

## МНОГОВОЛНОВАЯ БРЭГГОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ И ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В 3D ФОТОННОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

В. Г. Федотов<sup>1</sup>, А. В. Селькин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургского государственного университета, физический факультет

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской Академии наук

vladimir.fedotov@gmail.com

PACS 42.70.Qs, 42.25.Fx, 78.40-q

С использованием теории динамической дифракции, обобщённой на случай высокого диэлектрического контраста исследованы механизмы формирования спектров брэгговского отражения света от тонких плёнок фотонных кристаллов с симметрией решётки опала. Показано, что в условиях многоволновой дифракции в спектрах фотоннокристаллических плёнок с достаточно высокой степенью структурного совершенства могут проявляться дополнительные короткопериодные осцилляции коэффициента отражения (интерференционная “гребёнка”). На основании сопоставления формы полосы брэгговского отражения света с энергетическим спектром собственных электромагнитных мод фотонного кристалла делается вывод о том, что дополнительная структура в спектрах возникает вследствие интерференции добавочных мод с низкой групповой скоростью.

**Ключевые слова:** фотонные кристаллы, многоволновая дифракция, брэгговское отражение.

### 1. Введение

Фотонные кристаллы (ФК) – пространственно-периодические твердотельные структуры, диэлектрическая проницаемость которых промодулирована с периодом, сравнимым с длиной волны света. В настоящее время такие структуры привлекают повышенный интерес, связанный, в первую очередь, с перспективами их практического применения в нанофотонике и оптоэлектронике в качестве элементов эффективного управления световыми потоками [1 – 3], а также с возможностью изучения новых оптических явлений, имеющих фундаментальное научное значение [4].

Среди наиболее ярких оптических явлений, связанных с ФК, можно выделить многоволновую брэгговскую дифракцию (МБД) света [5], которая проявляется в виде специфической дублетной структуры полосы брэгговского отражения [6, 7]. Такая структура обусловлена тем, что в условиях МБД несколько семейств непараллельных друг другу кристаллических плоскостей, характеризующихся несовпадающими наборами индексов Миллера, оказываются вовлечёнными в брэгговское отражение на одной и той же частоте.

В настоящей работе представлены результаты исследования механизмов формирования спектров брэгговского отражения света от плёнок трёхмерных (3D) опалоподобных ФК, обладающих симметрией кубической гранецентрированной решётки, с учётом МБД и новых интерференционных эффектов, обусловленных многократным отражением собственных электромагнитных мод ФК от границ раздела.

## 2. Результаты и обсуждение

Основное внимание в настоящей работе уделено анализу сложной формы спектрального контура брэгговского отражения света от опалоподобной ФК плёнки с латеральными поверхностями (границами раздела), параллельными кристаллическим плоскостям (111). Спектры отражения рассчитывались в рамках теории динамической дифракции с использованием в явном виде дисперсионных кривых собственных электромагнитных ТЕ-мод ФК, определяемых дисперсионным уравнением

$$K^2 - k_0^2 \varepsilon_0 = \frac{|\varepsilon_{111}|^2 k_0^4}{(K - G_{111})^2 - k_0^2 \varepsilon_0} + \frac{|\varepsilon_{11\bar{1}}|^2 k_0^4}{(K - G_{11\bar{1}})^2 - k_0^2 \varepsilon_0}, \quad (1)$$

в приближениях трёхволнового ( $\varepsilon_{11\bar{1}} \neq 0$ ) и двухволнового ( $\varepsilon_{11\bar{1}} = 0$ ) смешивания [8, 9]. В уравнении (1)  $k_0 = \omega/c = 2\pi/\lambda$  ( $\omega$  – частота,  $c$  – скорость света,  $\lambda$  – длина волны света в вакууме),  $\mathbf{K}$  – волновой вектор,  $\varepsilon_0$  – средняя диэлектрическая проницаемость ФК среды,  $G_{111}$  и  $G_{11\bar{1}}$  – векторы обратной решетки, порождаемые кристаллическими плоскостями (111) и (11 $\bar{1}$ ),  $\varepsilon_{111}$  и  $\varepsilon_{11\bar{1}}$  – амплитуды разложения пространственно-периодической диэлектрической функции ФК  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 + \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \varepsilon_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r})$  в ряд Фурье по векторам обратной решётки  $\mathbf{G}$

