

Учреждение Российской академии наук  
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

На правах рукописи

Рыбин Михаил Валерьевич

**Иммерсионная спектроскопия  
фотонных кристаллов  
на основе синтетических опалов**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Лимонов Михаил Феликсович

Санкт-Петербург – 2009

# Содержание

<b>Введение</b> . . . . .	5
<b>Глава 1. Обзор литературы</b> . . . . .	13
1.1. Природные фотонные кристаллы . . . . .	13
1.2. Синтез опалов и их строение . . . . .	18
1.3. Оптические свойства фотонных кристаллов . . . . .	25
1.4. Влияние дефектов и неупорядоченности структуры на оптиче- ские параметры фотонных кристаллов . . . . .	38
1.5. Многокомпонентные фотонные кристаллы . . . . .	45
1.6. Вычислительные методы . . . . .	47
1.7. Постановка задачи . . . . .	51
<b>Глава 2. Экспериментальные методики и характеристика об-         разцов</b> . . . . .	54
2.1. Методы экспериментального исследования стоп-зон . . . . .	54
2.2. Экспериментальная установка для измерения оптических спек- тров фотонных кристаллов . . . . .	56
2.3. Иммерсионная спектроскопия синтетических опалов . . . . .	59
2.4. Геометрические размеры и ориентация образцов . . . . .	61
2.5. Характеризация опалов методами СЭМ и ПЭМ . . . . .	63
<b>Глава 3. Высокоиндексные (<math>hkl</math>) стоп-зоны в фотонных кри-         сталлах на основе синтетических опалов</b> . . . . .	74
3.1. Экспериментальное исследование стоп-зон по спектрам пропус- кания синтетических опалов . . . . .	76
3.2. Высокоиндексные ( $hkl$ ) стоп-зоны в синтетических опалах . . . . .	88

<b>Глава 4. Стоп-зоны в многокомпонентных фотонных кристаллах: селективное переключение и резонансные эффекты . . .</b>	<b>97</b>
4.1. Экспериментальное исследование иммерсионных зависимостей $(hkl)$ стоп-зон в синтетических опалах . . . . .	100
4.2. Теоретическое описание эффектов выключения стоп-зон в многокомпонентных фотонных кристаллах . . . . .	108
4.3. Моделирование зависимости $\varepsilon_f^0(G)$ в синтетических опалах . . .	122
4.4. Фотонная зонная структура синтетических опалов . . . . .	125
4.5. Возможные приложения многокомпонентных ФК: пассивный и активный режимы при селективном переключении стоп-зон . . . . .	127
<b>Глава 5. Резонанс Фано в спектрах пропускания фотонных кристаллов на основе синтетических опалов . . . . .</b>	<b>132</b>
5.1. О возможности возникновения резонанса Фано с участием брэгговского рассеяния в фотонных кристаллах . . . . .	135
5.2. Экспериментальное наблюдение резонанса Фано в синтетических опалах . . . . .	137
5.3. Расчет фотонной зонной структуры опалов, образованных идентичными неоднородными сферами $\alpha$ -SiO <sub>2</sub> . . . . .	140
5.4. Расчет спектров пропускания неупорядоченного 3D фотонного кристалла с ГЦК-решеткой . . . . .	143
5.5. Аппроксимация спектров с помощью формулы Фано . . . . .	149
5.6. Анализ механизмов рассеяния света в неупорядоченных фотонных кристаллах . . . . .	154
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>157</b>
<b>Приложение А. Метод плоских волн . . . . .</b>	<b>160</b>

А.1. Сведение уравнений Максвелла к линейной алгебраической задаче . . . . .	161
А.2. Два метода решения задачи на собственные числа . . . . .	165
А.3. Эффективная диэлектрическая проницаемость . . . . .	167
А.4. Алгоритм решения задачи на собственные значения . . . . .	169
<b>Приложение Б. Теоретический анализ ширины фотонной стоп-</b>	
<b>зоны . . . . .</b>	<b>179</b>
Б.1. Двухволновое приближение . . . . .	179
Б.2. Ширина фотонной стоп-зоны . . . . .	180
<b>Литература . . . . .</b>	<b>186</b>

# Введение

Исследование фотонных кристаллов (ФК) – одно из самых молодых направлений в физике твердого тела. Фотонными кристаллами (photonic bandgap materials) называются слабопоглощающие структуры, которые характеризуются периодической модуляцией диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(x, y, z)$  с периодом, сравнимым с длиной электромагнитных волн, и запрещенными зонами в спектре собственных электромагнитных состояний. Начало интенсивному исследованию ФК положили работы Э. Яблоновича (E. Yablonovitch) [1] и С. Джона (S. John) [2], опубликованные в 1987 г. В работе [1] отмечалось, что коэффициент Пёрселла, отвечающий за спонтанное излучение, определяется свойствами электромагнитного поля, которые зависят от диэлектрического окружения  $\varepsilon(x, y, z)$ . В работе [2] теоретически было проанализировано рассеяние света в неупорядоченных ФК и предсказана локализация фотонов на границах стоп-зон.

Следует отметить, что история исследования ФК берет свое начало еще в XIX веке, когда в 1887 г. Рэлей опубликовал основы теории распространения электромагнитных волн в одномерных периодических структурах, т.е., фактически, в ФК [3, 4]. В XX веке, за десять лет до публикаций [1, 2], В.П. Быков рассмотрел задачу о спонтанном излучении в периодических средах с запрещенными зонами [5, 6]. В этих публикациях был высказан ряд оригинальных идей, предвосхитивших результаты работ [1,2], однако в то время идеи В.П. Быкова оказались невостребованными, и, в результате, слава родоначальников нового направления прочно закрепилась за Э. Яблоновичем и С. Джоном.

Анализ основных физических свойств ФК базируется на аналогии с хорошо развитой теорией твердого тела. В «обычных» кристаллах электроны распространяются в периодическом поле атомного потенциала, а в ФК фотоны

распространяются в периодическом «поле» модулированной диэлектрической проницаемости. В обоих случаях возникает зонная структура – для электронов в «обычных» кристаллах и для фотонов в ФК (рис. 1). Отметим разницу в законе дисперсии  $E(\mathbf{k})$ , который в случае электронной зонной структуры является квадратичным, а в случае фотонной зонной структуры – линейным.

Итак, из-за периодической модуляции диэлектрической проницаемости в энергетическом спектре ФК возникают чередующиеся зоны разрешенных (собственных) и запрещенных состояний. В зависимости от симметрии кристаллической структуры и от глубины модуляции диэлектрической проницаемости возможно образование одномерных *стоп-зон* (разрыв в спектре собственных состояний для света, распространяющегося в фиксированном направлении кристаллической решетки ФК), либо *полной (трехмерной) запрещенной фотонной зоны* (перекрытие стоп-зон по всем направлениям распространения света). Обнаружение и исследование полной фотонной запрещенной зоны представляет как фундаментальный интерес, связанный с исследованиями локализованных фотонных состояний, так и прикладной интерес, вызванный возможностью управления спонтанной эмиссией, созданием миниатюрных волноводов, микрорезонаторов и т.д.

Направление, связанное с исследованием ФК, в настоящее время активно развивается: этой тематике посвящен целый ряд книг [9–14] и обзоров [8, 15–19], в журналах ежегодно публикуется  $\sim 2500$  статей. Исследования ФК привели к появлению новых направлений в материаловедении, химии, физике. Несомненный интерес представляет изучение *фононных кристаллов* – аналога ФК для фононов [20], а также *магнонных кристаллов* – аналога ФК для магнонов (квантов возбуждения спиновой системы – спиновых волн) [21, 22]. Усилия по разработке новых материалов нестандартными методами привели к возникновению динамично развивающегося направления – создания и исследования *метаматериалов* [23–25].

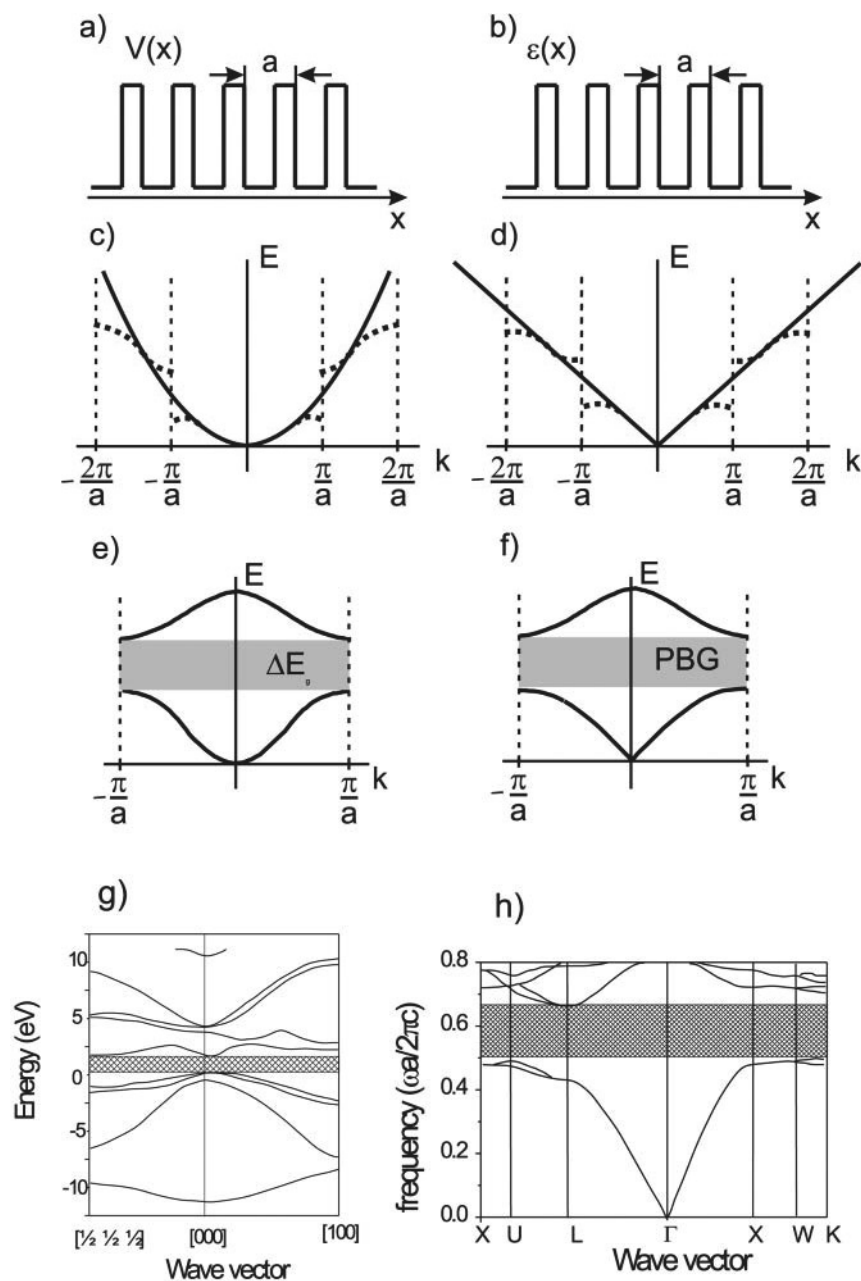


Рис. 1. (а) Одномерный периодический потенциал  $V(x)$ . (б) Периодически модулированная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(x)$ . (с) Дисперсия  $E(\mathbf{k})$  свободных электронов (непрерывные кривые) и дисперсия электронов в периодическом потенциале  $V(x)$  (пунктирные кривые). (д) Дисперсия электромагнитных волн в изотропной среде (непрерывные кривые) и в среде с периодической модуляцией диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(x)$  (пунктирные кривые). (е) Приведенная зонная структура для электронов. (ф) Приведенная зонная структура для фотонов. (г) Электронная зонная структура GaAs. (h) Фотонная зонная структура 3D ФК, созданного Э.Яблоновичем [7]. Схема основана на рисунке, приведенном в работе [8].

Как известно, «обычные» кристаллы имеют периодическую модуляцию диэлектрической проницаемости с периодом, сопоставимым с длинами волн рентгеновского диапазона. В экспериментах по рассеянию рентгеновских лучей на кристаллах было открыто рассеяние Брэгга [26], которое лежит в основе формирования запрещенных зон в спектрах волновых состояний самой разной природы (электроны, фононы, фотоны, магноны). С момента открытия рентгеновского брэгговского рассеяния в 1912 до появления ФК, т.е. структур, которые характеризуются оптическим брэгговским рассеянием, прошло восемь десятилетий. Такой временной разрыв, вероятно, обусловлен тем, что величина запрещенной зоны связана с диэлектрическим контрастом  $\eta = \max(\varepsilon(\mathbf{r}))/\min(\varepsilon(\mathbf{r}))$ , который в области длин волн рентгеновского излучения в «обычных» кристаллах составляет величину  $\eta \approx 1 + 10^{-5}$ , в то время как для существования полной фотонной запрещенной зоны требуется диэлектрический контраст  $\eta > 4$  [27, 28]. Создание высококачественных структур с таким высоким диэлектрическим контрастом стало возможным лишь в самое последнее время.

ФК принято классифицировать в соответствии с числом пространственных направлений, в которых задается модуляция диэлектрической проницаемости: 1D, 2D и 3D ФК (рис. 2). Основываясь на такой классификации, можно проследить последовательное появление дополнительных свойств и, соответственно, расширение областей возможных приложений ФК разной размерности. Стоп-зона в 1D структуре является основой для создания высокоэффективных зеркал и микрорезонаторов; протяженные дефекты в 2D структуре позволяют возбуждать волноводные моды, т.е. управлять световыми потоками; полная запрещенная фотонная зона в 3D структуре может обеспечить контроль спонтанного излучения [1, 15, 29].

Проблематика, связанная с ФК, включает в себя целый ряд оригинальных задач фундаментального и прикладного характера, таких как изучение новых



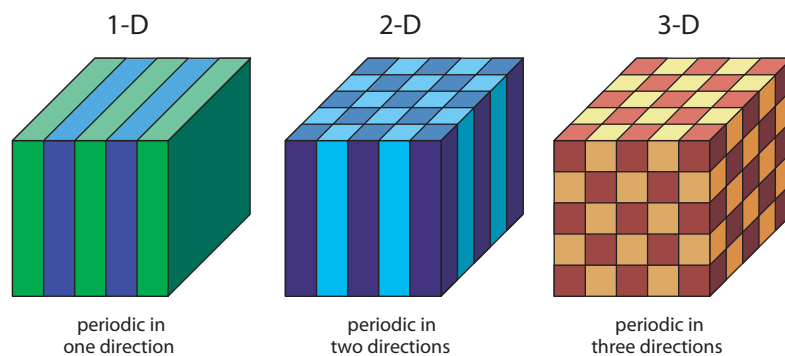


Рис. 2. Простейшие примеры одно-, двух- и трехмерных ФК [9]. Цвета обозначают материалы с разными значениями диэлектрической проницаемости. Структура ФК характеризуется периодичностью распределения диэлектрической проницаемости вдоль одной или нескольких осей.

возможностей управления световыми потоками, подавление спонтанного излучения в образце, локализация фотонных состояний. ФК рассматриваются как перспективные материалы для использования в лазерных технологиях, для создания принципиально новых систем оптической связи и обработки информации.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, двух приложений и списка цитируемой литературы.

Глава 1 посвящена обзору литературы.

В Главе 2 описаны экспериментальные методики, использованные в данной работе, в том числе оригинальный алгоритм, который был разработан для обработки изображений ФК, получаемых методом сканирующей электронной микроскопии.

Подробно описана методика иммерсионной спектроскопии ФК, основанная на исследовании фотонной зонной структуры в зависимости от переменной диэлектрической проницаемости одной или нескольких компонент. При разработке этой методики мы учитывали уникальную специфику опалов, которые представляют собой идеальную трехмерную матрицу для введения различных заполнителей, в частности – смеси жидкостей с диэлектрической

проницаемостью, величину которой можно непрерывно варьировать в определенном диапазоне.

В Главе 3 представлены результаты исследования высокоиндексных ( $hkl$ ) стоп-зон в синтетических опалах. Оптические спектры пропускания опалов измерялись в зависимости от целого ряда параметров, включая контраст диэлектрической проницаемости структуры опал-заполнитель, ориентацию образца относительно светового пучка, поляризацию света, длину волны, толщину образца. Для интерпретации наблюдавшихся особенностей в спектрах пропускания опалов был проведен расчет дисперсионных зависимостей ( $hkl$ ) стоп-зон в брэгговском приближении для ГЦК решетки. В результате кроме исследованных ранее в работе [30] стоп-зон  $\{111\}$ ,  $\{200\}$  и  $\{220\}$  дополнительно были обнаружены стоп-зоны, принадлежащие семействам  $\{311\}$ ,  $\{222\}$ ,  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  и  $\{333\}$ .

Глава 4 посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию оптических свойств многокомпонентных фотонных кристаллов (МФК). Разработанная аналитическая модель основана на анализе форм-фактора рассеяния, определяющего интенсивность брэгговской дифракции света на системе кристаллографических плоскостей с индексами Миллера ( $hkl$ ). Особый интерес представляет случай трехкомпонентного ФК (состоящего из трех однородных компонент), который позволяет изучать основные фотонные свойства произвольного МФК и получать при этом наглядные графические решения. В работе были проанализированы эффекты переключения стоп-зон в трехкомпонентных ФК в зависимости от диэлектрических и структурных параметров, симметрии кристаллической решетки; проводился анализ квазипериодических резонансных свойств фотонных стоп-зон. Благодаря этим расчетам были выявлены общие закономерности эффектов селективного переключения ( $hkl$ ) стоп-зон в МФК.

Методом иммерсионной спектроскопии было проведено подробное исследова-

дование фотонных ( $hkl$ ) стоп-зон в опалах. Путем изменения диэлектрической проницаемости жидких заполнителей опалов был экспериментально продемонстрирован эффект селективного переключения ( $hkl$ ) стоп-зон. Было установлено, что в исследованном диапазоне контраста диэлектрической проницаемости стоп-зона (222) не меняет своей интенсивности, т.е. относится к классу резонансных. Комплексный анализ результатов оптических экспериментов и теоретических расчетов в совокупности с данными, полученными методом сканирующей электронной микроскопии (изображений частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>), позволил сделать однозначный вывод о том, что эффект селективного переключения ( $hkl$ ) стоп-зон обусловлен неоднородной диэлектрической структурой частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Разработанная теоретическая модель позволила описать всю совокупность экспериментальных данных по переключению различных ( $hkl$ ) стоп-зон в опалах.

В главе 5 приводятся результаты прецизионного спектроскопического исследования области «выключения» стоп-зон на примере стоп-зоны (111) в опалах. В области «выключения» стоп-зоны (111) спектры регистрировались с минимальным шагом ( $\sim 0.0025$ ) изменения коэффициента преломления жидкости, заполняющей опаловую матрицу. В результате этих экспериментов был обнаружен новый для фотонных кристаллов эффект – превращение брэгговской полосы непропускания в брэгговский пик пропускания – картина, характерная для широко известного в спектроскопии явления резонанса Фано. Резонанс Фано в спектрах пропускания опалов наблюдался между узкой полосой, обусловленной рассеянием Брэгга на системе плоскостей (111), и широким фоном, связанным с рассеянием Ми на неоднородных по диэлектрической проницаемости частицах  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Было установлено, что параметр Фано  $q$ , определяющий форму брэгговской полосы (111) в спектрах пропускания опалов, связан с контрастом диэлектрической проницаемости между опаловой матрицей и заполнителем. При нулевом контрасте ( $q = 0$ ) в спек-

трах возникает брэгговский пик пропускания вместо обычно наблюдаемой полосы непропускания. Кроме того, при  $q = 0$  наблюдается зеркальная (в шкале длин волн) трансформация асимметричной полосы (111): при  $q > 0$  более затянутым является коротковолновое крыло, а при  $q < 0$  – длинноволновое крыло.

В диссертационной работе приводится оригинальная теоретическая «квази-3D» модель, которая позволила количественно описать все экспериментально наблюдаемые эффекты, связанные с резонансом Фано в опалах.

# Глава 1

## Обзор литературы

### 1.1. Природные фотонные кристаллы

За миллионы лет эволюции в процессе развития и естественного отбора у живых организмов совершенствовались и видоизменялись самые разные параметры тела – размер, форма и, конечно, цвет. Кто-то с помощью яркой окраски старался привлечь внимание, кто-то, наоборот, красился в тон окружающей среды, чтобы стать незаметным. В этом бесконечном процессе поиска оптимальных решений природа не могла пройти мимо удивительной возможности создавать цветовые ощущения благодаря рассеянию света на мельчайших «чешуйках», равномерно покрывающих крылья и другие части тела птиц и насекомых (рис. 1.1). Так появилась «фотоннокристаллическая» переливающаяся раскраска жуков [31] и бабочек [34], а также роскошные наряды пернатых [35]. В ряде случаев периодическая структура возникает в процессе роста, как, например, у стеклянных морских губок [33]. Слоистость спикул, составляющих скелет губок, определяется возрастом организма, по аналогии с годичными кольцами у деревьев. Отдельные представители флоры тоже обладают элементами фотоннокристаллической структуры. Например, мембрана клетки некоторых диатомовых водорослей обладает периодическим строением [36], а альпийский цветок эдельвейс защищается от УФ излучения с помощью упорядоченной системы волокон [32].

Разнообразные примеры структур, обладающих периодичностью в пространстве, и, соответственно, фотоннокристаллическими свойствами, мы можем встретить также в окружающей нас «неживой» природе. Одним из самых ярких представителей ФК в «неживой» природе являются хорошо из-

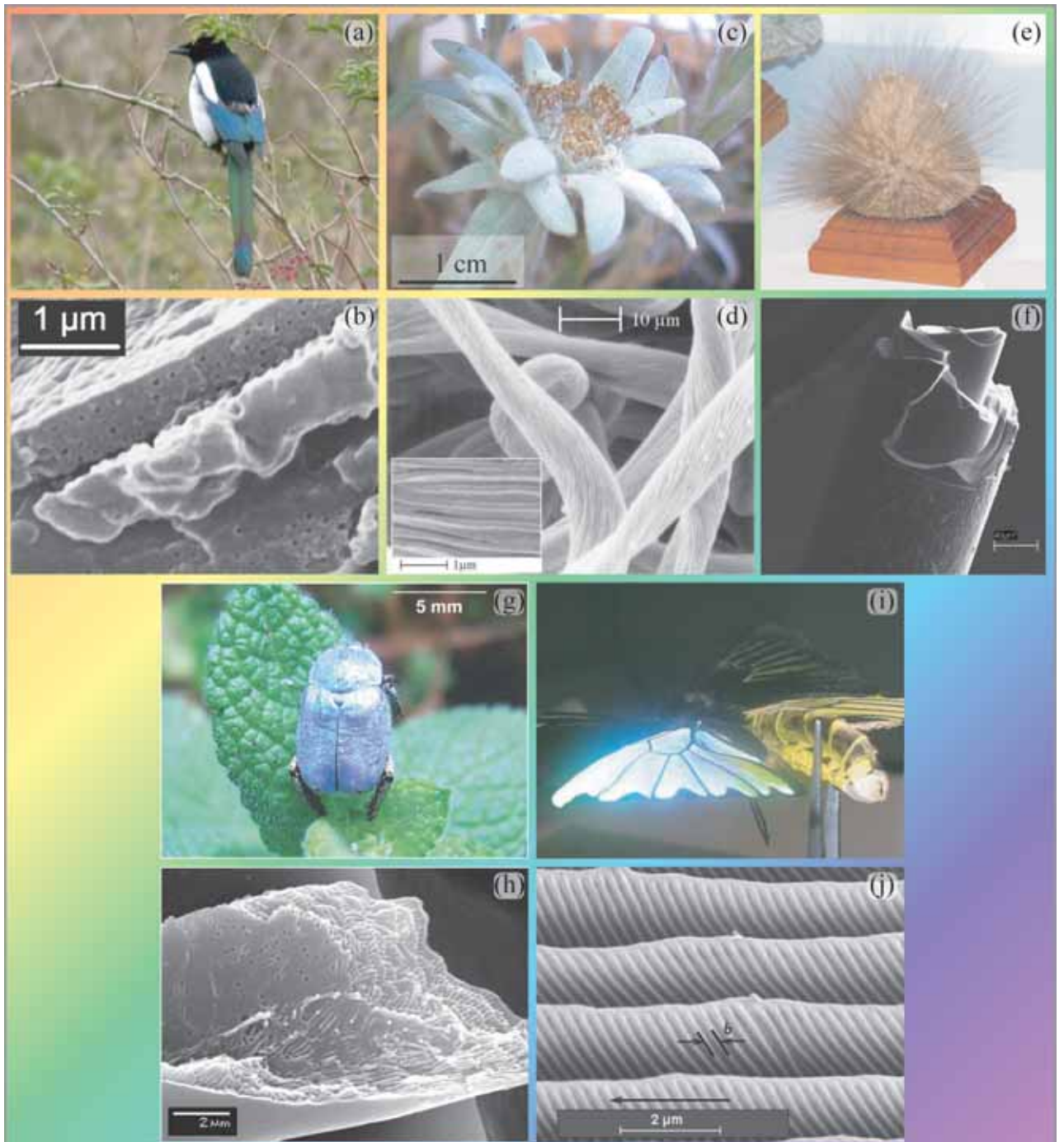


Рис. 1.1. Примеры фотоннокристаллических структур в «живой» природе (внешний вид и изображение, полученное методом сканирующей электронной микроскопии): (a,b) перо сороки [31]; (c,d) лепестки эдельвейса [32]; (e,f) спикула стеклянной морской губки [33]; (g,h) панцирь жука цветоройки [31]; (i,j) крыло бабочки птицекрыла [34].

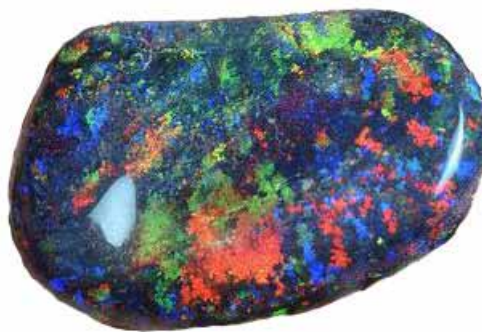


Рис. 1.2. Крупный образец природного опала найденного в Австралии. Фотография Пола А. Соудерса (из базы данных Corbis corp.).

вестные драгоценные камни – благородные опалы (от латинского *opalus*, от греческого *οπάλιος*, от санскритского *упала* – видеть изменение цвета). Природные опалы – это гелевые минералоиды, которые обычно залегают на глубине 10-25 метров. По статистике более 95% опалов добываются в Австралии. Знаменитым центром добычи опалов является маленькое местечко Кубер Педи (Cooper Pedy) на юге Австралии. Из-за исключительно высокой температуры в австралийской пустыне все население Кубер Педи обитает под землей, где кроме жилищ находятся церковь, школа, магазин и т.д.

Выделяют группу благородных опалов, которая объединяет целый ряд драгоценных камней, имеющих одно общее свойство: при освещении они мерцают и переливаются, создавая неповторимую игру цвета (рис. 1.2). Стоит отметить, что явление резкого усиления рассеяния света коллоидными растворами или чистыми веществами в критических состояниях (например, при фазовых переходах) получило в честь опалов название «опалесценция». В зависимости от вида, месторождения и основного цвета, различают черные, белые, молочные или кристальные опалы, болдер-опалы, матричные опалы, Иова-орехи из Квинсленда, так называемые «картинные камни», а также мексиканские и огненные опалы.

Опалы не являются кристаллами (в обычном понимании этого слова) в отличие от других драгоценных камней (бриллианта, рубина, сапфира и др.)

[37]. Как следствие, опалы нельзя называть минералами, так как они не обладают атомной кристаллической структурой. Опалы образуются в результате затвердевания кремнеземного геля и обладают сложным строением. По химическому составу опалы являются гидроокисью кремния  $\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ , т.е. кремнеземом с некоторым количеством слабо связанных молекул воды (в благородном опале вода составляет 5-10%). По своим механическим характеристикам опалы являются достаточно хрупкими материалами (твердость 5-6.5 пунктов по шкале Мооса). По своему происхождению опалы - минералоид осадочный, гипергенный или низкотемпературно-гидротермальный. Встречается в виде прожилок, заполняя трещины геологических пород. Кроме того, из рассеянных мелких частиц опала состоят горные породы диатомит, трепел и опока.

Чтобы получить ювелирное изделие, многие драгоценные камни (например, алмазы) подвергают специальной огранке. Цель такой обработки – придать кристаллу определенную форму, чтобы вошедший белый свет претерпел многократное внутреннее отражение и, из-за дисперсии, покидая камень, создавал игру цветов на его поверхности. Опалы не требуют специальной огранки, так как обладают уникальным (для драгоценных камней) механизмом рассеяния света. В 1964 году в журнале Nature вышла статья Дж. Сандерса (J.V.Sanders) [38] в которой он доказал, что причудливую игру цвета опалов создает брэгговская дифракция света. Как показали результаты электронной микроскопии [38, 39], опалы состоят из субмикронных сфер аморфного кремнезема (другие названия – диоксид кремния или аморфный кварц)  $\alpha\text{-SiO}_2$ . При этом все образцы опалов, демонстрирующие достаточно монохромную «раскраску» (при фиксированной геометрии рассеяния света), состоят из близких по размеру сфер, упакованных преимущественно в гранцентрированную кубическую (ГЦК) решетку. В природе встречаются образцы со сферами  $\alpha\text{-SiO}_2$  диаметром 150-400 нм.



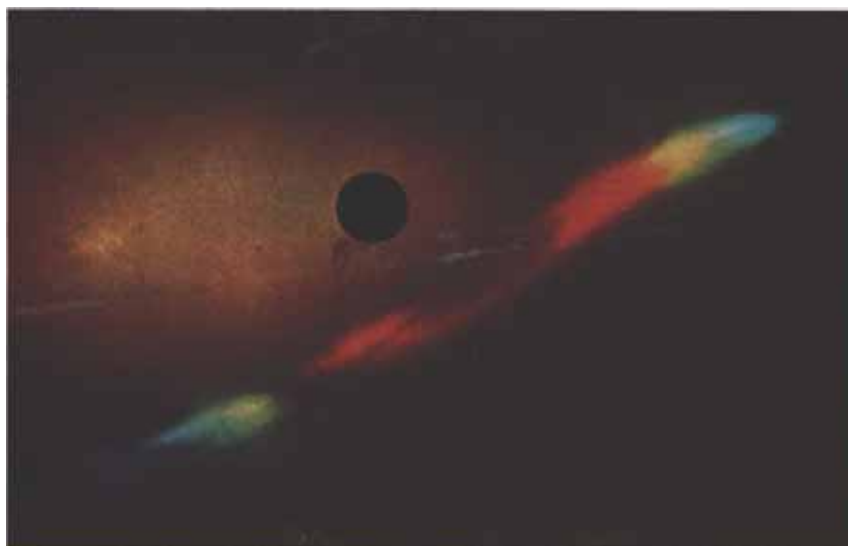


Рис. 1.3. Дифракционная картина, зарегистрированная на цветную фото пленку, обмотанную вокруг цилиндрической кюветы [40].

Дж. Сандерс исследовал рассеяние света на опалах с помощью дифракционной методики [40]. Для исследования применялся иммерсионный метод [41]: образец опала был иммерсирован (погружен) в декалин ( $C_{10}H_{18}$ ) – бесцветную жидкость, с коэффициентом преломления  $n = 1.47$  близким к коэффициенту преломления  $\alpha\text{-SiO}_2$ . Благодаря этому уменьшались эффекты, связанные с преломлением света на границе образца, что позволяло исследовать опалы с произвольной формой поверхности. Типичная фотография дифракционных картин приведена на рис. 1.3.

Природные опалы исследовались также современными спектроскопическими методами. Например, в работе [42] приведены результаты измерений спектров отражения природных и синтетических опалов. Было показано, что образцы природных опалов состоят из отдельных упорядоченных доменов, сформированных частицами  $\alpha\text{-SiO}_2$ . Межсферное пространство в исследованных образцах заполнено материалом с показателем преломления, близким к показателю преломления  $\alpha\text{-SiO}_2$ . Поэтому диэлектрический контраст в природных опалах чрезвычайно мал, в результате чего брэгговские рефлексии проявляются в виде спектрально узких полос отражения.

## 1.2. Синтез опалов и их строение

Искусственные ФК изготавливают различными методами, в том числе методом электронной литографии [10, 43–51], автоклонирования [52, 53], голографии [54, 55] и др. [10, 12–14, 16, 56]. Первые ФК, созданные механическими методами [7, 57–60], имели миллиметровый период решетки и, соответственно, фотонные стоп-зоны попадали в СВЧ-диапазон. В дальнейшем произошло расширение рабочего диапазона в коротковолновую область спектра, и в настоящее время разработаны ФК для СВЧ-, ИК- и видимого диапазона электромагнитных волн. Примечательно, что эта история повторяется в случае метаматериалов, первые из которых были разработаны для СВЧ-диапазона, а в настоящее время уже перекрыт ИК- диапазон и технологи вплотную подошли к созданию метаматериалов, которые будут работать в видимой области спектра [25].

Отдельным технологическим направлением являются синтез коллоидных кристаллов и синтетических опалов, в основе которого лежит процесс самосборки сферических частиц. Опалы, которые получают в лабораторных условиях, мы будем далее называть синтетическими.

Опалы состоят из достаточно однородных по диаметру сфер  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, которые образуют структуру с плотной упаковкой. Ранее считалось, что природные опалы формируются за время порядка десятков или даже сотен тысяч лет [61]. Однако позже было установлено, что процесс синтеза природных опалов может протекать существенно быстрее [37], что позволяет синтезировать образцы опалов в лабораторных условиях. Процесс синтеза опалов можно разделить на два этапа. На первом получают суспензию, содержащую близкие по размеру сферы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, а на втором этапе получают объемные образцы синтетических опалов в результате процесса самосборки, когда сферы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> формируют плотноупакованную структуру [62]. Полученные образцы могут

подвергаться дополнительной обработке, например термическому отжигу.

### 1.2.1. Формирование сферических частиц

Сферы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> получают методом Штобера [63]. Этот метод основан на реакции гидролиза тетраэтилортосиликата (сложных эфиров кремниевой кислоты) в спиртовой среде, содержащей необходимое количество воды и аммиака. В результате реакции возникают достаточно однородные сферические частицы аморфного диоксида кремния. Метод позволяет за время порядка одного часа получить суспензию, содержащую сферы, которые характеризуются незначительным разбросом по диаметру (менее 10%), среднее значение которого может варьироваться в диапазоне от 50 до 2000 нм. Диаметр сфер зависит от концентраций воды и аммиака, а также различных спиртов.

В результате исследования опалов методом просвечивающей электронной микроскопии было установлено, что сферические частицы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> имеют внутреннюю структуру [30, 64–66]. Так, в работах [30, 64] исследовалась структура частиц с диаметром  $\sim 200$ – $300$  нм. Было обнаружено, что сферы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> в своем объеме содержат поры размером 3–12 нм. Это свидетельствует о том, что сами сферы состоят из более мелких квазисферических частиц с характерными размерами в несколько десятков нанометров. Размер пор уменьшается к периферии сферы, а вблизи поверхности сфер  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> поры не наблюдаются. Таким образом, сферы с диаметром 200–300 нм (а именно такие исследовались в диссертационной работе) имеют существенно неоднородную структуру с более плотным приповерхностным слоем.

В работах [65, 66] исследовались относительно большие сферы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> диаметром  $\sim 1000$  нм. Было установлено, что такие сферы имеют более сложную сверхструктуру: они состоят из более мелких квазисферических частиц  $\sim 100$  –  $150$  нм, которые в свою очередь, состоят из еще более мелких пер-

вичных квазисферических частиц диаметром 5-20 нм.

### 1.2.2. Методы самосборки

Наиболее распространенный метод получения объемных образцов синтетических опалов из сферических частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> называют методом «самосборки». Существует несколько модификаций этого метода. Стоит отметить, что во многих работах для получения образцов вместо сфер  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> используются сферы из полимерных материалов (полистирол, полиметилметакрилат и др.). При этом авторы сохраняют за полученными структурами название «опалы».

### Метод седиментации

На первом этапе в кювете подготавливают суспензию – раствор, содержащий однородные сферические частицы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Собственно метод седиментации (осаждения) [62, 67, 68] основан на том, что сферы под действием гравитационной силы опускаются на дно кюветы. При этом помимо гравитационных сил сферы также притягиваются друг к другу благодаря силам Ван-дер-Ваальса. В результате на дне кюветы образуется плотноупакованные высокоупорядоченные слои, параллельные дну кюветы и перпендикулярные оси роста образца. Эти слои принято называть ростовыми слоями, а соответствующую им плоскость – ростовой плоскостью. При плотной упаковке гексагональные ростовые слои могут занимать друг относительно друга лишь три различных положения, обычно обозначаемые в литературе как А, В и С [69]. Чередование этих слоев может приводить к формированию ГЦК решетки (последовательность ...АВСАВС...), гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетки (последовательность ...АВАВАВ...), а также решетки смешанного типа. Согласно теоретическим работам [70–72], для плотноупакованных однородных сфер ГЦК решетка оказывается более энергетически

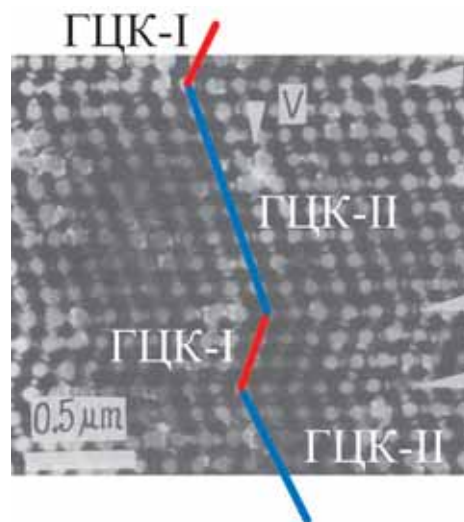


Рис. 1.4. Изображение двойникованной структуры образца опала, полученное с помощью электронной микроскопии ([76]). Ось роста образца соответствует вертикальной координате. Красные фрагменты ломаной линии обозначают область подрешетки ГЦК-I, а синие – ГЦК-II.

выгодной, а следовательно и более устойчивой по сравнению с ГПУ решеткой. Однако разница в энергии между ГЦК и ГПУ структурами очень мала ( $\Delta E \leq 10^{-3}k_B T$ ) [68], в результате чего реальные образцы состоят из двойникованной ГЦК-решетки, которая образуется из двух зеркально-симметричных реализаций упорядоченных ГЦК-упаковок – ...АВСАВС... (ГЦК-I) и ...СВАСВА... (ГЦК-II) (рис. 1.4). В синтетических опалах эти два типа ГЦК-упаковок чередуются случайным образом [73–75].

После того, как суспензия высыхает (процесс седиментации может занимать несколько месяцев), полученный образец подвергают отжигу при температуре  $\sim 1000^\circ\text{C}$ . В результате сферы незначительно спекаются друг с другом, что придает образцу определенную твердость. Кроме спекания (т.е. проникновения соседних сфер друг в друга) происходит также небольшая деформация вдоль оси роста, приводящая к изменению сферической формы частиц  $\alpha\text{-SiO}_2$  на сфероидальную.

