

СПЕКТРОСКОПИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 535.012.2:535.361:520.362

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА  
С ДЕФЕКТОМ ИЗ НАНОКОМПОЗИТА  
С УЧЕТОМ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ

© 2015 г. С. Я. Ветров<sup>\*,\*\*</sup>, П. С. Панкин<sup>\*</sup>, И. В. Тимофеев<sup>\*\*,\*\*\*</sup>

<sup>\*</sup> Сибирский федеральный университет, Институт инженерной физики и радиоэлектроники,  
660041 Красноярск, Россия

<sup>\*\*</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

<sup>\*\*\*</sup> Сибирский федеральный университет, Лаборатория нелинейной оптики и спектроскопии,  
660041 Красноярск, Россия

E-mail: ppankin@sfu-kras.ru

Поступила в редакцию 08.01.2015 г.

В окончательной редакции 27.02.2015 г.

Исследованы спектральные свойства одномерного фотонного кристалла с дефектом структуры, в качестве которого рассмотрен слой изотропного нанокompозита, внедренного между двумя многослойными диэлектрическими зеркалами. Нанокompозит состоит из диспергированных в прозрачной матрице наночастиц золота сферической формы и характеризуется эффективной резонансной диэлектрической проницаемостью. Исследована зависимость спектров пропускания и поглощения от размера и концентрации наночастиц. Показано, что в спектре пропускания наряду с запрещенной зоной, обусловленной брэгговской дифракцией света, дополнительно возникает полоса непропускания, обусловленная поглощением нанокompозита вблизи резонансной частоты.

DOI: 10.7868/S0030403415070284

## ВВЕДЕНИЕ

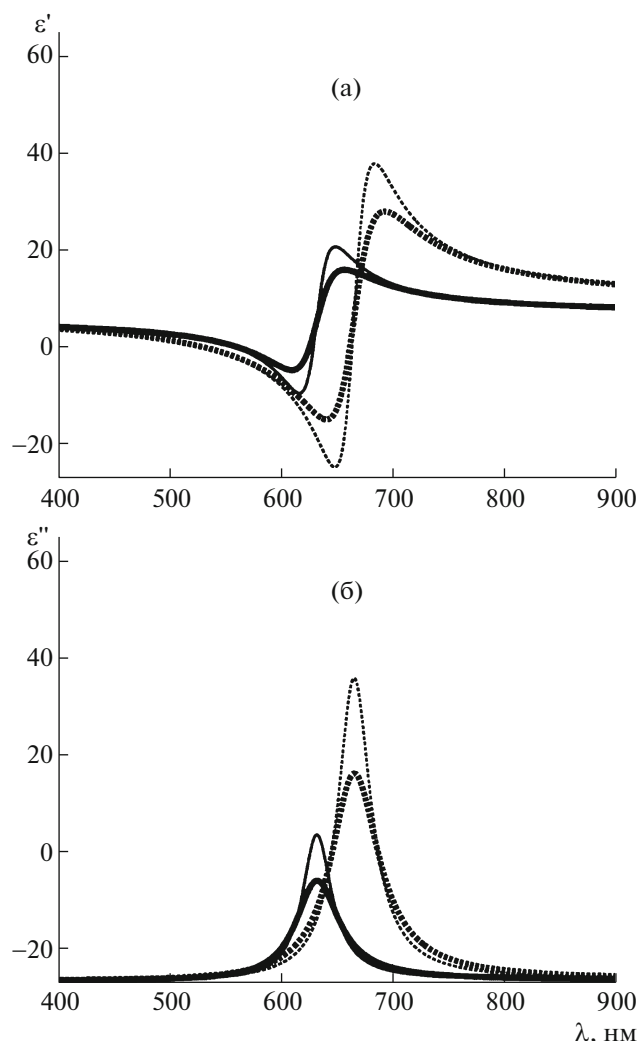
Фотонные кристаллы (ФК) — это метаматериалы с периодически меняющимся в пространстве показателем преломления, с периодом, допускающим брэгговскую дифракцию света. Важным свойством ФК является локализация электромагнитных волн на дефектах структуры. В этом случае в запрещенной зоне (ЗЗ) ФК появляются дополнительные разрешенные уровни, соответствующие локализованным дефектным модам. В случае одномерного ФК дефектный слой, внедренный между двумя многослойными диэлектрическими зеркалами, проявляет себя как структура типа микрорезонатора Фабри-Перо, а локализованные дефектные моды суть собственные моды микрорезонатора. Положением и коэффициентом пропускания дефектных мод, а также формой и размером ЗЗ можно эффективно управлять, варьируя геометрические и структурные параметры ФК. На основе ФК с дефектными модами созданы новые типы фотонно-кристаллических волноводов, нанорезонаторы с высокой добротностью и низкопороговые лазеры, предложены способы повышения эффективности нелинейно-оптических процессов [1, 2].

