывести зависимости коэффициента отражения и пропускания от пористости и диаметра глобулы ГФК.
- 3. Разработать экспериментальную установку и провести опытное исследование оптических характеристик ГФК.
- 4. Сравнить результаты экспериментов с результатами, предсказанными на основе математического моделирования.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

## 1 этап. Моделирование сечения ячейки ГФК с гранецентрированной кристаллической решеткой в направлениях <111>, <100>, <110>.

Обычно, в качестве глобулярных фотонных кристаллов используются матрицы искусственных опалов, состоящие из плотноупакованных глобул аморфного кремнезёма диаметром около 200 нм [3].

Структура природного опала представляет собой гранецентрированную кристаллическую решетку (далее — ГЦК решетка), образованную близкими по диаметру глобулами кремнезема (SiO<sub>2</sub>).

В соответствии со строением ГЦК решетки были выделены 3 сечения. Это сечения в плоскостях <111>, <100>, <110>. В направлении <111> обычно проводится заполнение опаловой матрицы различными нановключениями для получения новых свойств, например: сегнетоэлектрических, ферромагнических, инверсной заселенности.

Для визуализации трехмерной модели ячейки ГФК и выбранных сечений использовалась программная система трехмерной графики Autodesk 3ds Max. Сначала была реализована модель ячейки и ее сечений в трехмерном виде (рис.1).



Рис. 1. Основные сечения элементарной ячейки (а) в плоскостях: <111> (б); <110> (в); <100> (г), полученные в редакторе трехмерной графики Autodesk 3ds Max

На основе анализа полученных сечений были построены их математические модели в системе компьютерной алгебры Maple. Результаты моделирования для всех трех сечений представлены на рис.2.



Рис. 2. Рассчитанные сечения в плоскостях: 100 (а); 111 (б); 110 (в). Единицы измерения – нанометры

## 2 этап. Вывод зависимости коэффициента отражения и пропускания от пористости и диаметра глобулы ГФК.

Коэффициент преломления воздуха  $(n_1)$  принимается за единицу [4]. Сначала были получены графики зависимости коэффициента преломления света в среде ГФК от разных значений пористости. Минимальное значение пористости  $(\eta_0)$  приблизительно равно 0.26 (кубическая плотная упаковка), если считать глобулы сплошными [5]. На самом деле истинная пористость выше, так как глобулы тоже являются структурами с ГЦК решеткой. Таким образом, настоящее значение пористости (η<sub>max</sub>) можно высчитать по следующей формуле:

$$\eta_{\max} = \eta_0 \left( 1 - \eta_0 \right) + \eta_0 \approx 0.45 \tag{1}$$

Коэффициент преломления ГФК (n<sub>eff</sub>) зависит от относительной диэлектрической проницаемости (ε<sub>eff</sub>):

$$\varepsilon_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}^2$$
 (2)

С учетом коэффициента преломления оксида кремния n<sub>SiO2</sub>:

$$\mathbf{n}_{\text{eff}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}}} = \sqrt{n_{\text{SiO2}}^{2}} \cdot \left(1 - \eta_0 - \Delta \eta\right) + \left(\eta_0 + \Delta \eta\right)$$
$$\Delta \eta \in \left[\eta_0, \eta_{\text{max}}\right]$$
(3)

График этой функции приведен на рис. 3 ( $n_{SiO2} = 1.47$  (x)).



Рис. 3. Зависимость коэффициента преломления (n<sub>eff</sub>) от пористости (Δη) ГФК

В первом приближении коэффициенты отражения (R) и пропускания (T) рассчитываются для ГФК, как однородной среды, то есть без учета внутренней структуры кристалла. При нормальном падении света расчет производится по формуле Френеля:

$$R = \left| \frac{n_{eff} - n_{1}}{n_{eff} + n_{1}} \right|^{2} = \left| \frac{n_{eff} - 1}{n_{eff} + 1} \right|^{2}$$
(4)

С учетом формулы (3) получим зависимость коэффициента отражения от пористости ГФК:

$$\mathbf{R} = \left| \frac{\sqrt{n_{\mathrm{SiO2}}^{2} \cdot \left(1 - \eta_{0} - \Delta \eta\right) + \left(\eta_{0} + \Delta \eta\right)} - 1}{\sqrt{n_{\mathrm{SiO2}}^{2} \cdot \left(1 - \eta_{0} - \Delta \eta\right) + \left(\eta_{0} + \Delta \eta\right)} + 1} \right|^{2} \qquad (5)$$
$$\Delta \eta \in \left[\eta_{0}, \eta_{\mathrm{max}}\right]$$

График, отражающий эту зависимость, проведен на рис. 4.



## Рис. 4. Зависимость коэффициента отражения (R) от пористости (Δη) ΓΦК

Коэффициент пропускания можно высчитать по следующей формуле:

$$\mathbf{T} = \mathbf{1} - \mathbf{R} \tag{6}$$

График, отражающий эту зависимость, проведен на рис. 5.