Метод седиментации позволяет получать объемные образцы синтетиче-

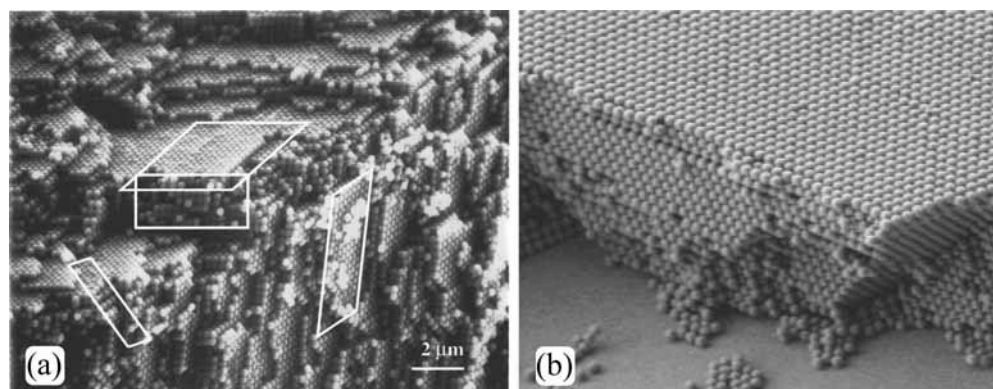


Рис. 1.5. Изображения образцов синтетических опалов, полученные с помощью электронной микроскопии. (а) Образец, выращенный методом седиментации [78]. (б) Образец, выращенный методом вертикального осаждения [68, 79].

ских опалов сантиметровых размеров. Однако такие образцы обычно содержат большое количество дефектов, в том числе вакансий и дефектов упаковки (обсуждавшееся выше двойникование), наблюдается также полидоменность структуры (наличие микрокристаллитов). Поэтому для проведения физических экспериментов из большого количества образцов приходится отбирать наилучшие, с минимальным количеством дефектов.

### Метод вертикального осаждения

В работе [77] был предложен метод «вертикального осаждения», который позволяет получать тонкие опаловые пленки толщиной до 50 мкм. Такие пленочные образцы имеют существенное преимущество по сравнению с объемными образцами, полученными методом седиментации - их структура содержит значительно меньшее количество дефектов (рис. 1.5).

Метод вертикального осаждения состоит в следующем. Подложку, закрепленную в вертикальном положении (рис. 1.6), погружают в суспензию, содержащую сферические частицы (объемная концентрация частиц обычно составляет  $\sim 1\%$ ). После этого подложку начинают медленно вытягивать вверх. В результате на поверхности подложки образуется несколько слоев сфериче-

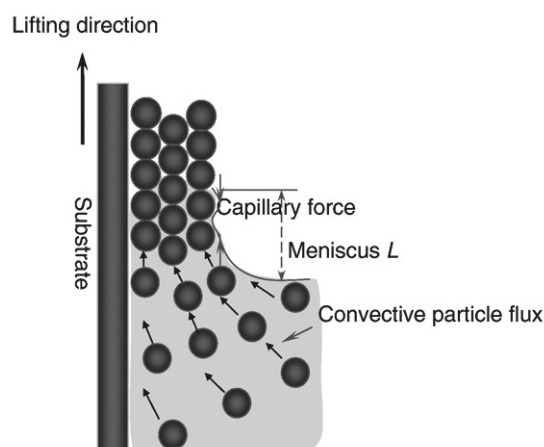


Рис. 1.6. Схема формирования опаловых пленок методом вертикального осаждения [80].

ских частиц, образующих плотноупакованную ГЦК структуру. Один из вариантов метода предполагает погружение подложки под некоторым углом к вертикальной оси. При другой реализации метода подложка остается неподвижной, а уровень жидкости понижается за счет ее испарения. Схематично физические процессы, лежащие в основе метода вертикального осаждения, представлены на рис. 1.6.: пленка образуется за счет диффузии частиц и капиллярного эффекта. Следует отметить, что гравитационные силы, приводящие к седиментации, оказывают большее влияние на большие частицы. Поэтому, в зависимости от вязкости жидкости, в которой находятся сферические частицы, а также от материала самих частиц, метод вертикального осаждения позволяет получать образцы, состоящие из сфер, диаметр которых не превышает 2 мкм [80].

### 1.2.3. Заполненные и инвертированные опалы

Идеальные сферы, формирующие любую плотноупакованную структуру (ГЦК, ГПУ или их смесь), занимают  $\sim 74\%$  объема образца. Структура реальных образцов синтетических опалов характеризуется частичным перекрытием сфер из-за спекания, при этом объем, который занимают спекшиеся

сферы, превышает 74%. В плотноупакованной структуре не только сферы, но и пустоты между ними образуют регулярную периодическую трехмерную подрешетку. Существуют две характерные формы пор – октаэдрическая и тетраэдрическая [64], имеющие размеры  $\sim 0.2D$  и  $\sim 0.4D$  соответственно ( $D$  – диаметр сфер). При идеальной сферической форме частиц  $\alpha\text{-SiO}_2$  пустоты в опале соединяются непрерывной сетью каналов, которые имеют в сечении форму треугольника с вогнутыми сторонами. Таким образом, структура опалов содержит трехмерно-периодическую матрицу пустот, которые можно заполнять различными веществами, получая композитные материалы (заполненные опалы) [16].

Возможность заполнения опала различными веществами и создания композитов позволяет качественно изменять физические свойства исходной матрицы и существенно расширяет диапазон возможных применений опалоподобных ФК. Как известно, такие явления, как люминесценция, оптическая активность, магнетизм, сверхпроводимость и многие другие не свойственны опалам, состоящим из сфер  $\alpha\text{-SiO}_2$ . Однако опалы можно заполнить материалами, обладающими этими свойствами. Показательно, что в самой первой работе, посвященной исследованию фотонных свойств опалов [81], изучались образцы, заполненные полупроводником CdS, обладающим люминесцентными свойствами.

Заполнение пустот позволяет, кроме всего прочего, изменить диэлектрический контраст структуры. Эта идея использовалась, в частности, при исследовании оптических свойств опалов иммерсионным методом [30, 41, 42, 73–75, 78, 82–87]. Метод состоит в погружении образца опала в жидкость, которая проникает в капиллярную систему, образованную порами, в результате чего уменьшается диэлектрический контраст ФК. При этом уменьшается влияние формы поверхности образца на регистрируемые спектры.

Заполнением опаловых пор можно не только уменьшить диэлектрический



контраст, но и увеличить его, используя материалы с высоким показателем преломления, такие как Si, Ge, GaN, GaP [16, 88–92]. Теоретически было предсказано, что в случае ГЦК-решетки (структура опалов) полная фотонная запрещенная зона возникает при отношении показателей преломления сфер и заполнителя больше 2.8 [28]. Таким образом, для возникновения полной запрещенной зоны в композите опал-заполнитель, последний должен иметь показатель преломления  $n > 4$ , так как опаловые сферы имеют показатель преломления  $n \sim 1.4$ .

В 1998 году были опубликованы работы [93–95], демонстрирующие технологию создания так называемых инвертированных опалов. На первом этапе поры в образцах опалов заполняются материалом с высоким показателем преломления (Si, TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), после чего исходные сферы *a*-SiO<sub>2</sub> удаляются методом химического травления. В результате получается инвертированная структура сферических пустот в материале с высоким коэффициентом преломления. Отметим, что из-за большого количества дефектов в полученных образцах инвертированных опалов вопрос об экспериментальном обнаружении полной фотонной запрещенной зоны остается открытым.

### 1.3. Оптические свойства фотонных кристаллов

Спектроскопические, в том числе оптические методики, широко используются при исследовании физических свойств ФК. Активно исследуются явления, связанные с локализацией, а также с замедлением групповой скорости электромагнитного излучения в ФК различной размерности со встроенными волноводами [96–101] и микрорезонаторами [102–109]. В работах [110, 111] наблюдалось расталкивание энергетических уровней, один из которых связан с экситонным состоянием в квантовой точке, а другой – с собственной микрорезонаторной модой. Изучаются различные способы перестроения фотонной

зонной структуры, в том числе – за счет инъекции свободных носителей [90, 112–116]. В магнитофотонных кристаллах (ФК, содержащих магнитную компоненту) обнаружено усиление линейного, а также нелинейного магнитооптического отклика среды (эффект фарадеевского вращения плоскости поляризации и магнитооптический эффект Керра) [117–122]. В теоретической работе [123] было предложено рассматривать нелинейные ФК. Наличие периодической структуры в ФК приводит к возникновению условий фазового синхронизма и генерации гармоник: наблюдалась генерация второй, третьей и четвертой гармоник [124–128]). При исследовании фотоннокристаллических волокон было установлено, что эти структуры позволяют задавать желаемые дисперсионные характеристики, преобразовывать частоты лазерных импульсов, генерировать интенсивный суперконтинуум, а также наблюдались другие эффекты [129–134].

В данном обзоре основное внимание будет уделено результатам исследования оптических свойств синтетических опалов.

### **1.3.1. Оптические свойства синтетических опалов**

В 1995 году группа сотрудников ФТИ им. А.Ф. Иоффе под руководством А.А. Каплянского и В.Н. Богомолова обратила внимание на фотонные свойства синтетических опалов и продемонстрировала экспериментально, что эти объекты являются 3D ФК для видимого спектрального диапазона [81]. В дальнейшем исследование фотонных свойств опалов, опалоподобных прямых и инвертированных структур развернулось широким фронтом во многих ведущих научных центрах США, Японии, Испании, Англии, Франции, Италии, Нидерландов, Греции и ряда других стран. Эти исследования активно развивались также в ряде лабораторий ФТИ им. А.Ф.Иоффе. В настоящее время синтетические опалы по праву считаются одним из наиболее удобных модель-

ных объектов для исследования трехмерных ФК.

Многочисленные исследования оптических свойств опалоподобных ФК были направлены, в первую очередь, на изучение фотонных стоп-зон, а также структурных особенностей этих материалов. В случае низкого контраста стоп-зоны можно однозначно связать с брэгговской дифракции света на определенных  $(hkl)$  системах плоскостей ФК. Поэтому крайне информативным является исследование брэгговской дифракции света (спектроскопия отражения, анализ дифракционных картин, исследование угловых характеристик рассеянного света), а также измерение спектров пропускания, в которых наблюдаются полосы, непосредственно связанные со стоп-зонами. Анализ спектрального положения и ширины полос в оптических спектрах позволяет определить различные параметры фотонных стоп-зон.

Рассмотрим кинематическую модель однократного рассеяния света на структуре ФК. Условие дифракции электромагнитной волны на периодической структуре ФК описывается хорошо известным векторным уравнением [135].

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}_{hkl} \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}'$  – волновые вектора падающей и рассеянной волн, а  $\mathbf{G}_{hkl}$  – вектор обратной решетки, соответствующий индексам Миллера  $(hkl)$ . Из уравнения (1.1) можно получить закон Брэгга:

$$\lambda_{hkl} = 2n_{eff}d_{hkl} \cos(\theta_{int}), \quad (1.2)$$

который можно представить в зависимости от внешнего угла падения [136]:

$$\lambda_{hkl} = 2d_{hkl} \sqrt{n_{eff}^2 - \sin^2(\theta_{ext})}. \quad (1.3)$$

В выражениях (1.2,1.3):  $\lambda_{hkl}$  – брэгговская длина волны в вакууме (спектральное положение фотонной стоп-зоны),  $n_{eff}$  – эффективный коэффициент преломления ФК,  $d_{hkl}$  – межплоскостное расстояние для системы плоскостей

$(hkl)$ ,  $\theta_{int}$  – угол падения света на  $(hkl)$  систему плоскостей (для света внутри ФК),  $\theta_{ext}$  – угол падения света на  $(hkl)$  систему плоскостей (для света вне ФК). Формула (1.3) предполагает возможность использования закона преломления Снеллиуса на границе фотонный кристалл/однородный материал. Отметим, что вопрос о возможности введения эффективного коэффициента преломления является нетривиальной теоретической задачей. Тем не менее, обычно предполагается, что эффективный коэффициент преломления можно ввести и, соответственно, можно пользоваться формулой (1.3).

Без учета преломления на границе образца закон Брэгга для дифракции света на ГЦК решетке можно переписать в виде [74], которым мы будем неоднократно пользоваться в дальнейшем:

$$\lambda_{hkl}(\theta_{hkl}) = 2d_{111}\sqrt{\varepsilon_{eff}} \left( \frac{3}{h^2 + k^2 + l^2} \right)^{1/2} \cos \theta_{hkl}, \quad (1.4)$$

где  $d_{111}$  – межплоскостное расстояние для системы плоскостей (111),  $\varepsilon_{eff} = n_{eff}^2$  – эффективное значение диэлектрической проницаемости ФК,  $\theta_{hkl}$  – угол падения светового пучка на систему плоскостей  $(hkl)$ . Значения  $d_{111}$  и  $d_{hkl}$  связаны соотношением:

$$d_{hkl} = d_{111} \left( \frac{3}{h^2 + k^2 + l^2} \right)^{1/2} \quad (1.5)$$

из которого следует, что  $d_{111}$  – максимальное межплоскостное расстояние среди всех  $d_{hkl}$  в ГЦК решетке.

Синтетические опалы представляют собой исключительно удобный объект для исследования брэгговской дифракции света в силу целого ряда причин. Наиболее важная определяется формулой Брэгга (1.3), из которой следует, что при характерном размере сферических частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> в несколько сотен нанометров длина волны дифрагированного света ( $\lambda_{hkl}$ ) будет попадать в видимый спектральный диапазон, который не только доступен для визуального наблюдения экспериментатором, но и прекрасно регистрируется

фотоприемниками спектральных приборов.

В результате многочисленных спектроскопических экспериментов, выполненных разными авторами, было установлено, что наблюдать брэгговскую дифракцию (и, соответственно, изучать свойства фотонной стоп-зоны) легче всего на системе ростовых плоскостей (111). Это объясняется тем, что, во-первых, стоп-зона (111) имеет самое длинноволновое положение (в геометрии  $\Gamma \rightarrow L$ ) из всех возможных ( $hkl$ ) зон, во-вторых, плоскости (111) параллельны ростовой и наиболее совершенной границе образца, что позволяет исследовать дисперсионные зависимости  $\lambda_{hkl}(\theta)$  в максимально широком телесном угле.

Формулы (1.2,1.3,1.4) предсказывают линейную зависимость брэгговской длины волны от межплоскостного расстояния  $d_{hkl}$ , которое для плоскостей (111) связано с диаметром опаловых сфер  $D$  как  $d_{(111)} = \sqrt{2/3}D$ . Поэтому положение полос в спектрах пропускания, связанных с фотонной стоп-зоной, должно иметь линейную зависимость от диаметра опаловых сфер. Такая зависимость была экспериментально продемонстрирована в одной из первых работ [137], посвященных исследованию фотонных свойств синтетических опалов (рис. 1.7). Это позволило связать наблюдаемые полосы со стоп-зоной (111).

Формулы (1.2,1.4) устанавливают связь положения фотонной стоп-зоны не только с размерами сферических частиц, образующих структуру опала, но и с углом падения света  $\theta_{int} = \theta_{hkl}$  на систему плоскостей ( $hkl$ ). Варьирование  $\theta_{int}$  позволяет определять дисперсионные зависимости и является достаточно надежным способом идентификации стоп-зон в оптических спектрах низкоконтрастных ФК. В большинстве экспериментальных работ по изучению фотонных свойств опалов измерялись дисперсионные зависимости фотонной стоп-зоны (111) [42, 74, 78, 81, 83–89, 91, 137–145]. Так, при нормальном падении  $\theta_{int} = \theta_{ext} = 0$ , согласно закону Брэгга (1.2,1.3,1.4) и соотношению

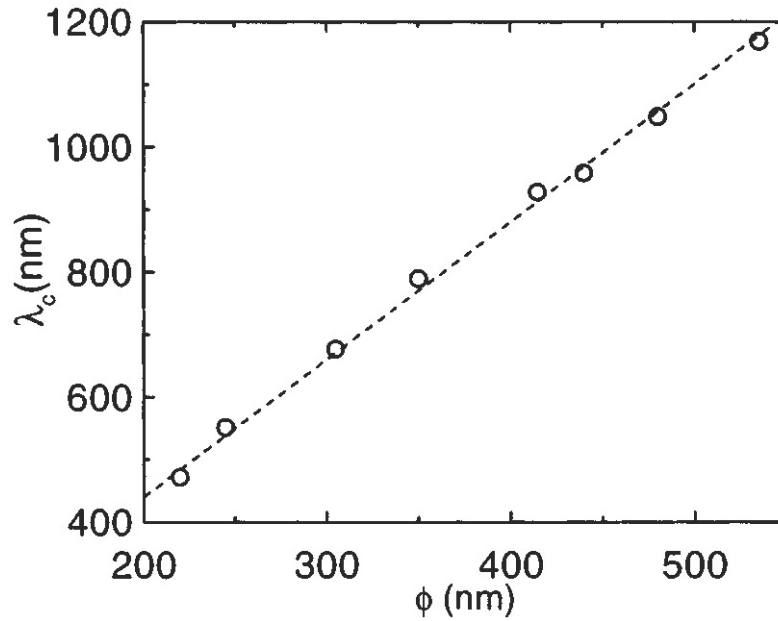


Рис. 1.7. Спектральные положения центра полосы (111) в спектрах пропускания синтетических опалов в зависимости от диаметра сферических частиц, формирующих образец. Пунктир – аппроксимация по закону Брэгга (1.3) [137].

(1.5), стоп-зона (111) занимает самое длинноволновое положение в спектрах опалоподобных ФК. По мере увеличения угла  $\theta_{int}$  спектральная полоса смещается в коротковолновую область в хорошем соответствии с законом Брэгга (рис. 1.8). Отметим, что в случае среднего и большого диэлектрического контраста  $\eta > 1.3$  таким методом удавалось однозначно интерпретировать лишь ростовую (111) стоп-зону.

В работах [85, 87, 139, 141] исследовались поляризационные зависимости фотонных стоп-зон в опалах, т.е. зависимость интенсивности спектральных полос в параллельной ( $p$ ) и перпендикулярной ( $s$ ) поляризациях относительно плоскости падения светового пучка. Было обнаружено, что в условиях низкого контраста (опал, заполненный иммерсионной жидкостью) стоп-зона (111) в  $p$ -поляризованном свете практически не наблюдается при  $\theta_{int} \sim 45^\circ$ , в то время как в  $s$ - поляризации она сохраняется [139, 141]. В работе [87] эффект исчезновения зоны в  $p$ -поляризованном свете наблюдался также в спектрах незаполненного опала, т.е. при большем диэлектрическом контра-

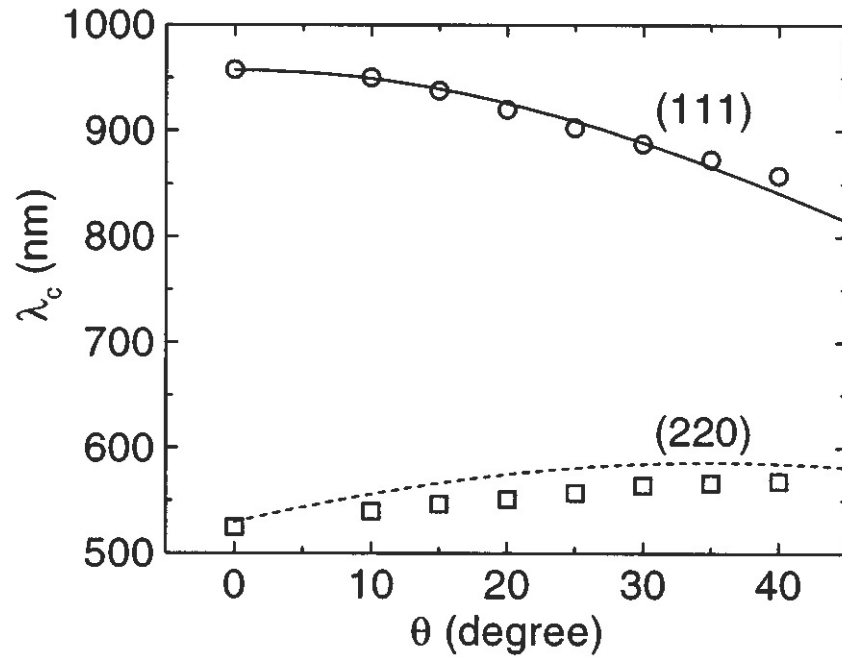


Рис. 1.8. Спектральные положения центра брэгговских полос в спектрах пропускания синтетических опалов в зависимости от угла падения света. Линии - аппроксимация по закону Брэгга (1.3) [137].

сте (рис. 1.9). По мере увеличения угла  $\theta_{ext}$  интенсивность полосы отражения в  $p$ -поляризации уменьшается и при  $\theta_{ext} \sim 50^\circ$  обращается в нуль, а при дальнейшем увеличении  $\theta_{ext}$  интенсивность полосы снова начинает возрастать [87]. В работе [85] отмечается, что такое поведение поляризованных спектров отражения аналогично эффекту Брюстера, когда под определенным углом  $p$ -поляризованный свет проходит через плоскую границу раздела двух однородных сред без отражения. Однако имеется существенная разница между этими эффектами на границе раздела двух однородных сред и в ФК. В случае ФК для каждой системы плоскостей  $(hkl)$  определяется свое значение угла  $\theta_{int}$  при котором стоп-зоны «пропадают», если отсчет вести от одного фиксированного направления (например, ростовой оси  $[111]$  в опалах). Точно так же в ФК поляризацию ( $p$ - и  $s$ -) необходимо определять относительно конкретной системы плоскостей  $(hkl)$ . В частности, луч, имеющий  $p$ -поляризацию относительно одной системы плоскостей, может быть

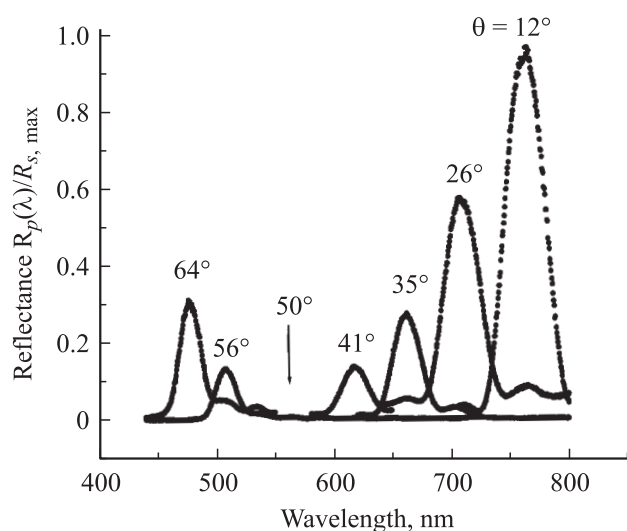


Рис. 1.9. Спектры отражения опалов в  $p$ -поляризованном свете в зависимости от угла падения  $\theta_{hkl}$ . Спектры нормировались на максимальные значения пиков отражения в  $s$ -поляризации [87].

$s$ -поляризованным относительно другой системы плоскостей. Эта ситуация подробно разбирается в работе [85]. В диссертационной работе этот эффект мы будем называть «квазибрюстерским эффектом» и обозначать через  $\theta^{qB}$  критический угол падения («квазибрюстерский угол»), при котором пропадает  $p$ -компонента в спектре отражения, т.е. соответствующая стоп-зона в  $p$ -поляризованном свете. Теоретически квазибрюстерский эффект проанализирован в Приложении Б (параграфы Б.2.2 и Б.2.3).

Далее рассмотрим кратко влияние фотонных стоп-зон на спонтанное излучение, а также возможность управления стоп-зонами. В пионерских работах Э. Яблоновича и С. Джона [1, 2] отмечалась важная особенность ФК – возможность управления спонтанной эмиссией света. Эта возможность обусловлена изменением плотности состояний электромагнитного поля внутри ФК. Ряд работ, посвященных исследованию влияния стоп-зон на испускание света, был выполнен на заполненных, инвертированных, инвертированных и снова заполненных опалах [81, 86, 146, 147]. При этом методами спектроскопии отражения и пропускания наблюдалось подавление люминесценции



в спектральных диапазонах и направлениях, соответствующих стоп-зонам (111). Кроме люминесценции, в неупорядоченных опалах также наблюдалось лазерное излучение со случайным механизмом генерации (random laser) [148], отличительным признаком которого является существование порогового значения интенсивности накачки. Одно из перспективных направлений применения ФК связано с управлением световыми потоками за счет модуляции стоп-зон [9, 10]. Для эффективного управления необходимо изменять параметры фотонных стоп-зон во времени. Один из способов перестроения стоп-зон заключается в изменении диэлектрической проницаемости компонент, образующих ФК, за счет инжекции свободных носителей. Так, в работе [90] наблюдалось изменение коэффициента отражения на 1% в области стоп-зон за время порядка 30 фемтосекунд с последующей релаксацией порядка нескольких пикосекунд. В работе [136] были исследованы опалы, заполненные оксидом ванадия  $\text{VO}_2$ , – веществом, претерпевающим фазовый переход при температуре  $T_c = 67^\circ\text{C}$ . Фазовый переход сопровождается изменением диэлектрической проницаемости, что позволяет перестраивать фотонную зонную структуру за время порядка 500 пикосекунд [149]. Альтернативой изменения диэлектрической проницаемости может служить изменение геометрических параметров ФК. С помощью механического воздействия в импульсном режиме можно изменить межплоскостное расстояние и, тем самым, модулировать брэгговскую длину волны  $\lambda_{hkl}$ . В работе [150] с помощью гиперзвуковой акустической волны была получена модуляция (с периодом порядка 100 пикосекунд) коэффициента отражения в области стоп-зоны.

### 1.3.2. Исследование фотонной зонной структуры опалов

Под фотонной зонной структурой будем понимать зависимость энергетического положения запрещенных фотонных зон от направления волнового

вектора света  $E(\mathbf{k})$  (т.е. дисперсионные зависимости фотонных зон) при сканировании волнового вектора падающей световой волны  $\mathbf{k}$  по всей поверхности зоны Бриллюэна (ЗБ). Синтетические опалы характеризуются двойникованной ГЦК-решеткой, поэтому необходимо рассматривать две соответствующим образом совмещенные ЗБ ГЦК – решетки [73–76, 84].

Как уже отмечалось, в большинстве ранних экспериментальных работ исследовались только фотонные стоп-зоны (111). Это обусловлено тем, что системы ростовых плоскостей (111) наиболее упорядочены, следовательно, связанные с ними спектральные особенности проявляются наиболее ярко. Кроме того, ростовая поверхность (111) является наиболее совершенной поверхностью в образцах опалов. Заметим, что угол между направлениями  $[111]$  и  $\langle \bar{1}11 \rangle$  составляет величину близкую к  $70^\circ$ . Таким образом, внутренние углы  $\theta_{int}$ , необходимые для исследования фотонных запрещенных зон, соответствующих неростовым системам плоскостей  $\{111\}$ , при существенном преломлении света на границе образца фактически недостижимы. Однако при использовании иммерсионного метода влиянием преломления и рассеяния света на границе можно пренебречь, что позволяет исследовать брэгговское отражение света от систем плоскостей, произвольно ориентированных в ГЦК – решетке.

Впервые фотонная зонная структура низкоконтрастных синтетических опалов экспериментально была исследована по спектрам оптического пропускания в работах [74, 84] (рис. 1.10). Наблюдаемая дисперсия стоп-зон  $E(\mathbf{k})$  сравнивалась с зависимостями  $\lambda_{hkl}(\theta)$ , полученными на основе теории брэгговской дифракции световых волн на отдельных системах плоскостей  $(hkl)$  кристаллической решетки опалов и рассчитанными по формуле (1.4). В результате такого сравнения установлено, что в исследованном спектральном интервале экспериментальная зависимость  $E(\mathbf{k})$  хорошо описывается совокупностью дисперсионных зависимостей  $\lambda_{hkl}(\theta)$ , обусловленных брэгговской

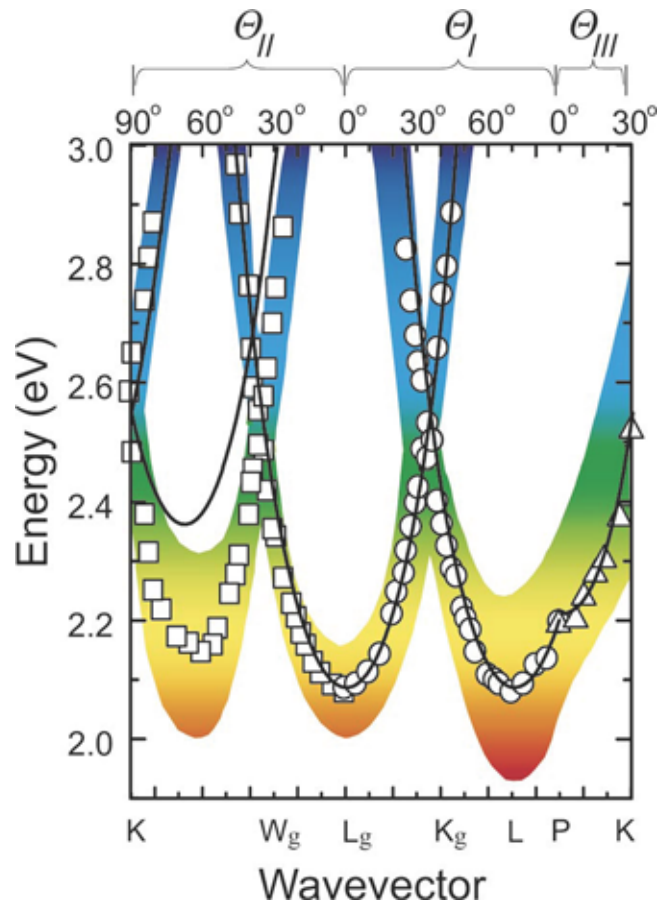


Рис. 1.10. Экспериментально измеренная фотонная зонная структура синтетических опалов. Значкам отмечено положение минимумов пропускания. Цветная заливка определяет полуширину полос в спектрах пропускания. Сплошные линии – расчет по формуле (1.4) [74].

дифракцией на плоскостях семейства  $\{111\}$  двойникованной ГЦК- решетки опалов. Более высокоиндексные  $(hkl)$  стоп-зоны в работах [74, 84] не изучались.

Интересным эффектом, который наблюдается в процессе исследования фотонной зонной структуры, является многоволновая брэгговская дифракция света. Многоволновая брэгговская дифракция возникает, когда брэгговские условия выполняются для двух систем плоскостей  $(h_1k_1l_1)$  и  $(h_2k_2l_2)$  одновременно, т.е. когда при фиксированном волновом векторе  $\mathbf{k}$  (фиксированный угол падения  $\theta_{int}$ ) выполняется соотношение  $\lambda_{h_1k_1l_1} = \lambda_{h_2k_2l_2}$ . В работе [139] были исследованы спектры зеркального отражения в зависимости от

относительной ориентации образца инвертированного опала (воздушные сферы в  $\text{TiO}_2$ ) и падающего луча. При этом фиксировалась плоскость падения, определённая относительно системы ростовых плоскостей (111). В обратном пространстве эта геометрия эксперимента соответствует изменению волнового вектора  $\mathbf{k}$  в плоскости, проходящей через точки  $\Gamma$ , X и L ЗБ ГЦК решетки. Угол падения  $\theta$  отсчитывался от направления роста кристалла  $[111]$  ( $\Gamma \rightarrow L$ ) в сторону, соответствующую направлению  $[200]$  ( $\Gamma \rightarrow X$ ). При малых углах наблюдается один пик, частотное положение максимума которого соответствует брэгговскому отражению от систем плоскостей (111), определяемое формулой (1.4). При увеличении угла  $\theta$  и приближении к области многоволновой брэгговской дифракции, то есть к точке U ЗБ [брэгговское условие выполняется одновременно для двух систем плоскостей (111) и (200)], возникает дублетная структура (рис. 1.11), то есть появляется второй пик, связанный с отражением от системы плоскостей (200) и расположенный в области более коротких длин волн. Интенсивность коротковолнового пика возрастает. Пики двигаются навстречу друг другу, при этом положения их максимумов перестают удовлетворять условию Брэгга. Далее, после прохождения точки U, расстояние между пиками начинает увеличиваться, и интенсивность длинноволнового пика начинает уменьшаться. После прохождения области многоволновой дифракции теперь уже положение коротковолнового пика удовлетворяет формуле (1.4). После работы [139] многоволновую дифракцию наблюдали как в незаполненных, так и в заполненных опалах с разным диэлектрическим контрастом [87, 89, 91, 140, 142, 143, 145].

### 1.3.3. Дифракционная методика исследования фотонных стоп-зон

Фотонные стоп-зоны в периодических структурах возникают благодаря брэгговской дифракции света, поэтому одним из самых естественных методов

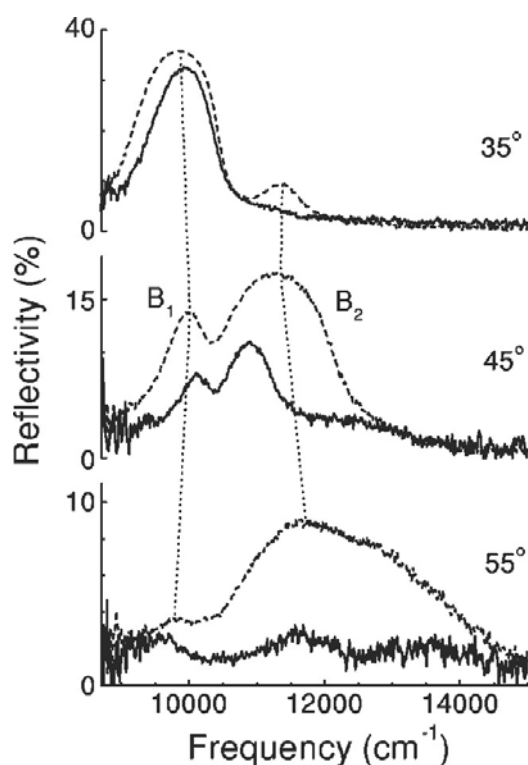


Рис. 1.11. Спектры брэгговского отражения света инвертированного опала при углах падения  $35^\circ$ ,  $45^\circ$  и  $55^\circ$  для  $s$ - (пунктирные кривые) и  $p$ -поляризацій (сплошные кривые). Вертикальные пунктирные кривые соединяют положения максимумов в  $s$ -поляризации [139].

исследования стоп-зон в ФК является изучение трехмерных дифракционных картин. Фактически речь идет об оптическом аналоге рентгеноструктурного анализа кристаллической решетки. Синтетические опалы являются идеальным объектом для дифракционных исследований, т.к. состоят из квазисферических частиц  $\alpha\text{-SiO}_2$  диаметром в несколько сотен нанометров, что обуславливает брэгговскую дифракцию в видимом спектральном диапазоне [см. формулы (1.2,1.3,1.4)], которая наблюдается непосредственно глазами экспериментатора.

Благодаря высокому качеству отдельных образцов синтетических опалов брэгговская дифракция на системах плоскостей ГЦК-решетки имеет ярко выраженную индикатрису рассеяния, и отраженный пучок легко проектируется на матовый экран. Таким образом, дифракционная методика, детально раз-

работанная в работах [73–75], позволяет визуализировать стоп-зоны, которые наблюдаются на экране как набор четких пятен-рефлексов (рис. 1.12). В работе [74] благодаря параллельному исследованию картин дифракции и спектров пропускания опалов было установлено однозначное соответствие между дифракционными рефлексами и характерными полосами в спектрах пропускания (рис. 1.10). В свою очередь, эти полосы были однозначно связаны с  $(hkl)$  стоп-зонами.

Благодаря дифракционным экспериментам наблюдалось двойникование ГЦК решетки опалов: дифракционные картины, которые были получены в экспериментах с типичными образцами опалов, содержали удвоенное количество рефлексов по отношению к ожидаемому числу и пространственному положению для идеальной ГЦК решетки [73–75]. Отметим, что на ряде образцов картина двойникования практически отсутствовала – это были образцы наивысшего качества, на которых проводились основные спектроскопические исследования, представленные в данной диссертационной работе.

Следует упомянуть еще две публикации [151] и [152], авторы которых также наблюдали дифракционные картины при падении лазерного излучения вдоль ростовой оси [111] опалоподобных пленочных ФК (собранных из полимерных сфер). Однако в этих работах дифракционные рефлексы не сопоставлялись с определенными  $(hkl)$  стоп-зонами.

#### **1.4. Влияние дефектов и неупорядоченности структуры на оптические параметры фотонных кристаллов**

В данном параграфе мы обратим внимание на одно принципиальное различие между «обычными» кристаллами и ФК. Обычные кристаллы состоят из абсолютно идентичных атомов, в то время как в ФК роль атомов выполняют «рукотворные» частицы субмикронных размеров, которым генетически

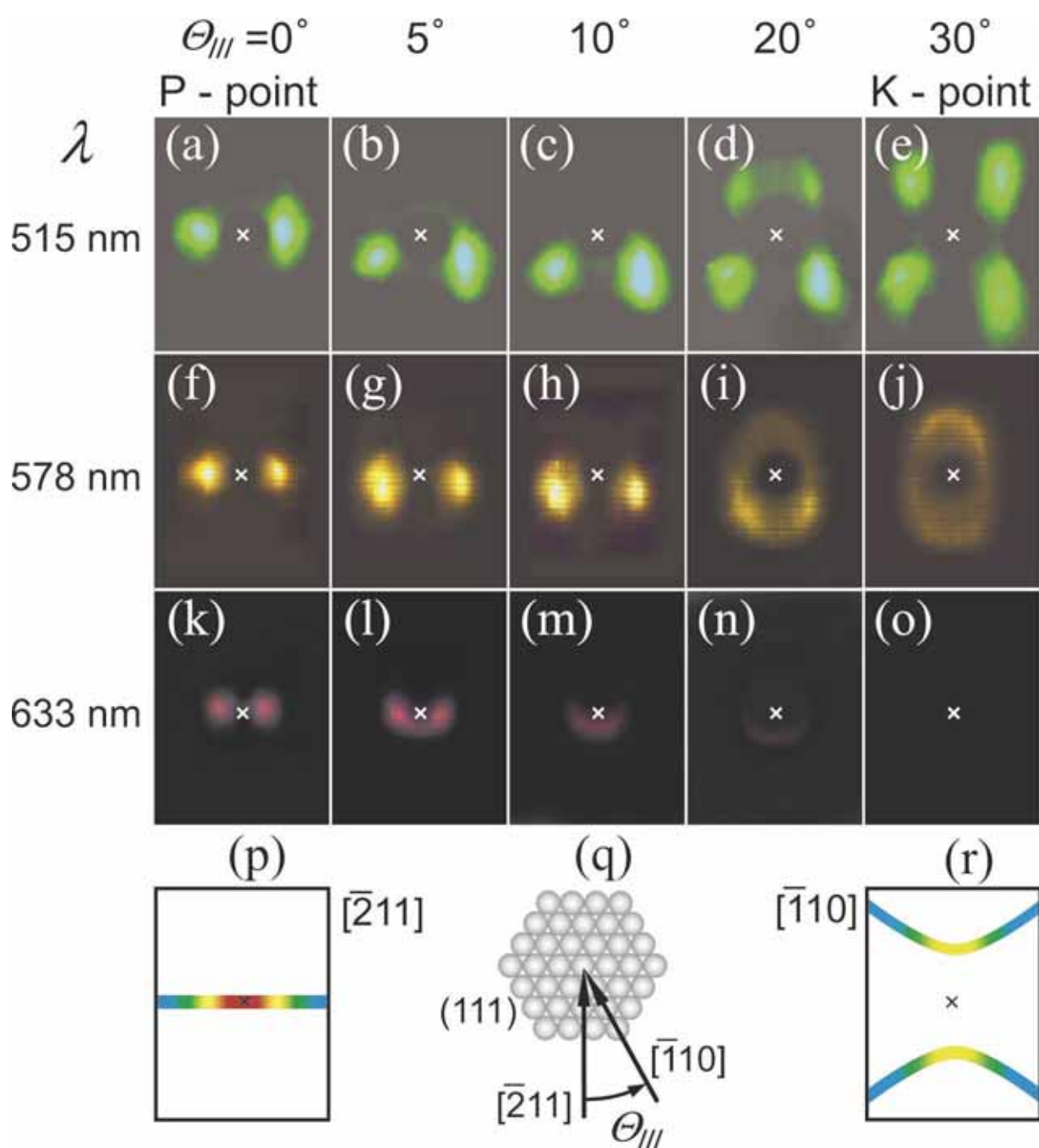


Рис. 1.12. (а-о) Картины дифракции света на образце опала, заполненном изопропиловым спиртом, при изменении ориентации образца относительно падающего луча  $[\bar{2}11] \rightarrow [\bar{1}10]$ , для трех длин волн лазерного излучения 515, 578 и 633 нм. Расчет положения дифракционных пятен на экране для геометрии рассеяния  $[\bar{2}11]$  (р) и  $[\bar{1}10]$  (г). (q) Геометрия эксперимента: направление падающего пучка относительно ростового слоя (111) [74].