Новые способы управления светом возникают, если в качестве дефектного слоя в одномерном ФК использовать изотропный слой нанокomp-

позита (НК), состоящий из диспергированных в прозрачной матрице металлических наноразмерных включений сферической формы [3–6]. В [7] получены и исследованы экспериментально и теоретически нанокompозитные пленки на основе  $\text{SiO}_2$  и  $\text{TiO}_2$  с включением золотых сферических наночастиц. Показано, что такие нанокompозиты характеризуются эффективной резонансной диэлектрической проницаемостью, которая описывается формулой Максвелла Гарнетта [8]. Отметим, что пленки  $\text{SiO}_2$  и  $\text{TiO}_2$  с диспергированными в них золотыми наночастицами вызывают повышенный интерес как фотовольтаические материалы [7, 9]. В настоящей работе изучаются спектральные свойства одномерного ФК с дефектным слоем, в качестве которого рассматривается нанокompозитная пленка на основе  $\text{TiO}_2$  [7], с учетом размерных эффектов в золотых наночастицах.

## ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Рассматриваемая нами ФК-структура представляет собой слоистую среду с резонансным дефектным слоем нанокompозита. Дефектный НК-слой толщиной  $W_d$  состоит из золотых наночастиц сферической формы, равномерно распределенных в диэлектрической матрице диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ ) с диэлектрической проницаемостью (ДП)  $\epsilon_d = 4.57$ .



**Рис. 1.** Действительная  $\epsilon'$  (а) и мнимая  $\epsilon''$  (б) части эффективной диэлектрической проницаемости нанокompозита при факторе заполнения  $f = 0.13$  (сплошная линия) и  $f = 0.24$  (пунктир). Тонкими линиями показана ДП без учета размера частиц, толстыми — при радиусе частиц  $r = 20$  нм.

В качестве материала наночастиц в нашей работе, как и в [7], используется золото — один из распространенных материалов для плазмоники. Коэффициент затухания для электронов в модели Друде–Зоммерфельда для золота на порядок отличается от серебра, используемого в работах [3–6].

В качестве чередующихся слоев, из которых составлена элементарная ячейка ФК, рассматриваются слой двуокиси циркония ( $ZrO_2$ ) с ДП  $\epsilon_a = 4.16$  и двуокиси кремния ( $SiO_2$ ) с ДП  $\epsilon_b = 2.10$ . Толщины слоев равны соответственно  $W_a = 50$  нм и  $W_b = 74$  нм. ФК-структура помещена в среду с ДП, равной единице (воздух), и состоит из  $N = 19$  слоев, включая дефектный слой в центре симметричной структуры.

Эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозита определяется формулой

Максвелла Гарнетта, широко применяемой при рассмотрении матричных сред, когда в материале матрицы диспергированы изолированные металлические включения малой объемной доли:

$$\epsilon = \epsilon_d \left[ 1 + \frac{3f(\epsilon_m - \epsilon_d)}{3\epsilon_d + (1-f)(\epsilon_m - \epsilon_d)} \right], \quad (1)$$

где  $f$  — фактор заполнения, т.е. доля наночастиц в матрице,  $\epsilon_d$  и  $\epsilon_m$  — диэлектрические проницаемости соответственно матрицы и металла, из которого изготовлены наночастицы. Модель Максвелла Гарнетта предполагает квазистатическое приближение. Ее главные особенности следующие: нанокompозитный слой является электродинамически изотропным; включения в диэлектрической матрице нанокompозита разделены расстояниями, много большими, чем их характерный размер; характерный размер включений мал по сравнению с длиной волны света в эффективной среде. Предсказания модели эффективной среды Максвелла Гарнетта являются достоверными для умеренной доли включений с фактором заполнения  $f \ll 1$  [10].

Диэлектрическую проницаемость металла, из которого изготовлены наночастицы, найдем, используя приближение Друде–Зоммерфельда:

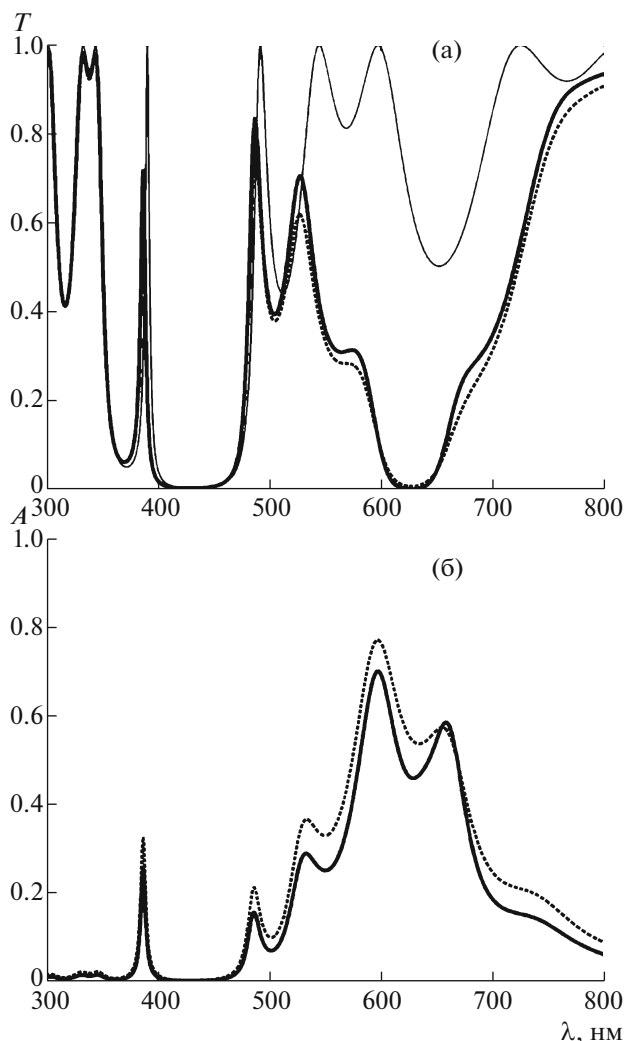
$$\epsilon_m(\omega) = \epsilon_0 - \frac{\omega_p^2}{\omega \left( \omega + i \left( \gamma + A \frac{v_F}{r} \right) \right)}, \quad (2)$$

где  $\epsilon_0$  — постоянная, учитывающая вклады межзонных переходов связанных электронов,  $\omega_p$  — плазменная частота,  $\gamma$  — коэффициент затухания (величина, обратная времени релаксации электронов),  $v_F$  — скорость Ферми,  $r$  — радиус наночастицы,  $A$  — эффективный параметр, описывающий степень потери когерентности при рассеянии электрона на поверхности. Для золота  $\epsilon_0 = 9.84$ ,  $\omega_p = 9$  эВ,  $\gamma = 0.1$  эВ,  $v_F = 1.4 \times 10^8$  см/с,  $A = 1$  [11, 12]. На рис. 1 представлены действительные и мнимые части эффективной ДП НК, вычисленные по формуле (1) как функции длины волны падающего света. ДП представлена для двух значений фактора заполнения  $f$ . Тонкими линиями выделены ДП, вычисленные при формальном стремлении радиуса  $r$  частиц к бесконечности (приближение неограниченного материала в формуле Друде–Зоммерфельда (2)).

