

**Самарский филиал федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
Физического института им. П.Н. Лебедева  
Российской академии наук**

**ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет»**

**Самарский научно-образовательный центр  
по оптике и лазерной физике**

**XII Всероссийский молодежный Самарский  
конкурс-конференция научных работ  
по оптике и лазерной физике**

**(Самара, 12-15 ноября 2014 года)**

***Сборник конкурсных докладов***

Москва, 2014

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

П.С. Панкин<sup>1</sup>, С.Я. Ветров<sup>1,2</sup>, И.В. Тимофеев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Сибирский федеральный университет  
(660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79)*

<sup>2</sup>*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН  
(660036, г. Красноярск, Академгородок 50/38)  
e-mail: p.s.pankin@mail.ru*

## АННОТАЦИЯ

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 от размера и концентрации наночастиц.

## 1. 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 фотоннокристалли-

ческих волноводов, нанорезонаторы с высокой добротностью и низкороговые 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 нанокompозита (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 данной работе изучаются спектральные свойства 1Д ФК с дефектным слоем нанокompозита, полученного в [7], с учетом размерных эффектов в золотых наночастицах.

## 2. 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)  $\epsilon_a = 4.57$ . В качестве чередующихся слоев, из которых составлена элементарная ячейка ФК, рассматриваются слой двуокиси циркония ( $\text{ZrO}_2$ ) с ДП  $\epsilon_a = 4.16$  и двуокиси кремния ( $\text{SiO}_2$ ) с ДП  $\epsilon_b = 2.10$ . Толщины слоев равны соответственно  $W_a = 50$  нм и  $W_b = 74$  нм. ФК-структура помещена в среду (воздух) с ДП равной единице и состоит из  $N = 19$  слоев, включая дефектный слой в центре симметрии 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.

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,  $\gamma$  – 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,  $v_F = 1.4 \cdot 10^8$  см/с,  $A = 1$  [10].

На рисунке 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)).

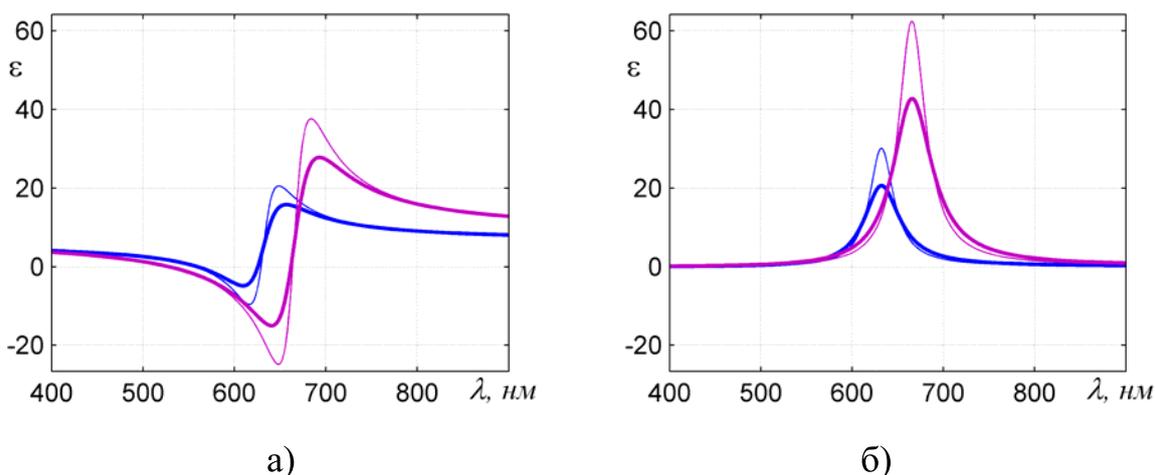


Рис. 1. Действительная (а) и мнимая (б) части диэлектрической проницаемости нанокompозита при факторе заполнения  $f = 0.13$  (синий) и  $0.24$  (пурпурный). Тонкими линиями показана ДП без учета размера частиц, толстыми – при радиусе частиц  $r = 20$  нм

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

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Спектры пропускания и поглощения структуры были найдены методом матрицы переноса [11]. На рисунке 2 представлены спектры пропускания и поглощения системы при толщине дефектного слоя  $W_d = 70$  нм, и факторе заполнения  $f = 0.13$ . Черной линией показан затравочный спектр ФК, включающий дефектный слой из диоксида титана, не содержащий наночастиц.