присущи вариации в размерах, форме, диэлектрических параметрах. Например, в тонких 2D ФК наблюдается небольшая степень конусности отверстий, т.е. неконтролируемое отклонение от желаемой геометрии рассеивателя, которое присуще каждой ячейке. Такая неупорядоченность структуры неизбежно отражается на оптических свойствах ФК.

Обсуждая влияние неупорядоченности на оптические свойства ФК следует отдельно упомянуть дефекты, которые специально вводятся в структуру ФК (волноводы, микрорезонаторы) для получения определенных фотонных свойств. Кроме того, отметим, что любые образцы обладают границами, которые можно рассматривать как неизбежный дефект, влияющий на степень связывания света с состояниями внутри ФК [153], а также приводящий к возникновению поверхностных мод [9, 154].

Остановимся теперь на специфической для ФК неупорядоченности, которая обусловлена тем, что в реальном образце все рассеиватели уникальны, при этом в той или иной мере варьируется положение рассеивателя, его геометрическая форма (в том числе размеры), а также значение диэлектрической проницаемости. При описании оптических свойств фотонные кристаллы можно представить как объекты, обладающие периодичностью в среднем [155]. При этом вводится виртуальная кристаллическая решетка и рассеиватель, а реальный образец следует рассматривать как структуру, состоящую из рассеивателей со случайным отклонением индивидуальных параметров. Большое количество теоретических работ посвящено исследованию эффектов неупорядоченности в 1D структурах [156–160], так как в этом случае можно применить метод матриц переноса, позволяющий получить точное решение (см. разд. 1.6.1 далее). Также проводились исследования влияния беспорядка на оптические характеристики 2D [161, 162] и 3D [163–166] ФК. В этих статьях, в основном, анализируются результаты численных расчетов оптических спектров. При этом вводится параметр  $\delta$ , характеризующий степень



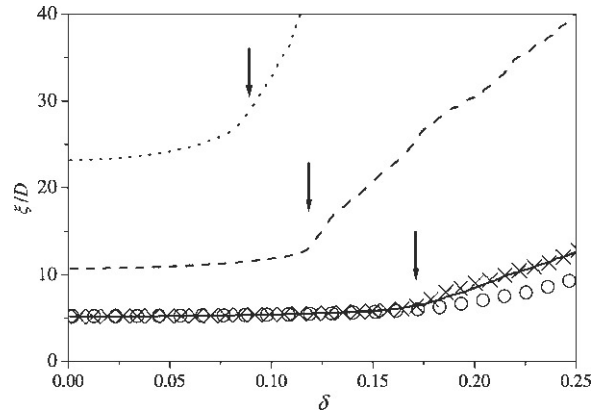


Рис. 1.13. Расчет длины свободного пробега фотона в центре запрещенной зоны в зависимости от степени неупорядоченности  $\delta$  1D структуры. Приведены расчеты для трех структур с разной степенью модуляции диэлектрической проницаемости (диэлектрическим контрастом). Пороговое значение  $\delta_t$  отмечено стрелками. Символы соответствуют «перенормировке» кривых по формуле ( $\xi \rightarrow \xi/\alpha; \delta \rightarrow \delta/\sqrt{\alpha}$ ) [159].

неупорядоченности.

Для количественного анализа в качестве измеряемого параметра обычно используют полуширину или интенсивность пика в спектрах отражения либо полосы в спектрах пропускания, которые связаны со стоп-зоной. Было показано, что при малых значениях параметра  $\delta$  наблюдается незначительное изменение полуширины и интенсивности полос, по сравнению с идеальной структурой. Однако существует пороговое значение для параметра  $\delta = \delta_t$  (рис. 1.13), после достижения которого наблюдается резкое размытие спектральных особенностей (полос, связанных со стоп-зонами).

В экспериментальной работе [167] исследовались образцы опалов, которые отличались по полуширине нормального распределения диаметров сфер (параметр  $\delta$ ), образующих ФК (рис. 1.14). При этом наблюдалось качественное соответствие с результатами теоретических работ, т.е. пороговый характер зависимости интенсивности и полуширины пика отражения полосы (111) от степени неупорядоченности образца.

В работе [168] исследовались бинарные ФК. Образцы состояли из смеси по-

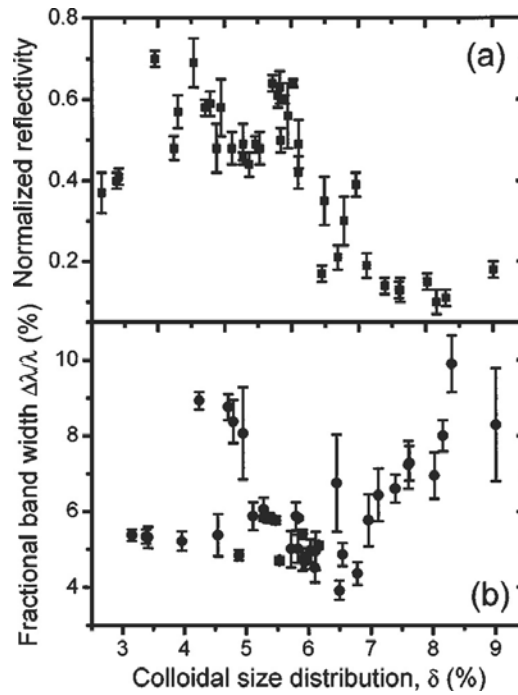


Рис. 1.14. Измеренная интенсивность (а) и полуширина (б) пика, связанного с (111) стоп-зоной, в спектрах отражения образцов синтетических опалов в зависимости от степени неупорядоченности  $\delta$ . Степень неупорядоченности  $\delta$  соответствует полуширине распределения диаметров сфер [167].

лимерных сфер двух сортов (полиметилметакрилат – PMMA и полистирол – PS), отличающиеся диаметром ( $\alpha_D \equiv D_{PMMA}/D_{PS}$ ) и диэлектрической проницаемостью ( $\epsilon_{PMMA} = 1.5$ ,  $\epsilon_{PS} = 1.6$ ). Изучался два типа неупорядоченности: по геометрическим параметрам и по диэлектрической проницаемости. При больших значениях  $\alpha_D = 1.3$ -2.6 по сравнению с отношением диэлектрических проницаемостей ( $\epsilon_{PMMA}/\epsilon_{PS} = 0.94$ ) можно изучать эффекты, связанные с геометрической неупорядоченностью. Результаты обработки максимума интенсивности полосы в спектрах отражения в зависимости от концентрации сфер большего диаметра представлены на рис. 1.15. Максимум интенсивности полосы отражения не демонстрирует выраженного порогового характера в зависимости от концентрации больших сфер. Эта зависимость напоминает экспоненциальную. При проведении экспериментов по изучению второго типа неупорядоченности (по диэлектрической проница-

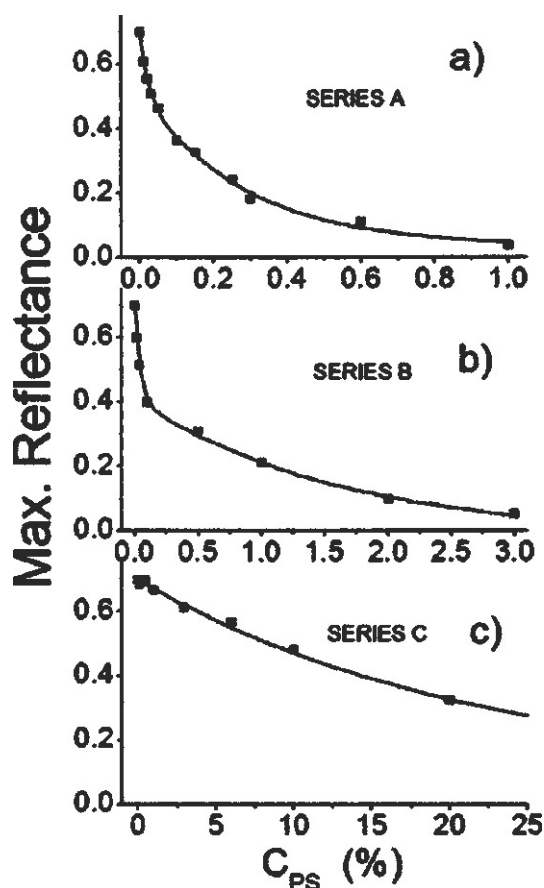


Рис. 1.15. Измеренная интенсивность пика, связанного с (111) стоп-зоной, в спектрах отражения образцов бинарных синтетических опалов в зависимости от степени неупорядоченности  $\delta$ . Степень неупорядоченности  $\delta$  соответствует концентрации полистироловых сфер  $C_{PS}$  бóльшего диаметра. Отношение диаметров  $D_{PMMA}/D_{PS} = 2.59$  (a), 1.63 (b), 1.30 (c) [168].

емости) измерялись спектры отражения образцов, приготовленных из смеси сфер с  $\alpha_D = 0.96$ . В этих экспериментах существенным является влияние неоднородности, связанной с изменением диэлектрической проницаемости сферических частиц. В зависимости от концентрации полистироловых сфер наблюдалось плавное смещение спектрального положения полосы без существенных изменений как полуширины, так и интенсивности (рис. 1.16).

Результаты этих работ указывают на то, что при  $\delta < \delta_t$  фотонные свойства образцов соответствуют свойствам идеальной структуры, состоящей из рассеивателей с усредненными параметрами. При  $\delta > \delta_t$  фотонные свойства

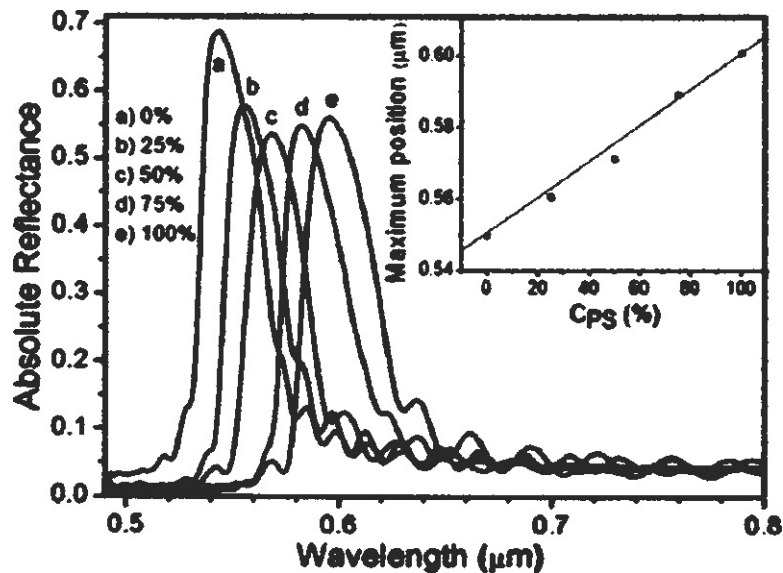


Рис. 1.16. Спектры отражения бинарного ФК состоящего из смеси сфер полиметилметакрилата и полистирола близкого диаметра. Степень неупорядоченности  $\delta$  соответствует концентрации полистироловых сфер  $C_{PS}$ . На вставке значками обозначено измеренное спектральное положение пика полосы отражения. Сплошной линией приведен расчет по закону Брэгга (1.3) для усредненных параметров в зависимости от  $\delta = C_{PS}$  [168].

образцов заметно деградируют.

Стоит выделить группу работ [163, 169–171], в которых исследуется баллистическое рассеяние света на дефектах в синтетических опалах. В баллистической модели, основанной на геометрической оптике, рассматривают «траекторию» луча, как ломаную линию (точки излома соответствуют актам рассеяния на дефектах). Заметим, что положение наиболее интенсивной в спектрах пропускания стоп-зоны (111) зависит от направления волнового вектора. Следовательно, спектр рассеяния должен содержать несколько полос (111), количество которых связано с числом точек излома «траектории» луча. В экспериментах по исследованию рассеяния света в различные направления передней полусферы [171] наблюдались две полосы. По-видимому, это связано с тем, что наиболее вероятен процесс с единичным актом рассеяния (одна точка излома). Первую полосу можно интерпретировать как проявление стоп-зоны для направления луча до точки излома, а вторую – как про-

явление стоп-зоны для направления после точки излома. Оба направления контролируются в эксперименте.

## 1.5. Многокомпонентные фотонные кристаллы

В большинстве теоретических и экспериментальных работ ФК рассматриваются как двухкомпонентные структуры, состоящие из двух однородных компонент с диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ . Важным свойством двухкомпонентных ФК является полное просветление структуры, т.е. одновременное «выключение» всех стоп-зон при отсутствии диэлектрического контраста ( $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ ). Вплоть до последнего времени структуры опал-заполнитель рассматривались как двухкомпонентные ФК, образованные однородными частицами  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> и однородным заполнителем. При этом считалось, что хорошо известная неоднородность частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> [64] не оказывает существенного влияния на оптические свойства опалоподобных ФК.

Недавно [30] было обнаружено, что в опалах фотонные стоп-зоны, связанные с системами плоскостей (111), (200) и (220), выключаются при различных значениях диэлектрической проницаемости заполнителя (рис. 1.17). Такая картина не согласуется с двухкомпонентной моделью ФК на основе синтетических опалов. Поэтому в работе [30] было введено новое понятие - многокомпонентные ФК, т.е. ФК, которые состоят из трех или более однородных компонент, или из неоднородных компонент. На основании экспериментальных данных был сделан вывод о том, что опалы принадлежат к классу многокомпонентных ФК вследствие неоднородности квазисферических частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>.

Для теоретического описания наблюдавшихся эффектов была разработана аналитическая модель, которая позволяет определять условия пропадания («выключения») фотонных стоп-зон в низкоконтрастных многокомпо-

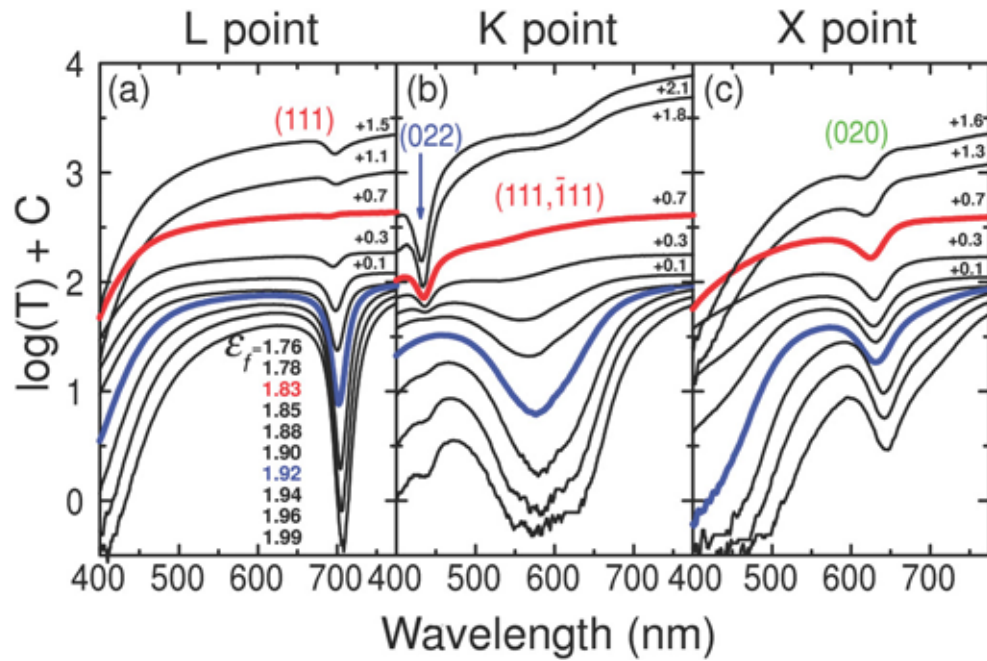


Рис. 1.17. Спектры пропускания синтетических опалов в геометриях  $\Gamma \rightarrow L$ ,  $\Gamma \rightarrow K$  и  $\Gamma \rightarrow X$  в зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\epsilon_f$ , которая менялась в диапазоне  $1.76 < \epsilon_f < 1.99$ . Спектры смещены по оси ординат на указанную величину. Красным цветом отмечены спектры для  $\epsilon_f = 1.83$  – исчезновение стоп-зон  $\{111\}$ ; синим цветом –  $\epsilon_f = 1.92$  – исчезновение стоп-зон  $\{220\}$  [30].

ментных ФК в зависимости от диэлектрических и структурных параметров, симметрии кристаллической решетки. Модель предполагает анализ структурного фактора рассеяния, и основана на том, что условие пропадаания брэгговской дифракции света на системе плоскостей  $(hkl)$  (условие обращения структурного фактора рассеяния в ноль) соответствует условию пропадаания соответствующей  $(hkl)$  фотонной стоп-зоны. Многокомпонентность структуры опала была учтена при моделировании диэлектрического профиля частиц  $\alpha\text{-SiO}_2$ : зависимость от радиуса сферы была представлена в виде кусочно-линейной функции, состоящей из двух частей: постоянная величина в основном объеме сферы и линейно возрастающая функция вблизи поверхности сферы. Эта модель позволила успешно описать все полученные экспериментальные данные [30].

## 1.6. Вычислительные методы

Теоретические исследования оптических свойств ФК во многом опираются на хорошо разработанные в физике твердого тела подходы к расчетам электронных состояний. Тем не менее, проводя аналогию между электронной и фотонной зонными структурами следует учитывать существенные различия. Укажем два основных различия, одно из которых усложняет расчеты, а другое существенно упрощает. Во-первых, в случае с электронами успешно используется приближение скалярных волн. Однако такое приближение неприменимо в случае ФК: векторный характер электромагнитного поля оказывает существенное влияние на фотонную зонную структуру. Во-вторых, при расчетах электронной зонной структуры учитывается электрон-электронное взаимодействие в рамках приближения самосогласованного поля, в то время как отсутствие фотон-фотонного взаимодействия позволяет достаточно точно (без привлечения дополнительных приближений) вычислять фотонную зонную структуру, а также спектры пропускания и отражения света, исходя из известного распределения диэлектрической проницаемости [9–11].

### 1.6.1. Метод матриц переноса

Наиболее простым и быстрым методом решения электродинамической задачи является метод матриц переноса (см., например, [172–174]). К сожалению, этот метод имеет один существенный недостаток – он применим только к 1D ФК. Метод основан на том, что электромагнитное поле до и после границы раздела двух сред можно связать с помощью так называемой матрицы переноса.

В одномерном случае есть несколько способов однозначно задать монохроматическое электромагнитное поле. Например, можно задавать поле амплитудами волн  $E_-$  и  $E_+$ , бегущих в сторону уменьшения и увеличения ко-

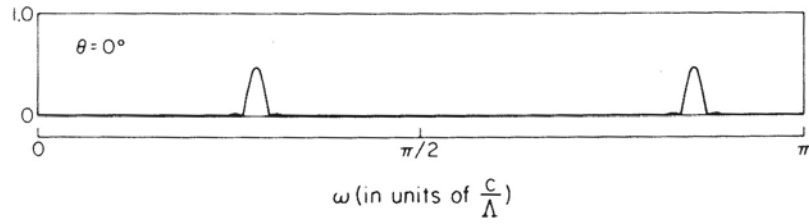


Рис. 1.18. Спектры отражения 1D ФК с 15 периодами, вычисленные методом матриц переноса [174].

ординат соответственно; можно задавать значения электрического поля  $E$  и магнитного поля  $H$ , что равносильно заданию начальных условий, т.е. значения функции и ее производной. Существуют и другие способы задания поля. С точки зрения линейной алгебры разные способы соответствуют значениям некоторого вектора в разных системах координат. При проведении расчетов удобнее работать в базисе  $(E, H)$ , так как исходя из граничных условий уравнений Максвелла при прохождении волны через интерфейс (раздел двух сред с разными значениями диэлектрической проницаемости) пара  $(E, H)$  сохраняется. При этом матрица переноса (распространения) электромагнитной волны по однородной среде записывается в следующем виде

$$M = \begin{pmatrix} \cos(kdn) & -i \sin(kdn)/n \\ -in \sin(kdn) & \cos(kdn) \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

где  $n$  – коэффициент преломления среды,  $k = \omega/c$  – модуль волнового вектора в вакууме,  $d$  – расстояние, на которое распространяется свет (толщина однородного слоя). В результате, путем перемножения матриц (1.6) можно связать значение поля на границах 1D ФК, т.е. можно вычислить спектры пропускания и отражения (см., напр., рис. 1.18).

### 1.6.2. Метод разложения по плоским волнам

Помимо вычисления спектров пропускания и рассеяния ФК, важной задачей является расчет фотонной зонной структуры (рис. 1.19). Здесь, как обыч-



но, под фотонной зонной структурой мы будем понимать значение собственных энергий в зависимости от направления распространения волны  $E(\mathbf{k})$ . Разложение электромагнитного поля по базису плоских волн (метод Фурье) представляет собой наиболее общий подход к расчету фотонной зонной структуры [9–11]. Этот метод подробно изложен в Приложении А и, вкратце, сводится к следующему. На первом этапе система дифференциальных уравнений Максвелла записывается в виде задачи на собственные значения. Далее, дифференциальная задача сводится к линейной алгебраической путем разложения искомого поля по базису плоских волн (преобразования Фурье). В этом базисе дифференциальный оператор представляется бесконечномерной матрицей. На заключительном этапе численно решается секулярное уравнение большой размерности. Впервые для системы векторных уравнений Максвелла метод плоских волн был представлен в работе [27]. В последующих работах исследовалась сходимость [175], обсуждались вопросы, связанные с повышением точности [176], а также предлагались методы численного решения задачи [177].

### 1.6.3. Другие вычислительные методы

Для ФК, состоящих из сферических частиц, при вычислении оптических свойств целесообразно использовать симметрию рассеивателей. В случае обычных кристаллов задача по расчету электронной зонной структуры решается методом ККР (аббревиатура образована по фамилиям Корринги (J. Korringa) [178], Кона и Ростокера (W. Kohn, N. Rostoker) [179], предложившим данный подход для расчета электронной зонной структуры. Для расчета зонной структуры ФК метод ККР был адаптирован в ряде работ (напр., [180, 181]), а для вычисления спектров пропускания разработан метод «послойного ККР» (напр., [182]). В рамках метода ККР рассматриваются два ключевых фак-

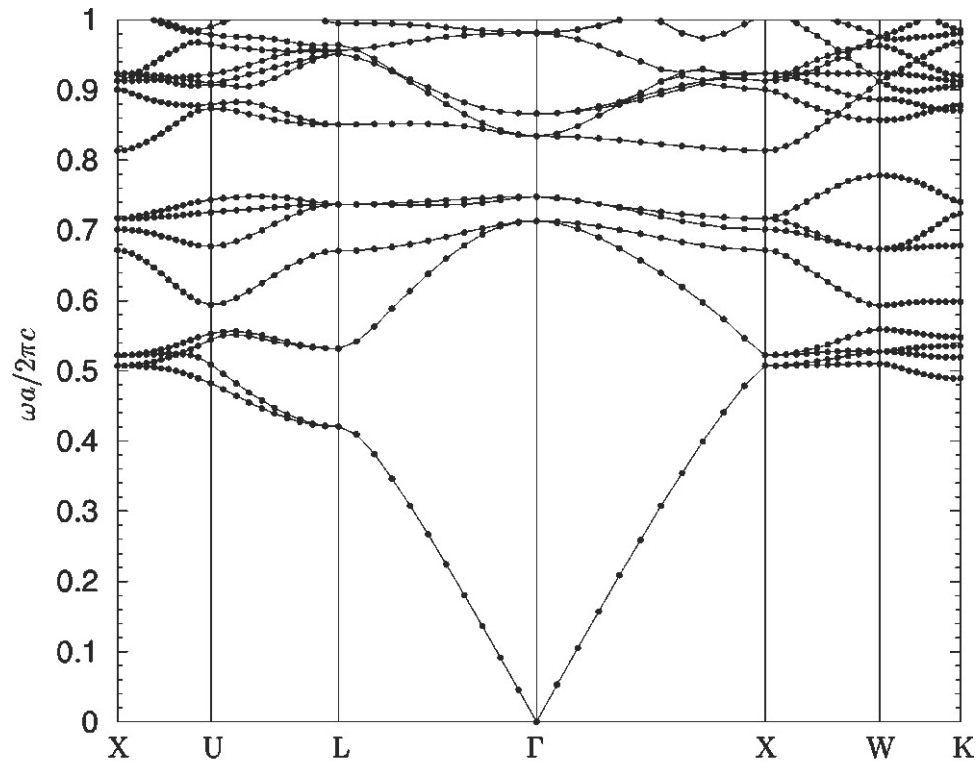


Рис. 1.19. Фотонная зонная структура инвертированного опала (воздушные сферы в кремнии  $\epsilon_{Si} \approx 11.9$ ), рассчитанная методом разложения электромагнитного поля по базису плоских волн [28].

тора, определяющие фотонную зонную структуру: (i) как волна рассеивается на изолированном рассеивателе; (ii) как рассеиватели распределены в пространстве. Решение первой задачи представляют через функцию Грина. Что касается второй задачи, то используется тот факт, что в межсферном пространстве поле удобно записать в виде разложения по плоским волнам. Остается «сшить» решения внутри и вне сферы.

Помимо метода послойного ККР, для расчетов оптических спектров ФК широко используется численный метод конечных разностей во временной области (FDTD - Finite-difference time-domain) [183, 184]. Кроме того, применяется так называемый «трехмерный метод матриц переноса» [185], двухволновой метод [186, 187], метод матриц рассеяния [188], а также метод приближения планарного усреднения среды [91, 189].

## 1.7. Постановка задачи

История исследований ФК на основе синтетических опалов берет свое начало с работы [81], вышедшей в 1995 г. Таким образом, уже более 10 лет во многих лабораториях мира интенсивно исследуются эти объекты, число публикаций по опалам давно перешагнуло рубеж первой сотни, а сами опалы вполне заслуженно относят к модельным объектам для исследования фотонных свойств 3D ФК в видимом спектральном диапазоне. Для исследователя, который планирует продолжить изучение опалов, в подобной ситуации есть и плюсы, и минусы. Очевидным недостатком является сам факт многочисленных публикаций, которые продолжают появляться в ведущих журналах и, шаг за шагом, планомерно устраняют оставшиеся «белые пятна» в наших знаниях об опалоподобных ФК. Тем не менее, мы ориентировались на наши преимущества, которые заключаются в солидном теоретическом базисе, современном экспериментальном оборудовании и, конечно, в наших библиографических знаниях о структурных и фотонных свойствах синтетических опалов. Кроме того, мы обладаем образцами синтетических опалов высокого оптического качества. Эти факторы позволяли надеяться на то, что в процессе выполнения диссертационной работы будут обнаружены новые интересные свойства ФК на основе синтетических опалов.

В данной работе решались следующие основные задачи:

1. Поиск и исследование высокоиндексных семейств фотонных стоп-зон.

Согласно литературным данным, при исследовании низкоконтрастных ФК на основе опалов наблюдались стоп-зоны, связанные с «низкоиндексными» системами плоскостей  $\{111\}$ ,  $\{200\}$  и  $\{220\}$ . Что касается фотонной зонной структуры (т.е. совокупности дисперсионных зависимостей  $(hkl)$  стоп-зон), то она была экспериментально измерена, во-первых, в неполяризованном свете и, во-вторых, в ограниченном спектраль-

ном интервале, который охватывал стоп-зоны семейства  $\{111\}$ . Поэтому первая задача, которая ставилась в данной работе, состояла в обнаружении, интерпретации и исследовании дисперсионных зависимостей «высокоиндексных»  $(hkl)$  стоп-зон в синтетических опалах. Целью данной работы является построение фотонной зонной структуры опалов и изучение ее модификации в зависимости от поляризации света и контраста диэлектрической проницаемости.

## 2. Теоретическое и экспериментальное исследование многокомпонентных ФК.

Следующей задачей является продолжение теоретических и экспериментальных исследований многокомпонентных ФК, начало которым было положено в работе [30]. Теоретическая часть диссертационной работы направлена на разработку модели трехкомпонентного ФК, т.е. структуры, состоящей из трех однородных компонент. С одной стороны, такая структура обладает всеми свойствами многокомпонентных ФК, с другой стороны, наличие всего трех однородных компонент позволяет получить аналитические выражения для описания эффектов селективного переключения стоп-зон и представить их в виде наглядного графического материала. Экспериментальная часть будет оригинальной в том случае, если в ходе выполнения планируемой работы будут обнаружены и исследованы новые семейства стоп-зон  $\{hkl\}$  в дополнение к исследованным ранее семействам  $\{111\}$ ,  $\{200\}$  и  $\{220\}$ . Тогда появится возможность провести достаточно детальное исследование эффекта селективного выключения  $(hkl)$  стоп-зон, присущего многокомпонентным ФК, на основе обширного экспериментального материала. При этом особый интерес представляет поиск так называемых резонансных стоп-зон, которые, несмотря на свою брэгговскую природу, практически не зави-

сят от контраста диэлектрической проницаемости ФК.

3. Прецизионное исследование процесса выключения стоп-зон в опалах при изменении диэлектрического контраста.

Физические явления, связанные с качественными изменениями физических свойств или параметров вещества, всегда вызывают пристальный интерес исследователей. К такому явлению несомненно относится просветление фотонного кристалла при пропадании диэлектрического контраста. Что происходит при этом с брэгговской дифракцией и, соответственно, с фотонными стоп-зонами? Ответ на этот вопрос далек от тривиального, особенно если учесть, что во-первых, сферы  $a\text{-SiO}_2$  неоднородны по размерам и структуре (т.е. по диэлектрической проницаемости), во-вторых, что разные семейства стоп-зон выключаются в опалах при разных значениях диэлектрической проницаемости заполнителя, и, более того, теория предсказывает существование невыключаемых резонансных стоп-зон. Таким образом, еще одной задачей данной работы являлось прецизионное исследование процесса выключения стоп-зоны методом иммерсионной спектроскопии на примере наиболее интенсивной и хорошо разрешенной в спектрах пропускания полосы (111).

## Глава 2

# Экспериментальные методики и характеризация образцов

В этой главе обсуждаются экспериментальные методики, использованные в ходе выполнения диссертационной работы. В первой части приведено общее описание и основные параметры использованного оборудования, в том числе специально разработанного для выполнения поставленных задач. Во второй части излагается методика определения статистических характеристик ансамбля частиц  $a\text{-SiO}_2$  в синтетических опалах. Методика основана на обработке изображений опалов, полученных с помощью электронной микроскопии. Для вычисления статистических параметров был разработан оригинальный алгоритм, позволяющий независимо определять диаметр каждой частицы  $a\text{-SiO}_2$  и координаты ее центра. Основу алгоритма составляет процедура распознавания объектов, границы которых обладают радиальной симметрией, с помощью преобразования исходного изображения, аналогичного преобразованию Хо.

### 2.1. Методы экспериментального исследования стоп-зон

Прежде чем приступить к описанию экспериментальных методик, следует уточнить объект исследования, т.е. ответить на два вопроса: что такое фотонная стоп-зона и как наблюдать ее экспериментально?

В случае 1D ФК с определением понятия «стоп-зона» существенных проблем не возникает: стоп-зона – это диапазон энергий, в котором распространение света запрещено. Однако уже на этом этапе необходимо сделать одно замечание. Под термином «запрещено» следует понимать факт отсутствия

собственных состояний электромагнитного поля с квазиволновым чисто вещественным вектором, при этом нужно различать стоп-зоны для  $p$ - и  $s$ -поляризации.

Теперь перейдем к обсуждению второго вопроса - об экспериментальном наблюдении стоп-зон. Если в идеальном ФК электромагнитные состояния, соответствующие стоп-зоне, отсутствуют, то в оптическом эксперименте можно наблюдать узкую (сравнимую с теоретической шириной стоп-зоны) спектральную особенность. Для этого на ориентированный образец ФК направляют пучок белого света. Считая поглощение среды пренебрежимо малой величиной, можно написать закон сохранения энергии в виде

$$\int d\Omega \frac{d\sigma(\lambda)}{d\Omega} + T(\lambda) = 1, \quad (2.1)$$

где  $\frac{d\sigma(\lambda)}{d\Omega}$  – дифференциальное сечение рассеяния в телесный угол  $d\Omega$ ,  $T(\lambda)$  – коэффициент пропускания,  $\lambda$  - длина волны. Формула (2.1) показывает, что эксперименты по исследованию рассеянного и прошедшего света взаимно дополняют друг друга. В условиях малого диэлектрического контраста за формирование ( $hkl$ ) стоп-зоны отвечает брэгговская дифракция света на системе кристаллографических плоскостей ( $hkl$ ), а, следовательно, дифрагированное излучение обладает выраженной индикатрисой рассеяния. Таким образом, формула (2.1) свидетельствует о том, что анализировать стоп-зоны можно различными методами: измеряя спектры пропускания, отражения и анализируя дифракционные картины (рис. 2.1). Выбор конкретной схемы зависит от цели экспериментального исследования.

В случае, когда поверхность образца почти параллельна интересующей экспериментатора системе кристаллографических плоскостей [это условие выполняется для системы ростовых плоскостей (111) в опалах], достаточно просто исследовать соответствующую стоп-зону, измеряя спектры отражения. Анализ дифракционных картин рассеяния лазерного излучения (см.

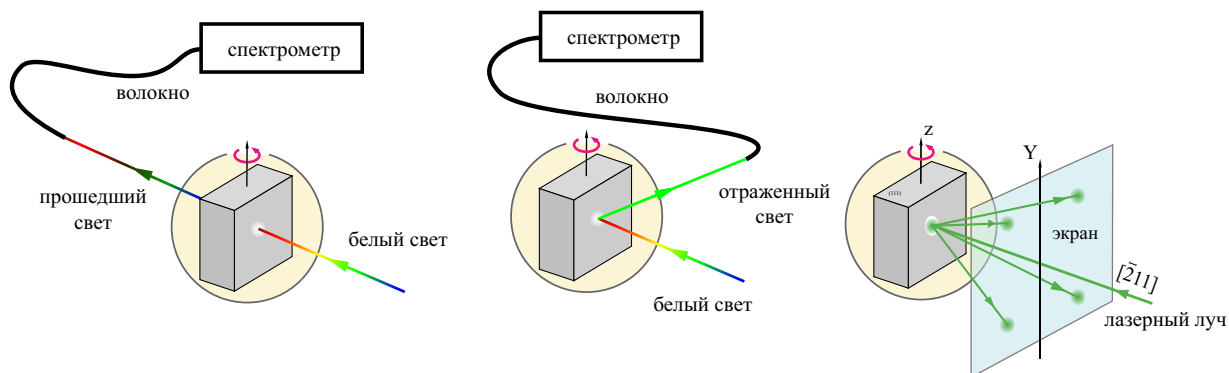


Рис. 2.1. Схемы экспериментов по изучению пропускания, отражения и дифракции светового пучка в ФК.

разд. 1.3.3) позволяет измерять индикатрису рассеяния, т.е. дифференциальное сечение рассеяния для определенной длины волны. При этом выраженные максимумы интенсивности содержат информацию об ориентации кристаллографических плоскостей ( $hkl$ ), наличии двойникования решетки, степени упорядоченности ФК [73–75]. В том случае, когда требуется определить спектральное положение и ширину нескольких стоп-зон, наиболее удобной является методика спектроскопии пропускания. Эта методика широко применяется при исследовании параметров стоп-зон в ФК в зависимости от ориентации образца и поляризации пучка света.

## 2.2. Экспериментальная установка для измерения оптических спектров фотонных кристаллов

В данной работе для измерения оптических спектров пропускания использовался двухлучевой спектрофотометр PerkinElmer Lambda-650, оптическая схема которого приведена на рис. 2.2. Прибор имеет два источника света (1): дейтериевую лампу для УФ-диапазона и галогенную лампу накаливания для видимого диапазона. Свет, пройдя через двойной монохроматор (2) и систему диафрагм (3), попадает на вертушку-селектор с зеркальными лопастями для



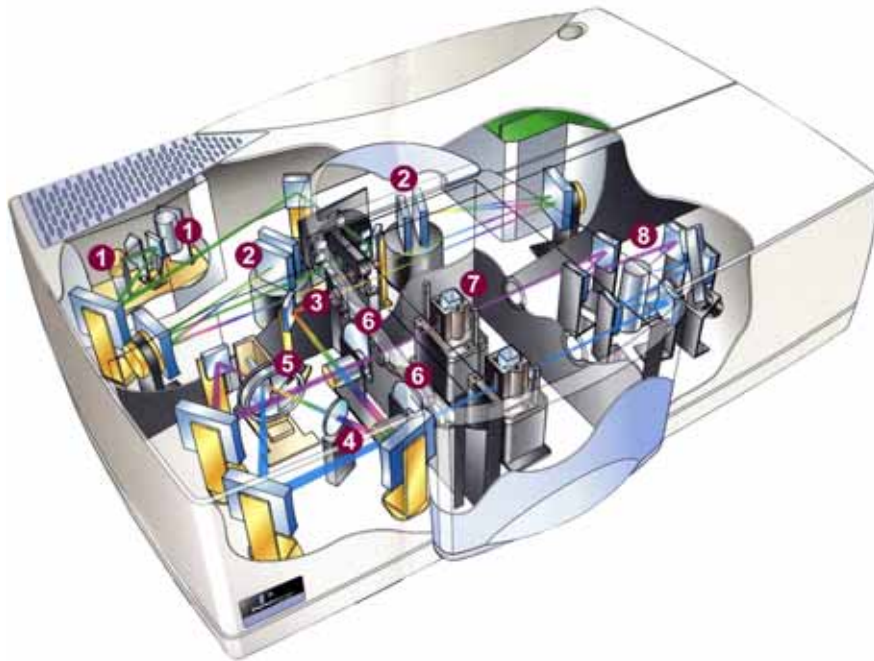


Рис. 2.2. Оптическая схема спектрофотометров PerkinElmer Lambda 650, 850 и 950.