Из рис. 1 видно, что величина действительной и мнимой частей ДП нанокompозита, а также положение резонансной частоты существенным образом зависят от действительного размера и концентрации наночастиц в НК.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

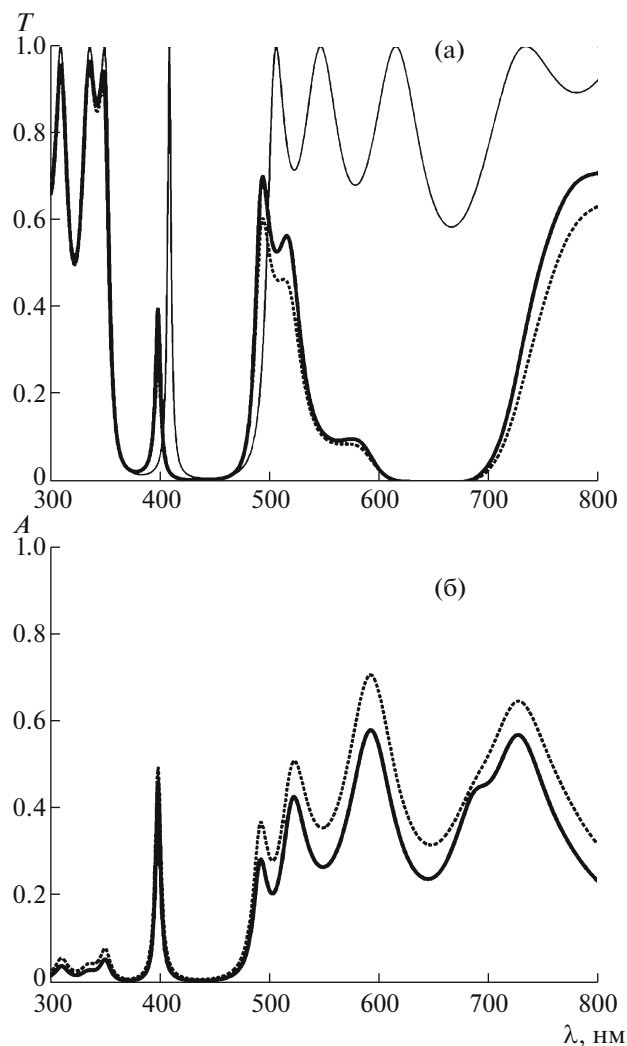
Спектры пропускания и поглощения структуры были найдены методом матрицы переноса [13]. На рис. 2 представлены спектры пропускания и поглощения системы при толщине дефект-



**Рис. 2.** Коэффициент пропускания  $T$  (а) и поглощения  $A$  (б) системы как функция длины волны падающего света. Толщина дефекта  $W_d = 70$  нм. Параметры:  $f = 0$  (тонкая сплошная линия);  $f = 0.13$ , без учета размера (толстая сплошная линия);  $f = 0.13$ ,  $r = 20$  нм (пунктир).

ного слоя  $W_d = 70$  нм и факторе заполнения  $f = 0.13$  [7]. Тонкой линией показан затравочный спектр ФК, включающий дефектный слой из диоксида титана, не содержащий наночастиц.