( $\varepsilon_{111}$  и  $\varepsilon_{11\bar{1}}$  определяются векторами  $G_{111}$  и  $G_{11\bar{1}}$ , соответственно). Такой подход позволяет проводить непосредственное сопоставление контура отражения с энергетическим спектром собственных состояний ФК и обеспечивает физически ясную интерпретацию наблюдаемых спектральных особенностей.

В качестве модельного объекта рассматривалась пленка идеального опалоподобного ФК, состоящего из плотноупакованных сфер полистирола (диэлектрическая постоянная  $\varepsilon_a = 2.522$ ) диаметром  $a_{00} = 300$  нм, помещённых в вакуум (внешняя среда “ $v$ ” и межчастичное пространство “ $b$ ” характеризуются одним и тем же значением диэлектрической постоянной  $\varepsilon_v = \varepsilon_b = 1$ ). Толщина плёнки  $L = a_{00} \left(1 + \sqrt{2/3}(N_{ml} - 1)\right)$  задавалась числом монослоёв  $N_{ml}$ . Численные расчёты проведены для геометрии отражения  $s$ -поляризованного света, в которой плоскость падения была ориентирована перпендикулярно семейству наклонных к отражающей поверхности ФК кристаллических плоскостей (11 $\bar{1}$ ) и (002). Именно в такой геометрии внутри ФК возбуждаются состояния, описываемые дисперсионным уравнением (1). Имея в виду, что резонансные условия МБД выполняются при определённом значении  $\theta = \theta_*$  угла падения света [9], в расчётах использовался угол  $\theta = 57^\circ$ , близкий к  $\theta_* = 57.35^\circ$  для рассматриваемой модельной ситуации.

Модель трёхволнового смешивания соответствует 3D случаю и учитывает одновременную дифракцию света на системах кристаллических плоскостей (111) и (11 $\bar{1}$ ) (дополнительный вклад в дифракцию на плоскостях (002) оказывается пренебрежимо малым, поскольку для соответствующих таким плоскостям фурье-амплитуд  $|\varepsilon_{002}| \ll |\varepsilon_{111}|, |\varepsilon_{11\bar{1}}|$ ). Спектры брэгговского отражения для этого случая изображены на рис. 1а сплошными кривыми. Штриховые кривые относятся к модели двухволнового смешивания (одномерный (1D) случай) и описывают дифракцию света только на одной системе кристаллических плоскостей (111). Из сравнения результатов, полученных с использованием двух обсуждаемых моделей видно, что рассчитанные спектры качественно отличаются друг от друга в спектральном диапазоне фотонной запрещённой зоны (ФЗЗ), где достигается максимальное значение коэффициента отражения. Вне резонансного диапазона ФЗЗ наблюдаются классические интерференционные полосы Фабри-Перо.