разделения пучка на два луча: опорный и сигнальный (5); далее через кюветное отделение (7) свет попадает на ФЭУ (8). Отметим, что в оптическую схему PerkinElmer Lambda-650 не входит деполяризатор (4), поляризаторы и аттенюаторы (6), приведенные на схеме для семейства приборов PerkinElmer Lambda-650-850-950. Спектрофотометр позволяет проводить измерения в диапазоне 190-900 нм со спектральным разрешением не хуже 0.17 нм. При проведении экспериментов площадь поперечного сечения сигнального пучка в области образца составляла величину не более  $2 \text{ мм}^2$  при угловой расходимости менее  $3^\circ$ . Для своего класса прибор имеет достаточно большое кюветное отделение ( $200 \text{ мм} \times 300 \text{ мм} \times 220 \text{ мм}$ ). Для измерения спектров синтетических опалов мы разработали дополнительный модуль крепления оптического столика ( $170 \text{ мм} \times 90 \text{ мм}$ ) и держателя образца (рис. 2.3). В силу конструктивных особенностей спектрофотометра PerkinElmer Lambda 650 опорный и сигнальный лучи имеют сильную степень линейной поляризации. Поэтому сразу после входного окна кюветного отделения в сигнальный канал был уста-

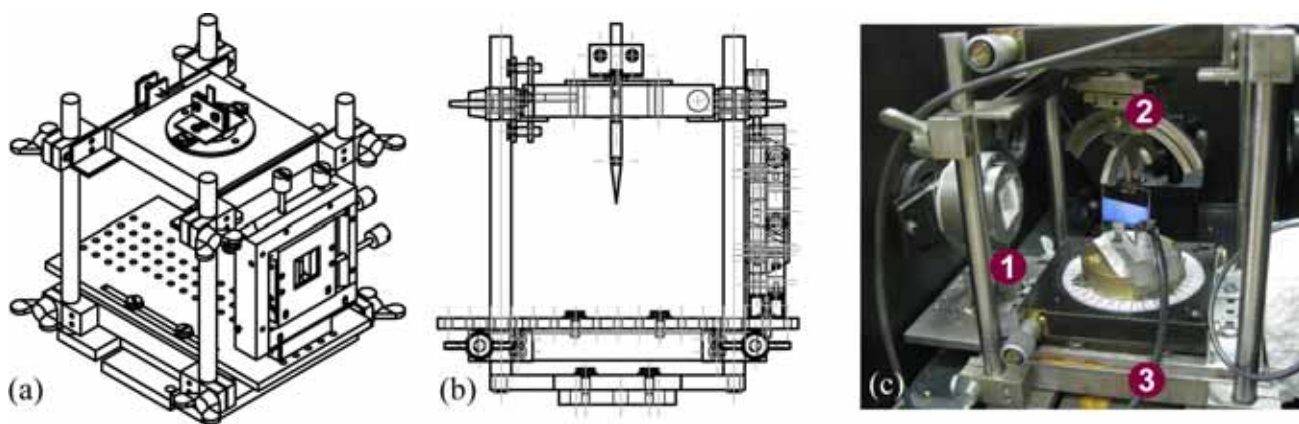


Рис. 2.3. Схематическое изображение дополнительного модуля к спектрофотометру PerkinElmer Lambda 650 (а) изометрическая проекция, (б) проекция в плоскости, образованной лучом спектрофотометра и вертикальной осью. (с) Фотография кюветного отделения спектрофотометра PerkinElmer Lambda 650 с дополнительным модулем.

новлен псевдо-деполяризатор, состоящий из соединенных посредством оптического контакта клиньев из кристаллического кварца и кварцевого стекла. После деполяризатора свет проходил через поляризатор [(1) на рис. 2.3с], закрепленный в центре поворотного механизма, позволяющего задавать угол линейной поляризации с точностью не хуже  $2^\circ$ . В качестве поляризатора использовалась призма Глана-Томсона с рабочим диапазоном 210-2300 нм. Так как понятие стоп-зоны связано с направлением распространения света относительно кристаллической решетки ФК, при проведении экспериментов было необходимо с высокой точностью задавать и контролировать ориентацию образца. Для этого был разработан держатель, позволяющий вращать образец вокруг четырех осей (рис. 2.3). Первый поворотный механизм (точность  $\leq 0.5^\circ$ ) позволяет вращать вокруг вертикальной оси миниатюрный поворотный блок [(2) на рис. 2.3с], основу которого составляет столик Федорова, используемый в установках для измерения дифракции рентгеновских лучей. Столик Федорова позволяет вращать образец в двух взаимно перпендикулярных направлениях с точностью  $\leq 0.1^\circ$ . Дополнительно само пружинное крепление образца можно поворачивать вокруг своей оси (точность  $\leq 2^\circ$ ). С

помощью первого поворотного механизма и столика Федорова (три степени свободы) задается требуемая исходная ориентация ГЦК-решетки образца опала относительно падающего пучка. Затем для измерения дисперсионных (т.е. угловых) спектральных зависимостей образец вращается в заданном направлении с использованием только одного поворотного механизма (с точностью не хуже  $0.5^\circ$ ). Таким образом, избыточное количество степеней свободы существенно упрощает проведение эксперимента и, следовательно, повышает надежность результатов.

Для измерения спектров отражения на оптический столик закрепляется поворотный механизм со световодом [(3) на 2.3(с)], по которому свет передается непосредственно на ФЭУ. Отметим, что держатель световода позволяет варьировать телесный угол  $d\Omega$ , в котором собирается дифрагированное излучение.

Для проведения иммерсионных экспериментов жидкие заполнители заливались в кювету из плавленого кварца, прозрачного в диапазоне 190-900 нм. При этом для измерения спектров пропускания использовалась кювета с плоскопараллельными окнами, которая помещалась непосредственно на оптический столик, а для экспериментов по отражению использовалась цилиндрическая кювета, которая устанавливалась на поворотный механизм для вращения световода таким образом, что ось вращения совпадала с центром кюветы. Это позволяло минимизировать эффекты, связанные с преломлением луча на границах кюветы.

### **2.3. Иммерсионная спектроскопия синтетических опалов**

Основные экспериментальные результаты работы были получены методом иммерсионной спектроскопии. Суть метода заключается в анализе зависимости оптических спектров от диэлектрической проницаемости одной из

компонент ФК, в нашем случае — от диэлектрической проницаемости заполнителя опалов. Для этого образец опала помещается в кювету с жидкостью, которая проникает в поры, образованные пространством между сферами  $\alpha\text{-SiO}_2$  и окружает весь образец. В этих экспериментах кроме собственно изучения иммерсионных зависимостей достигался еще один эффект: в результате понижения диэлектрического контраста между образцом (состоящим из сфер и заполнителя) и окружающим пространством (заполнителем) существенно уменьшается рассеяние света на границах образца. Таким образом удается получать совершенные трехмерные картины брэгговской дифракции света на кристаллической структуре опалов, контрастные спектры пропускания и отражения. В качестве иммерсионной жидкости были использованы дистиллированная вода, изопропиловый спирт, пропиленгликоль, глицерин, а также их смеси. Измерения спектров пропускания показали, что все эти жидкости прозрачны в видимом диапазоне, коротковолновая граница пропускания воды и пропиленгликоля составляет  $\sim 250$  нм, а глицерина и изопропилового спирта  $\sim 350$  нм. Ранее в работе [30] диэлектрическая проницаемость заполнителя  $\varepsilon_f$  определялась на основе литературных данных для чистых жидкостей, а для смеси жидкостей оценивалась с помощью линейной по объемным долям формулы  $\varepsilon_f = \frac{\varepsilon_1 v_1 + \varepsilon_2 v_2}{v_1 + v_2}$ . При выполнении диссертационной работы для измерения диэлектрической проницаемости жидкостей использовался рефрактометр Аббе ИРФ-454 Б2М, погрешность которого не превышает  $7.5 \cdot 10^{-4}$ . Стоит отметить, что определенную погрешность в измерения вносят температурные колебания. Так, при изменении комнатной температуры на  $\pm 10^\circ\text{C}$  диэлектрическая проницаемость жидкостей может изменяться в пределах  $3 \cdot 10^{-4}$ . Таким образом, значение диэлектрической проницаемости контролировалось с точностью до тысячных долей, что и позволило успешно решить поставленные в работе задачи. В ходе проведения подготовительных экспериментов была определена зависимость  $\varepsilon_f$  смеси воды и изопропилово-

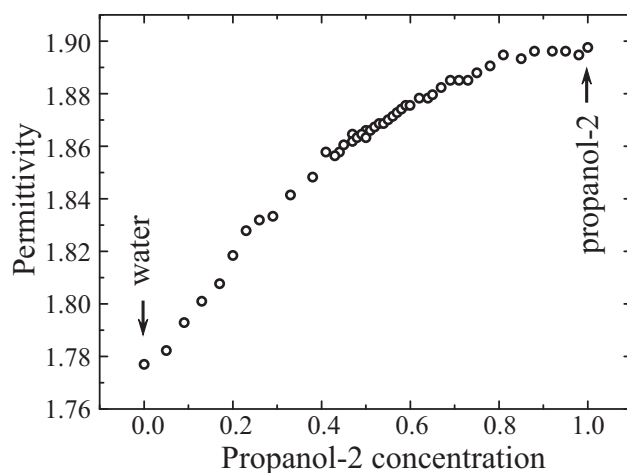


Рис. 2.4. Зависимость диэлектрической проницаемости смеси дистиллированной воды и изопропилового спирта от их объемного соотношения.

го спирта от их объемных долей (рис. 2.4). Оказалось, что для определения диэлектрической проницаемости смеси двух жидкостей нельзя использовать линейную аппроксимацию. Поэтому  $\varepsilon_f$  следует измерять каждый раз непосредственно перед погружением образца в жидкость.

Для измерения спектров пропускания в максимально широком спектральном диапазоне мы использовали в качестве заполнителя две жидкости: дистиллированную воду ( $\varepsilon_{\text{H}_2\text{O}} = 1.778$ ) и пропиленгликоль ( $\varepsilon_{\text{PG}} = 2.053$ ), а также их смесь, что позволяло плавно менять диэлектрическую проницаемость заполнителя в интервале  $1.778 \leq \varepsilon_f \leq 2.053$ .

## 2.4. Геометрические размеры и ориентация образцов

В данной работе для исследований ФК использовались образцы синтетических опалов, выращенных проф. М.И. Самойловичем (ЦНИТИ «Техномаш», г. Москва). Для детальных исследований фотонных стоп-зон из большого числа синтетических опалов различных размеров и оттенков были отобраны высококачественные образцы молочно-розового цвета, однородно распределенного по всей ростовой поверхности (111). Основные результаты, пред-

ставленные в данной диссертационной работе, были получены на образце, который в начале представлял собой прямоугольный параллелепипед с размером ростовой плоскости (111)  $9.3 \times 5.2 \text{ мм}^2$  и толщиной (размер по направлению оси роста [111]) 2.2 мм. В процессе проведения экспериментов этот образец был распилен на несколько параллелепипедов, два из которых имели толщину (по оси роста [111]) 0.8 мм и 0.6 мм. Большая часть экспериментов была проведена на наиболее однородном образце толщиной 0.6 мм. Его ростовая плоскость (111) имела размеры  $7.2 \times 3.0 \text{ мм}^2$ .

Для изучения фотонной зонной структуры, т.е. зависимостей энергетического положения стоп-зон от направления волнового вектора света (при сканировании по всей поверхности зоны Бриллюэна) образец необходимо было предварительно ориентировать с высокой точностью. Процесс ориентации образцов можно разделить на несколько этапов.

(i) Как правило, ростовое направление [111] определяется достаточно просто, исходя из внешнего вида образца опала: ростовая плоскость (111) является наиболее совершенной. В данном случае речь не идет о высокоточной ориентации, это лишь первый предварительный этап.

(ii) На втором этапе анализируются картины дифракции, а именно положение и симметрия дифракционных рефлексов, связанных с брэгговским отражением от неростовых плоскостей семейства {111}. Таким образом, дополнительно к направлению [111] можно определить второе направление в ГЦК-решетке опала. Известно, что два направления полностью задают ориентацию 3D объекта. Альтернативным вариантом может служить анализ изображений ростовой поверхности (111), полученных с помощью атомно-силовой или электронной микроскопии.

(iii) Описанные методы не позволяют ориентировать образец непосредственно в спектрофотометре. Поэтому для привязки кристаллографических направлений в ГЦК решетке опалов к численным значениям на лимбах держателя

образца используется следующая спектроскопическая методика. Согласно закону Брэгга (1.4) для трех высокосимметричных направлений  $\Gamma \rightarrow L_g$ ,  $\Gamma \rightarrow L$  и  $\Gamma \rightarrow K$  стоп-зоны, связанные с системами кристаллографических плоскостей (111),  $(\bar{1}11)$  и (022) (соответственно) характеризуются наиболее длинноволновыми положениями в спектрах пропускания. Исходя из этих соображений образец ориентировался таким образом, чтобы в этих трех геометриях полоса в спектрах пропускания занимала самое длинноволновое положение при поворотах образца вокруг трех осей. Такая методика позволяла определять кристаллографические направления ГЦК решетки в образцах опала с точностью не хуже  $2^\circ$ .

## 2.5. Характеризация опалов методами СЭМ и ПЭМ

Синтетические опалы высокого качества окрашены монохромно, поскольку состоят из частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> близкого размера. Эти частицы формируют наиболее упорядоченные в опалах плотноупакованные гексагональные ростовые слои (111). Последовательное наложение этих слоев друг на друга вдоль ростовой оси [111] приводит к упорядоченным (например, ГЦК-решетка) либо неупорядоченным (например, двойникованная ГЦК-решетка [73–75]) структурам. В трехмерной плотноупакованной решетке опала каждая частица  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> спечена с двенадцатью соседними: с шестью частицами из того же ростового слоя и с шестью частицами из двух соседних ростовых слоев (111) – с тремя – из «нижнего» слоя (111) и с тремя – из «верхнего» слоя (111).

Высококонтрастные изображения синтетических опалов были получены методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на электронном микроскопе FEI XL30 (Нидерланды) при рабочем напряжении 10 кВ (Эксперименты проводились Г. Юшиным, Georgia Institute of Technology, USA). В этих экспериментах образец покрывался слоем платины толщиной порядка 5 нм.

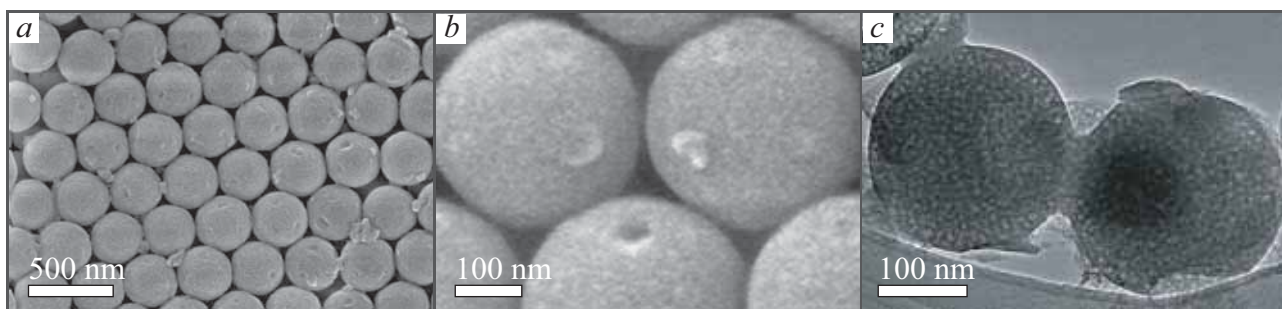


Рис. 2.5. Изображения синтетических опалов и отдельных частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, полученные методами СЭМ (а, b) и ПЭМ (с) с разным увеличением. (а) Изображение ростового слоя (111) образца с диаметром частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>  $\bar{D} = 316$  нм. На рис. (b) хорошо видны три ямки - следы частицы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, находившейся слоем выше и оторванной от трех изображенных частиц. (с) Изображение двух спекшихся частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>.

Исследования методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) (Г. Юшин) выполнялись на микроскопе JEOL 2010 (Япония) при рабочем напряжении 200 кВ. Расстояние до образца составляло 5-8 мм. Образцы изучались без нанесения проводящего покрытия благодаря низкому давлению в рабочей камере (порядка 1 торр), что определяло минимальный поверхностный заряд частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Были получены изображения ряда образцов синтетических опалов различной степени упорядоченности и с разным размером частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> (рис. 2.5).

Частицы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> в первом приближении выглядят как сферы (рис. 2.5а), однако при более детальном рассмотрении становится ясно, что самом деле эти частицы являются спекшимися и деформированными (рис. 2.5b,c), т.е. являются квазисферическими. Это искажение невелико, поэтому в качестве основного структурного параметра частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> мы будем использовать диаметр, определенный в результате аппроксимации СЭМ-изображения квазисферической частицы окружностью. Ниже подробно излагается алгоритм обработки СЭМ-изображений и обсуждаются результаты обработки изображений одного образца опала высокого качества со средним диаметром частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>  $\bar{D} = 316$  нм (такой размер определяет молочно-розового цвет



образца). Данный образец подробно исследовался в диссертационной работе спектроскопическими методами.

### 2.5.1. Методика обработки СЭМ- и ПЭМ-изображений опалов

Существующие методики оценки степени структурного беспорядка на основе анализа микроскопических изображений основаны на изучении пространственного фурье-спектра [168] и методе подсчета количества центров, попадающих в кольцо заданного радиуса [167]. Являясь в своей основе интегральными, эти методики не позволяют разделить вклад таких параметров, как разброс диаметров частиц и расстояний между их центрами. Поэтому основная задача данной работы заключалась в создании алгоритма определения диаметров частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> и нахождения координат их центров, что позволяет непосредственно вычислять усредненные постоянные кристаллической решетки и распределение частиц по диаметрам.

Для решения этой задачи был разработан алгоритм для обработки изображений структуры синтетических опалов, полученных методом СЭМ. Алгоритм основан на процедуре распознавания объектов, граница которых обладает радиальной симметрией, с помощью преобразования исходного изображения, аналогичного преобразованию Хо (Hough, в другой транскрипции - преобразование Хафа [190]).

Прежде чем приступить к описанию алгоритма обработки изображений и изложению полученных результатов, необходимо определить термины, которые будут использоваться ниже. Следуя работе [190] мы будем понимать под изображением двумерную функцию  $f(x, y)$ , где  $x$  и  $y$  – координаты точки на плоскости, значение  $f$  которой называется яркостью (интенсивностью) изображения в данной точке. В случае цифрового изображения величины  $x$ ,  $y$  и  $f$  принимают конечное число дискретных значений. Это означает, что цифро-

вое изображение состоит из конечного числа элементов, каждый из которых характеризуется тремя целыми неотрицательными числами – двумя координатами и яркостью. Если на первые два числа никаких специальных ограничений не накладывается, то последнее (яркость) может принимать значения только в интервале  $[0, L - 1]$ , где  $L$  – число уровней (градаций) яркости. Как правило, из соображений удобства число уровней принимают равным целой степени двойки, т.е.  $L = 2^k$ . Эти элементы, образующие цифровое изображение, называют элементами изображения или пикселями.

Высокое качество СЭМ-изображений исследованных нами образцов синтетического опала позволяет провести детальное изучение статистических характеристик ансамбля частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, образующих ростовую плоскость (111). Для решения этой задачи необходимо измерить диаметры всех, или значительной части видимых на изображении частиц. В принципе подобная процедура может быть выполнена «вручную», путем прямого подсчета количества пикселей, укладывающихся на диаметре каждого шарика. Подобный способ измерения, обладая очевидным преимуществом простоты его реализации, является весьма трудоемким. Однако более существенный недостаток состоит в определенной субъективности результатов каждого отдельного измерения, которая связана не только с размытостью границ изображений частиц, но и с их не вполне совершенной сферической формой. Поскольку элемент субъективности может быть исключен только путем полной формализации процедуры измерения, нами был разработан и реализован алгоритм, позволяющий получить информацию как о диаметрах частиц, так и о координатах их центров.

Основу алгоритма составляет процедура распознавания объектов, граница которых обладает радиальной симметрией, с помощью преобразования исходного изображения, аналогичного известному преобразованию Хо. Это преобразование позволяет находить на монохромном изображении кривые,

заданные параметрически. Монохромным считается изображение, состоящее из точек двух типов: точек контура, ограничивающего объект (например, окружность, ограничивающая круг) и фоновых точек, к которым относятся как точки вне, так и внутри объекта. Поэтому полутоновое изображение должно быть предварительно трансформировано в монохромное (содержащее только контур объекта и фон) с использованием какого-либо градиентного фильтра, например фильтра Собеля (Sobel), Превитта (Prewitt) [190, 191], Кенни (Canny) [192] и последующей пороговой обработки. Задача преобразования  $X_0$  состоит в выделении кривых, проходящих через максимальное количество точек контура объекта.

Принцип преобразования  $X_0$  состоит в следующем. Пусть некая функция  $F(x, y, a_1, a_2, \dots, a_n) = 0$  задает на плоскости  $(x, y)$  семейство кривых с параметрами  $a_1, a_2, \dots, a_n$ . Параметры семейства кривых образуют фазовое пространство, каждая точка которого (конкретные значения набора  $a_1, a_2, \dots, a_n$ ) соответствует некоторой кривой на плоскости  $(x, y)$ . Ввиду дискретности машинного представления и входных данных (изображения), требуется перевести непрерывное фазовое пространство в дискретное. Для этого в фазовом пространстве  $a_1, a_2, \dots, a_n$  вводится «сетка», разбивающая его на «ячейки» достаточно малого размера. Каждой ячейке можно поставить в соответствие число  $A$ , указывающее количество точек контура объекта, принадлежащих кривой с параметрами данной ячейки. В результате можно найти кривые  $F(x, y, a_1, a_2, \dots, a_n) = 0$ , на которых лежит наибольшее количество точек контура объекта.

В нашем случае задача  $F(x, y, x_0, y_0, R_0) = 0$  состоит в поиске окружностей неизвестного радиуса с неизвестными координатами центра  $(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 - R_0^2 = 0$ . При переходе от непрерывного пространства параметров  $(x_0, y_0, R_0)$  к дискретному, последнее представляет собой трехмерный массив целых неотрицательных чисел  $A_{nmk}$ , индексы которого  $(n, m, k)$  задают на-

бор параметров  $(x_0, y_0, R_0)$ . Два индекса этого массива  $(n, m)$  определяют координаты центров окружностей (соответствуют паре  $x_0, y_0$ ) в пространстве изображения, а третий индекс  $(k)$  - радиус окружности и соответствует  $R_0$ . Для дальнейшего изложения целесообразно ввести понятие двумерного «сечения»  $B_{nm}$  трехмерного массива  $A_{nmk}$ . При этом массив представляет собой последовательность двумерных сечений с размерностью  $(n \times m)$ , совпадающей с размерностью исходного изображения, и упорядоченную по возрастанию радиуса  $R_0$ .

Собственно преобразование исходного изображения (например, СЭМ - изображения опала) в трехмерный массив чисел состоит в том, что каждому элементу  $A_{nmk}$  присваивается значение, равное количеству точек контура изображения (например, контура, ограничивающего частицы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>), лежащих на окружности с центром в точке  $(n, m)$  и радиусом, равным  $k$ . Следует отметить, что процедура подсчета числа точек монохромного изображения, лежащих на окружности радиуса  $k$ , эквивалентна нахождению дискретной свертки изображения с ядром (маской), представляющим собой квадратную матрицу размером  $2k + 1$ . Элементы этой матрицы, лежащие на вписанной окружности, равны 1, а остальные – нулю. Таким образом, алгоритм включает в себя ряд последовательных преобразований исходного изображения. На рис. 2.6 на примере фрагмента СЭМ-изображения ростовой плоскости (111) образца синтетического опала продемонстрирована эта последовательность трансформаций. Фрагмент исходной полутоновой картинки (рис. 2.6а) с помощью фильтра Кенни преобразуется в монохромное изображение границ (рис. 2.6б). Последнее, в свою очередь, подвергается описанному преобразованию, аналогичному преобразованию Хо. На рис. 2.6д в качестве примера представлено одно сечение результирующего трехмерного массива  $A_{nmk}$ , являющееся результатом свертки монохромного изображения рис. 2.6б с маской рис. 2.6с, радиус которой  $k = 88$  пикселей.

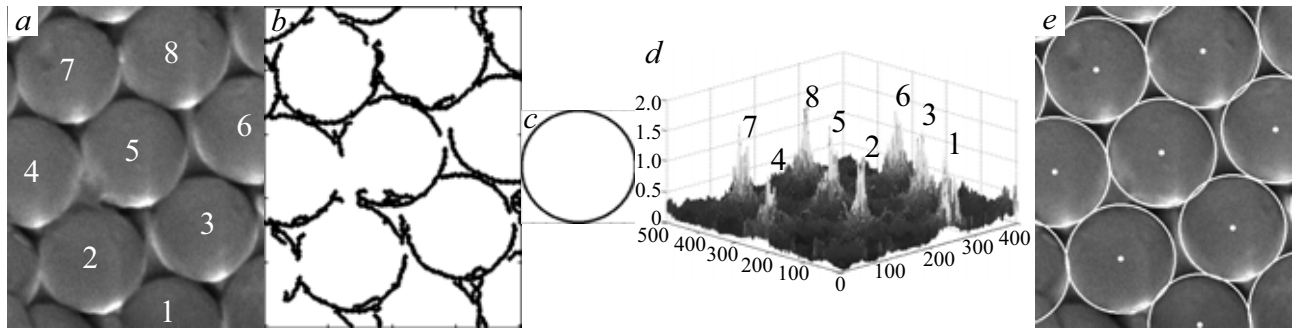


Рис. 2.6. Последовательность преобразований исходного полутонового изображения в процессе распознавания структур, обладающих круговой симметрией. (а) Исходное полутоновое изображение ростовой плоскости опала (111) с пронумерованными частицами  $a\text{-SiO}_2$ . (б) Монохромное изображение границ частиц  $a\text{-SiO}_2$ , полученное после применения фильтра Кенни и пороговой обработки. (с) Изображение квадратной матрицы  $177 \times 177$  пикселей со вписанной окружностью радиуса  $k = 88$  пикселей. (d) Свертка  $A_{nmk}/k$  контурного изображения (б) с ядром (с), нормированная на радиус  $k = 88$ . Нумерация пиков соответствует нумерации частиц  $a\text{-SiO}_2$  на изображении (а). (е) Исходное изображение опала с нанесенными окружностями и их центрами, найденными в результате распознавания. Для ряда пар частиц (например, частицы 3 и 5) хорошо виден эффект спекания, т.е. пересечения соответствующих окружностей.

Получаемый в результате описанного выше преобразования трехмерный массив  $A_{nmk}$  является входной информацией для процедуры распознавания квазисферических объектов, состоящей в нахождении их радиусов и координат центров. Как уже указывалось, массив состоит из ряда двумерных сечений  $B_{nm}$ , представляющих собой, подобно двумерному массиву, изображенному на рис. 2.6d, свертки контурного изображения (рис. 2.6b) с ядрами различных радиусов  $k$ . Схематично структура трехмерного массива представлена на рис. 2.7а, где показаны 3 из  $k_{\max}$  двумерных сечений. Нетрудно видеть, что локальные экстремумы (пики) на рис. 2.6d совпадают с центрами соответствующих частиц  $a\text{-SiO}_2$ , видимых на рис. 2.6а. Что касается радиуса отдельной частицы, то он определяется по зависимости высоты пика от радиуса ядра свертки  $k$ , которая всегда имеет выраженный экстремум. За

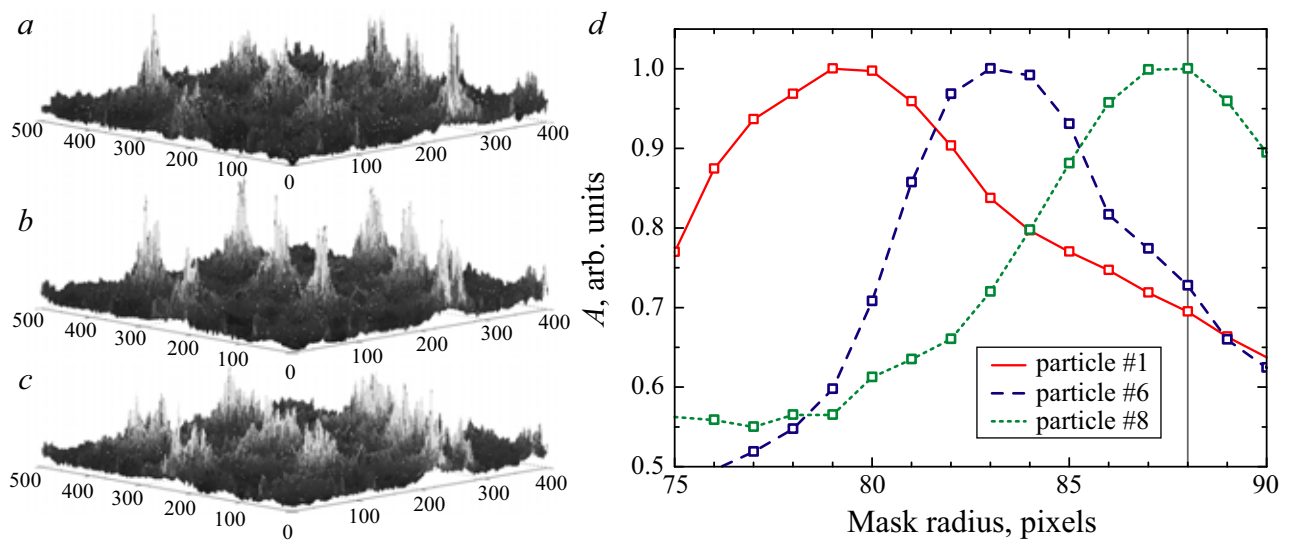


Рис. 2.7. (a-c) Схематичное представление фрагмента трехмерного массива данных  $A_{nmk}/k$ , получаемого в результате выполнения описанного преобразования контурного изображения, представленного на рис. 2.6b, для радиусов маски  $k = 75, 88$  и  $99$  пикселей. Показаны три сечения, среднее  $k = 88$  соответствует рис. 2.6d. (d) Нормированные на максимум зависимости высоты пиков свертки, соответствующих частицам, обозначенным на рис. 2.6a цифрами 1, 6 и 8 от радиуса маски. Вертикальная линия отмечает свертку с  $k = 88$ .

радиус распознанной частицы принимается радиус маски  $k$ , при котором соответствующий пик свертки достигает своего максимального значения, а за координаты ее центра – координаты этого пика  $(n, m)$ . Сказанное иллюстрирует рис. 2.7b, где представлены нормированные зависимости высоты пиков свертки от радиуса маски  $k$  для частиц, обозначенных на рис. 2.6a цифрами 1, 6 и 8. Вертикальная линия отмечает свертку с радиусом маски  $k = 88$ , изображенную на рис. 2.6d. При этом значении радиуса своего максимума достигает кривая, соответствующая частице 8 и именно этот радиус (выраженный в данном случае в пикселях) принимается истинным для данной частицы.

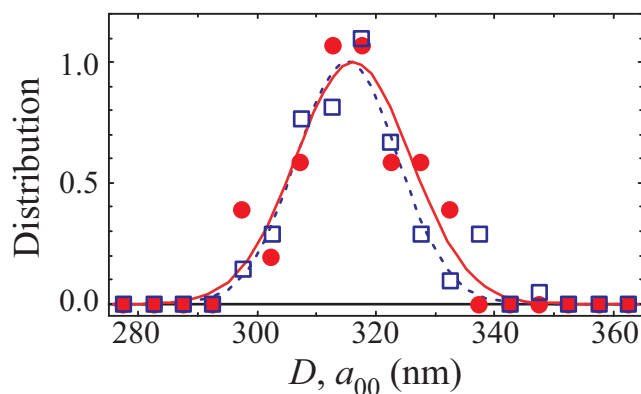


Рис. 2.8. Результаты обработки СЭМ-изображения ростовой поверхности (111) образца опала: распределение диаметров  $a$ -SiO<sub>2</sub> частиц (красные кружки) и расстояний между ближайшими центрами (синие квадраты). Сплошные линии – аппроксимация функцией Гаусса.

### 2.5.2. Результаты обработки СЭМ-изображений

В этом параграфе представлены результаты обработки СЭМ изображения образца синтетического опала с помощью описанного выше алгоритма. Мы остановимся на результатах обработки изображения ростовой поверхности (111), представленной на рис. 2.5а. Было обработано изображение, содержащее порядка  $\sim 180$  частиц  $a$ -SiO<sub>2</sub>. Это изображение принадлежит образцу, который был подробно исследован методами оптической спектроскопии. На основании анализа спектров пропускания был определен ряд его структурных параметров, включая средний диаметр частиц  $a$ -SiO<sub>2</sub>, который оценивался как  $D = 315 \pm 15$  нм [85].

В результате обработки СЭМ изображения (рис. 2.5а) были определены следующие статистические характеристики ансамбля частиц  $a$ -SiO<sub>2</sub>, принадлежащих ростовой плоскости (111) (рис. 2.8): средний диаметр частиц  $\bar{D} = 316.2$  нм, второй момент распределения (дисперсия)  $\sigma^2 = 94.1$  нм<sup>2</sup>, среднеквадратичное отклонение  $\sigma = 9.7$  нм, полуширина контура распределения 22.8 нм, что соответствует разбросу диаметров в 7.2% по уровню 0.5. Среднее расстояние между центрами плотноупакованных частиц  $a$ -SiO<sub>2</sub> из-за эффек-

та спекания оказалось незначительно меньше, чем  $\bar{D}$ , и составило  $\bar{a}_{00} = 315.2$  нм. Процесс спекания можно рассматривать как взаимопроникновение сфер, в результате которого расстояние  $\bar{a}_{00}$  между их центрами уменьшается на величину  $\Delta\bar{a}$ , которая в данном случае составляет  $\sim 1$  нм. Для характеристики этого эффекта введем коэффициент спекания [91, 144]:

$$\chi = (\bar{D} - \bar{a}_{00})/\bar{a}_{00} = \Delta\bar{a}/\bar{a}_{00}, \quad (2.2)$$

который для поверхностного слоя (111) (рис. 2.5а) составляет  $\chi = 0.0032$ . Используя эту величину, можно определить скорректированный с учетом эффекта спекания фактор заполнения объема решетки частицами  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Как известно, в идеальной плотноупакованной ГЦК-решетке сферы занимают  $f_{00} = \pi/3\sqrt{2} = 0.740$  объема. При слабом изотропном спекании фактор заполнения выражается как [91, 144]:

$$f_0 = f_{00} \frac{1 - 3\chi^2(3 - \chi)}{(1 - \chi)^3} \approx f_{00} (1 + 3\chi), \quad (2.3)$$

Из соотношения (2.3) следует, что при малом  $\chi$  фактор объемного заполнения  $f_0$  пропорционален линейному изменению межцентрового расстояния  $\Delta\bar{a}$  по трем координатам, число которых определяет коэффициент 3. При  $\chi = 0.0032$  фактор заполнения  $f_0 = 0.747$ , т.е. удельный объем, занимаемый частицами  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, увеличился  $\sim 1\%$ , что свидетельствует о незначительном спекании поверхностного слоя (111). Эта величина, однако, является характеристикой только изучавшегося нами поверхностного слоя, который может быть более рыхлым, чем внутренние слои образца. Действительно, на основании оптических экспериментов в работе [42] при изучении синтетического опала с постоянной решетки  $a_{00} = 280 \pm 15$  нм были определены значения коэффициента спекания  $\chi = 0.011$  и коэффициента заполнения  $f_0 = 0.77$ , которые описывали эффекты более сильного спекания в объеме образца.

Таким образом, в результате обработки данных электронной микроско-



пии было установлено, что в высококачественных образцах распределение частиц  $a\text{-SiO}_2$  по размерам близко к нормальному, были определены параметры этого распределения и усредненные структурные параметры, относящиеся к ростовым слоям ГЦК решетки синтетических опалов. Было продемонстрировано прекрасное соответствие между результатами обработки оптических спектров и обработки изображений опалов, полученных методом СЭМ.

Результаты, представленные в Главе 2, излагаются в статьях [193–196].

## Глава 3

# Высокоиндексные $(hkl)$ стоп-зоны в фотонных кристаллах на основе синтетических опалов

Глава посвящена поиску и интерпретации высокоиндексных  $(hkl)$  стоп-зон в ФК на основе синтетических опалов. Ранее в литературе сообщалось о наблюдении и исследовании фотонных стоп-зон, принадлежащих «низкоиндексным» семействам  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$ . Для этих семейств было установлено, что в низкоконтрастных опалах дисперсионные зависимости стоп-зон  $E(\mathbf{k})$  (т.е. спектральное положение стоп-зон в зависимости от направления светового пучка относительно осей ГЦК-решетки) хорошо описываются в брэгговском приближении, т.е. дисперсионными зависимостями для брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$ , соответствующих системам плоскостей [30, 85].

Для обнаружения высокоиндексных  $(hkl)$  стоп-зон в спектрах пропускания опалов была выполнена предварительная работа по определению оптимальных условий проведения эксперимента. Тщательно исследовались зависимости спектров пропускания опалов от геометрии рассеяния, поляризации падающего пучка, толщины образца, диэлектрической проницаемости заполнителя. В результате, в спектрах пропускания опалов удалось обнаружить ряд новых полос, для интерпретации которых был выполнен расчет дисперсии брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$ . Сопоставление рассчитанных зависимостей  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  с положением обнаруженных полос позволило однозначно интерпретировать не описанные ранее в литературе высокоиндексные  $(hkl)$  стоп-зоны и определить законы дисперсии  $E(\mathbf{k})$ .