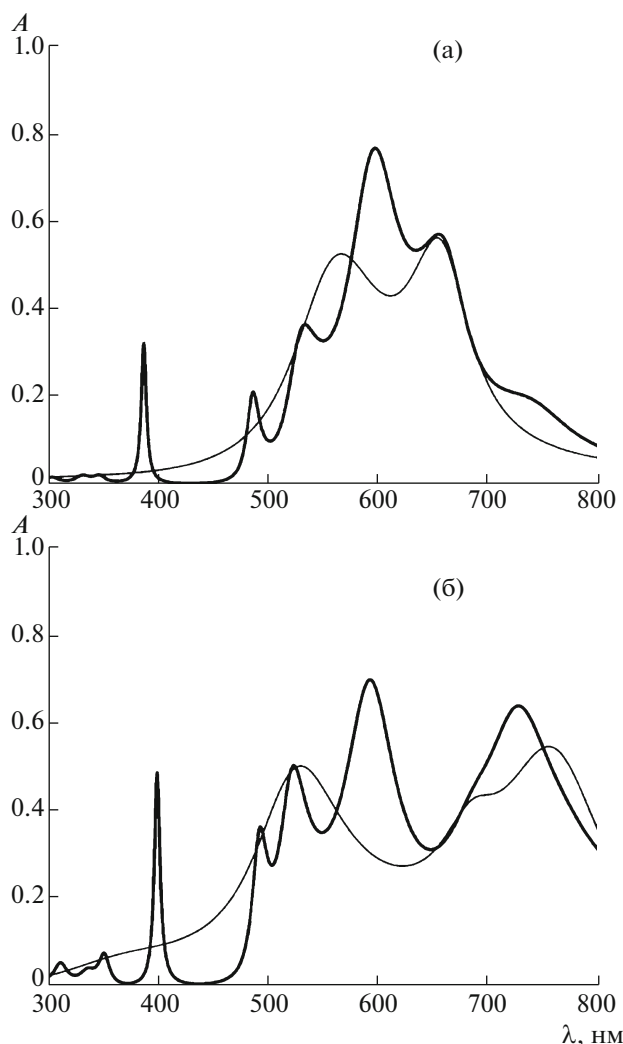
Из рис. 2а видно, что на длине волны, соответствующей резонансной частоте НК (рис. 1), появляется дополнительная полоса непропускания в спектре пропускания. Это связано с тем, что золото в модели Друде–Зоммерфельда (2) обладает большим коэффициентом затухания, поэтому появление этой полосы – эффект поглощения на резонансной плазмонной частоте (рис. 2б) в отличие от исходной ЗЗ затравочного спектра, природа которой связана с брэгговской дифракцией света. Таким образом, в спектре пропускания наряду с ЗЗ, обусловленной брэгговской дифракцией света, возникает полоса непропускания, обуслов-



**Рис. 3.** Коэффициент пропускания  $T$  (а) и поглощения  $A$  (б) системы как функция длины волны падающего света. Толщина дефекта  $W_d = 90$  нм. Параметры:  $f = 0$  (тонкая сплошная линия);  $f = 0.24$ , без учета размера (толстая сплошная линия);  $f = 0.24$ ,  $r = 20$  нм (пунктир).

ленная поглощением нанокompозита вблизи резонансной частоты. Также наблюдаются уменьшение пропускания, обусловленное поглощением энергии собственной моды микрорезонатора, и небольшой частотный сдвиг для дефектного пика в брэгговской ЗЗ при введении наночастиц в НК. При учете размера наночастиц наблюдается уменьшение пропускания системы. Это связано с тем, что величина ДП НК уменьшается при учете размерных эффектов (рис. 1).

На рис. 3 представлены спектры пропускания и поглощения системы при толщине дефектного слоя  $W_d = 90$  нм и факторе заполнения  $f = 0.24$  [7]. Тонкой линией показан затравочный спектр ФК, включающий дефектный слой из диоксида титана, не содержащий наночастиц.