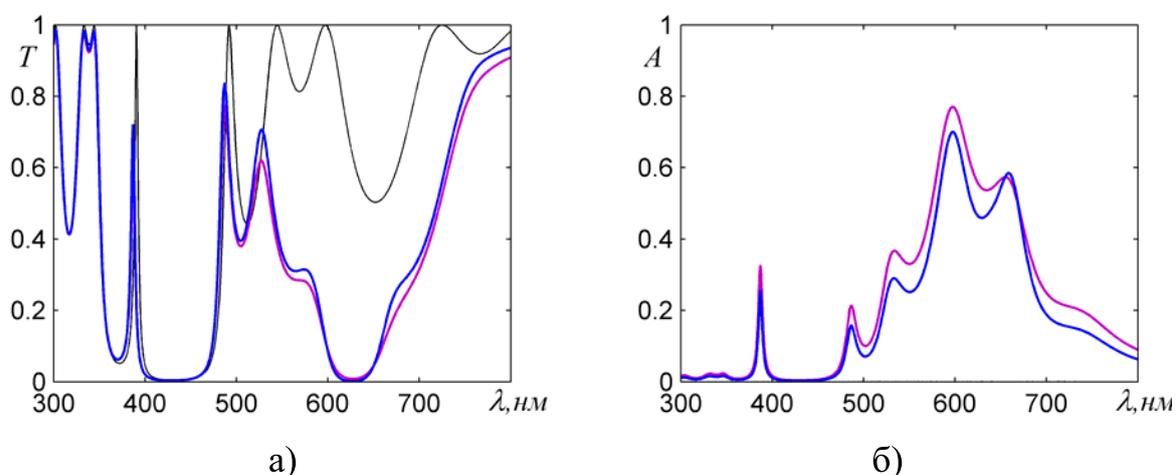


Рис. 2. Коэффициент пропускания  $T$  (а) и поглощения  $A$  (б) системы как функция длины волны падающего света. Толщина дефекта  $W_d = 70$  нм. Параметры:  $f = 0$  (черный);  $f = 0.13$ , без учета размера (синий);  $f = 0.13$ ,  $r = 20$  нм (пурпурный)

Из рисунка 2(а) видно, что на длине волны, соответствующей резонансной частоте НК (см. рисунок 1) появляется дополнительная ЗЗ в спектре пропускания. Это связано с тем, что золото в модели Друде – Зоммерфельда (2) обладает большим коэффициентом затухания, поэтому появление этой ЗЗ – эффект поглощения на резонансной частоте (см. рисунок 2(б)), в отличие от исходной ЗЗ затравочного спектра, природа которой связана с Брэгговской дифракцией света. Также наблюдается уменьшение пропускания 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 (см. рисунок 1).