Опалы состоят из квазисферических частиц  $a\text{-SiO}_2$ , которые образуют плотноупакованные высокоупорядоченные слои, перпендикулярные оси роста образца  $[111]$  в обозначениях ГЦК-решетки. Эти слои принято называть

ростовыми слоями, а соответствующую им плоскость – ростовой плоскостью (111). При плотной упаковке гексагональные ростовые слои (111) могут занимать друг относительно друга лишь три различных положения, обычно обозначаемые в литературе как А, В и С [69]. Как отмечалось в Главе 1, чередование этих слоев может приводить к формированию двойникованной ГЦК-решетки, которая образуется из двух зеркально-симметричных реализаций упорядоченных ГЦК-упаковок – АВСАВС (ГЦК-I) и СВАСВА (ГЦК-II). В синтетических опалах эти два типа ГЦК-упаковок чередуются случайным образом (см. Рис. 1.4 и работы [73, 75]).

Чтобы определить, являются ли наши образцы двойникованными, были проведены оптические эксперименты и выполнен расчет дисперсионных зависимостей стоп-зон для решеток ГЦК-I и ГЦК-II. В результате сравнения экспериментальных данных с результатами расчета было установлено, что наиболее качественные образцы опалов (на которых в дальнейшем и проводились основные эксперименты) имеют структуру, близкую к идеальной недвойникованной решетке (будем называть ее ГЦК-I). Отметим, что в некоторых спектрах этих образцов все же наблюдались линии, обусловленные решеткой ГЦК-II. Тем не менее, эти линии не мешали решению основной задачи – поиску новых высокоиндексных ( $hkl$ ) стоп-зон решетки ГЦК-I. Во-первых, линии, соответствующие решетке ГЦК-II, имели крайне слабую интенсивность и, во-вторых, расчет позволил их идентифицировать в спектрах и отделить от линий решетки ГЦК-I. Поэтому при дальнейшем изложении материала обсуждение, в основном, будет касаться решетки ГЦК-I, причем индекс «I» будет опускаться.

В то же время на других, менее качественных образцах, в спектрах пропускания наблюдались интенсивные полосы, соответствующие обоим решеткам – ГЦК-I и ГЦК-II.

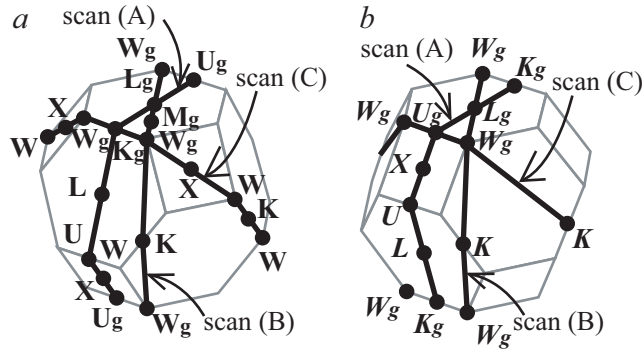


Рис. 3.1. Зона Бриллюэна решетки ГЦК-I (a) и решетки-двойника ГЦК-II (b). На поверхности ЗБ указаны особые точки высокой симметрии. Толстыми линиями обозначены контуры, определяемые пересечением поверхности ЗБ с плоскостями сканирования (A), (B) и (C).

### 3.1. Экспериментальное исследование стоп-зон по спектрам пропускания синтетических опалов

Обсудим результаты экспериментального исследования спектров пропускания синтетических опалов. Как было указано выше, данные эксперименты проводились с целью определения оптимальных условий для наблюдения высокоиндексных  $(hkl)$  стоп-зон.

#### 3.1.1. Двойникование ГЦК-структуры синтетических опалов

ЗБ решеток ГЦК-I и ГЦК-II представлены на рис. 3.1. Структура опала формируется так, что направления  $\Gamma \rightarrow L_g$  в ЗБ обеих ГЦК-решеток совпадают, причем решетка ГЦК-II может быть получена поворотом решетки ГЦК-I на  $60^\circ$  вокруг направления  $\Gamma \rightarrow L_g$ , либо зеркальным отражением решетки ГЦК-I относительно ростовой плоскости (рис. 3.1a,b).

Для того, чтобы определить наличие или отсутствие двойникования ГЦК-решетки у конкретного образца оптического методом, на фоне спектра «основной» решетки ГЦК-I следует искать проявление наиболее интенсивных линий

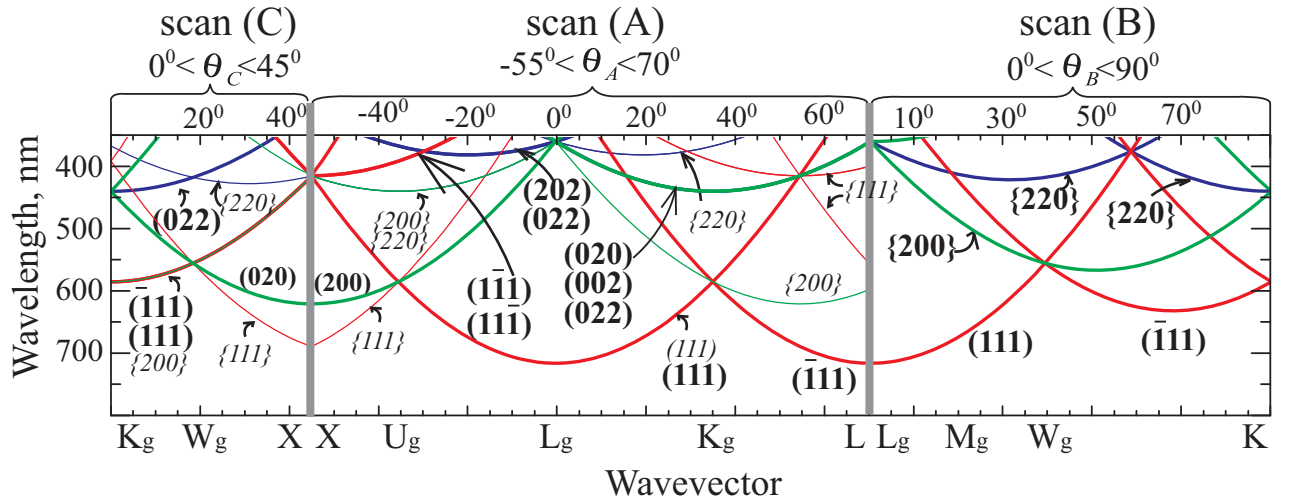


Рис. 3.2. Дисперсия брэгговских длин волн для семейств плоскостей  $\{111\}$ ,  $\{200\}$  и  $\{220\}$ . Толстые линии – ГЦК-I, тонкие линии – решетка-двойник ГЦК-II.

«примесной» решетки ГЦК-II. Как известно, наиболее интенсивные полосы связаны с «низкоиндексными» семействами плоскостей  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$  [30, 85]. Результаты расчета дисперсионных зависимостей брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  для двойникованной ГЦК-решетки и трех контуров сканирования (А-С), соответствующих эксперименту, приведены на рис. 3.2. Расчет зависимости брэгговской длины волны, измеряемой в вакууме, от угла падения светового пучка  $\theta_{hkl}$  на систему плоскостей  $(hkl)$  производился по формуле:

$$\lambda_{hkl}(\theta_{hkl}) = 2d_{111}\sqrt{\varepsilon_{av}} \left( \frac{3}{h^2 + k^2 + l^2} \right)^{1/2} \cos \theta_{hkl}, \quad (3.1)$$

где  $d_{111}$  – расстояние между соседними плоскостями  $(111)$ ,  $d_{111} = \sqrt{2/3}D = 265$  нм (для  $\bar{D} = 316$  нм),  $\theta_{hkl} = [\widehat{hkl}], \mathbf{k}$  – угол между направлением падающего пучка и нормалью к плоскости  $(hkl)$ ,  $\varepsilon_{av} = 0.75\varepsilon_{a-\text{SiO}_2} + 0.25\varepsilon_f$  – средняя диэлектрическая проницаемость ГЦК-структуры опал-заполнитель, определенная с учетом небольшого спекания сферических частиц (см. Главу 2). Напомним, что в случае ГЦК-решетки с точечным контактом плотноупакованных сфер последняя формула выглядит следующим образом:  $\varepsilon_{av} = 0.74\varepsilon_{a-\text{SiO}_2} + 0.26\varepsilon_f$ .

Расчет, результаты которого представлены на рис. 3.2, был выполнен для основных высокосимметричных направлений ГЦК-решетки опала, заполненного водой,  $\varepsilon_f = 1.77$ . На рис. 3.2 показаны рассчитанные по формуле (3.1) брэгговские длины волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  для трех сканирований, т.е. путей, которые образуются пересечением волнового вектора  $\mathbf{k}$  с поверхностью ЗБ ГЦК-решетки. Например, для решетки ГЦК-I эти пути сканирования имеют вид:

$$(A) \quad X \rightarrow U_g \rightarrow L_g \rightarrow K_g \rightarrow L \quad -55^\circ \leq \theta_A \leq 70^\circ \quad (3.2a)$$

$$(B) \quad L_g \rightarrow M_g \rightarrow W_g \rightarrow K \quad 0^\circ \leq \theta_B \leq 90^\circ \quad (3.2b)$$

$$(C) \quad K_g \rightarrow W_g \rightarrow X \quad 0^\circ \leq \theta_C \leq 45^\circ. \quad (3.2c)$$

Отметим, что мы ввели в рассмотрение нетабулированную для ГЦК-решетки точку  $M_g$  на поверхности ЗБ между точками  $L_g$  и  $W_g$ . Эту точку будет удобно использовать в дальнейшем при обсуждении экспериментальных данных по поиску и интерпретации высокоиндексных  $(hkl)$  стоп-зон.

Из рис. 3.1a видно, что плоскости сканирования (т.е. сечения ЗБ) для решетки ГЦК-I (A)  $\Gamma L_g K_g L$  и (B)  $\Gamma L_g W_g K$  содержат общее направление  $\Gamma \rightarrow L_g$ , в прямом пространстве проходят через ростовую ось  $[111]$ . В зависимости от того, через какую именно из шести эквивалентных точек  $W_g$  проведена плоскость (B)  $\Gamma L_g W_g K$ , плоскости (A) и (B) будут развернуты друг относительно друга на угол  $30^\circ$ , как показано на рис. 3.1, или на  $90^\circ$ , как показано на рис. 3.8. Сечения  $\Gamma L_g K_g L$  (A) и  $\Gamma L_g W_g X$  (C) содержат общее направление  $\Gamma \rightarrow K_g$  и перпендикулярны друг другу.

Обход трех указанных путей сканирования ЗБ дает достаточно полную информацию о дисперсии фотонных стоп-зон ГЦК-решетки опала. Согласно результатам расчета, существует вырождение дисперсионных ветвей для ряда плоскостей ГЦК решетки. Под вырождением мы понимаем точное равенство брэгговских длин волн для разных систем плоскостей. Рассмотрим

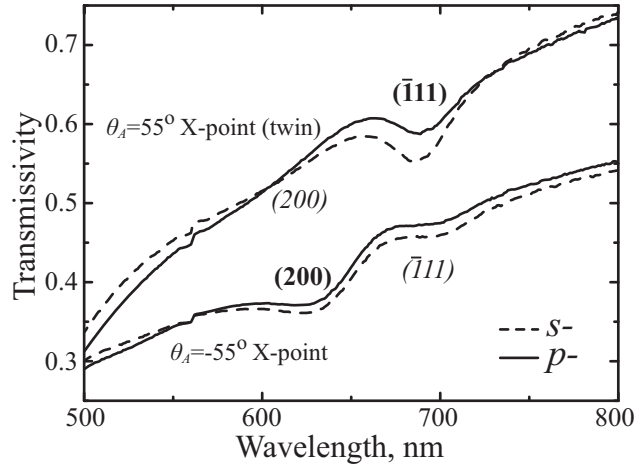


Рис. 3.3. Спектры пропускания образца опала 0.6 мм для  $\theta_A = -55^\circ$  (что соответствует направлению  $\Gamma \rightarrow X$  решетки ГЦК-I) и  $\theta_A = 55^\circ$  (что соответствует направлению  $\Gamma \rightarrow X$  решетки-двойника ГЦК-II). Сплошные линии соответствуют падению  $p$ -поляризованного света, штриховые линии –  $s$ -поляризованного света.

вырождение на примере решетки ГЦК- I. Во-первых, происходит вырождение ветвей, связанных с плоскостями одного семейства ( $hkl$ ): например, при сканировании (A) вырождены дисперсионные ветви плоскостей  $(1\bar{1}1)$  и  $(11\bar{1})$ , а при сканировании (C) – плоскостей  $(111)$  и  $(\bar{1}11)$ . Во-вторых, происходит вырождение ветвей, связанных с плоскостями разных семейств: например, при сканировании (A) вырождены дисперсионные ветви плоскостей  $(020)$ ,  $(002)$  и  $(022)$ , т.е. семейств  $\{200\}$  и  $\{220\}$ .

Сопоставление расчетных и экспериментальных зависимостей позволяет сделать вывод о наличии двойников в исследованном образце синтетических опалов. Для идентификации двойникованной структуры достаточно проанализировать спектры пропускания при сканировании (A) (см. рис. 3.2).

Рассмотрим дисперсионные ветви семейств  $\{111\}$  и  $\{200\}$  в диапазонах углов  $-55^\circ \leq \theta_A \leq -40^\circ$  и  $35^\circ \leq \theta_A \leq 70^\circ$ . Угол  $\theta_A = -55^\circ$  соответствует X-точке ЗБ решетки ГЦК-I, а угол  $\theta_A = 55^\circ$  соответствует X-точке ЗБ решетки ГЦК-II. На рис. 3.3 представлены спектры образца 0.6 мм в воде в  $s$ - и  $p$ -поляризациях при  $\theta_A = -55^\circ$  и  $\theta_A = 55^\circ$ . Если бы структура исследованного

образца опала была недвойникованной, то в спектральном диапазоне 500-800 нм при  $\theta_A = -55^\circ$  наблюдалась бы единственная полоса (200) в области  $\sim 600$  нм, а при  $\theta_A = 55^\circ$  - единственная полоса (111) в области  $\sim 700$  нм. Эти две полосы, принадлежащие решетке ГЦК-I, действительно являются наиболее интенсивными, однако помимо них в спектрах присутствует слабая «инвертированная» пара полос, т.е. полоса  $\sim 700$  нм при  $\theta_A = -55^\circ$  и полоса  $\sim 600$  нм при  $\theta_A = 55^\circ$ . Обратившись к рис. 3.2 легко убедиться, что эти полосы обусловлены решеткой ГЦК-II. Сравнивая интенсивность полос в спектрах на рис. 3.3, можно сделать вывод о том, что данный образец имеет двойникованную ГЦК структуру с явным преобладанием объемной доли доменов ГЦК-I над доменами ГЦК-II.

При увеличении контраста диэлектрической проницаемости опал-заполнитель полосы, соответствующие двойнику ГЦК-II, становятся еще более заметными. В частности, полоса  $\sim 700$  нм при  $\theta_A = -55^\circ$  становится интенсивной при заполнении опала пропиленгликолем и сливается с полосой (200) решетки ГЦК-I.

Следует отметить, что в пределах одного образца могут существовать области с различным соотношением доменов ГЦК-I и ГЦК-II. Поэтому, на стадии предварительных экспериментов следует провести измерение спектров пропускания в различных точках и, зная, каким образом проявляется решетка ГЦК-II, выбрать наиболее однородный участок с минимальной примесью компоненты ГЦК-II.

### **3.1.2. Зависимость параметров стоп-зон от толщины образца**

В данной работе были исследованы спектры пропускания трех образцов разной толщины 0.6, 0.8 и 2.2 мм, причем два последних были вырезаны из первого, как уже было указано в Главе 2.



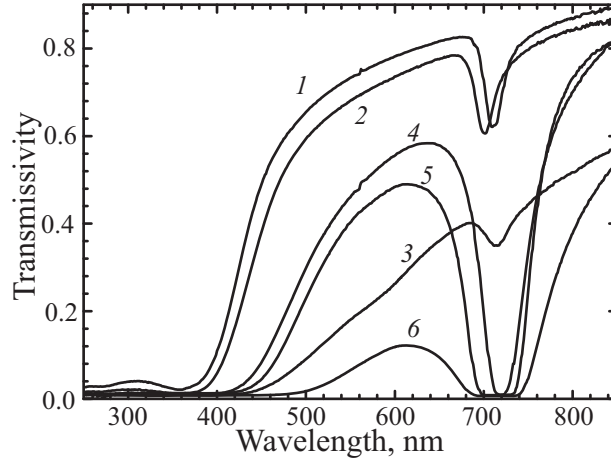


Рис. 3.4. Спектры пропускания  $s$ -поляризованного света при нормальном падении света на ростовую поверхность (111)  $\theta_A = 0$  для трех пластин опала толщиной 0.6, 0.8 и 2.2 мм, заполненных водой – спектры (1), (2), (3), и пропиленгликолем – спектры (4), (5) и (6) соответственно.

Зависимость пропускания опалов на брэгговской длине волны от толщины образца исследовалась ранее в ряде работ для относительно большого ( $\epsilon_{polymer}/\epsilon_{air} \approx 2.69$  в случае полимерных опалов) [142, 197], и умеренного  $\epsilon_{glycerin}/\epsilon_{a-SiO_2} \approx 1.15$  [189] диэлектрического контраста. Было показано, что при увеличении толщины образца пропускание света в области фотонной зоны для направления [111] падает экспоненциально, что хорошо согласуется с результатами, полученными теоретически в скалярной модели [197]. Отметим, что в работах [142, 189, 197] исследовались лишь чрезвычайно тонкие образцы 5-25 мкм (пленки с большим контрастом) и 50-310 мкм (объемный образец с умеренным контрастом).

В данной работе проводились аналогичные эксперименты на образцах опалов миллиметровой толщины. В качестве заполнителя были выбраны вода и пропиленгликоль, причем вода, обеспечивающая очень низкий диэлектрический контраст  $\epsilon_{a-SiO_2}/\epsilon_{H_2O} \approx 1.02$ , позволяет изучать фотонные стоп-зоны не только тонких, но и толстых миллиметровых образцах. На рис. 3.4 приведены спектры пропускания образцов опала толщиной 0.6, 0.8 и 2.2 мм при

распространении светового пучка вдоль ростового направления  $[111]$  (геометрия  $\Gamma \rightarrow L_g$ ). Из рисунка хорошо видно, что в спектрах опала, заполненного водой, полосы имеют незначительную интенсивность у всех трех образцов, что не позволяет, строго говоря, называть их фотонными стоп-зонами. В то же время у образцов, заполненных пропиленгликолем ( $\varepsilon_{pg}/\varepsilon_{a-SiO_2} \approx 1.13$ ), полоса (111) по своим характеристикам вполне соответствует названию стоп-зоны. В спектрах пропускания структуры опал-вода параметры полос (111) (длина волны в минимуме  $\lambda_{111}$  и полуширина  $\Delta\lambda_{111}$ ) для образца 2.2 мм составляют  $\lambda_{111} = 711$  нм и  $\Delta\lambda_{111} = 29$ , для образца 0.8 мм  $\lambda_{111} = 702$  нм,  $\Delta\lambda_{111} = 26$  нм и для образца 0.6 мм  $\lambda_{111} = 712$  нм,  $\Delta\lambda_{111} = 25$  нм.

Экспериментальные данные (рис. 3.4) указывают на то, что для образцов миллиметровой толщины интенсивность линии растет, а сама линия сужается при уменьшении толщины образца – результат, противоположный размерным эффектам, наблюдавшимся на образцах микронной толщины [142, 189, 197]. В нашем случае увеличение интенсивности наблюдаемой линии непропускания при уменьшении толщины связано с неупорядоченностью кристаллической структуры толстого образца по сравнению с вырезанными из него тонкими пластинками. Действительно, брэгговские длины волн для направления  $\Gamma \rightarrow L_g$  у этих двух пластинок отличаются почти на 10 нм, что может свидетельствовать об изменении постоянной решетки вдоль оси роста исходного образца 2.2 мм. Этот результат согласуется с выводами работы [83], где также наблюдалось смещение полосы (111) при исследовании серии пластинок опала, вырезанных из одного объемного образца перпендикулярно оси его роста.

Таким образом, для проведения прецизионных экспериментов следует использовать образцы опала толщиной 0.1–1 мм, что позволит, с одной стороны, работать на достаточно однородных образцах и, с другой стороны, наблюдать очень слабые линии, которые неразличимы в спектрах пленочных (микрон-

ных) образцов.

### 3.1.3. Поляризационная зависимость стоп-зон синтетических опалов

При обсуждении поляризационной зависимости спектров пропускания опалов необходимо обратить внимание на определение  $p$ - и  $s$ -компонент линейной поляризации. В одномерном случае (см. напр. [198]) система брэгговских плоскостей и граница образца параллельны, поэтому компоненты поляризации определяются однозначно. Однако в случае синтетических опалов, т.е. трехмерных ФК, существует множество непараллельных систем плоскостей ( $hkl$ ). Поэтому следует уточнить, как именно определяются компоненты поляризации.

В наших экспериментах при сканировании (А) и (В) для компонент поляризации выбраны общепринятые обозначения:  $p$ -компонента соответствует колебаниям вектора электрического поля  $\mathbf{E}$  в плоскости сканирования, т.е. в плоскости  $\Gamma L_g K_g L$  при сканировании (А) и в плоскости  $\Gamma L_g W K$  при сканировании (В). Соответственно,  $s$ -компонента падающего света ортогональна  $p$ -компоненте и в обоих случаях (А) и (В) параллельна кристаллографической плоскости (111), т.е. ростовой плоскости образца. При сканировании (С) под  $p$ -компонентой поляризации падающего пучка мы также будем понимать компоненту, лежащую в плоскости сканирования (в данном случае это плоскость  $\Gamma K_g W_g X$ ), а под  $s$ -компонентой – ортогональную  $p$ -компоненте и, соответственно, плоскости сканирования  $\Gamma K_g W_g X$ . При этом  $s$ -компонента уже не будет параллельна ростовой плоскости (111), а будет параллельна плоскостям (020), (002) и (022) (рис. 3.5). Плоскости  $\Gamma L_g K_g L$  (А) и  $\Gamma K_g W_g X$  (С) перпендикулярны друг другу и содержат общее направление  $\Gamma \rightarrow K_g$ . Для этого направления  $p$ - и  $s$ -компоненты при сканированиях (А) и (С) бу-

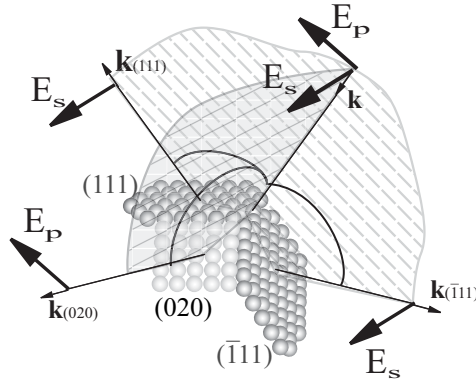


Рис. 3.5. Схематическое изображение механизма дифракции поляризованного пучка с волновым вектором  $\mathbf{k}$  при  $\theta_A = 35^\circ$  (геометрия  $\Gamma \rightarrow K$ ). Изображены пучки, «отраженные» от плоскостей (111),  $(\bar{1}11)$  и (020) с указанием преимущественной поляризации дифрагированного света.

дут совпадать с точностью до перестановки, а именно,  $p$ -компонента сканирования (А), лежащая в плоскости  $\Gamma L_g K_g L$ , для направления  $\Gamma \rightarrow K_g$  будет в точности перпендикулярна плоскости  $\Gamma K_g W_g X$ , т.е. будет соответствовать  $s$ -компоненте сканирования (С). И, наоборот,  $s$ -компонента сканирования (А) для направления  $\Gamma \rightarrow K_g$  будет в точности соответствовать  $p$ -компоненте сканирования (С).

Анализ поляризационных особенностей в спектрах опалов, выполненный в работе [85], показывает, что для каждой системы кристаллографических плоскостей  $(hkl)$  следует определять  $p$ - и  $s$ -компоненты поляризации с учетом ориентации падающего пучка относительно этой выбранной системы плоскостей. Из результатов работы [87] следует, что для пути сканирования (А) в  $p$ -поляризации отраженная компонента падающего света обращается в нуль при критическом значении угла падения  $\theta_A = \theta^{qB}$  на систему плоскостей  $(hkl)$ . Значение критического (квазибрюстеровского) угла определяется из формулы:

$$\sin^2 \theta_{hkl}^{qB} = \frac{\varepsilon_{av}}{2\varepsilon_v} \left( 1 \pm \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{h+k+l}{h^2+k^2+l^2} \sqrt{h^2+k^2+l^2 - hk - hl - kl} \right), \quad (3.3)$$

где  $\varepsilon_v$  определяет диэлектрическую проницаемость внешней среды, которой в нашем случае является заполнитель. В случае слабого контраста, когда опал погружен в иммерсионную жидкость, можно полагать  $\varepsilon_{av} = \varepsilon_v$ . Формула (3.3) позволяет вычислить значения углов  $\theta_A = \theta^{qB}$ , при которых будут отсутствовать в  $p$ -поляризации фотонные стоп-зоны ( $hkl$ ), а именно  $\theta_{111}^{qB} = 45.4^\circ$ ,  $\theta_{111}^{qB} = 25.7^\circ$  и  $\theta_{200}^{qB} = -9.8^\circ$ . Следует отметить, что эти значения близки к углу  $45^\circ$ , отсчитанному относительно нормали к соответствующей плоскости ( $hkl$ ). Как отмечалось в работах [85, 87] этот критический угол имеет определенную аналогию с углом Брюстера для границы раздела двух однородных сред. Поэтому его уместно называть квазибрюстеровским.

Исследованные в данной работе спектры пропускания опала в зависимости от поляризации падающего света приведены на рис. 3.6 ( $p$ - и  $s$ -компоненты) для образца 0.6 мм, заполненного водой. Наиболее характерные спектры, демонстрирующие эффект пропадания фотонных стоп-зон в  $p$ -поляризации, приведены на рис. 3.7 для образца 0.6 мм с двумя разными заполнителями (вода либо пропиленгликоль). Эти спектры соответствуют направлению  $\theta_A = 40^\circ$ , близкому к квазибрюстеровскому углу  $\theta_{111}^{qB} = 45.4^\circ$  для плоскости (111). В спектрах присутствуют две полосы «непропускания», одна из которых – в области длин волн  $\sim 600$  нм соответствует перекрывающимся широким зонам (111) и ( $\bar{1}11$ ), вторая – в области длин волн  $\sim 430$  нм соответствует зонам (200), (002) и (202). Видно, что в спектрах опала, заполненного водой, полоса  $\sim 600$  нм проявляется только в  $s$ -поляризации, а в  $p$ -поляризации не наблюдается вообще, в то время как полоса  $\sim 430$  нм присутствует в обеих поляризациях, хотя и имеет несколько различающиеся интенсивности и полуширины. При заполнении опала пропиленгликолем в спектре с  $s$ -поляризацией доминирует широкая полоса в области 540-640 нм, в то время как в  $p$ -поляризации проявляется более слабая и узкая полоса с центром  $\sim 620$  нм, что соответствует расчетному значению для зоны ( $\bar{1}11$ ).

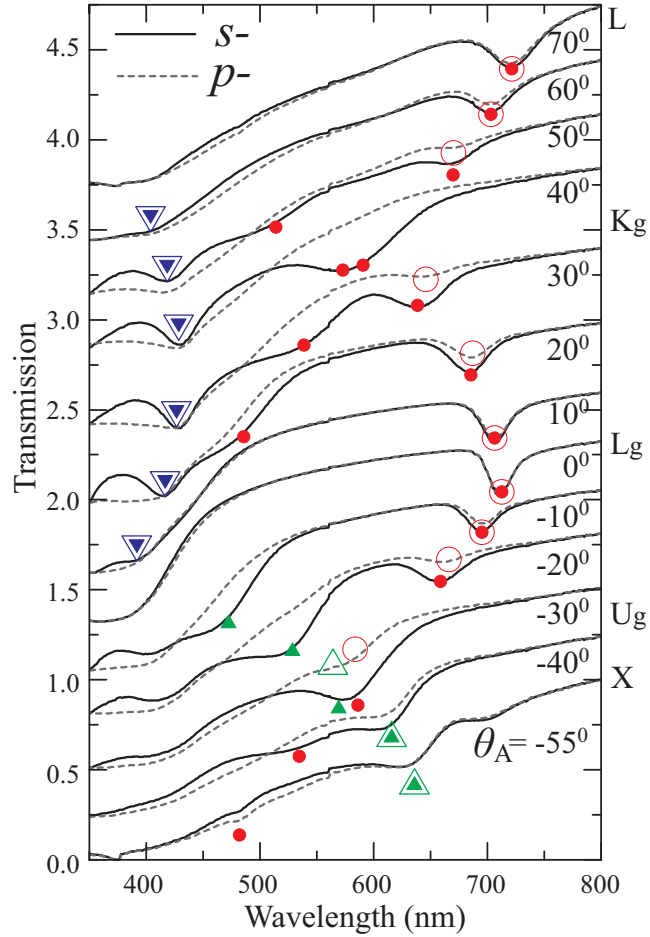


Рис. 3.6.  $s$ - и  $p$ - поляризованные спектры пропускания опала во всем диапазоне углов  $-55^\circ \leq \theta_A \leq 70^\circ$  сканирования (А). Использовался заполненный водой ( $\varepsilon_f = 1.78$ ) образец толщиной 0.6 мм с диаметром  $a\text{-SiO}_2$  частиц  $\bar{D} = 316$  нм. Сплошные кривые –  $s$ -поляризация, пунктирные кривые –  $p$ -поляризация.

Важно отметить, что в  $p$ -поляризации в области фотонной зоны (111) полоса «непропускания» отсутствует.

Разница в поведении полос (111) и ( $\bar{1}11$ ), которая проявляется в спектрах опала с пропиленгликолем, объясняется следующим образом. Для фотонной зоны (111) квазибрюстеровский угол  $\theta_{111}^{qB} = 45.4^\circ$  близок к обсуждаемому  $\theta_A = 40^\circ$ , а для фотонной зоны ( $\bar{1}11$ ) критический угол составляет  $\theta_{\bar{1}11}^{qB} = 25.7^\circ$ , что уже заметно отличается от  $\theta_A = 40^\circ$ . Следовательно, эффект пропадания фотонных стоп-зон в  $p$ -поляризации при углах, близких к критическому значению  $\theta^{qB}$ , наблюдается не только при малом контрасте

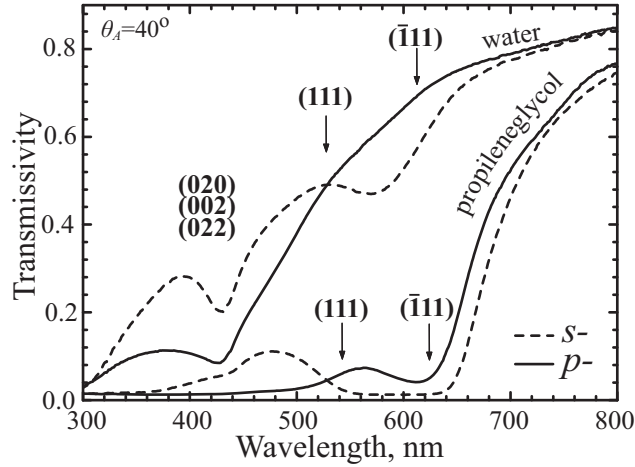


Рис. 3.7. Спектры пропускания образца опала толщиной 0.6 мм, заполненного водой и пропиленгликолем, сканирование (А), угол падения  $\theta_A = 40^\circ$ . Сплошные линии соответствуют падению  $p$ -поляризованного света, штриховые линии –  $s$ -поляризованного света. Стрелками указано рассчитанное по формуле (3.1) положение фотонных стоп-зон (111) и ( $\bar{1}11$ ) для структур опал-вода и опал-пропиленгликоль.

(опал-вода), так и при большем контрасте (опал-пропиленгликоль), когда в спектрах с  $s$ -поляризацией уже сформировались фотонные стоп-зоны с практически нулевым пропусканием (в линейной шкале, рис. 3.7).

Таким образом, при поиске слабых линий в спектрах пропускания опалов необходимо учитывать их поляризационную зависимость, которая не является тривиальной. В  $p$ -поляризации отраженная компонента падающего света обращается в нуль в области квазибрюстеровских углов, т.е. соответствующая стоп-зона не наблюдается в спектрах пропускания. При этом, задав геометрию рассеяния (т.е. направление падающего пучка относительно осей ГЦК решетки), для каждой системы  $(hkl)$  плоскостей необходимо определить, какая компонента поляризованного света соответствует  $p$ -, а какая –  $s$ -компоненте, и, кроме того, для каждой системы  $(hkl)$  плоскостей необходимо вычислить соответствующий только этой системе критический угол  $\theta_{hkl}^{qB}$ .

## 3.2. Высокоиндексные ( $hkl$ ) стоп-зоны в синтетических опалах

Ранее в работах [30, 73, 74, 84, 85] было продемонстрировано, что в случае малого контраста диэлектрической проницаемости опал-заполнитель низкоэнергетическая область фотонной зонной структуры хорошо описывается в приближении брэгговской дифракции света на  $\{111\}$  плоскостях ГЦК-решетки. В настоящей работе для интерпретации экспериментальных данных был проведен расчет дисперсионных зависимостей брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  для ГЦК-решетки и трех контуров сканирования (А-С), соответствующих эксперименту, рис. 3.8. Расчет проводился по формуле (3.1) в широком спектральном интервале для тех систем плоскостей  $hkl$ , у которых брэгговские длины волн  $\lambda_{hkl}$  попадают в рабочий диапазон спектрометра PerkinElmer Lambda 650, а именно – 190-900 нм.

Отметим, что на рис. 3.8 приведены дисперсионные кривые  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  только для тех семейств  $\{hkl\}$ , которые удалось обнаружить в ходе проведения эксперимента. Так, на рис. 3.8 представлены дисперсионные зависимости брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  для семейств плоскостей  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$ ,  $\{311\}$ ,  $\{222\}$ ,  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  и  $\{333\}$ . Как известно, в случае ГЦК-решетки брэгговскую дифракцию света могут вызывать лишь системы плоскостей с индексами Миллера одинаковой четности [69]. Поэтому на рис. 3.8 мы ограничиваемся зависимостями только для семейств плоскостей, у которых все индексы Миллера имеют одинаковую четность. Также отметим, что более высокоиндексные ( $hkl$ ) стоп-зоны для образца с диаметром сфер  $\bar{D} = 316$  нм лежат в далеком ультрафиолетовом диапазоне спектра, где проявляются эффекты, связанные с поглощением света в заполнителе. Это приводит к невозможности однозначной интерпретации особенностей, наблюдаемых в спектрах пропускания.



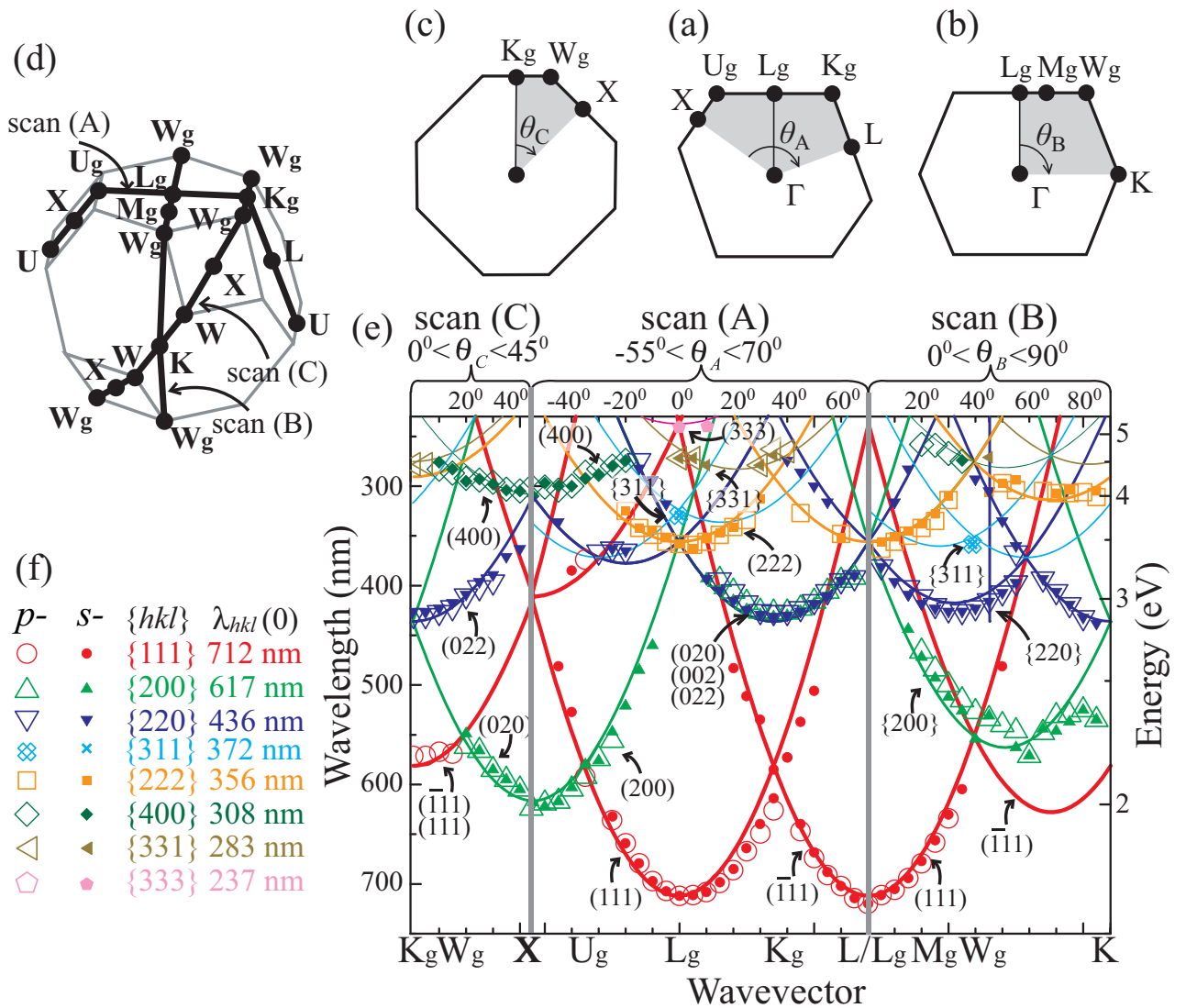


Рис. 3.8. (a-d) ЗБ ГЦК решетки с тремя сечениями сканирования (A), (B) и (C). (e) Непрерывные кривые - рассчитанные зависимости брэгговской длины волны от угла падения светового пучка на системы  $(hkl)$  плоскостей ГЦК-решетки для трех путей сканирования. Значками приведены измеренные положения стоп-зон в спектрах пропускания. (f) Используемая на панели (e) система обозначений  $(hkl)$  стоп-зон в  $p$ - и  $s$ - поляризациях и соответствующее  $(hkl)$  плоскостям расчетное значение брэгговской длины волны  $\lambda_{hkl}(0)$ .