**Рис. 4.** Коэффициент поглощения  $A$  пленки нанокompозита (тонкая линия) и фотонного кристалла с дефектом из нанокompозита (толстая линия) как функция длины волны падающего света. Толщина пленки  $W_d = 70$  нм (а) и 90 нм (б).

На рис. 3а также видна полоса непропускания, соответствующая поглощению в НК на резонансной частоте ДП НК, ширина этой полосы при заданной толщине дефектного слоя  $W_d = 90$  нм увеличилась по сравнению с полосой на рис. 2а, при этом изменилась ширина полосы пропускания между брэгговской ЗЗ и полосой непропускания, обусловленной поглощением. Это может быть полезно при создании широкополосных светофильтров на базе такой структуры. Эффект уменьшения пропускания для дефектного пика в брэгговской ЗЗ, а также его частотный сдвиг в случае увеличения фактора заполнения проявляются интенсивнее. При учете размера наночастиц происходит уменьшение пропускания аналогично случаю рис. 2а.

На рис. 4 представлены спектры поглощения одной пленки нанокompозита и при внедрении ее в ФК-структуру.

Из рисунка видно, что при введении нанокompозита в фотонный кристалл наблюдается увеличение максимума поглощения для отдельных интервалов частот, что может быть полезно для нужд фотовольтаики.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показана возможность качественного изменения спектральных характеристик одномерного фотонного кристалла при помощи дефектного слоя нанокompозита, допированного золотыми наночастицами. Спектры пропускания и поглощения существенно образом зависят от концентрации наночастиц в НК, что может быть полезно при создании широкополосных светофильтров на базе таких структур. Характерно, что в спектре пропускания наряду с брэгговской ЗЗ возникает полоса непропускания, обусловленная поглощением нанокompозита вблизи резонансной частоты. При учете размера частиц происходит модификация спектра, обусловленная эффектами диссипации — затуханием для неограниченного объема металла и процессами рассеяния электронов на поверхности наночастицы. Применение фотонно-кристаллического резонатора для увеличения поглощения света в подобном нанокompозите может быть полезно для нужд фотовольтаики.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ Сибирскому федеральному университету на выполнение НИР в 2014 г. (Задание № 3.1276.2014/К), при поддержке РФФИ (грант № 14-02-31248) и совместного проекта СО РАН и Министерства науки и технологий Тайваня.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Joannopoulos J.D., Johnson S.G., Winn J.N., Meade R.D.* Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. Princeton: Princeton University Press, 2008. 286 p.
2. *Маньязов Б.И.* Когерентная и нелинейная оптика фотонных кристаллов. М.: Физматлит, 2009. 149 с.
3. *Ветров С.Я., Авдеева А.Ю., Тимофеев И.В.* // ЖЭТФ. 2011. Т. 140. № 5(11). С. 871.
4. *Ветров С.Я., Бикбаев Р.Г., Тимофеев И.В.* // ЖЭТФ. 2013. Т. 144. № 6(12). С. 1129.
5. *Моисеев С.Г., Остаточников В.А., Семенов Д.И.* // Квант. электрон. 2012. Т. 42. № 6. С. 557.
6. *Моисеев С.Г., Остаточников В.А., Семенов Д.И.* // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. № 6. С. 413.
7. *Pedruza E. et al.* // Adv. Funct. Mater. 2011. V. 21. P. 3502.
8. *Maxwell Garnett J.C.* // Phil. Trans. R. Soc. Lond. 1904. V. 203. P. 385.
9. *Ferry V.E., Munday J.N., Atwater H.A.* // Adv. Funct. Mater. 2010. V. 22. P. 4794.
10. *Моисеев С.Г.* // Опт. и спектр. 2011. Т. 111. № 2. С. 264.
11. *Климов В.В.* Наноплазмоника. М.: Физматлит, 2009. 480 с.
12. *Doyle W.T.* // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. № 14. P. 9852.
13. *Yeh P.* // J. Opt. Soc. Amer. 1979. V. 69. № 5. P. 742.