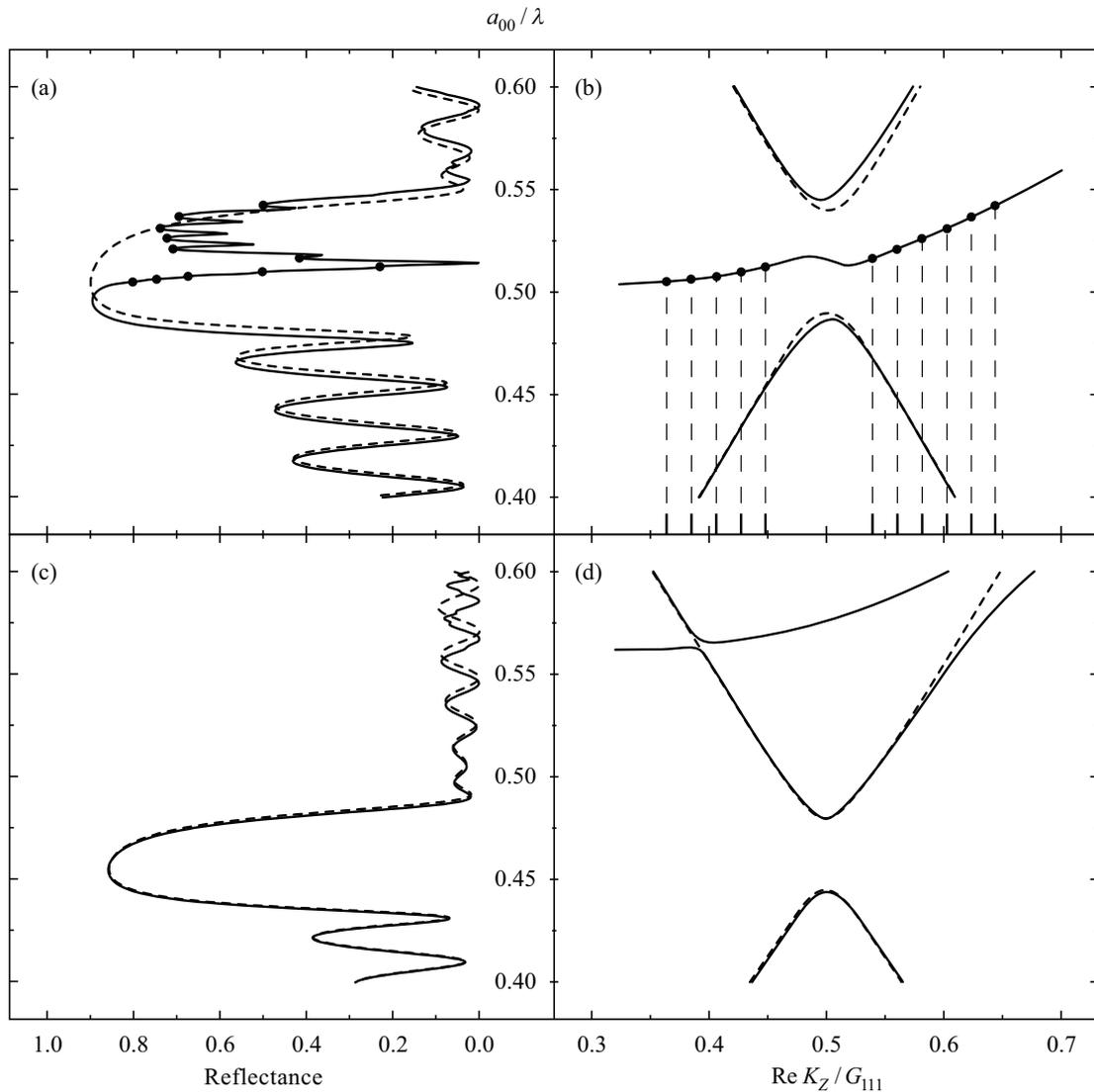


РИС. 1. Рассчитанные спектры брэгговского отражения света (а, с) и соответствующие энергетические спектры собственных мод электромагнитного поля (b, d) для фотоннокристаллической плёнки толщиной 20 монослоёв, состоящих из сфер полистирола диаметром  $a_{00} = 300$  нм для углов падения света  $\theta = 57^\circ$  (а, b) и  $\theta = 37^\circ$  (с, d). Штриховые кривые – для дифракции света только на одной системе кристаллических плоскостей (111). Сплошные кривые – для дифракции света одновременно на двух системах кристаллических плоскостей (111) и  $(11\bar{1})$ .  $\lambda$  – длина волны света в вакууме,  $G_{111}$  – минимальная длина вектора обратной решётки в направлении [111] (ось Z)