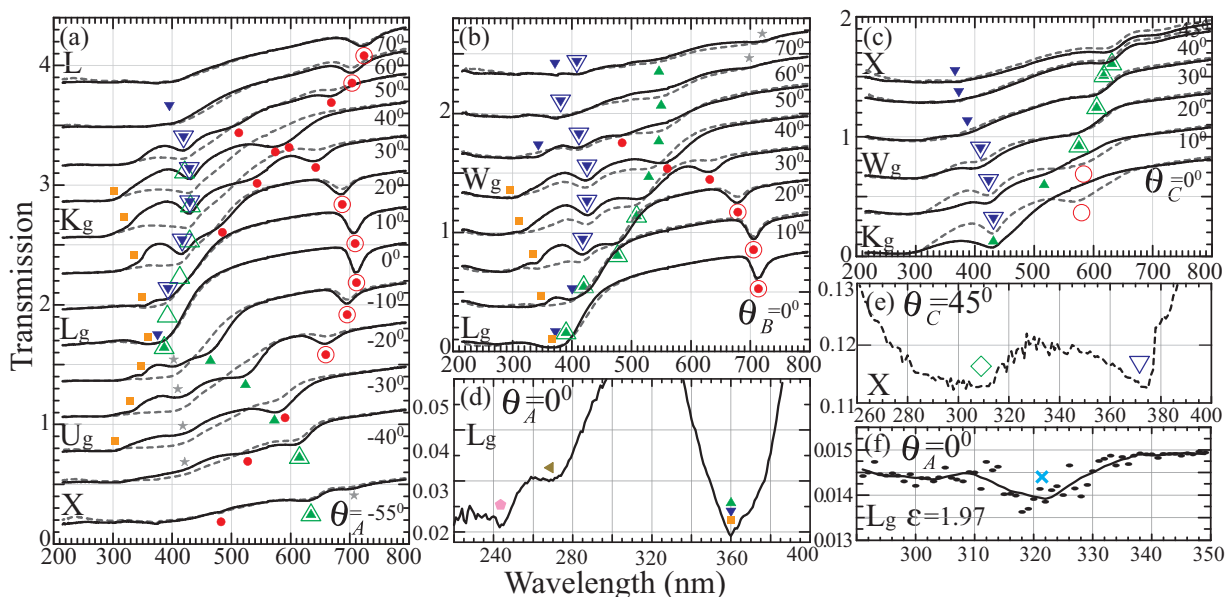


Рис. 3.9. Поляризованные спектры пропускания опала, иммерсированного дистиллированной водой, полученные при сканировании (А) – панель (а), сканировании (В) – панель (b) и сканировании (С) – панель (с) в зависимости от угла сканирования  $\theta$ . Спектры смещены по оси ординат на величину, пропорциональную разности углов  $\theta$ , соответствующих текущему и нижнему спектру (0.03 на один градус).  $s$ -компонента поляризации приведена сплошной кривой,  $p$ -компонента – пунктирной. Стоп-зоны обозначены согласно легенде на рис. 3.8f. Коротковолновая область  $p$ -спектра опала в воде  $\theta_B = 0$  (d) и  $\theta_C = 45^\circ$  (e). Коротковолновая область  $p$ -спектра опала, погруженного в смесь воды и пропиленгликоля,  $\theta_B = 0^\circ$  (f).

В предыдущих разделах приведены результаты предварительной работы, благодаря которой были определены оптимальные условия проведения эксперимента и параметры образца. Эти результаты позволили успешно провести «чистовые» прецизионные исследования, в результате которых был обнаружен целый ряд не наблюдавшихся ранее высокоиндексных стоп-зон.

Результаты измерений спектров пропускания в зависимости от ориентации волнового вектора  $\mathbf{k}$  падающего пучка относительно ГЦК-решетки представлены на рис. 3.9. Спектры измерялись с шагом  $5^\circ$  по углу  $\theta$ , для двух компонент линейной поляризации падающего света  $p$  и  $s$  ( $p$ -компонента поляризации соответствует колебаниям вектора электрического поля в плоскости

сканирования).

В результате обработки экспериментальных данных были определены ориентационные (от угла  $\theta$ ) зависимости спектрального положения полос, т.е. дисперсия фотонных стоп-зон  $E(\mathbf{k})$  (рис. 3.8). Расчетная брэгговская длина волны  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  определяется системой  $(hkl)$  плоскостей, на которых происходит дифракция света. Следовательно, совпадение ориентационной (от угла  $\theta$ ) зависимости полосы в спектрах с расчетной функцией  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  позволяет однозначно связать наблюдаемые стоп-зоны с системами плоскостей ГЦК решетки опала.

Рассмотрим каждое семейство  $\{hkl\}$  по отдельности. Расчеты брэгговских длин волн относятся к образцу опала с диаметром сфер  $\bar{D} = 316$  нм.

### **3.2.1. Семейство $\{111\}$ , $\lambda_{\{111\}}(0) = 2d_{111}\sqrt{\varepsilon_{av}}$ в точках $L$ ( $L_g$ ) на поверхности ЗБ**

Однозначная интерпретация полос семейства  $\{111\}$  определяется тем, что величина  $\lambda_{\{111\}}(0)$  (направление  $\Gamma \rightarrow L_g$ ) соответствует самой длинноволновой стоп-зоне в спектре опалов и для заполненного водой опала с  $\bar{D} = 316$  нм составляет  $\lambda_{\{111\}}(0) = 712$  нм (рис. 3.8). Отметим, что стоп-зоны  $(111)$  подробно описаны в литературе благодаря их простой интерпретации и четкому проявлению в спектрах.

### **3.2.2. Семейство $\{200\}$ , $\lambda_{\{200\}}(0) = \sqrt{3/4}\lambda_{\{111\}}(0)$ в точках $X$ на поверхности ЗБ**

При сканировании ( $A$ ) в исследуемый спектральный интервал попадают все три стоп-зоны семейства  $\{200\}$ , а именно  $(200)$ ,  $(020)$  и  $(002)$ . В этом диапазоне стоп-зона  $(200)$  не вырождена и экспериментально наблюдается очень четко, причем в  $X$ -точке соответствующая ей длина волны принимает

максимальное значение  $\lambda_{200}^{exp}(\theta_A = -55^\circ) \approx 625$  нм, лишь незначительно превышающее расчетную величину  $\lambda_{\{200\}}(0) = 617$  нм (рис. 3.8 и 3.9). В то же время стоп-зоны (020) и (002), а также (022) при сканировании (А) являются вырожденными, и для области волновых векторов  $X \rightarrow L_g \rightarrow K_g \rightarrow L$  наблюдается полоса, соответствующая их перекрытию (рис. 3.9). Расчетные значения для нее в точках  $L_g$  и  $L$  составляют 356 нм, а в точке  $K_g$  – 436 нм. При сканировании (В), которое не содержит точек  $X$ , наблюдается полоса (020) с локальным максимумом  $\lambda_{020}^{exp}(\theta_B = 52^\circ) \approx 563$  нм. При сканировании (С) полоса (020) в другой точке  $X$  ( $\theta_C = 45^\circ$ ) имеет длину волны 619 нм, близкую к расчетному значению 617 нм (рис. 3.9). Если продолжить сканирование (С) в сторону отрицательных углов  $\theta_C$ , то мы попадем в третью точку  $X$  ( $\theta_C = -45^\circ$ ), где должна наблюдаться полоса (002) также при  $\approx 617$  нм.

Отметим исключительно яркий поляризационный эффект, демонстрируемый стоп-зоной (200) при сканировании (А) (рис. 3.9). В области точки  $X$  ( $-55^\circ \leq \theta_A \leq -40^\circ$ ) соответствующие полосы в  $s$ - и  $p$ - поляризациях имеют близкие интенсивности. Однако при дальнейшем удалении от точки  $X$  полоса в  $p$ - поляризации теряет свою интенсивность и практически не наблюдается при  $-20^\circ \leq \theta_A \leq -10^\circ$ , в то время как в  $s$ - поляризации ее интенсивность по-прежнему остается существенной.

### 3.2.3. Семейство $\{220\}$ , $\lambda_{\{220\}}(0) = \sqrt{3/8}\lambda_{\{111\}}(0)$ в точках $K$ ( $K_g$ ) на поверхности ЗБ

Как отмечалось выше, при сканировании (А) стоп-зона (022) совпадает по длине волны с (020) и (002). Чтобы разделить эти полосы, следует обратиться к сканированиям (В) или (С), плоскости которых перпендикулярны плоскости (А) (рис. 3.8). Для этих путей вырождение снимается, семейства  $\{200\}$  и  $\{220\}$  расщепляются, причем в точке  $X$  соответствующие им длины

волн существенно разнятся: 619 нм для (020) и 370 нм для (022). Максимальное значение длины волны  $\lambda_{\{220\}}(0) = 431$  нм достигается в точках К ( $K_g$ ) на поверхности ЗБ. Итак, благодаря правильно выбранным путям сканирования удастся однозначно разделить стоп-зоны  $\{200\}$  и  $\{220\}$ . Также эту зону можно изучать отдельно в  $p$ -поляризованном свете в точках К ( $K_g$ ) благодаря эффекту, аналогичному эффекту Брюстера (см. предыдущий подразд. 3.2.2).

### 3.2.4. Семейство $\{311\}$ , $\lambda_{\{311\}}(0) = \sqrt{3/11}\lambda_{\{111\}}(0)$ в направлениях $\langle 311 \rangle$

В спектрах опалов, заполненных водой, не удалось наблюдать полосы семейства  $\{311\}$ . Причины этого эффекта будут рассмотрены далее в Главе 4. Однако уже при незначительном увеличении диэлектрической проницаемости заполнителя (смесь воды и пропиленгликоля,  $\epsilon_f = 1.97$ ) эти полосы удалось наблюдать. В направлении  $\Gamma \rightarrow W_g$  ( $\theta_B \approx 40^\circ$ ) пересекаются дисперсионные кривые, соответствующие стоп-зонам (311) и (131) (рис. 3.8). Для этого направления в спектре наблюдается слабая полоса с центром  $\sim 358$  нм (рис. 3.9f), что практически совпадает с рассчитанным по формуле (3.1) значением 356 нм. Такое совпадение позволяет сопоставить эту полосу со стоп-зоной семейства  $\{311\}$ . Отметим, что для исследуемого образца максимальное расчетное значение длины волны для семейства  $\{311\}$  составляет  $\lambda_{\{311\}}(0) = 372$  нм в направлениях  $\langle 311 \rangle$  при  $\theta_A \approx -30^\circ$  и  $\theta_B \approx 58^\circ$ .

### 3.2.5. Семейство $\{222\}$ , $\lambda_{\{222\}}(0) = 1/2\lambda_{\{111\}}(0)$ в точках L ( $L_g$ ) на поверхности ЗБ

Полосы (222), обусловленные вторым порядком дифракции на ростовых плоскостях (111), наблюдаются при сканированиях (А) и (В) на длинах волн, вдвое меньших  $\lambda_{\{111\}}(\theta)$  (рис. 3.9). Например, для ростового направления

$\Gamma \rightarrow L_g$  наблюдается полоса с длиной волны  $\lambda_{020}^{exp}(0) = 358$  нм при расчетной величине 356 нм. При отклонении от направления  $\Gamma \rightarrow L_g$  полосы  $\{222\}$ , как и полосы  $\{111\}$ , более контрастно проявляются в  $s$ -поляризации, чем в  $p$ -поляризации (см., например спектры при  $\theta_B \approx 30^\circ$  на рис. 3.9). Эти поляризационные зависимости связаны с проявлением эффекта пропадаания полос в  $p$ -поляризации вблизи квазибрюстерского угла.

### 3.2.6. Семейство $\{400\}$ , $\lambda_{\{400\}}(0) = 1/2\lambda_{\{200\}}(0) = \lambda_{\{111\}}(0)$ в точках X на поверхности ЗБ

В спектрах, соответствующих геометрии  $\Gamma \rightarrow X$  (рис. 3.9е), была обнаружена слабая полоса на длине волны  $\sim 308$  нм. Это значение в точности совпадает с расчетной величиной  $\lambda_{\{400\}}(0) = 308$  нм для второго порядка дифракции на плоскостях  $\{200\}$ . Отмеченная полоса наблюдалась в тех же спектрах, что и полосы семейства  $\{200\}$ , т.е. при сканировании (А)  $-55^\circ \leq \theta_A \leq -20^\circ$  и на всем пути (С) (рис. 3.8). Исходя из этого, эти полосы были приписаны семейству стоп-зон  $\{400\}$ .

### 3.2.7. Семейство $\{331\}$ , $\lambda_{\{331\}}(0) = \sqrt{3/19}\lambda_{\{111\}}(0)$ в направлениях $\langle 331 \rangle$

Спектры, полученные для ростового направления  $\Gamma \rightarrow L_g$  содержат слабую полосу на длине волны  $\sim 270$  нм (рис. 3.9d). Согласно расчетам, в точке  $L_g$  на длине волны 262 нм пересекаются три дисперсионные кривые семейства стоп-зон  $\{331\}$ , а именно (331), (133) и (313). Таким образом, полосу  $\sim 270$  нм с большой вероятностью можно связать со стоп-зоной семейства  $\{331\}$ . Отметим, что для семейства  $\{331\}$  максимальное значение длины волны составляет 283 нм, которое соответствует направлениям  $\langle 331 \rangle$ .

### 3.2.8. Семейство $\{333\}$ , $\lambda_{\{333\}}(0) = 1/3\lambda_{\{111\}}(0)$ в точках $\mathbf{L}$ ( $L_g$ ) на поверхности ЗБ

В спектрах, соответствующих точке  $L_g$ , была обнаружена еще одна очень слабая полоса на длине волны  $\sim 245$  нм [рис. 3.9d]. По своему спектральному положению она близка к расчетному значению 237 нм для стоп-зоны  $(333)$ , т.е. определяется третьим порядком рассеяния на плоскостях  $(111)$ . Как и полосы семейства  $\{331\}$ , полоса  $(333)$  быстро пропадает при отклонении от направления  $\Gamma \rightarrow L_g$ .

### 3.2.9. $(hkl)$ стоп-зоны с индексами Миллера разной четности

Для экспериментальной проверки утверждения о том, что брэгговской дифракции в ГЦК-структуре возникает исключительно на плоскостях, с индексами Миллера одинаковой четности [69], был выполнен расчет для стоп-зон с индексами Миллера разной четности  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  $\{210\}$ ,  $\{211\}$ ,  $\{300\}$ ,  $\{211\}$  и  $\{310\}$  с максимальной брэгговской длиной волны  $\lambda_{hkl}(0)$  не менее 380 нм. Расчетные дисперсионные кривые не удалось сопоставить с экспериментально наблюдавшимися особенностями в спектрах, поэтому они не приводятся на рис. 3.8. Этот факт также свидетельствует о том, что исследованный нами образец опала имеет структуру, достаточно близкую к ГЦК.

## Основные результаты и выводы

1. Исследованы спектры пропускания ФК на основе синтетических опалов в зависимости от основных параметров эксперимента (поляризация и геометрия рассеяния) и от параметров образца (толщина, контраст диэлектрической проницаемости).
2. В спектрах пропускания экспериментально наблюдались стоп-зоны, при-

надлежащие семействам  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$ ,  $\{311\}$ ,  $\{222\}$ ,  $\{331\}$ ,  $\{400\}$  и  $\{333\}$ .

3. Для каждого из перечисленных  $\{hkl\}$  семейств стоп-зон определены оптимальные условия наблюдения в спектрах пропускания синтетических опалов.
4. В низкоконтрастных ФК на основе синтетических опалов дисперсионные зависимости стоп-зон  $E(\mathbf{k})$  хорошо описываются в приближении брэгговского рассеяния света  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  на плоскостях  $(hkl)$  ГЦК решетки.

Результаты, представленные в Главе 3, излагаются в работах [194, 199, 200].



# Стоп-зоны в многокомпонентных фотонных кристаллах: селективное переключение и резонансные эффекты

В этой главе представлены результаты экспериментального и теоретического исследования многокомпонентных ФК. Изложение материала основывается на следующей классификации (рис. 4.1). ФК, состоящие из двух однородных материалов, обладающих постоянными по объему значениями диэлектрической проницаемости, будем называть двухкомпонентными ФК (структуры в первом ряду на рис. 4.1). Соответственно, ФК, состоящие из трех однородных компонент с постоянными значениями диэлектрической проницаемости, будем называть трехкомпонентными ФК (структуры во втором ряду на рис. 4.1). Трехкомпонентные ФК, а также ФК с большим числом однородных компонент или с неоднородным по объему значением диэлектрической проницаемости, которая описывается произвольной пространственно-периодической зависимостью  $\varepsilon_1(\mathbf{r})$  (структуры в третьем ряду на рис. 4.1), будем называть *многокомпонентными фотонными кристаллами*.

Отметим, что в настоящее время существует обширная литература, посвященная исследованию двухкомпонентных ФК. Это структуры, состоящие из двух разных материалов (компонент), которые становятся полностью прозрачными, если диэлектрическая проницаемость одной из компонент совпадает с диэлектрической проницаемостью другой. Таким образом, двухкомпонентные ФК не позволяют осуществлять селективное управление световыми потоками на разных брэгговских длинах волн путем модуляции диэлектрической проницаемости одной из компонент: включаться и включаться будут

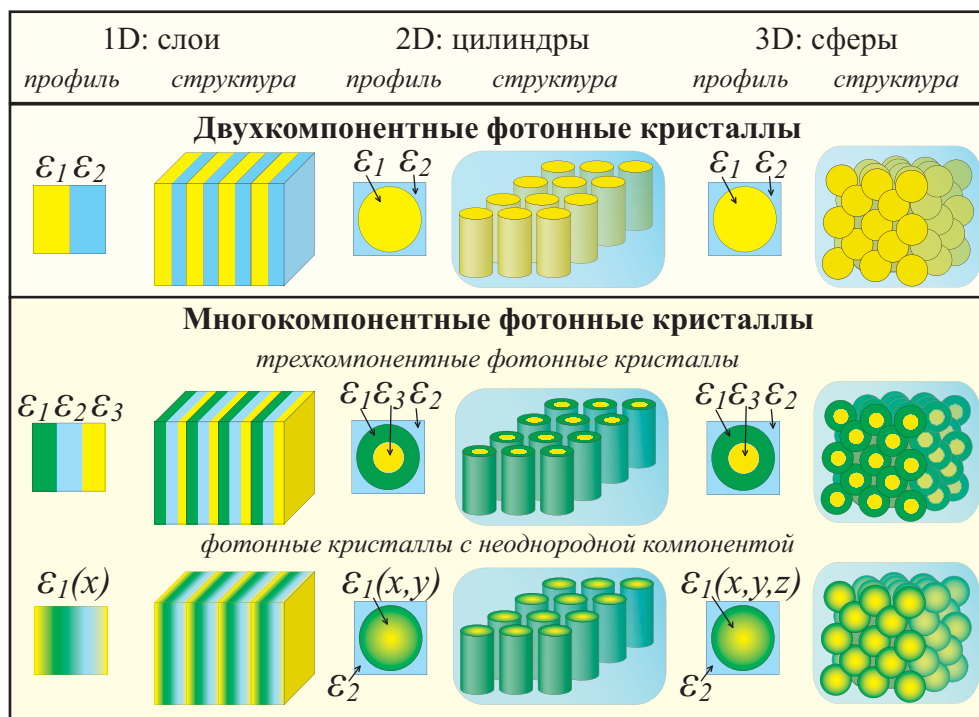


Рис. 4.1. Схематическое представление двухкомпонентных ФК (первый ряд) и многокомпонентных ФК (второй и третий ряды), имеющих различную размерность – 1D (первая колонка), 2D (вторая колонка) и 3D (третья колонка). В таблице представлено 9 структур, для каждой из которых показан профиль диэлектрической проницаемости.

все стоп-зоны одновременно. С одной стороны, такое свойство упрощает механизмы управления светом в двухкомпонентных ФК, но, с другой стороны, существенно сужает их функциональные возможности и области применения, т.к. фактически исключает диэлектрическую проницаемость как независимый параметр при управлении различными  $(hkl)$  стоп-зонами.

Таким образом, интерес представляют исследования ФК, которые не обладают таким ограничением. При этом желательно определить общие механизмы включения/выключения отдельных  $(hkl)$  стоп-зон, а также качественного перестроения всей фотонной зонной структуры как целого. Одним из возможных путей расширения функциональных возможностей ФК является усложнение фотонных свойств структуры благодаря переходу от двухкомпонентных к многокомпонентным ФК с более сложной пространственно-перио-

дической зависимостью диэлектрической проницаемости.

До последнего времени в литературе в основном рассматривались фотонные свойства двухкомпонентных ФК. Исключение составляют несколько работ. Так, при расчетах фотонной зонной структуры ГЦК решетки в работе [175], посвященной сходимости метода разложения по плоским волнам, в качестве рассеивателей авторы дополнительно рассмотрели сферические частицы с гауссовым профилем диэлектрической проницаемости (в нашей терминологии это многокомпонентные ФК с неоднородными компонентами). Отметим также работу [201], посвященную оценке величины поправок к расчетам фотонной зонной структуре 2D кремниевых ФК, в которой учитывался дополнительный слой окисла на границе кремний-воздух. Селективное переключение стоп-зон в трехкомпонентных опалоподобных ФК, состоящих из сфер в оболочке, было рассмотрено в работах [202, 203] – авторы с помощью численных методов рассчитали ширину низкоэнергетических стоп-зон в направлениях  $\Gamma \rightarrow L$  и  $\Gamma \rightarrow X$ . При этом было обнаружено, что в этих двух направлениях стоп-зоны исчезают не одновременно. Аналогичный экспериментальный результат был получен путем осаждения однородного слоя кремния [88] или оксида цинка [92] на поверхность сферических полистироловых частиц, формирующих опалоподобный ФК. Следует отметить, что в этих работах авторы интерпретировали наблюдаемые особенности как самую низкоэнергетическую стоп-зону в двух разных направлениях:  $\Gamma \rightarrow L$  и  $\Gamma \rightarrow X$ .

При экспериментальном исследовании ФК на основе опалов методом иммерсионной спектроскопии было установлено, что стоп-зоны семейств  $\{111\}$ ,  $\{200\}$  и  $\{220\}$  исчезают при разных значениях диэлектрической проницаемости заполнителя  $\epsilon_f$  [30]. Этот эффект связан с тем, что сферические частицы  $\alpha\text{-SiO}_2$  имеют неоднородную по диэлектрической проницаемости внутреннюю структуру, т.е. синтетические опалы относятся к классу многокомпонентных ФК.

В настоящей Главе представлены результаты систематического изучения эффектов селективного переключения стоп-зон в многокомпонентных ФК. Экспериментальная часть работы включает в себя, во-первых, выбор оптимальных условий проведения экспериментов по изучению различных  $(hkl)$  стоп-зон. Далее, с помощью метода иммерсионной спектроскопии пропускания было исследовано поведение различных  $(hkl)$  стоп-зон в зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя. При этом особое внимание уделяется определению величины диэлектрической проницаемости заполнителя, при которой интенсивность наблюдаемой  $(hkl)$  полосы в спектрах пропускания достигает минимального значения. Важно отметить, что в данной главе для краткости изложения мы будем использовать термины «стоп-зона исчезает» или «стоп-зона выключается». Однако, как будет продемонстрировано в Главе 5 на примере иммерсионного поведения полосы  $(111)$ , полного исчезновения стоп-зон в опалах не происходит. В области «выключения» полоса непропускания претерпевает трансформацию в слабый по интенсивности пик пропускания. Этот эффект связан с неупорядоченностью синтетических опалов и в идеальных упорядоченных ФК наблюдаться не должен.

Теоретическая часть работы состоит в развитии оригинальной модели, которая позволила достаточно успешно описать экспериментальные результаты. Модель разработана для упорядоченного многокомпонентного ФК. Эффекты, связанные с беспорядком, будут теоретически рассматриваться в Главе 5.

#### **4.1. Экспериментальное исследование иммерсионных зависимостей $(hkl)$ стоп-зон в синтетических опалах**

Данный раздел посвящен описанию результатов, полученных при исследовании иммерсионных зависимостей различных семейств  $\{hkl\}$  стоп-зон, т.е.

исследованию интенсивности соответствующих пиков в спектрах пропускания от величины диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ . При этом упор делался на определение величины диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$ , при котором стоп-зона ( $hkl$ ) исчезает (выключается). Следует особо подчеркнуть, что в данной работе иммерсионные зависимости ( $hkl$ ) стоп-зон были измерены для всех высокосимметричных направлений в ЗБ, т.е. при сканированиях (А), (В) и (С), для двух компонент линейной поляризации падающего света ( $p$ - и  $s$ -). Таким образом, была экспериментально определена фотонная зонная структура синтетических опалов  $E(\mathbf{k}, \varepsilon_f)$  для случая малого диэлектрического контраста.

Наиболее трудоемким было исследование иммерсионных зависимостей и определение значений  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$  для высокоиндексных ( $hkl$ ) стоп-зон, которые, как правило, имеют очень слабую интенсивность в спектрах пропускания опалов. Эта работа была успешно выполнена благодаря исследованиям, описанным в Главе 3, в результате которых были определены спектральные интервалы, геометрии рассеяния и поляризации падающего света, оптимальные для наблюдения различных высокоиндексных ( $hkl$ ) стоп-зон. В частности было установлено, что наиболее контрастные линии в спектрах пропускания опалов можно получить на образце 0.6 мм. В большинстве случаев следует использовать  $s$ -поляризованный свет (вектор магнитного поля  $\mathbf{H}$  осциллирует в плоскости падения на систему ( $hkl$ ) плоскостей, отвечающую за формирование стоп-зоны). Ключевым моментом является выбор ориентации образца относительно падающего луча, при которой в спектрах пропускания интересующая ( $hkl$ ) стоп-зона не перекрывается с другими стоп-зонами.

Ниже мы подробно рассмотрим поведение каждого семейства  $\{hkl\}$  стоп-зон при изменении контраста диэлектрической проницаемости опал-заполнитель, т.е. иммерсионные зависимости  $\{hkl\}$  стоп-зон. На рис. 4.2 представлены иммерсионные зависимости всех исследованных семейств стоп-зон, т.е. спек-

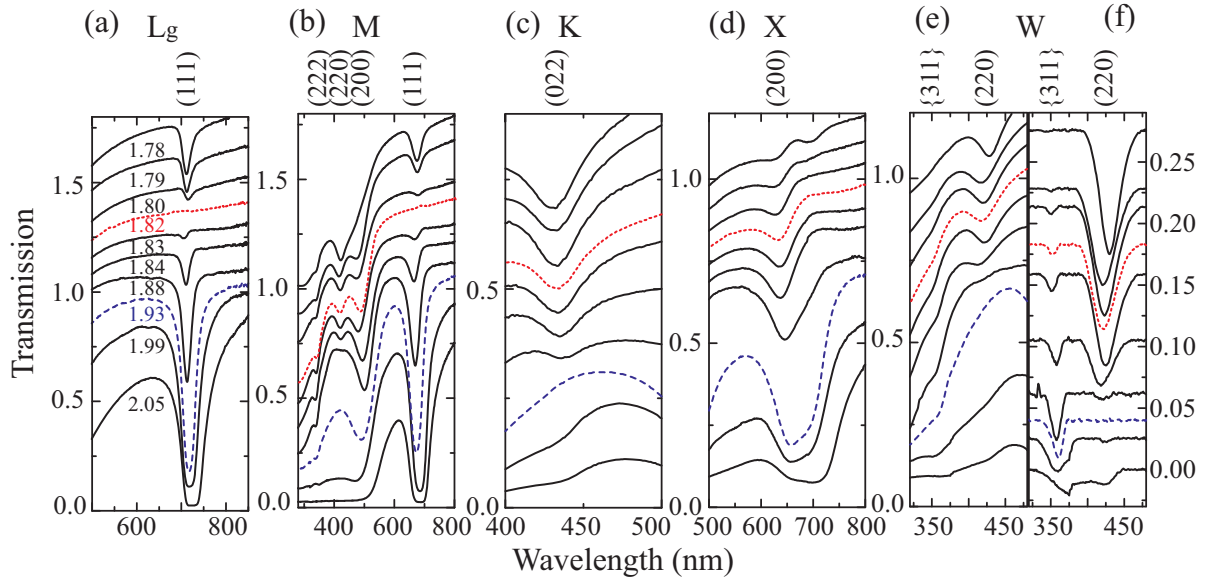


Рис. 4.2. Зависимость спектров пропускания образца опала ( $\bar{D} = 316$  нм) от величины диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$  во всем экспериментально исследованном диапазоне  $1.78 \leq \varepsilon_f \leq 2.05$  (a-e). Представлены спектральные области и геометрии рассеяния (указаны соответствующие особые точки на поверхности ЗБ), в которых наиболее четко проявляется поведение различных  $(hkl)$  стоп-зон. (f) Результат обработки спектров, представленных на панели (e). Значения диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$  приведены на панели (a) и относятся также к соответствующим спектрам на панелях (b-f). Красным цветом выделены спектры для заполнителя  $\varepsilon_f = 1.82$ , при котором выключается семейство  $\{111\}$  стоп-зон, синим цветом выделены спектры для заполнителя  $\varepsilon_f = 1.93$ , при котором выключается семейство  $\{220\}$  стоп-зон.

тральные области и геометрии рассеяния (указаны соответствующие особые точки на поверхности ЗБ), в которых наиболее четко проявляется поведение стоп-зон  $\{111\}$  ( $L_g, M$ ),  $\{200\}$  ( $M, X$ ),  $\{220\}$  ( $M, K, W$ ),  $\{311\}$  ( $W$ ),  $\{222\}$  ( $M$ ).

На рис. 4.3 приведены результаты обработки спектров пропускания в виде зависимости нормированных (домноженных на величину, постоянную для каждой  $(hkl)$  стоп-зоны) интенсивностей полос, соответствующих  $(hkl)$  стоп-зонам, от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ . При этом под интенсивностью полосы мы будем понимать интенсивность пика в спектре экстинкции  $\chi(\lambda) = -\ln T(\lambda)/d$ , где  $T(\lambda)$  – коэффициент пропускания, а  $d$  –

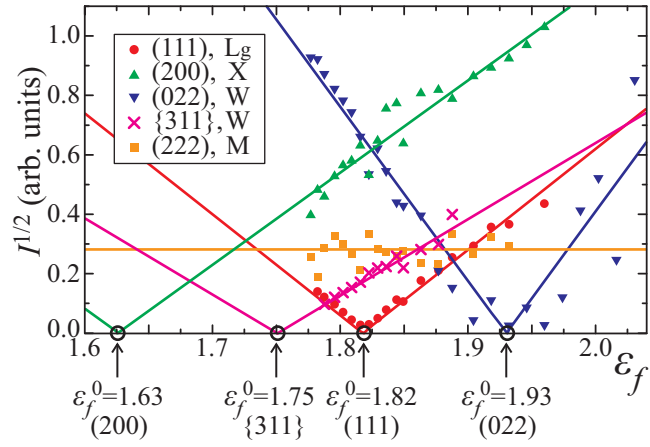


Рис. 4.3. Зависимость нормированной интенсивности ( $hkl$ ) стоп-зон от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ . Прямые линии – результат аппроксимации экспериментальных точек линейной зависимостью.

толщина образца. Выбор экстинкции связан с тем, что амплитуда волны с частотой, попадающей в стоп-зону, убывает экспоненциально с увеличением расстояния при распространении в ФК (см., например, [189]).

#### 4.1.1. Семейство $\{111\}$ , $\varepsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$

На рис. 4.4 представлены спектры пропускания образца опала ( $\bar{D} = 316$  нм) с двумя различными заполнителями, один из которых (смесь воды и пропиленгликоля,  $\varepsilon_f = 1.82$ ) соответствует пропаданию стоп-зон семейства  $\{111\}$ . Подробно зависимость нормированной интенсивности стоп-зоны (111) от диэлектрической проницаемости заполнителя представлена на рис. 4.2a для геометрии рассеяния  $\Gamma \rightarrow L_g$  и на рис. 4.2b для геометрии  $\Gamma \rightarrow M$ .

Как следует из эксперимента, диэлектрическая проницаемость заполнителя  $\varepsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$  определяет условие выключения стоп-зон как для ростовых плоскостей (111), так и для неростовых плоскостей ( $\bar{1}11$ ), причем не только в геометриях  $\Gamma \rightarrow L_g$  и  $\Gamma \rightarrow M$ , но и во всем интервале исследованных длин волн и волновых векторов, т.е. при сканированиях (А), (В) и (С), в  $s$ - и  $p$ - поляризациях падающего света. Более того, в случае пересече-

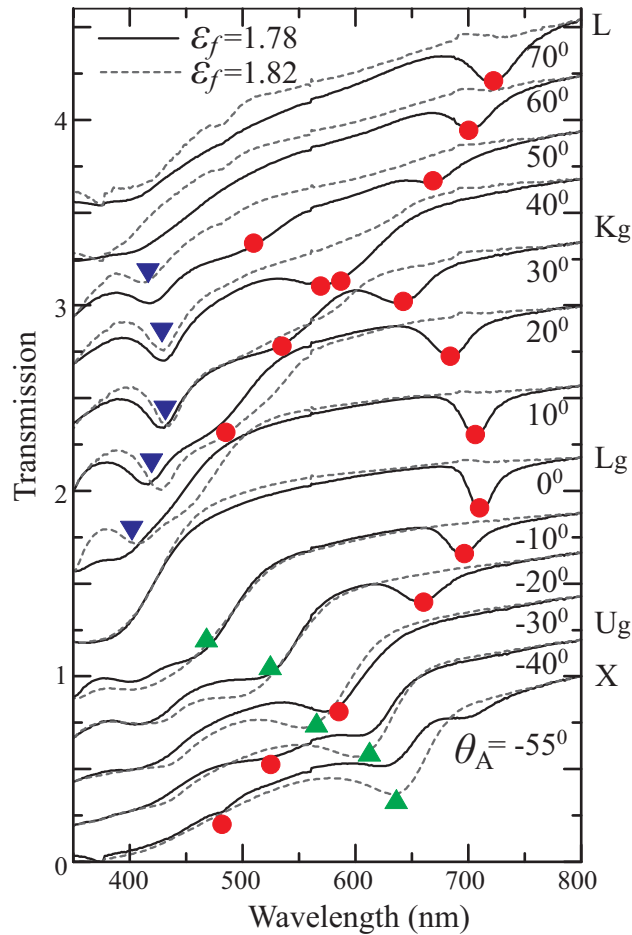


Рис. 4.4. Спектры пропускания опалов во всем диапазоне углов  $-55^\circ \leq \theta_A \leq 70^\circ$  сканирования (A) в  $s$ - поляризации при двух значениях диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f = 1.78, 1.82$ . Соответствие символов такое же, как и на рис. 3.8: красные кружки – семейство  $\{111\}$  стоп-зон, зеленые треугольники –  $(200)$ , перевернутые синие треугольники – полоса, определяемая стоп-зонами  $(020)$ ,  $(002)$  и  $(022)$ .

ния двух дисперсионных ветвей семейства  $\{111\}$  обе стоп-зоны выключаются при  $\varepsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$ . Пересечение ветвей, соответствующих стоп-зонам  $(111)$  и  $(\bar{1}11)$ , происходит в точке К и такое явление называется многоволновой дифракцией света.

На рис. 4.3 представлена зависимость нормированной интенсивности полосы  $(111)$  в спектрах пропускания опалов (геометрия  $\Gamma \rightarrow L_g$ ) от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ . Видно, что с достаточно высокой точностью во всем исследованном интервале экспериментальные данные опи-



сываются линейной зависимостью как при  $\varepsilon_f > 1.82$ , так и при  $\varepsilon_f < 1.82$ , причем угол наклона аппроксимирующей прямой сохраняется.

#### 4.1.2. Семейство $\{200\}$ , $\varepsilon_f^0(G_{200}) \approx 1.63$

Наиболее удобными для наблюдения фотонных зон семейства  $\{200\}$  являются следующие ориентации:  $\theta \approx -55^\circ$  при сканировании (А) и  $\theta_C \approx 45^\circ$  при сканировании (С). Эти ориентации ГЦК-решетки относительно падающего пучка соответствуют в обратном пространстве области волновых векторов вблизи направления  $\Gamma \rightarrow X$ , рис. 3.8, 4.4. Иммерсионная зависимость стоп-зоны (200) представлена на рис. 4.2d, из которого следует, что стоп-зона из семейства  $\{200\}$  наблюдается во всем исследуемом диапазоне  $\varepsilon_f$  от 1.78 (вода) до 2.05 (пропиленгликоль). На рис. 4.3 представлена зависимость нормированной интенсивности полосы (200) в спектрах пропускания опалов от величины  $\varepsilon_f$ . Учитывая линейную зависимость, установленную для полосы (111), и предполагая аналогичный линейный закон для полосы (200), определяем значение  $\varepsilon_f^0(G_{200}) \approx 1.63$ , при котором стоп-зона (200) должна выключатся путем варьирования диэлектрической проницаемости заполнителя.

#### 4.1.3. Семейство $\{220\}$ , $\varepsilon_f^0(G_{220}) = 1.93$

При сканировании по пути (А)  $L_g \rightarrow K_g \rightarrow L$  стоп-зона (022) совпадает по энергии со стоп-зонами (020) и (002) и поэтому не может быть исследована изолированно (рис. 3.8, 4.4). Чтобы разделить эти полосы в спектрах, следует обратиться к сканированию (В)  $L_g \rightarrow W_g \rightarrow K$  в плоскости  $\Gamma L_g K_g K$  или к сканированию (С)  $K_g \rightarrow W_g \rightarrow X$  в плоскости  $\Gamma K_g W_g X$ , перпендикулярной плоскости сканирования (А)  $\Gamma L_g K_g L$ . Для путей (В) и (С) вырождение снимается – семейства  $\{200\}$  и  $\{220\}$  расщепляются, причем в точке X соответствующие им длины волн существенно разнятся:  $\sim 619$  нм для (020) и

$\sim 370$  нм для (022). Отметим также, что в случае сканирования (С) полоса (022) более контрастно наблюдается в  $p$ -поляризации.

Иммерсионная зависимость полосы (022) в спектрах пропускания представлена на рис. 4.2с для геометрии рассеяния  $\Gamma \rightarrow K$  в  $p$ -поляризации, а результаты обработки спектров – на рис. 4.3. Как и в случае стоп-зон семейства {111}, стоп-зона (022) выключается в экспериментально исследованном интервале диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f^0(G_{220}) = 1.93$ .

Кроме геометрии  $\Gamma \rightarrow K$ , стоп-зоны семейства {220} наблюдаются также в геометрии  $\Gamma \rightarrow W$ , рис. 3.8. Соответствующая иммерсионная зависимость спектров пропускания представлена на рис. 4.2е, а ее обработка – на рис. 4.2f и рис. 4.3. Из рисунков хорошо видно, что стоп-зоны семейства выключаются при  $\varepsilon_f^0(G_{220}) = 1.93$  независимо от ориентации решетки опала относительно падающего светового пучка.