Рис. 5 Зависимость коэффициента пропускания (T) от пористости (Δη) ΓΦК

приближении Bo втором математической модели были В дополнительно учтены диаметр глобулы (D) и длина волны ( $\lambda$ ) согласно Коэффициент [7]. работе отражения промежуточных зависит от коэффициентов (r<sub>1</sub> и r<sub>2</sub>).

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_{1} + \frac{\mathbf{r}_{2} \left(1 - \mathbf{r}_{1}\right)^{2} e^{i\alpha}}{1 - \mathbf{r}_{1} \mathbf{r}_{2} e^{i\alpha}},$$
(7)  
где  $\alpha = 4 \pi \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{n}_{eff} \cdot \mathbf{D}}{\lambda}$ 

Множитель  $\left(\frac{2}{3}\right)^2$  учитывает межплоскостное расстояние в направлении <111>. В итоге квадрат модуля r, т.е.

$$R = |r|^{2} = r r^{*}, \qquad (8)$$
  
где  $r^{*} = r_{1} + \frac{r_{2} (1 - r_{1})^{2} e^{i\alpha}}{1 - r_{1} r_{2} e^{i\alpha}},$ 

был рассчитан в системе компьютерной алгебры Maple.

Результаты числового расчета R приведены на графиках (рис. 6-7). Они отражают зависимость коэффициента отражения от длины волны, пористости и диаметра глобул.



Рис. 6. Зависимость коэффициента отражения (R) от длины волны ( $\lambda$ ) и диаметра глобул (D) для идеального ГФК ( $\Delta \eta = 0.26$ )



Рис. 7. Зависимость коэффициента отражения (R) от длины волны (λ) и диаметра глобул (D) для ГФК с учетом пористости глобул (Δη = 0.45)

Графики аналогичных зависимостей коэффициента пропускания толстого ГФК приведены на рис. 8-9.



Рис. 8. Зависимость коэффициента пропускания (Т) от



Рис. 9. Зависимость коэффициента пропускания (T) от длины волны (λ) и диаметра глобул (D) для ГФК с учетом пористости глобул (Δη = 0.45)

## 3 этап. Разработка экспериментальной установки и проведение практических исследований оптических характеристик ГФК.

Для проверки полученных на этапе математического моделирования зависимостей коэффициента отражения и пропускания от пористости, длины волны и диаметра глобул ГФК была разработана экспериментальная установка. Принципиальная схема приведена на рис. 8.



Рис. 10. Схема установки для замера коэффициента отражения света:

1 – источник монохроматического излучения (лазер); 2 – стеклянная пластина; 3 – фотодетектор; 4 – исследуемый образец ГФК

Использованное оборудование: лазеры (1) Green Dragon 500mW (500 мВ, 532 нм) и Red Dragon 2000 (2000 мВ, 650 нм); стеклянная пластина (2) расположенная таким образом, что угол падения (α) луча лазера составляет 45°; устройство для регистрации фотонов (3) на основе вентильного фотоэффекта; образец (4) ГФК на опаловой основе с диаметром глобул 290 нм и пористостью 0.26 (изготовитель: ЦНИТИ "Техномаш").

Фотография установки приведена на рис. 9.



Рис. 11. Фотография экспериментальной установки

Данные для расчета коэффициента преломления (n<sub>c</sub>) стеклянной пластины были установлены экспериментально и с использованием закона Снеллиуса рассчитаны по формуле:

$$n_{c} = \sqrt{1 + \left(\frac{d}{b}\right)^{2}} \sin(\alpha), \qquad (9)$$

где d – толщина стеклянной пластины (1.2 мм  $\pm$  0.5 мм); b – расстояние между нормалью, проведенной в место входа луча в пластину и нормалью, проведенной в место выхода луча из пластины (1.5 мм  $\pm$  0.5 мм);  $\alpha$  – угол падения луча лазера на стеклянную пластинку (80°  $\pm$  1°). В итоге была получена следующая оценка для показателя преломления:

$$n_c \approx 1.57 \pm 0.01$$

Для расчета экспериментального коэффициента отражения образца  $(R_3)$  ГФК, необходимо знать коэффициент отражения стекла  $(R_c)$ . Он выводится с использованием формул Френеля для s- и p-поляризаций света при угле падения луча лазера на стеклянную пластинку в 45°:

$$r_{s} \coloneqq \frac{\sqrt{1.5^{2} - \sin^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)} - \cos^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{1.5^{2} - \sin^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)} + \cos^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)}}$$

$$r_{p} \coloneqq r_{s} \frac{\cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\sqrt{1.5^{2} - \sin^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)} - \sin^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)}{\cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\sqrt{1.5^{2} - \sin^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)} + \sin^{2}\left(\frac{\pi}{4}\right)}}$$

$$(10)$$

В результате, коэффициент отражения может быть найден как корень квадратный из суммы амплитудных коэффициентов в четвертой степени:

$$R_{c} = \sqrt{|r_{s}|^{4} + |r_{p}|^{4}} \approx 0.20$$
 (11)