Расчёты, выполненные в рамках 3D модели дифракции, показывают, что в резонансном диапазоне, наряду с глубоким провалом в контуре отражения, возникает дополнительная короткопериодная (по длине волны) интерференционная структура (интерференционная “гребёнка”). Следует подчеркнуть, что такая “гребёнка” может наблюдаться для плёночных образцов достаточно высокого структурного совершенства и с малыми диссипативными потерями. С ростом диссипативных потерь и включением дополнительных небрэгговских каналов рассеяния (что феноменологически учитывается введением в расчёт мнимой добавки  $i\varepsilon''_0$  к средней диэлектрической постоянной ФК) резкие спектральные особенности сглаживаются, а короткопериодные осцилляции в полосе брэгговского отражения исчезают (рис. 2).

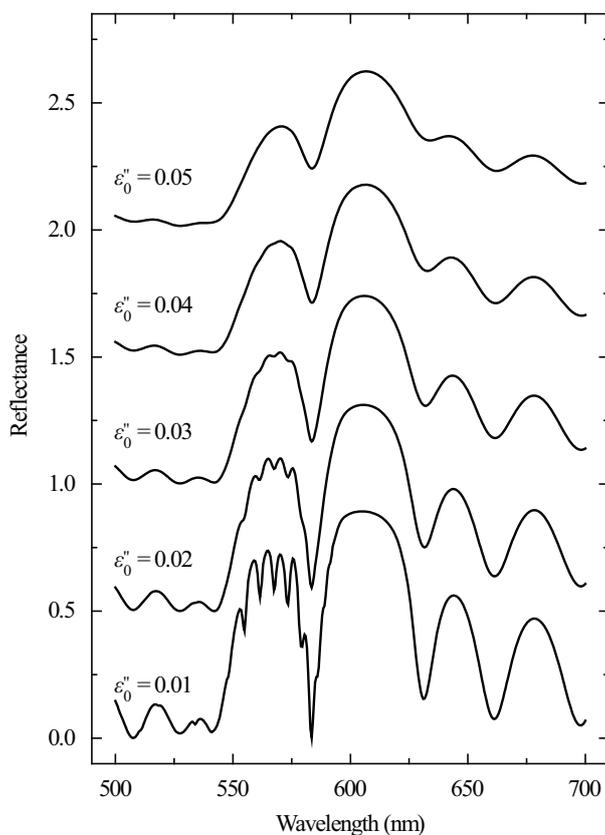


РИС. 2. Рассчитанные спектры брэгговского отражения света от фотоннокристаллической плёнки толщиной 20 монослоёв, собранной из сфер полистирола диаметром 300 нм для различных значений мнимой части  $i\varepsilon''_0$  средней диэлектрической проницаемости структуры, угол падения света  $\theta = 57^\circ$ . Для наглядности спектры смещены относительно друг друга по вертикальной оси

Физическая причина возникновения глубокого провала и короткопериодных осцилляций в резонансной области спектра отражения становится понятной при сопоставлении таких спектров со спектром собственных мод в области ФЗЗ. На рис. 1 сравниваются между собой спектры брэгговского отражения (а, с) и соответствующие им дисперсионные кривые собственных мод ФК (b, d). Как видим, и основной провал и короткопериодные осцилляции формируются в режиме многоволновой дифракции ( $\theta = 57^\circ$ , рис. 1a) в той области спектра в окрестности края первой зоны Бриллюэна ( $ReK_Z \approx G_{111}/2$ ), где возбуждается “медленная” добавочная мода, по своему энергетическому положению попадающая в основную стоп-зону ФК. Для угла падения света  $\theta = 37^\circ$  (рис. 1с), при котором резонансные условия

МБД не выполняются (добавочная мода оказывается за пределами основной стоп-зоны), как провал, так и интерференционная “гребёнка” отсутствуют.