#### 4.1.4. Семейство {311}, $\varepsilon_f^0(G_{311}) \approx 1.75$

Анализ зонной структуры, представленной на рис. 3.8, показывает, что наиболее удобной геометрией рассеяния для наблюдения стоп-зон семейства {311} является геометрия  $\Gamma \rightarrow W$  ( $\theta_B \approx 40^\circ$ ). В точке  $W$  пересекаются дисперсионные ветви двух фотонных зон (311) и (131) на длине волны 356 нм согласно расчету по формуле (3.1). Важно отметить, что в области точки  $W$  ветви {311} не пересекаются с дисперсионными ветвями других семейств { $hkl$ } рис. 3.8, поэтому экспериментально наблюдаемая линия  $\sim 358$  нм (рис. 4.2е) может быть однозначно связана со стоп-зонами {311}.

Опираясь на исходные спектры (рис. 4.2е) трудно установить характер иммерсионной зависимости полосы {311}. Однако обработка спектров (рис. 4.2f) позволяет выявить ее поведение. Из рис. 4.2f и 4.3 видно, что полоса {311} существует во всем диапазоне  $1.78 \leq \varepsilon_f \leq 2.05$ . Предполагая линейную за-

висимость, аналогичную экспериментально установленной для полос (111) и (022), определяем значение  $\varepsilon_f^0(G_{311}) \approx 1.75$ , при котором стоп-зоны семейства {311} должны выключаться.

#### 4.1.5. Семейство {222}: резонансные невыключаемые стоп-зоны

Полосы (222), обусловленные вторым порядком дифракции на ростовых плоскостях (111), могут наблюдаться при сканированиях (А) и (В) на длинах волн  $\lambda_{222}(\theta)$ , вдвое меньших  $\lambda_{111}(\theta)$  (рис. 3.8). Однако в наиболее удобной геометрии рассеяния  $\Gamma \rightarrow L_g$  дисперсионная ветвь (222) накладывается на несколько других дисперсионных ветвей {hkl} и, следовательно, не может быть однозначно выделена в спектрах пропускания. Поэтому для ее изучения была выбрана геометрия рассеяния  $\Gamma \rightarrow$ , в которой полоса (222) может быть исследована независимо от других полос (рис. 4.2b).

Результаты обработки спектров представлены на рис. 4.3, из которого видно, что в исследованном диапазоне  $1.78 \leq \varepsilon_f \leq 2.05$  нормированная интенсивность полосы (222) практически не зависит от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ , что позволяет отнести семейство {222} к классу резонансных «невыключаемых» стоп-зон (см. далее разд. 4.2.5). Резонансный характер стоп-зон {222} связан с тем, что модуль вектора обратной решетки этих плоскостей  $G_{222} = 2 G_{111} = 15.39$  находится в области второго резонанса  $G_{res_2}$  зависимости  $\varepsilon_f^0(G)$  для опалоподобных ФК. Хотя стоп-зоны {222} обусловлены вторым порядком дифракции света на ростовых плоскостях {111}, тем не менее, семейства {111} и {222} демонстрируют совершенно разные иммерсионные зависимости. В то время как стоп-зоны {111} выключаются заполнителем с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$ , стоп-зоны {222} не выключаются в исследованном интервале  $\varepsilon_f$  и являются резонансными, либо близкими к резонансным. Для выключения резонансных стоп-зон

необходимы материалы с очень большими, или очень малыми (отрицательными) значениями диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_f^0(G_{222})$ .

Отметим, что в результате исследований, изложенных в Главе 3, в спектрах пропускания опалов удалось обнаружить стоп-зоны, принадлежащие семействам  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$ ,  $\{311\}$ ,  $\{222\}$ ,  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  и  $\{333\}$ . В данной Главе были описаны иммерсионные зависимости стоп-зон семейств  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$ ,  $\{311\}$  и  $\{222\}$ , в то время как семейства  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  и  $\{333\}$  не обсуждались. Это связано с тем, что соответствующие полосы имеют в спектрах исследованных нами образцов малую интенсивность и могут уверенно наблюдаться лишь при оптимальных параметрах эксперимента. Поэтому нам не удалось получить для них надежные иммерсионные зависимости. Однако этот факт не является существенным, так как результаты, полученные при изучении нерезонансных семейств  $\{111\}$ ,  $\{200\}$ ,  $\{220\}$ ,  $\{311\}$  и резонансного семейства  $\{222\}$  позволили получить цельную картину иммерсионного поведения  $(hkl)$  стоп-зон в опалах.

## 4.2. Теоретическое описание эффектов выключения стоп-зон в многокомпонентных фотонных кристаллах

Существование энергетических стоп-зон, в которых распространение электромагнитных возбуждений по структуре запрещено, является определяющим свойством ФК. Необходимое условие возникновения стоп-зон состоит в наличии у структуры периодически модулированной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\mathbf{r})$ , т.е. в наличии диэлектрического контраста  $\Delta\varepsilon$ . В одномерной двухкомпонентной структуре ширина стоп-зоны  $\Delta\omega$  связана с контрастом по формуле  $\Delta\omega = (2/\pi)\omega\sqrt{\Delta\varepsilon/\varepsilon}$  [1, 172] и, соответственно, условие исчез-

новения стоп-зон выполняется, когда диэлектрические проницаемости обоих компонент совпадают,  $\Delta\varepsilon = 0$ . Если пренебречь возможным различием в дисперсионных зависимостях  $\varepsilon(\lambda)$  у материалов, образующих ФК, то это условие не зависит ни от энергии, ни от волнового вектора  $\mathbf{k}$ , ни от систем плоскостей  $(hkl)$ , определяющих стоп-зону. Однако в случае многокомпонентных ФК условия возникновения/исчезновения стоп-зон (т.е. условия включения/выключения стоп-зон) становятся более сложными.

Рассмотрим 3D ФК, имеющий ГЦК-структуру, состоящую из идентичных непересекающихся частиц с произвольным сферически симметричным профилем диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_s(r)$ . Будем считать, что в межсферном пространстве содержится однородный наполнитель с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_f$ . Если сферические частицы образуют плотную упаковку, т.е. точно касаются друг друга, их радиус, нормированный на расстояние между центрами сфер  $a_{00}$ , составляет  $r_s = 0.5$ . При  $r_s < 0.5$  можно рассматривать структуру, состоящую из несоприкасающихся сфер, зафиксированных в узлах ГЦК-решетки благодаря наполнителю [57, 204]. Величина, обратная диэлектрической проницаемости ячейки Вигнера-Зейтца такого ФК, определяется формулой

$$\frac{1}{\varepsilon(r)} = \frac{1}{\varepsilon_f} + \left( \frac{1}{\varepsilon_s(r)} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) \Theta(r_s - r), \quad (4.1)$$

где  $\Theta(x)$  – функция Хевисайда:  $\Theta(x) = 1$  при  $x \geq 0$  и  $\Theta(x) = 0$  при  $x < 0$ .

Будем рассматривать этот характерный случай, поскольку структурой, близкой к идеальной ГЦК, обладают многие классы ФК, такие как опалы, опалоподобные полимерные структуры, инвертированные опалы. Изложенные идеи легко обобщаются на случай ФК с другим законом распределения диэлектрической проницаемости по примитивной ячейке. Кроме того, на примере опалоподобной структуры можно исследовать общие свойства многокомпонентных ФК, такие как резонансное поведение стоп-зон, возможность вы-

ключения одних и невозможность выключения других  $\{hkl\}$  стоп-зон. Эти фотонные свойства мы подробно проанализируем, развивая аналитический подход, предложенный в работе [30].

#### 4.2.1. Общий подход для многокомпонентного фотонного кристалла

Чтобы исследовать фотонные свойства многокомпонентных ФК, рассмотрим форм-фактор рассеяния  $S(\mathbf{G}_{hkl})$  [см. Приложение Б, формулу (Б.33)]:

$$S(\mathbf{G}_{hkl}) = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} d\mathbf{r} \frac{1}{\varepsilon(r)} \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}). \quad (4.2)$$

Форм-фактор определяет интенсивность Брэгговской дифракции на системе плоскостей  $(hkl)$  как функцию вектора обратной решетки  $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ , который однозначно задает направление и систему плоскостей  $(hkl)$ ,  $\{\mathbf{b}_i; i = 1, 2, 3\}$  – базисные вектора обратной решетки,  $V_0$  – объем примитивной ячейки ФК.

Далее будем понимать под отсутствием дифракции на системе плоскостей  $(hkl)$  случай обращения в нуль форм-фактора рассеяния  $S(\mathbf{G}_{hkl}) = 0$ , когда свет с брэгговской длиной волны  $\lambda_{hkl}$  проходит сквозь ФК без рассеяния на этих плоскостях. Если обратная диэлектрическая проницаемость  $\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}$  описывается уравнением (4.1), то условие  $S(\mathbf{G}_{hkl}) = 0$  при  $\mathbf{G} = 0$  имеет вид:

$$S(0) = \frac{1-f}{\varepsilon_f} + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} d\mathbf{r} \frac{1}{\varepsilon_s(r)} \Theta(r_s - r) = 0, \quad (4.3)$$

где  $f = \frac{4\pi r_s^3}{3V_0}$  – доля заполнения объема сферами,  $V_0 = \frac{a_{00}^3}{\sqrt{2}}$ ,  $a_{00}$  – расстояние между центрами сфер в ГЦК- решетке. Отметим, что  $f = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \approx 0.74$  в случае точечного касания плотноупакованных сфер в ГЦК – решетке, когда  $a_{00} = 2r_s$ .

При  $|\mathbf{G}_{hkl}| \neq 0$  условие  $S(\mathbf{G}_{hkl}) = 0$ , которое мы будем подробно анализировать далее, принимает вид:

$$S(\mathbf{G}_{hkl}) = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} d\mathbf{r} \left( \frac{1}{\varepsilon_s(r)} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) \Theta(r_s - r) \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}) = 0. \quad (4.4)$$

Интегрируя по угловым переменным и переходя к системе сферических координат, можно найти значение диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$ , при которой форм-фактор рассеяния обращается в нуль:

$$\varepsilon_f^0(G_{hkl}) = \frac{\frac{1}{G_{hkl}^2} [\sin(G_{hkl}r_s) - G_{hkl}r_s \cos(G_{hkl}r_s)]}{\int_0^{r_s} \frac{r}{\varepsilon_s(r)} \sin(G_{hkl}r) dr} = \frac{\frac{1}{G_{hkl}^2} R(G_{hkl}, r_s)}{\int_0^{r_s} \frac{r}{\varepsilon_s(r)} \sin(G_{hkl}r) dr}, \quad (4.5)$$

где  $R(G, r) = \sin(Gr) - Gr \cos(Gr)$  - функция Рэлея-Ганса.

Для изучения величины  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$  как функции вектора обратной решетки  $\mathbf{G}_{hkl}$  мы не будем ограничиваться дискретными значениями, которые принимает аргумент  $\mathbf{G}_{hkl}$  в ГЦК-решетке, а формально рассмотрим  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$  как функцию непрерывного аргумента  $G = G_{hkl} = |\mathbf{G}_{hkl}|$ . Приведем значения  $G_{hkl} = \pi \sqrt{2(h^2 + k^2 + l^2)} a_{00}^{-1}$  для семейств плоскостей  $\{hkl\}$ , экспериментально исследованных в данной работе:  $G_{111} = 7.695$ ,  $G_{200} = 8.886$ ,  $G_{220} = 12.566$ ,  $G_{311} = 14.735$ ,  $G_{222} = 2G_{111} = 15.390$  (здесь и далее величины  $G_{hkl}$  указаны в единицах обратного расстояния между центрами сфер  $a_{00}^{-1}$ ).

В заключение этого подраздела отметим, что выражения, использованные в этом разделе, выведены в двухволновом приближении (см. Приложение Б), т.е. для случая изолированных (одиночных) стоп-зон. Поэтому случай многоволновой брэгговской дифракции, когда брэгговские условия выполняются для несколько стоп-зон одновременно, следует рассматривать отдельно.

#### 4.2.2. Двухкомпонентный фотонный кристалл

В начале рассмотрим простейший случай двухкомпонентного ФК, ГЦК-структура которого состоит из однородных сфер  $\varepsilon_s(r) = \varepsilon_s = const$ , окружен-

ных однородным заполнителем  $\varepsilon_f$ . В этом случае величина обратной диэлектрической проницаемости равна:

$$\frac{1}{\varepsilon(r)} = \frac{1}{\varepsilon_f} + \left( \frac{1}{\varepsilon_s} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) \Theta(r_s - r). \quad (4.6)$$

При  $|\mathbf{G}_{hkl}| \neq 0$  выражение для форм-фактора рассеяния (4.4) принимает вид:

$$S(G) = \frac{4\pi\sqrt{2}}{(Ga_{oo})^3} \left( \frac{1}{\varepsilon_s} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) R(G, r_s). \quad (4.7)$$

Из соотношения (4.7) следует, что для двухкомпонентного ФК условие отсутствия дифракции  $S(G) = 0$  реализуется в двух случаях. Стоит отметить, что в литературе обычно рассматривается только один тривиальный случай, когда условие  $S(G) = 0$  определяется обращением в нуль первой скобки выражения (4.7), т.е. при равенстве  $\varepsilon_f^0 = \varepsilon_s$  (такое же соотношение можно получить проинтегрировав знаменатель в (4.5) с условием  $\varepsilon_s(r) = \varepsilon_s = const$ ). Очевидно, что выполнение равенства  $\varepsilon_f^0 = \varepsilon_s$ , соответствует оптически однородной среде и является условием *одновременного исчезновения всех (hkl) стоп-зон*.

Кроме этого случая дифракция может пропадать при обращении в нуль функции Рэля-Ганса  $R(G, r_s)$ . Функция  $S(G)$  для двухкомпонентного ФК приведена на рис. 4.5. На этом рисунке также отмечены значения модуля вектора обратной решетки  $G_{hkl}$  для систем плоскостей ГЦК решетки с минимальными индексами Миллера. Нули функции Рэля-Ганса определяются соотношением

$$\tan Gr_s = Gr_s. \quad (4.8)$$

Если какое-либо решение уравнения (4.8)  $G_i$  совпадет с одним из параметров  $G_{hkl}$ , то для соответствующего семейства плоскостей  $\{hkl\}$  форм-фактор рассеяния (4.7) обратится в нуль. В случае ГЦК-решетки, состоящей из недеформированных плотноупакованных сфер с точечным касанием ( $r_s = 0.5$ ), первый корень  $G_1$  уравнения (4.8) близок к величине  $G_{200} = 8.886$  (рис. 4.5).



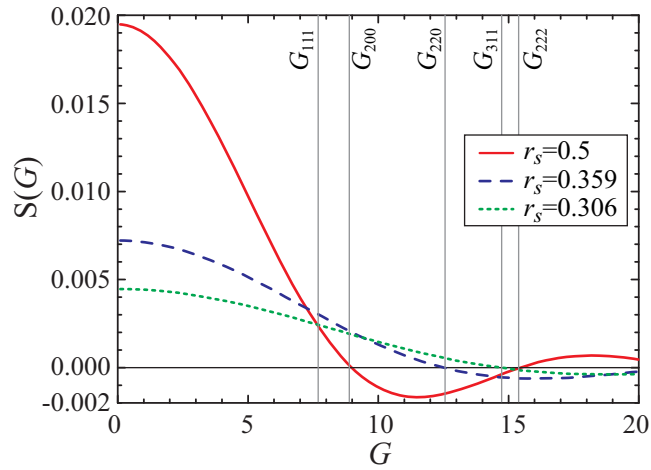


Рис. 4.5. Форм-фактор рассеяния  $S(G)$  для двухкомпонентной ГЦК решетки с радиусами сфер  $r_s = 0.5$  (точечное касание сфер),  $r_s = 0.359$  (условие выключение дифракции для плоскостей  $\{220\}$ ),  $r_s = 0.306$  (условие выключение дифракции для плоскостей  $\{311\}$ ). Расчет приведен по формуле (4.7) для значений  $\varepsilon_s = 1.9$  и  $\varepsilon_f = 2.0$ . Наименьшие модули векторов обратной решетки ГЦК структуры  $G_{hkl}$  отмечены вертикальными линиями.

Однако, если рассмотреть структуру с несоприкасающимися сферами, зафиксированными в узлах ГЦК решетки с помощью заполнителя как, например, в [57, 204], то при уменьшении радиуса сферы до значения  $r_s = 0.359$  получаем  $G_1 = G_{220}$ , т.е. выполнение условия отсутствия дифракции на плоскостях  $\{220\}$ . При дальнейшем уменьшении радиуса сферы мы последовательно будем получать выполнение условия  $G_1 = G_{hkl}$  для более высокоиндексных плоскостей (рис. 4.5). Из этого анализа следует вывод о том, что в двухкомпонентной структуре невозможно выключить дифракцию на плоскостях  $\{111\}$ . Кроме того, выполнение условия  $G_i = G_{220}$  определяется единственным параметром  $r_s$  и не зависит от величин  $\varepsilon_s$  и  $\varepsilon_f$ . Таким образом, варьируя размеры сфер мы можем создавать двухкомпонентный ФК с заранее заданной выключенной стоп-зоной  $(hkl)$  (исключение составляет стоп-зоны семейства  $\{111\}$ ), однако с помощью модуляции диэлектрической проницаемости невозможно селективно манипулировать определенными стоп-зонами  $(hkl)$ , т.е. селективно включать/выключать их.

### 4.2.3. Трехкомпонентный фотонный кристалл

Рассмотрим случай трехкомпонентного ФК, который можно реализовать на практике. Пусть ГЦК структура образована сферами, состоящими из однородного ядра радиуса  $r_n$  с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_n = \text{const}$ , окруженного однородной оболочкой  $\varepsilon_c = \text{const}$  с внешним радиусом  $r_c$ . Межсферное пространство заполнено однородным веществом  $\varepsilon_f = \text{const}$ . Величина обратной диэлектрической проницаемости ячейки Вигнера-Зейтца такого трехкомпонентного ФК определяется по формуле:

$$\frac{1}{\varepsilon(r)} = \frac{1}{\varepsilon_f} + \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c} \right) \Theta(r_n - r) + \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) \Theta(r_c - r). \quad (4.9)$$

Подставляя соотношение (4.9) в формулу (4.2) можно найти следующее выражение для условия отсутствия дифракции (выключения стоп-зон) при  $G \neq 0$ :

$$S(G) = \frac{4\pi\sqrt{2}}{(Ga_{oo})^3} \left[ \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c} \right) R(G, r_n) + \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) R(G, r_c) \right] = \\ = S_1(G) + S_2(G) = 0. \quad (4.10)$$

Сравнивая выражение (4.7) для форм-фактора рассеяния ФК, состоящего из однородных сфер, с выражением (4.10), можно сделать вывод, что форм-фактора рассеяния трехкомпонентного ФК состоит из двух слагаемых:  $S_1(G)$  – вклад в рассеяние однородных сфер с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_n$  радиуса  $r_n$ , которые окружены однородной средой  $\varepsilon_c$  и  $S_2(G)$  – вклад в рассеяние однородных сфер с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_c$  радиуса  $r_c$ , которые окружены однородным заполнителем  $\varepsilon_f$ . Оба этих члена являются знакопеременными и зависят как от соотношения диэлектрических проницаемостей, так и от знака соответствующей функции Рэля-Ганса  $R(G, r_s)$ .

Рассмотрим в качестве примера два случая – ГЦК-структуры прямого и инвертированного опала, причем у прямого опала вещество с варьируемой диэлектрической проницаемостью заполняет пространство между сфер

и искомой величиной является функция  $\varepsilon_f^0(G)$ , а в случае инвертированного опала вещество с варьируемой диэлектрической проницаемостью заполняет пространство самих сфер, и искомой величиной является функция  $\varepsilon_n^0(G)$ . Из формулы (4.10) получаем выражения для условия выключения стоп-зон в трехкомпонентном ФК:

$$\frac{1}{\varepsilon_f^0(G)} = \frac{1}{\varepsilon_c} + \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c} \right) \frac{R(G, r_n)}{R(G, r_c)}, \quad (4.11a)$$

$$\frac{1}{\varepsilon_n^0(G)} = \frac{1}{\varepsilon_c} + \left( \frac{1}{\varepsilon_f} - \frac{1}{\varepsilon_c} \right) \frac{R(G, r_c)}{R(G, r_n)}. \quad (4.11b)$$

Из выражений (4.11a,4.11b) следует, что  $\varepsilon_f^0$  и  $\varepsilon_n^0$  зависят от  $G$ , а также от всех параметров структуры, т.е. от  $\varepsilon_n, \varepsilon_c, r_n, r_c$  для прямых опалов и от  $\varepsilon_f, \varepsilon_c, r_n, r_c$  для инвертированных опалов. Это значит, что для разных стоп-зон ( $hkl$ ) мы получаем разные условия их выключения, т.е. в трехкомпонентных ФК появляется возможность селективного управления (включения/выключения) определенными стоп-зонами ( $hkl$ ) посредством модуляции диэлектрических или структурных параметров одной из компонент.

Рассмотрим случай прямой плотноупакованной ГЦК структуры типа опала ( $r_c = 0.5$ , точечное касание сфер) с ядром ( $r_n = 0.4$ ), состоящим из однородного аморфного кварца  $a\text{-SiO}_2$   $\varepsilon_n = 1.9$ , и с различными оболочками: диэлектрическая проницаемость меньше ( $\varepsilon_c = 1.0$ ), равна ( $\varepsilon_c = 1.9$ ) и больше ( $\varepsilon_c = 5, 11$ ) диэлектрической проницаемости ядра, Рис. 4.6а. Из рисунка видно, что в случае  $\varepsilon_n = \varepsilon_c$  величина  $\varepsilon_f^0$ , соответствующая условию выключения стоп-зон, не зависит от  $G$  и структура становится оптически прозрачной при равенстве между диэлектрическими проницаемостями заполнителя, ядра и оболочки, т.е.  $\varepsilon_f^0 = \varepsilon_n = \varepsilon_c = 1.9$  (голубая штрихпунктирная линия на рис. 4.6а). При  $\varepsilon_n \neq \varepsilon_c$  зависимость  $\varepsilon_f^0(G)$  приобретает сложный резонансный характер со следующими основными свойствами.

- (i) Зависимости  $\varepsilon_f^0(G)$  имеют квазипериодический характер с резонансны-

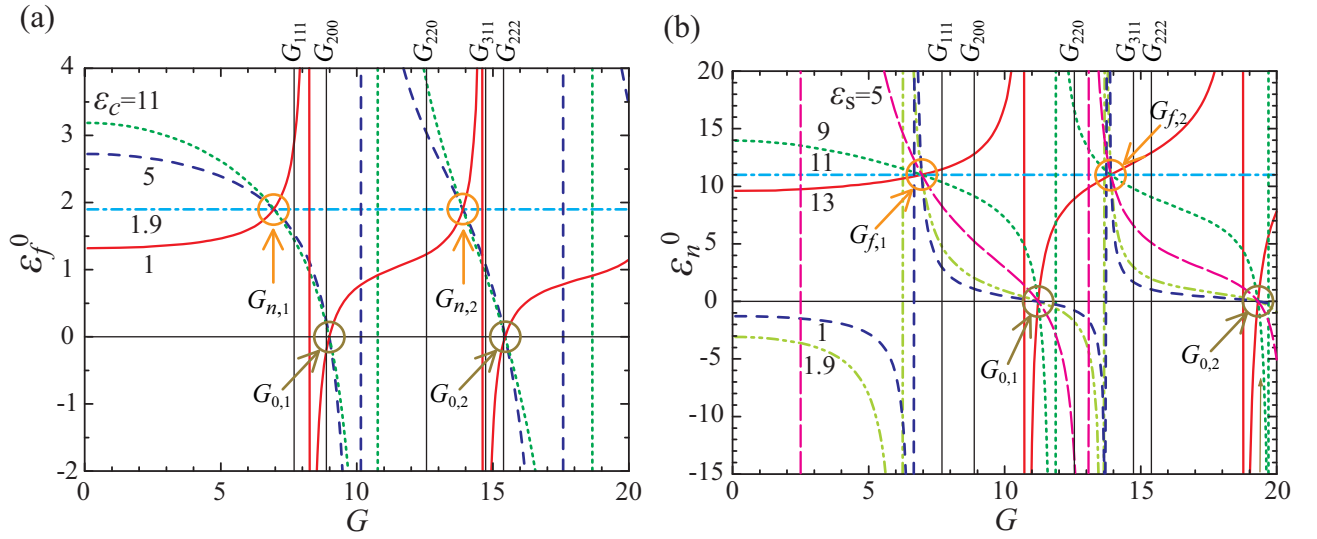


Рис. 4.6. (а) Диэлектрическая проницаемость заполнителя  $\varepsilon_f^0(G)$ , соответствующая условию выключения стоп-зон для трехкомпонентного ФК с ГЦК структурой. Параметры: ядро сферы ( $r_n = 0.4$ ,  $\varepsilon_n = 1.9$ ), оболочка сферы ( $r_c = 0.5$ ,  $\varepsilon_c = 1.0, 1.9, 5, 11$ ). (б) Диэлектрическая проницаемость ядра  $\varepsilon_n^0(G)$  ( $r_n = 0.4$ ), соответствующая условию выключения стоп-зон для трехкомпонентного ФК с инвертированной ГЦК-структурой. Вещество с  $\varepsilon_f = 11$  (например, Si) заполняет пространство вне сферы радиуса  $r_c = 0.5$ , и различные оболочки ( $\varepsilon_c = 1.0, 1.9, 5, 9, 11, 13$ ) заполняют пространство  $r_n < r < r_c$ . Наименьшие модули векторов обратной решетки ГЦК структуры  $G_{hkl}$  отмечены вертикальными линиями.

ми особенностями при  $G = G_{res}$ . Резонансные значения определяются условием:

$$\left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c} \right) \mathbf{R}(G, r_n) + \frac{1}{\varepsilon_c} \mathbf{R}(G, r_c) = 0, \quad (4.12)$$

которое получается из выражения (4.11а) при  $\varepsilon_f \rightarrow \pm\infty$ . Из уравнения (4.12) следует, что резонансные значения  $G_{res}$  определяются как диэлектрическими параметрами  $\varepsilon_n$  и  $\varepsilon_c$ , так и структурными параметрами  $r_n$  и  $r_c$ . В частности, в ГЦК-структуре, состоящей из сфер  $a\text{-SiO}_2$  ( $r_n = 0.4$ ,  $\varepsilon_n = 1.9$ ), покрытых слоем кремния ( $r_c = 0.5$ ,  $\varepsilon_c = 11$ ), первые два резонанса  $\varepsilon_f^0(G)$  соответствуют значениям  $G_{res} \approx 10.8$  и  $18.7$  (вертикальные зеленые точечные линии на рис. 4.6а). Брэгговская дифракция на системе резонансных  $(hkl)$  плоскостей (отвечающих условию  $G = G_{res}$ ) не может быть выключена с помощью изме-

нения диэлектрической проницаемости заполнителя.

Важно подчеркнуть, что резонансное условие  $G_{hkl} = G_{res}$  всегда можно реализовать, выбрав соответствующим образом параметры многокомпонентной структуры. Так, в случае трехкомпонентной ГЦК-структуры условие резонанса  $G = G_{res}$  (4.12) можно рассматривать как функцию  $G_{res}$  от переменных параметров  $\varepsilon_c, \varepsilon_n, r_n$ . Выбрав в качестве единственного переменного параметра  $\varepsilon_c$ , из уравнения (4.12) получаем те значения проницаемости оболочки, при которых стоп-зона ( $hkl$ ) становится резонансной ( $G_{hkl} = G_{res}$ ):

$$\varepsilon_c(res_{hkl}) = \varepsilon_n \left[ 1 - \frac{R(G_{hkl}, r_c)}{R(G_{hkl}, r_n)} \right]. \quad (4.13)$$

Например, для того, чтобы семейство стоп-зон  $\{220\}$  ( $G_{220} = 12.566$ ) было резонансным в ГЦК-структуре плотноупакованных сфер с оболочкой (параметры  $\varepsilon_n = 1.9, r_n = 0.4, r_c = 0.5$ ), проницаемость оболочки должна иметь значение  $\varepsilon_c(res_{220}) = -2.87$  (рис. 4.7). Чтобы рассчитать структуру, образованную заранее выбранными материалами, варьируемым параметром следует рассматривать радиус ядра  $r_n$ . Например, для ГЦК-структуры, состоящей из сфер  $a\text{-SiO}_2$  ( $\varepsilon_n = 1.9$ ), покрытых кремневой оболочкой ( $\varepsilon_c = 11$ ), в результате численного решения уравнения (4.13) относительно  $r_n$  получаем следующее значение, определяющее резонанс для стоп-зон  $\{220\}$ :  $r_n(res_{220}) = 0.33$  (рис. 4.7).

(ii) Важной особенностью функции  $\varepsilon_f^0(G)$  являются квазипериодически повторяющиеся точки  $G = G_0$ , в которых  $\varepsilon_f^0(G_0) \equiv 0$  независимо от величин  $\varepsilon_c$  и  $\varepsilon_n$  (за исключением случая  $\varepsilon_f^0 = \varepsilon_c = \varepsilon_n$ , голубая штрихпунктирная линия на рис. 4.6а). Эта особенность возникает при обращении в нуль функции  $R(G, r_c)$  во втором члене  $S_2(G)$  уравнения (4.10). При этом условие отсутствия дифракции (выключения стоп-зон)  $S_1(G) + S_2(G) = 0$  в случае ненулевого первого члена  $S_1(G) \neq 0$  может быть реализовано при  $\varepsilon_f^0 \rightarrow 0$ , когда во втором члене возникает неопределенность, имеющая конечную величину,

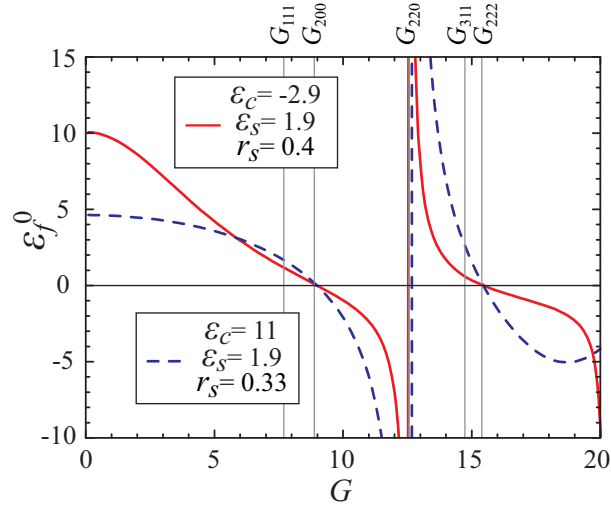


Рис. 4.7. Диэлектрическая проницаемость заполнителя  $\varepsilon_f^0(G)$ , соответствующая условию отсутствия дифракции (выключения стоп-зон) для трехкомпонентного ФК для ГЦК структуры, состоящей из плотноупакованных сфер с ядром  $r_n = 0.33$ ,  $\varepsilon_n = 1.9$  и оболочкой  $r_c = 0.5$ ,  $\varepsilon_c = 11$  (синий пунктир) и для сфер с ядром  $r_n = 0.4$ ,  $\varepsilon_n = 1.9$  и оболочкой  $r_c = 0.5$ ,  $\varepsilon_c = -2.87$  (красная сплошная). Наименьшие модули векторов обратной решетки ГЦК структуры  $G_{hkl}$  отмечены вертикальными линиями. Первый резонанс  $G_{res}$  для обеих зависимостей  $\varepsilon_f^0(G)$  совпадает с величиной  $G_{220} = 12.566$ .

равную  $-S_1(G)$ . Значения  $G_0$  находятся из уравнения

$$\tan Gr_c = Gr_c \quad (4.14)$$

и не зависят от параметров структуры  $\varepsilon_c$ ,  $\varepsilon_n$  и  $r_n$ . При  $r_c = 0.5$  два наименьших значения  $G_0$  составляют  $\approx 9.0$  и  $15.5$  (рис. 4.6а).

(iii) Еще одной особенностью функции  $\varepsilon_f^0(G)$  является наличие квазипериодически повторяющихся особых точек  $G = G_n$ , в которых  $\varepsilon_f^0$  не зависит от величины  $\varepsilon_c$ . Значения  $G_n$  находятся из уравнения

$$R(G, r_n) = R(G, r_c). \quad (4.15)$$

При  $r_n = 0.4$  и  $r_c = 0.5$  два наименьших значения  $G_n$  составляют  $\approx 7.0$  и  $13.9$  (рис. 4.6а). В этих особых точках  $G_n$  происходит изменение условий выключения стоп-зон. Рассмотрим, например, область наименьших значений

$G$  (до первого резонанса  $G_{res}$ ). В области  $G < G_n$  при  $\varepsilon_n < \varepsilon_c$  выполняется соотношение  $\varepsilon_n < \varepsilon_f^0 < \varepsilon_c$ , а при  $\varepsilon_n > \varepsilon_c$  выполняется противоположное соотношение  $\varepsilon_n > \varepsilon_f^0 > \varepsilon_c$ . Таким образом, при  $G < G_n$  для компенсации рассеяния и реализации условия выключения стоп-зон диэлектрическая проницаемость заполнителя должна отличаться от диэлектрической проницаемости ядра также, как отличается диэлектрическая проницаемость оболочки, т.е. обе среды должны быть либо оптически более плотными, либо оптически менее плотными, чем ядро.

С увеличением  $G$  после прохождения особой точки  $G_n$  в диапазоне  $G_n < G < G_{res}$  выполняется уже противоположное условие. Оптически более плотная оболочка  $\varepsilon_n < \varepsilon_c$  компенсируется менее плотным заполнителем  $\varepsilon_n > \varepsilon_f^0$  и, наоборот, оптически менее плотная оболочка  $\varepsilon_n > \varepsilon_c$  компенсируется более плотным заполнителем  $\varepsilon_n < \varepsilon_f^0$ . Например, при  $\varepsilon_n = 1.9$  и  $G = G_{111} \approx 7.7$  для  $\varepsilon_c = 1.0$  условие выключения стоп-зон достигается при ( ), в то время как для условие выключения стоп-зон достигается при  $\varepsilon_f^0 \approx 2.9$  ( $\varepsilon_f^0 > \varepsilon_n > \varepsilon_c$ ) (рис. 4.6а). Однако эти условия снова «инвертируются» при дальнейшем увеличении  $G$  после прохождения первой резонансной точки ( $G_{res} \approx 8.3$  для  $\varepsilon_c = 1.0$  и при  $G_{res} \approx 10.8$  для  $\varepsilon_c = 11$ ) и так далее (рис. 4.6а). Такая закономерность определяется периодическим характером функций, определяющих условие выключения стоп-зон в уравнении (4.10).

Аналогично рассматривается инвертированная ГЦК-структура (Рис. 4.6б), у которой условие выключения стоп-зон обеспечивается варьированием диэлектрической проницаемости ядра и определяется зависимостью  $\varepsilon_n^0(G)$  по формуле (4.11b). Расчет  $\varepsilon_n^0(G)$  был проведен для однородных оболочек с диэлектрической проницаемостью меньшей ( $\varepsilon_c = 1, 1.9, 5, 9$ ), равной ( $\varepsilon_c = 11$ ) и большей ( $\varepsilon_c = 13, \text{GaAs}$ ) диэлектрической проницаемости основной решетки ( $\varepsilon_f = 11, \text{Si}$ ). Из анализа Рис. 4.6б следует, что зависимости  $\varepsilon_n^0(G)$  обладают теми же квазипериодическими резонансными свойствами, которые были

рассмотрены выше для зависимостей  $\varepsilon_f^0(G)$  у прямой ГЦК-структуры, причем и в том, и в другом случае каждый квазипериод содержит три особые точки,  $G_{res}$ ,  $G_0$  и  $G_f$  (в особых точках  $G_f$  величина  $\varepsilon_n^0(G)$  не зависит от  $\varepsilon_c$  и определяется параметром  $\varepsilon_f$ ).

#### 4.2.4. Многокомпонентный фотонный кристалл:

##### однородная сфера с несколькими однородными оболочками

Рассмотрим теперь случай рассеивателя, состоящего из однородного сферического ядра, окруженного  $k$  оболочками. Величина обратной диэлектрической проницаемости ячейки Вигнера-Зейтца такого многокомпонентного ФК определяется по формуле:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon(r)} = \frac{1}{\varepsilon_f} + \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c^1} \right) \Theta(r_n - r) + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^1} - \frac{1}{\varepsilon_c^2} \right) \Theta(r_c^1 - r_c^2) + \dots \\ \dots + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^{k-1}} - \frac{1}{\varepsilon_c^k} \right) \Theta(r_c^{k-1} - r_c^k) + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^k} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) \Theta(r_c^k - r), \end{aligned} \quad (4.16)$$

где  $\varepsilon_n$  и  $r_n$  – диэлектрическая проницаемость и радиус однородного ядра,  $\varepsilon_c^i$  и  $r_c^i$  – диэлектрическая проницаемость и внешний радиус  $i$ -й однородной оболочки.

Подставляя соотношение (4.16) в формулу (4.4) получаем (при  $G \neq 0$ ) условие отсутствия дифракции (выключения стоп-зон) в таком многокомпонентном ФК:

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c^1} \right) R(G, r_n) + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^1} - \frac{1}{\varepsilon_c^2} \right) R(G, r_c^1) + \dots \\ \dots + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^{k-1}} - \frac{1}{\varepsilon_c^k} \right) R(G, r_c^{k-1}) + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^k} - \frac{1}{\varepsilon_f} \right) R(G, r_c^k) = 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Из соотношения (4.17) определяем диэлектрическую проницаемость однородного заполнителя  $\varepsilon_f^0(G)$ , которая соответствует выключению стоп-зон в



рассматриваемом случае:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_f^0(G)} = \frac{1}{\varepsilon_c^k} + \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_c^1} \right) \frac{\mathbf{R}(G, r_n)}{\mathbf{R}(G, r_c^k)} + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^1} - \frac{1}{\varepsilon_c^2} \right) \frac{\mathbf{R}(G, r_c^1)}{\mathbf{R}(G, r_c^k)} + \dots \\ \dots + \left( \frac{1}{\varepsilon_c^{k-1}} - \frac{1}{\varepsilon_c^k} \right) \frac{\mathbf{R}(G, r_c^{k-1})}{\mathbf{R}(G, r_c^k)}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Если ядро окружает только одна оболочка ( $k = 1$ ), выражение (4.18) совпадает с (4.11a).

#### 4.2.5. Многокомпонентный фотонный кристалл: сферы с произвольным профилем диэлектрической проницаемости $\varepsilon_s(r)$

Рассмотрим случай многокомпонентного ФК, описав его как структуру с произвольным профилем диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_s(r)$ . Анализ условий выключения стоп-зон для ГЦК решетки, состоящей из недеформированных плотноупакованных сфер с произвольным профилем  $\varepsilon_s(r)$  был выполнен в работе [30], где приводятся результаты расчета зависимостей  $\varepsilon_f^0(G)$  на основании уравнения (4.5) для ряда различных профилей  $\varepsilon_s(r)$ . Основные выводы состоят в следующем.