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

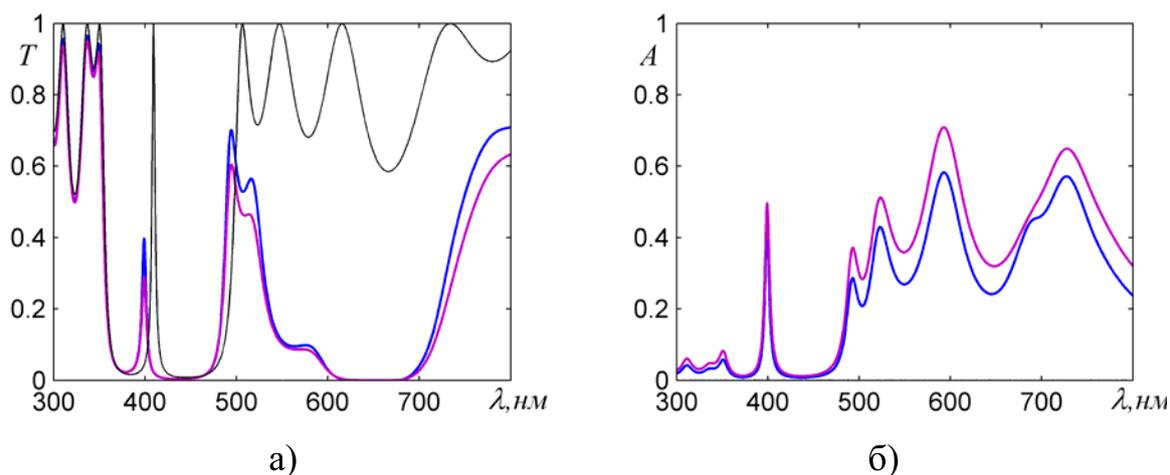


Рис. 3. Коэффициент пропускания  $T$  (а) и поглощения  $A$  (б) системы как функция длины волны падающего света. Толщина дефекта  $W_d = 90$  нм. Параметры:  $f = 0$  (черный);  $f = 0.24$ , без учета размера (синий);  $f = 0.24$ ,  $r = 20$  нм (пурпурный)

На рисунке 3(а) также видна дополнительная ЗЗ, соответствующая поглощению в НК на резонансной частоте ДП НК, ширина этой ЗЗ, при заданной толщине дефектного слоя  $W_d = 90$  нм, увеличилась по сравнению с ЗЗ на рисунке 2(а). 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 на рисунке 2(а).

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показана возможность качественного изменения спектральных характеристик 1Д ФК при помощи дефектного слоя нанокompозита, допированного золотыми наночастицами. Спектры пропускания и поглощения существенным образом зависят от концентрации наночастиц в НК. При учете размера частиц происходит модификация спектра, обусловленная эффек-

тами диссипации – затуханием для неограниченного объема металла и процессами рассеяния электронов на поверхности наночастицы. Применение ФК-резонатора для увеличения поглощения света в подобном НК может быть полезно для нужд фотовольтаики, при создании элементов для солнечных батарей.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ Сибирскому федеральному университету на выполнение НИР в 2014 году (Задание № 3.1276.2014/К) и при поддержке РФФИ (грант № 14-02-31248).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J.D. Joannopoulos et al., Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. // Princeton: Princeton University Press, 2008, 286 p.
2. Б.И. Манцызов, Когерентная и нелинейная оптика фотонных кристаллов. // М.: Физматлит, 2009, 149 с.
3. С.Я. Ветров, А.Ю. Авдеева, И.В. Тимофеев, Особенности спектральных свойств одномерного фотонного кристалла с резонансным дефектным слоем нанокompозита. // ЖЭТФ, 2011, № 5(11), с. 871 – 878.
4. С.Я. Ветров, Р.Г. Бикбаев, И.В. Тимофеев, Оптические таммовские состояния на границе фотонного кристалла и нанокompозита с резонансной дисперсией. // ЖЭТФ, 2013, № 6, с. 1129 – 1139.
5. С.Г. Моисеев, В.А. Остаточников, Д.И. Семенцов, Подавление дефектной моды в фотонно-кристаллической структуре с резонансным нанокompозитным слоем. // Квантовая электроника, 2012, т. 42, № 6, с. 557 – 560.
6. С.Г. Моисеев, В.А. Остаточников, Д.И. Семенцов, Влияние размерных эффектов на оптические характеристики одномерного фотонного кристалла с нанокompозитным дефектом. // Письма в ЖЭТФ, 2014, т. 100, № 6, с. 413 – 417.
7. E. Pedrueza et al., Novel Method of Preparation of Gold-Nanoparticle-Doped  $\text{TiO}_2$  and  $\text{SiO}_2$  Plasmonic Thin Films: Optical Characterization and Comparison with Maxwell–Garnett Modeling. // Adv. Funct. Mater., 2011, v. 21, p. 3502 – 3507.
8. J. C. Maxwell Garnett, Colours in Metal Glasses and in Metallic Films. // Phil. Trans. R. Soc. Lond., 1904, v. 203, p. 385 – 420.

9. V.E. Ferry, J.N. Munday, H.A. Atwater, Design Considerations for Plasmonic Photovoltaics. // *Adv. Funct. Mater.*, 2010, v. 22, p. 4794 – 4808.
10. В.В. Климов, Наноплазмоника. // М.: Физматлит, 2009, 480 с.
11. P. Yeh, Electromagnetic propagation in birefringent layered media. // *J. Opt. Soc. Amer.*, 1979, v. 69, p. 742 – 756.