Как отмечалось ранее [8, 9], именно эта добавочная мода ответственна за формирование глубокого провала в полосе брэгговского отражения, который наблюдается экспериментально [5 – 7] при наклонном падении света на поверхность ФК. С другой стороны, из рис. 1 видим (метки в виде точек на спектральных кривых), что конечная толщина ФК плёнки приводит к пространственному квантованию  $\Delta K_Z = \pi/L$  добавочной моды. Тогда соответствующий период осцилляций  $\Delta(a_{00}/\lambda)$  может быть оценён с помощью соотношения

$$\Delta(a_{00}/\lambda) = \frac{V_g a_{00}}{2Lc}, \quad (2)$$

где  $V_g = \partial\omega/\partial K_z$  – проекция на ось  $Z$  (нормаль к поверхности) групповой скорости распространяющейся волны. В спектральной области вдали от брэгговского резонанса формируется классическая интерференционная структура Фабри-Перо с периодом, также задаваемым формулой (2). Однако в последнем случае  $V_g = V_{g_0} \equiv c/\sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2\theta}$  представляет собой  $Z$ -составляющую групповой скорости обычной световой волны в среде, характеризующейся средней диэлектрической постоянной  $\varepsilon_0$ . Поскольку для добавочной (“медленной”) волны в области многоволнового резонанса  $V_g \ll V_{g_0}$ , то дополнительные осцилляции имеют существенно более короткий период по сравнению с обычными осцилляциями Фабри-Перо вдали от резонанса.

Квантование добавочной моды на правом крыле  $ReK_Z > G_{111}/2$  энергетического спектра (рис. 1b) проявляется более заметно в контуре отражения по сравнению с аналогичным квантованием на левом крыле  $ReK_Z < G_{111}/2$ . Такая асимметрия в проявлении интерференционных особенностей обусловлена, с одной стороны, чрезвычайно малой групповой скоростью моды на левом крыле дисперсионной зависимости (период осцилляций мал). С другой стороны, область левого крыла соответствует резкому спаду коэффициента отражения. В результате, дополнительная интерференционная структура проявляется в виде слабозаметных ступеней на спектральном контуре отражения.

Следует отметить, что в видимой области спектра для рассматриваемого размера частиц, составляющих ФК, никакие другие моды, кроме генерируемых кристаллическими плоскостями (111) и (11 $\bar{1}$ ), не вносят заметного вклада в энергетический спектр и, как следствие, в спектр отражения. Сопоставление результатов численного моделирования, выполненного при помощи дискретизации уравнений Максвелла на сетке пространственных координат [10], с результатами, полученными в приближении трёхволнового смешивания, проводится на рис. 3. Такое сопоставление показывает, что незначительные различия между полным электродинамическим расчётом и используемым приближением наблюдаются лишь вблизи ультрафиолетового края видимой области спектра. При этом приближение трёхволнового смешивания корректно описывает как спектральные положения особенностей (пика брэгговского отражения и провала на нём), так и форму контура отражения.

### 3. Заключение

Выполненные нами исследования спектров брэгговского отражения света от 3D опалоподобных ФК плёнок указывают на важную роль как эффектов интерференции, обусловленных существованием внешних поверхностей, так и эффектов МБД. Расчёт спектров произведён в приближении трёхволнового смешивания с использованием теории динамической дифракции, обобщённой на случай высокого диэлектрического контраста (сильной пространственной модуляции диэлектрической проницаемости). На основании полного электродинамического расчёта (с использованием процедуры дискретизации уравнений