В ходе экспериментов были проведены замеры уровня освещенности на месте нахождения образца ГФК (E<sub>v1</sub>) и отраженного от него света (E<sub>v2</sub>) для разной длины волны (532 и 650 нм). Таким образом, коэффициент отражения образца (R<sub>3</sub>) по следующей формуле:

$$\mathbf{R}_{\mathfrak{H}} = \frac{\mathbf{E}_{\mathbf{v}2}}{\mathbf{E}_{\mathbf{v}1} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{c}}} \tag{12}$$

Расчет среднего значения R<sub>э</sub> на основе экспериментальных данных приведен в таблице 1.

	$\lambda = 532$ нм		$\lambda = 650$ нм	
N⁰	Ev1	Ev2	Ev1	Ev2
1	457	0,4	434	5,80
2	461	0,3	431	7,2
3	467	0,4	411	6,1
4	473	0,3	406	6
5	485	0,4	401	6
Среднее	468,6	0,36	416,6	6,22
Rэ	0,004		0,075	

Таблица 1. Расчет среднего значения экспериментального коэффициента отражения R<sub>э</sub>

Погрешность расчета среднего значения  $R_{9}$  составляет  $\pm 10\%$ .

4 этап. Сопоставление результатов эксперимента с предсказаниями математического моделирования.

Ниже представлено сравнение теоретических и экспериментальных результатов с помощью графических зависимостей:



Рис. 12. Сравнение теории и эксперимента

Экспериментальные точки нанесены на функцию Гаусса.

На основании данных, отображенных на рис. 12 можно сделать следующие обобщения.

- Положение максимума коэффициента отражения в теории и эксперименте наилучшим образом соответствует значению пористости, равному 0.26.
- 2. Коэффициент отражения в эксперименте оказался меньше расчетного. Это можно объяснить тем, что качество поверхности образца ГФК отличается от расчетного и проведенное сравнение указывает на заметное количество поверхностных дефектов, которые размывают брэгговский резонанс (максимум отражения).
- Внутренние поры глобул, по видимому, не оказывают существенного влияния на брэгговское отражение.

## выводы

- Проведена трехмерная визуализация ячейки ГФК и выбранных сечений с помощью программной системы трехмерной графики Autodesk 3ds Max.
- 2. На основе анализа полученных сечений построены их математические модели в системе компьютерной алгебры Maple и, на основе литературных данных, построена программа для расчета зависимости коэффициента отражения от пористости, длины волны и диаметра глобулы при нормальном падении света:
- Разработана экспериментальная установка для измерения коэффициента отражения ГФК и получены данные, подтверждающие выведенную теоретическую зависимость.
- 4. На основе сравнения расчета и эксперимента получена методика анализа качества поверхности реального ГФК через известный коэффициент отражения сплошной среды.

## ПЕРСПЕКТИВЫ ДАЛЬНЕЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Дальнейшим направлением исследований в этой области является тестирование образцов ГФК с различной структурой с целью оценки качества их поверхности и дополнительной проверки математической модели.

Комплексное решение поставленной задачи позволит с высокой точностью рассчитывать значения коэффициентов отражения и пропускания для получения ГФК с необходимыми параметрами. Это обеспечит получение монохроматического излучения с меньшей шириной спектра излучения в системах со светодиодами и позволит создавать зеркала с избирательным отражением света.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] E. Yablonovitch, «Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics,» *Phys. Rev. Lett.*, т. 58, № 20, pp. 2059-2062, 18 Май 1987.
- [2] E. Yalonovitch и T. J. Gmitter, «Photonic Band Structure: The Face-Centered-Cubic Case Employing Nonspherical Atoms,» *Phys. Rev. Lett.*, т. 67, № 17, pp. 2295-2298, 21 Октябрь 1991.
- [3] В. С. Горелик, «Оптика глобулярных фотонных кристаллов,» *Квантовая* Электроника, т. 37, № 5, р. 410, Май 2007.
- [4] Ю. Я. Голубь, В. С. Горелик, Л. Злобина, В. Моисеенко и П. Свербиль, Необратимые процессы в природе и технике, А. Морозов и В. Горелик, Ред., Москва: ФИАН, 2005.
- [5] Г. Мякишев и А. Синяков, Физика. Оптика. Квантовая физика. 11класс., 2 ред., Дрофа, 2002, р. 56.
- [6] Л. Д. Ландау, А. И. Ахиезер и Е. М. Лившиц, Курс общей физики. Механика и молекулярная физика, КДУ, 2009, р. 126.
- [7] Н. И. Юрасов и И. И. Юрасова, «Влияние углеродной пленочной наноструктуры на коэффициент отражения от фотонного кристалла из искусственного опала,» *Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана*, № 44, pp. 30-35, 2012.