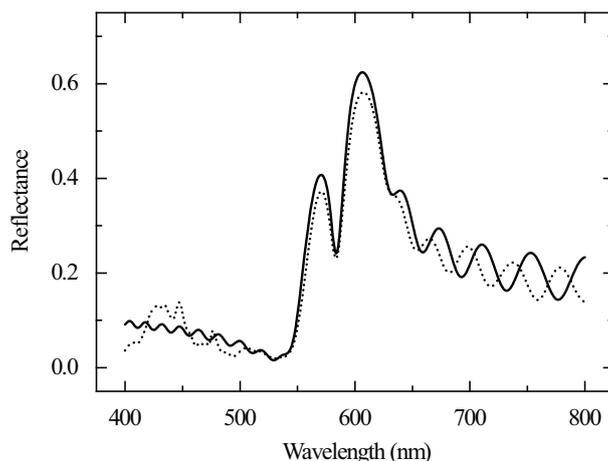


РИС. 3. Рассчитанные спектры брэгговского отражения света от фотоннокристаллической плёнки толщиной 21 монослой, собранной из сфер полистирола диаметром 300 нм, угол падения света  $\theta = 57^\circ$ . Пунктирная кривая — результат численного моделирования в рамках полного электродинамического расчёта с использованием дискретизации уравнений Максвелла. Сплошная кривая — расчёт в приближении трёхволнового смешивания (учёт дифракции света только на двух системах кристаллических плоскостей  $(111)$  и  $(11\bar{1})$ )

Максвелла при точной постановке задачи) установлено, что приближение трёхволнового смешивания правильно описывает сложную форму контура брэгговского отражения света, связанную с 3D характером дифракции.

Обнаружено существование в резонансной области спектра брэгговского отражения дополнительной короткопериодной интерференционной структуры (интерференционной “гребёнки”) и предсказана возможность экспериментального наблюдения такой структуры в ФК плёнках, обладающих высокой степенью структурного совершенства и малыми диссипативными потерями. Показано, что такая интерференционная структура обусловлена многоволновым характером дифракции света в ФК, связана с интерференцией “медленных” добавочных мод и возникает в результате их пространственного квантования.

Работа выполнена при поддержке Программы развития Санкт-Петербургского государственного университета (НИР 11.37.23.2011), Федеральной целевой программы (государственный контракт № 02.740.11.0384) и программы Отделения физических наук Российской Академии наук «Фундаментальные проблемы фотоники и физика новых оптических материалов» на 2011 год.

## Литература

- [1] Joannopoulos J.D., Johnson S.G., Winn J.N., Meade R.D. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (2nd edition). Princeton University Press, Princeton–Oxford, 2008, 286 P.
- [2] Galisteo-López J.F., Ibisate M., Sapienza R., Froufe-Pérez L.S., Blanco Á., López C. Self-Assembled Photonic Structures // *Adv. Mater.*, 2011, 23(1), 30-69.
- [3] Mizeikis V., Juodkazis S., Marcinkevicius A., Matsuo S., Misawa H. Tailoring and Characterization of Photonic Crystals // *J. Photochem. Photobiol. C*, 2001, 2, 35-69.
- [4] Sakoda K. Optical Properties of Photonic Crystals (2<sup>nd</sup> edition). Springer, Berlin–Heidelberg–New York, 2005, 253 P.
- [5] van Driel H.M., Vos W.L. Multiple Bragg Wave Coupling in Photonic Band-Gap Crystals // *Phys. Rev. B*, 2000, 62(15), 9872-9875.

- [6] Romanov S.G., Maka T., Sotomayor-Torrès C.M., Müller M., Zentel R., Cassagne D., Manzanares-Martínez J., Jouanin C. Diffraction of light from thin-film polymethylmetacrylate opaline photonic crystals // *Phys. Rev. E*, 2001, 63, 056603.
- [7] Gajiev G.M., Golubev V.G., Kurdyukov D.A., Medvedev A.V., Pevtsov A.B., Sel'kin A.V., Travnikov V.V. *Phys. Rev. B*, 2005, 72, 205115-1-205115-9.
- [8] Fedotov V.G., Sel'kin A.V., Men'shikova A.Yu., Shevchenko N.N., Yakimanskiy A.V. Resonant Multiple Diffraction of Light in Three-Dimensional Photonic Crystals // *Proc. of 17<sup>th</sup> Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology"*, Minsk, Belarus, 2009, 109-110.
- [9] Баженова А.Г., Селькин А.В., Меньшикова А.Ю., Шевченко Н.Н. Поляризационное подавление брэгговских рефлексов при отражении света от фотонных кристаллов // *ФТТ*, 2007, 49(11), 2010-2021.
- [10] Bondeson A., Rylander T., Ingelström P. *Computational Electromagnetics*. Springer, New York, 2005, 222 P.