(i) Зависимости  $\varepsilon_f^0(G)$  имеют квазипериодический характер с резонансными особенностями  $G = G_{res}$ . Резонансы функции  $\varepsilon_f^0(G)$  определяются обращением в нуль знаменателя уравнения (4.5), т.е. условием

$$\int_0^{r_s} \frac{r}{\varepsilon_s(r)} \sin(Gr) dr = 0. \quad (4.19)$$

Это условие справедливо для случая неоднородных сфер, т.к. при  $\varepsilon_s(r) = \varepsilon_s = \text{const}$  из уравнения (4.5) получаем тривиальное решение  $\varepsilon_f^0(G) = \varepsilon_s$ , т.е. прямую линию без резонансов, представленную среди других нетривиальных решений на Рис. 4.6a,b.

(ii) При резонансе условие выключения стоп-зон не может быть удовлетворено ни при каком профиле диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_s(r)$  и ни при каком значении диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ . Вдали от резонанса для  $G \neq G_{res}$  при любом физически реализуемом профиле диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_s(r)$ , можно подобрать однородную среду-заполнитель с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_f^0(G)$ , которая выключит стоп-зону  $(hkl)$ . Такой ФК становится прозрачным для света с брэгговской длиной волны (вычисленной для вакуума)  $\lambda_{hkl}$ . Следует отметить, что рассчитанная величина  $\varepsilon_f^0(G)$  может находиться за пределами реально существующих значений диэлектрических проницаемостей и в таком случае условие выключения для данной стоп-зоны  $(hkl)$  не достижимо на практике.

(iii) В многокомпонентных периодических структурах путем варьирования параметров (относительные размеры периодически повторяющихся компонент и их диэлектрическая проницаемость) всегда можно реализовать условия возникновения резонансного семейства стоп-зон  $\{hkl\}$ . Для соответствующих брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}$  такая среда никогда не будет прозрачной.

Таким образом, в многокомпонентных ФК неоднородность рассеивателя приводит к расщеплению  $\varepsilon_f^0$  в шкале  $G$ , что в общем случае позволяет осуществлять селективное управление разными  $(hkl)$  стоп-зонами.

### 4.3. Моделирование зависимости $\varepsilon_f^0(G)$ в синтетических опалах

При моделировании функции  $\varepsilon_s(r)$  следует исходить из данных ПЭМ и СЭМ (рис. 4.8), свидетельствующих о том, что поверхность сферических частиц  $a\text{-SiO}_2$  в исследованных опалах не содержит микропор и, следовательно, приповерхностный слой частиц должен иметь диэлектрическую проницаемость, близкую к величине  $\varepsilon_{a\text{-SiO}_2} = 2.13$  для объемного кварца (см. вставку

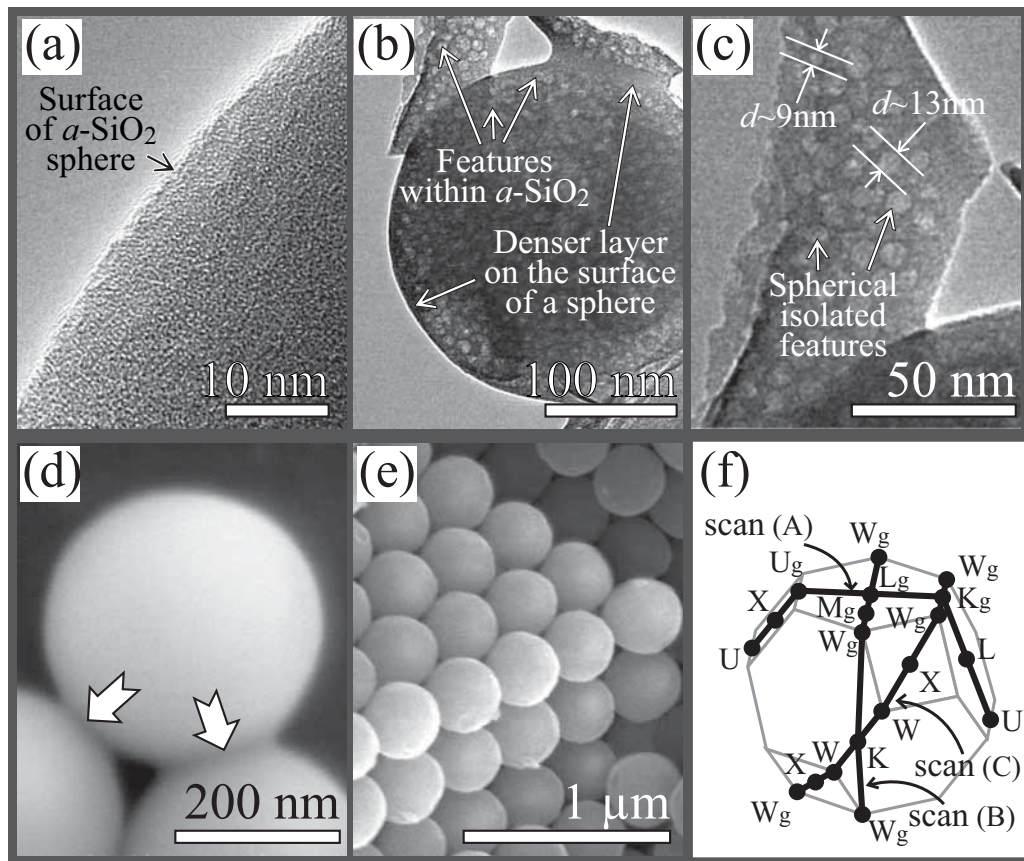


Рис. 4.8. ПЭМ (a)-(c) и СЭМ (d)-(e) изображения образца синтетического опала. Плотнo-упакованные в ГЦК решетку сферические частицы  $a\text{-SiO}_2$  обладают плотной оболочкой и рыхлым (пористым) ядром. Эффект спекания частиц  $a\text{-SiO}_2$  в синтетических опалах (d). Зона Бриллюэна ГЦК решетки (f).

на рис. 4.9) Далее, из данных ПЭМ и СЭМ также следует, что плотная оболочка имеет малую толщину по сравнению с радиусом сферы  $a\text{-SiO}_2$  и быстро переходит в область ядра, имеющего поры.

При моделировании профиля  $\varepsilon_s(r)$  мы остановились на кусочно-линейной функции, представленной на вставке рис. 4.9. Методами нелинейной аппроксимации была найдена функция  $\varepsilon_f^0(G)$ , хорошо описывающая набор экспериментальных данных (рис. 4.3). Два первых резонанса этой функции соответствуют значениям  $G_{res_1} = 9.07$  и  $G_{res_2} = 15.54$ . Отметим, что величина  $G_{res_1}$  близка к модулю вектора обратной решетки семейства плоскостей  $\{200\}$   $G_{200} = 8.886$ , а величина  $G_{res_2}$  близка к значению модуля вектора обратной

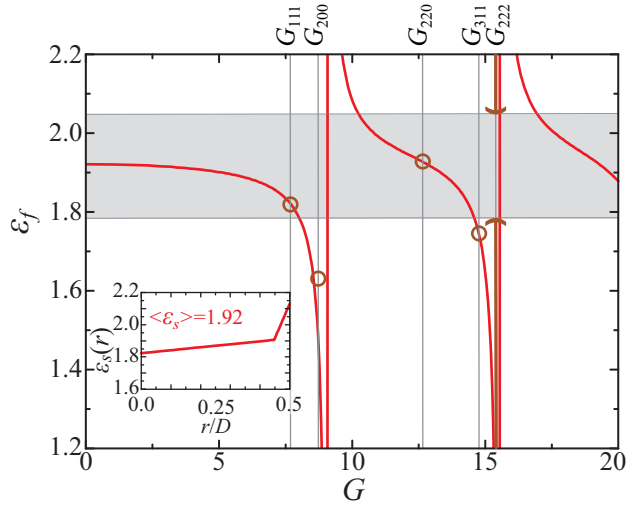


Рис. 4.9. Условия выключения стоп-зон для исследованного образца опала ( $\bar{D} = 316$  нм). Диэлектрическая проницаемость заполнителя  $\varepsilon_f^0(G)$ , соответствующая условию выключения стоп-зон для диэлектрического профиля  $\varepsilon_s(r)$ , моделирующего опаловые сферы  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Профиль  $\varepsilon_s(r)$  приведен на вставке. Наименьшие модули векторов обратной решетки ГЦК структуры отмечены вертикальными линиями. Кружки - экспериментально измеренные значения  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$ . Заштрихованная область -- экспериментально исследованный диапазон  $1.78 \leq \varepsilon_f \leq 2.05$ .

решетки для двух семейств  $\{311\}$  и  $\{222\}$  ( $G_{311} = 14.735$  и  $G_{222} = 15.39$ ), что и обуславливает невозможность выключения этих трех семейств в ограниченном интервале  $\varepsilon_f$ .

На основании модельной функции  $\varepsilon_s(r)$  можно определить среднюю диэлектрическую проницаемость сфер  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Усредняя по объему сферы значение  $\varepsilon_s(r)$ , получаем величину  $\bar{\varepsilon}_s = 1.92$ , которая достаточно хорошо согласуется со значением  $\bar{\varepsilon}_s = 1.97$ , полученным в работе [42] при обработке спектров отражения опалов. Величина  $\bar{\varepsilon}_s$  позволяет определить среднюю диэлектрическую проницаемость опала с заполнителем  $\varepsilon_{av} = 0.74\bar{\varepsilon}_s + 0.26\varepsilon_f$ , которая при заполнении опала, например, водой составляет  $\varepsilon_{av} = 1.88$ . Далее, по формуле (3.1) с использованием экспериментальных значений для брэгговской длины волны  $\lambda_{(111)}$  (измеренных с наибольшей точностью среди всех  $\lambda_{(hkl)}$ ) вычисляется размер сферических частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> исследованно-

го образца  $D = 317$  нм. Эта величина прекрасно согласуется со значением  $\bar{D} = 316$  нм, полученным для этого образца опала методами СЭМ и значением  $D = 315 \pm 15$  нм, полученным для этого образца ранее в оптических экспериментах [85].

Напомним, что ранее в литературе усредненная диэлектрическая проницаемость сфер  $\bar{\epsilon}_s$  отождествлялась с величиной  $\epsilon_f^0(G_{111})$ , при которой выключается стоп-зона (111). Результаты данной работы продемонстрировали, что это совершенно разные, не связанные друг с другом величины: средняя диэлектрическая проницаемость сферы  $\bar{\epsilon}_s = 1.92$  заметно отличается от значения  $\epsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$ .

#### 4.4. Фотонная зонная структура синтетических опалов

Хорошо известно, что основные свойства полупроводникового соединения определяет электронная зонная структура и, следовательно, изучение зонной структуры является одной из важнейших задач при исследовании полупроводников. Во многом аналогичную ситуацию мы имеем и при исследовании ФК. Поэтому одним из наиболее важных результатов данной работы можно считать экспериментальное определение фотонной зонной структуры синтетических опалов, представленной на рис. 4.10. Следует отметить, что данные результаты относятся к случаю низкого контраста опал-заполнитель.

Рисунок 4.10 представляет определенную из эксперимента фотонную зонную структуру опалов, которые являются типичными многокомпонентными ФК, и картину качественного перестроения фотонной зонной структуры в зависимости от диэлектрической проницаемости одной из компонент и поляризации падающего светового пучка. Фотонная зонная структура представлена для опалов, заполненных тремя различными жидкостями:  $\epsilon_f = 1.78$  (дистиллированная вода),  $\epsilon_f = 2.05$  (пропиленгликоль) и  $\epsilon_f = \epsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$  (смесь

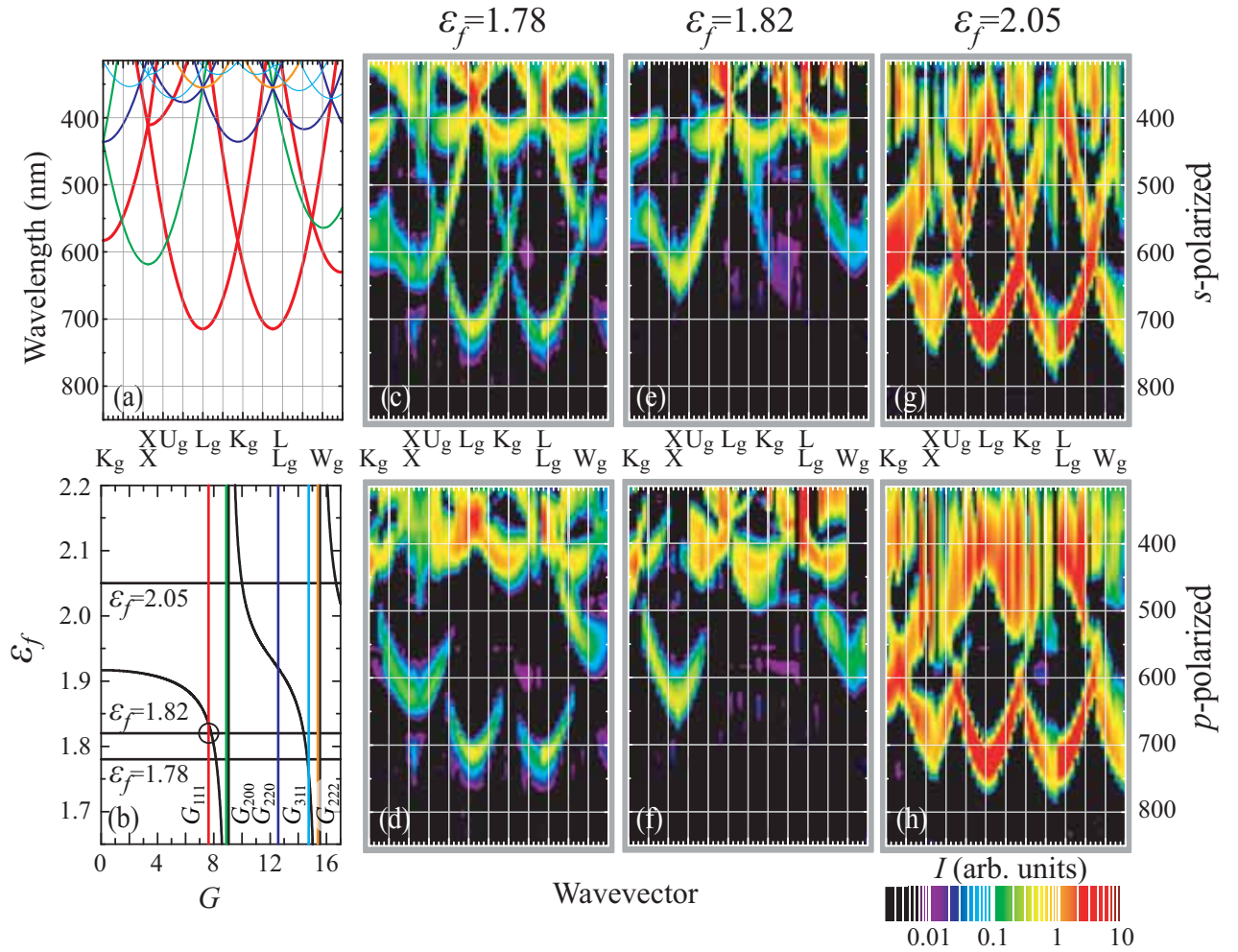


Рис. 4.10. Фотонная зонная структура опала. (а) Дисперсия брэгговских длин волн  $\lambda_{hkl}(\theta_{hkl})$  для трех путей сканирования (А-С). Красные линии – семейство стоп-зон  $\{111\}$ , зеленые –  $\{200\}$ , синие –  $\{220\}$ , голубые –  $\{311\}$ , оранжевые –  $\{222\}$ . (б) Диэлектрическая проницаемость заполнителя  $\epsilon_f^0(G)$ , соответствующая условию выключения стоп-зон (черная кривая) вычисленная с помощью уравнения (4.5) для диэлектрического профиля  $\epsilon_s(r)$  показанного на рис. 4.9. Значения диэлектрической проницаемости заполнителя  $\epsilon_f = 1.78, 1.82$  и  $2.05$  показаны горизонтальными линиями. Наименьшие модули векторов обратной решетки ГЦК структуры  $G_{hkl}$  отмечены вертикальными линиями. (с-н) Экспериментально измеренная фотонная зонная структура опала для трех различных заполнителей и двух линейных поляризаций падающего света, приведенная в том же масштабе длин волн и волновых векторов и для тех же трех путей сканирования, что и расчеты на панели (а). Шкала интенсивностей стоп-зон приведена в правом нижнем углу рисунка. (с)  $\epsilon_f = 1.78$ ,  $s$ -поляризация, (д)  $\epsilon_f = 1.78$ ,  $p$ -поляризация, (е)  $\epsilon_f = 1.82$ ,  $s$ -, (ф)  $\epsilon_f = 1.82$ ,  $p$ -, (г)  $\epsilon_f = 2.05$ ,  $s$ -, (н)  $\epsilon_f = 2.05$ ,  $p$ -.

вода-пропиленгликоль) при падении на образец линейно поляризованного света ( $s$ - и  $p$ - поляризации). Аналогичную картину мы вправе ожидать от любых других низкоконтрастных ФК, имеющих ГЦК-решетку и состоящих из квазисферических частиц.

Рисунок 4.10 демонстрирует эффект полного выключения семейства стоп-зон  $\{111\}$ , которое наблюдается при  $\varepsilon_f = \varepsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$ . В такой структуре стоп-зоны семейства  $\{111\}$  не наблюдаются ни при каких геометриях рассеяния (т.е. волновых векторах  $\mathbf{k}$ ), ни для ростовой  $(111)$ , ни для неростовой  $(\bar{1}11)$  системы плоскостей, во всем исследованном спектральном интервале 300-800 нм. Следует отметить, что теоретически идеальной компенсации стоп-зоны в широком спектральном интервале добиться невозможно из-за различия в дисперсионных зависимостях диэлектрической проницаемости аморфного кремния  $\varepsilon_{a\text{-SiO}_2}(\lambda)$  и заполнителя  $\varepsilon_f(\lambda)$ , однако, как показали эксперименты, этот эффект пренебрежимо мал и в настоящей работе не обсуждается. Кроме зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя, рис 4.10 демонстрирует поляризационную зависимость фотонной зонной структуры, которая проявляется в геометриях рассеяния, соответствующих критическому углу  $\theta^{qB}$ , определяемому для каждой  $(hkl)$  системы плоскостей индивидуально.

## **4.5. Возможные приложения многокомпонентных ФК: пассивный и активный режимы при селективном переключении стоп-зон**

Одно из наиболее очевидных применений обнаруженных эффектов связано с возможностью селективного управления потоками света, распространяющимися на различных длинах волн. Свет является самым быстрым носи-

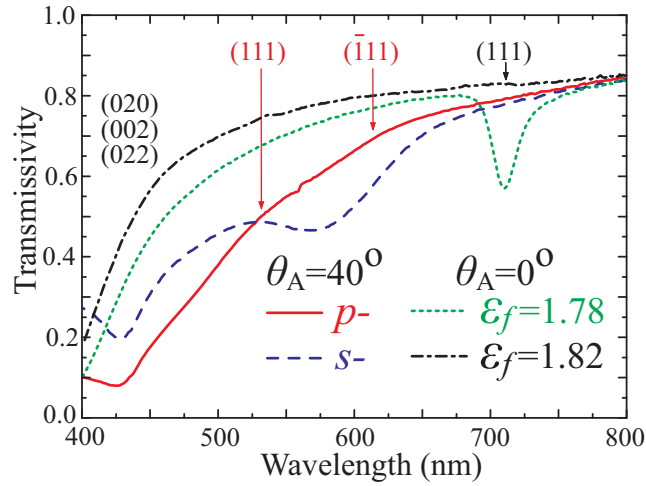


Рис. 4.11. Выключение стоп-зон семейства  $\{111\}$  с помощью варьирования диэлектрической проницаемости заполнителя и с помощью изменения поляризации падающего света.

телем информации, поэтому телекоммуникационные системы нового поколения будут работать на элементной базе, важной составной частью которой станут ФК. При этом роль многокомпонентных ФК может оказаться весьма существенной благодаря эффекту селективного включения/выключения фотонных стоп-зон.

Рисунок 4.11 демонстрирует селективное включение/выключение стоп-зон, которое можно реализовать либо подбором (модуляцией) структурных параметров ФК, либо управлением поляризациями светового пучка. На рисунке представлены поляризованные спектры пропускания опала, погруженного в воду и в смесь вода-пропиленгликоль с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_f = \varepsilon_f^0(G_{111}) = 1.82$ . Рассматриваются две геометрии рассеяния: нормальное падение света на плоскости  $(111)$  ( $\theta_A = 0^\circ$ ) и падение светового пучка под углом  $\theta_A = 40^\circ$ , близким к квазибрюстеровскому углу для плоскости  $(111)$  либо  $(\bar{1}11)$   $\theta_A^{qB}(111) = 45.4^\circ$ ,  $\theta_A^{qB}(\bar{1}11) = 25.7^\circ$ . В представленном на рис. 4.11 спектральном диапазоне при  $\theta_A = 40^\circ$  наблюдаются две полосы «непропускания», одна из которых – в области длин волн  $\sim 600$  нм соответствует перекрывающимся стоп-зонам  $(111)$  и  $(\bar{1}11)$ , вторая – в области длин волн  $\sim 430$



ним соответствует стоп-зонам (020), (002) и (022). Видно, что стоп-зоны семейства  $\{111\}$  можно полностью выключить либо подбором диэлектрической проницаемости заполнителя, либо изменением поляризации света. При этом стоп-зоны (020), (002) и (022) будут оставаться активными, т.к. выключить все три зоны одновременно с помощью диэлектрической проницаемости заполнителя невозможно:  $\varepsilon_f^0(G_{200}) \neq \varepsilon_f^0(G_{220})$ . Следовательно, информация, передаваемая на длине волны  $\lambda \sim 600$  нм и информация, передаваемая на длине волны  $\lambda \sim 430$  нм может обрабатываться независимо.

Таким образом, многокомпонентные структуры расширяют границы применения ФК. Применяемые в настоящее время двухкомпонентные ФК могут работать только в двух режимах – все стоп-зоны включены ( $\varepsilon_f = \varepsilon_s$ , свет не проходит) или все зоны выключены ( $\varepsilon_f \neq \varepsilon_s$ , свет проходит). В результате двухкомпонентные ФК не позволяют проводить независимую обработку сигналов, распространяющихся на разных брэгговских длинах волн. Многокомпонентные ФК, напротив, позволяют включать/выключать стоп-зоны селективно, что придает дополнительные преимущества при обработке оптической информации.

Селективная обработка сигнала может осуществляться как в пассивном, так и в активном режиме. Под пассивным режимом подразумевается использование многокомпонентного ФК с заранее рассчитанными параметрами  $\varepsilon_f^0(G_{hkl})$ , который неизменно во времени разделяет (т.е. либо «отражает», либо пропускает) информацию, передаваемую на разных длинах волн. Еще более широкие перспективы открывает временная модуляция параметров многокомпонентного ФК, которая позволит селективно манипулировать информацией, передаваемой на разных длинах волн в режиме реального времени. Селективное включение/выключение можно осуществить в активном режиме изменяя диэлектрическую проницаемость одной или нескольких компонент, как это было сделано в работах [90, 149], или с использованием пи-

косекундного импульсного сжатия [150], т.е. модуляцией вектора обратной решетки  $G$ . Такая модуляция будет особенно эффективна вблизи резонанса ( $G \sim G_{res}$ ) для брэгговской длины волны  $\lambda_{200}$  при нормальном падении света на плоскость (200).

## Основные результаты и выводы

1. Многокомпонентные фотонные кристаллы (состоящие из трех или более однородных компонент, или из неоднородных компонент) обладают квазипериодической резонансной зависимостью условий иммерсии («выключения»)  $(hkl)$  стоп-зон от длины вектора обратной решетки. Вне резонанса любая стоп-зона может быть «выключена» подбором диэлектрической проницаемости одной из компонент. Для резонансной стоп-зоны такое «выключение» невозможно.
2. Синтетические опалы, состоящие из неоднородных квазисферических частиц  $a\text{-SiO}_2$ , относятся к классу многокомпонентных ФК.
3. Экспериментально определенные иммерсионные зависимости  $(hkl)$  стоп-зон в опалах описываются в рамках аналитической теории, основанной на анализе форм-фактора рассеяния для ГЦК-решетки.
4. В экспериментально исследованном диапазоне  $1.78 \leq \varepsilon_f \leq 2.05$  стоп-зона (222) не меняет своей интенсивности, что отличает ее от других исследованных  $(hkl)$  стоп-зон, в том числе от стоп-зоны (111). Таким образом, стоп-зону (222) можно отнести к классу резонансных стоп-зон.
5. В результате структурных и оптических исследований были определены диэлектрические параметры опалов:  $\bar{\varepsilon}_s = 1.92$ ,  $\varepsilon_s(r/D = 0.5) = 2.13$ .

6. Экспериментально определена фотонная зонная структура синтетических опалов для случая низкого диэлектрического контраста. Установлены зависимости зонной структуры от диэлектрического контраста и поляризации падающего света.

Результаты данной главы излагаются в работах [205–208].

## Глава 5

# Резонанс Фано в спектрах пропускания фотонных кристаллов на основе синтетических опалов

В 1961 г. У. Фано опубликовал свою пионерскую работу [209], в которой теоретически проанализировал своеобразную форму линий в спектрах неупругого рассеяния электронов на атомах He. Как оказалось впоследствии, подход, использованный в работе [209], обладает большой общностью и применим в случае, когда узкая линия расположена на фоне слабо-меняющегося спектрального контура. Это явление, получившее название «*резонанс Фано*» (другие названия «*взаимодействие Фано*» и «*интерференция Фано*»), наблюдалось в разных физических процессах, включая магнитные явления [210], эффекты, связанные с поляризацией фотоэлектронов [211], рассеяние света в полупроводниках [212, 213] и сверхпроводниках [214, 215]. Суть эффекта состоит в том, что при рассеянии частица, проявляя волновую природу, может переходить в одно и то же конечное состояние по двум разным каналам рассеяния. Первый – соответствует узкой линии, причем в этом случае фаза волны изменяется на  $\sim \pi$  в узком спектральном диапазоне от одного крыла линии до другого. Второй канал соответствует фоновому рассеянию, для которого в интересующей области резонанса амплитуду и фазу можно считать постоянными. В случае, рассмотренном У. Фано [209], интерференция возникает вследствие существования двух каналов ионизации атома He. Один из каналов приводит к появлению узкой линии, связанной с формированием промежуточного автоионизационного состояния, второй канал приводит к появлению слабоменяющегося фона, соответствующего прямому ионизаци-

онному процессу. Такой резонанс проявляется как асимметричный профиль узкой линии в спектрах пропускания либо отражения, а в общем случае – в спектрах дифференциального сечения рассеяния. Для описания формы узкой линии Фано получил простое выражение, которое в общем виде выглядит следующим образом:

$$F(\Omega) = \frac{(\Omega + q)^2}{\Omega^2 + 1}, \quad (5.1)$$

где  $q$  – параметр асимметрии (или параметр Фано),  $\Omega = (\omega - \omega_B)/(\gamma_B/2)$ ,  $\omega_B$  и  $\gamma_B$  – частота и ширина узкой линии. Для простоты анализа в выражение (5.1) добавляют нормировочный коэффициент  $(1 + q^2)^{-1}$ . Из формулы

$$F'(\Omega) = \frac{1}{1 + q^2} \frac{(\Omega + q)^2}{\Omega^2 + 1}, \quad (5.2)$$

следует, что в случае резонанса Фано в зависимости от знака и величины параметра  $q$  узкая линия в общем случае имеет асимметричный профиль, а в особых точках приобретает симметричную форму:

(i) При  $q \rightarrow \pm\infty$  формула Фано имеет вид  $F'(\Omega) = \frac{1}{\Omega^2 + 1}$  (контур Лоренца), при  $\omega = \omega_B$  функция достигает максимального значения  $F'(\Omega) = 1$ .

(ii) При  $q \rightarrow 0$  формула Фано имеет вид  $F'(\Omega) = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + 1}$ , при  $\omega = \omega_B$  функция достигает минимального значения  $F'(\Omega) = 0$ .

*Таким образом, в случае резонанса при изменении параметра Фано от  $q = 0$  к  $q \rightarrow \pm\infty$  происходит «переворот» узкой линии, причем в процессе этой трансформации ее контур все время является асимметричным.*

Важно отметить, что, в зависимости от характера процесса и геометрии наблюдения в простейшей одномерной модели, могут наблюдаться два случая, которые удобно пояснить на примере взаимодополняющих спектров пропускания и отражения. Если узкая линия в спектрах отражения описывается формулой Фано  $R = F'(\Omega)$ , то при  $|q| \gg 1$  наблюдается пик ( $R = 1$  на частоте  $\omega = \omega_B$ ), а при  $|q| \rightarrow 0$  наблюдается минимум ( $R = 0$  на частоте

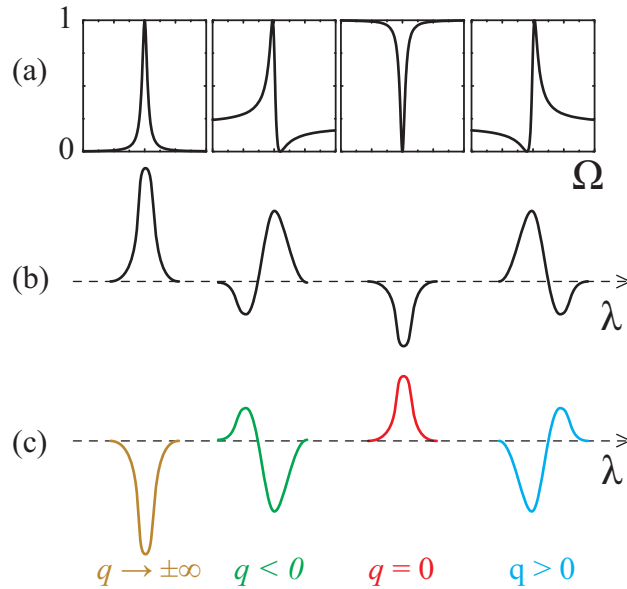


Рис. 5.1. Изображение четырех характерных для резонанса Фано контуров узкой линии. (a) расчет по формуле (5.2) в шкале частот для  $q \rightarrow \text{inf}$ ,  $q = -2$ ,  $q = 0$ ,  $q = 2$ . Схематическое изображение контура Фано узкой линии в случае отражения (b) и пропускания (c) в шкале длин волн.

$\omega = \omega_B$ ). При этом в спектрах пропускания  $T = 1 - R = 1 - F'(\Omega)$  получаем инвертированную картину: при  $|q| \gg 1$  наблюдается минимум ( $T = 0$  на частоте  $\omega = \omega_B$ ), а при  $|q| \rightarrow 0$  наблюдается пик ( $T = 1$  на частоте  $\omega = \omega_B$ ). Следует также отметить, что вид экспериментально наблюдаемых спектров существенно зависит от фоновой составляющей (рис. 5.1).

В последнее время концепция резонанса Фано стала использоваться при описании оптических свойств различных нанобъектов, включая ФК (см. обзор [216]). В частности, для тонких 2D ФК, экспериментально [217, 218] и теоретически [219, 220] было продемонстрировано, что к возникновению резонанса Фано приводит интерференция между двумя процессами: (i) рассеянием через возбуждение собственного состояния ФК (guided mode), которое проявляется как узкая линия, и (ii) рассеянием Фабри-Перо на границах пластины. В ряде работ в качестве узкой линии выступает полоса, связанная с модой высокодобротного микрорезонантора [221–223], или полоса люминес-

ценции [224–226]. Также в применении к ФК резонанс Фано был рассмотрен в рамках оптической бистабильности [227–229]. Следует особо подчеркнуть, что, не смотря на возрастающий интерес к исследованию резонанса Фано в ФК, до сих пор не рассматривалась возможность использования в качестве источника узкой линии основное состояние ФК – непосредственно стоп-зону, возникающую из-за брэгговской дифракции.

В настоящей главе мы рассмотрим резонанс Фано в ФК, вызванный взаимодействием между узкополосным брэгговским рассеянием и индуцированным дефектами широкополосным фоновым рассеянием. Экспериментально было обнаружено необычное поведение полосы (111) в спектрах пропускания опалов, которое на основании выполненных расчетов было интерпретировано в рамках резонанса Фано.

### **5.1. О возможности возникновения резонанса Фано с участием брэгговского рассеяния в фотонных кристаллах**

Появление резонанса Фано можно ожидать в случае, когда в спектрах изучаемого объекта можно выделить взаимодействующие узкую линию и медленно меняющийся фон. Исходной точкой наших рассуждений о резонансе Фано в ФК любой размерности будет осознание того факта, что стоп-зона в спектрах пропускания либо отражения ФК обычно наблюдается в виде узкой полосы, которая, в принципе, может рассматриваться как кандидат на роль узкой линии в концепции резонанса Фано. Рассмотрим в качестве примера характерный представитель 3D ФК – синтетические опалы. В спектрах пропускания опалов наблюдаются полосы, связанные со стоп-зонами, типичная ширина которых составляет несколько десятков нанометров (рис. 5.2). При

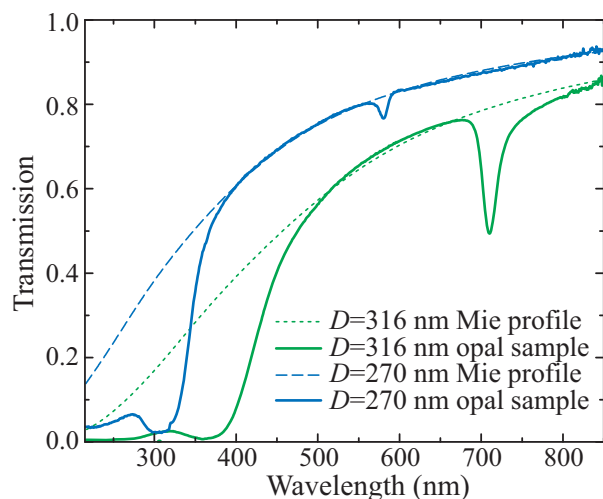


Рис. 5.2. Спектры пропускания двух образцов синтетических опалов ( $\bar{D} = 316$  нм и  $\bar{D} = 270$  нм) в  $\Gamma \rightarrow L$  геометрии рассеяния (сплошные кривые). Пунктир: спектры пропускания структуры, состоящей из неупорядоченных в пространстве сфер ( $D = 316$  нм и  $D = 270$  нм), рассчитанные с учетом однократного рассеяния света. Расчет выполнен с использованием теории Ми.

этом весь спектр пропускания опалов включает в себя видимую, ближние УФ и ИК области. По отношению к этому спектру, который можно условно оценить в  $\sim 10^3$  нм, ширину стоп-зон можно рассматривать как узкую полосу.

Обсудим теперь возможную кандидатуру на роль медленноменяющейся фоновой компоненты в концепции Фано. Сразу следует отметить, что в случае идеально упорядоченных ФК спектры пропускания формируются из одних стоп-зон, вне которых структура прозрачна, т.е. дополнительное фоновое рассеяние не наблюдается (если мы пренебрегаем граничными эффектами, что справедливо для нашего случая малого диэлектрического контраста). Однако в реальных ФК, таких, например, как опалоподобные структуры, вне областей стоп-зон пропускание отличается от идеального (т.е. существенно меньше 100%) и представляет собой плавно меняющийся спектр (рис. 5.2). Природа этого фона, наблюдаемого разными авторами [78, 137, 139, 193, 199, 230], до последнего времени оставалось не определенной. Как показали ре-



результаты настоящей работы, индуцированное неупорядоченностью остаточное рассеяние Ми на сферических частицах, формирующих опалоподобный ФК, как раз и отвечает за характерную форму фонового рассеяния в спектрах пропускания опалов.

Таким образом, в случае неупорядоченных ФК выполняются условия, необходимые для возникновения резонанса Фано с участием брэгговского рассеяния света. Более того, на существование резонанса Фано в ФК непосредственно указывают и хорошо известные литературные данные. Действительно, имеется множество публикаций, в которых приведены спектры пропускания и отражения прямых и инвертированных опалов. При этом в целом ряде публикаций полосы, связанные со стоп-зонами, имеют ассиметричную форму [88, 140, 144, 231], природа которой до сих пор оставалась неизвестной. Пример такого спектра приведен на рис. 5.2: хорошо видно, что полоса, соответствующая стоп-зоне (111) с длиной волны порядка 715 нм, имеет ассиметричную форму, т.е. длинноволновое крыло оказывается более затянутым по сравнению с более крутым коротковолновым крылом. Однако, чтобы с уверенностью говорить об обнаружении резонанса Фано с участием брэгговского рассеяния в опалах, необходимо на одном образце получить всю картину, описываемую уравнением (5.1), т.е. наблюдать все типы линий, представленные на рис. 5.1). При этом ключевым моментом является наблюдение инвертирования брэгговской полосы «непропускания» (т.е. отражения) в брэгговский пик пропускания при  $q = 0$ .

## **5.2. Экспериментальное наблюдение резонанса Фано в синтетических опалах**

Исследования спектров пропускания опалов, о которых пойдет речь в данной главе, проводились методом иммерсионной спектроскопии пропускания.

Измерения диэлектрической проницаемости жидкости-заполнителя были выполнены на высокоточном рефрактометре Аббе ИРФ-454Б2М (погрешность измерения диэлектрической проницаемости не превышала  $7.5 \cdot 10^{-4}$ ), что позволило уменьшить шаг изменения диэлектрической проницаемости заполнителя до 0.001. Как и в других наших работах, в данных экспериментах использовались две жидкости – дистиллированная вода ( $\varepsilon_{\text{H}_2\text{O}} = 1.777$ ) и особо чистый пропиленгликоль ( $\varepsilon_{\text{pg}} = 2.053$ ), а также их смесь.

Чтобы установить детальную картину «выключения» стоп-зоны (111) и выяснить, превращается ли полоса «непропускания» (111) в пик пропускания (111), область выключения стоп-зоны (111) вблизи  $\varepsilon_f = \varepsilon_{f111}^0 \sim 1.82$  «сканировалась» с минимальным шагом по диэлектрической проницаемости заполнителя  $\Delta\varepsilon_f \approx 0.001 - 0.002$ . Для проверки воспроизводимости результатов измерения проводились на трех изучавшихся ранее образцах опала ( $\bar{D} = 316$  нм) толщиной 0.6, 0.8 и 2.2 мм.

Наиболее характерные спектры, отражающие иммерсионную зависимость пропускания образцов 0.6 и 2.2 мм, приведены на рис. 5.3. Видно, что линия (111) имеет ярко выраженную асимметрию, которая зеркально (в шкале длин волн) трансформируется при  $\varepsilon_f = \varepsilon_f^0$ : при  $\varepsilon_f > \varepsilon_f^0$  (синий цвет) более затянутым является коротковолновое крыло, а при  $\varepsilon_f < \varepsilon_f^0$  (зеленый цвет) – длинноволновое крыло. С приближением к области выключения наблюдается уменьшение интенсивности линии (111) и увеличение ее асимметрии. Изучение спектров пропускания при  $\varepsilon_f \rightarrow \varepsilon_f^0$  принесло неожиданный результат: брэгговская полоса (111) не исчезает ни при каких значениях  $\varepsilon_f$ . При  $\varepsilon_f = \varepsilon_f^0$  наблюдается главный эффект: брэгговская полоса непропускания (отражения) трансформируется в брэгговский пик пропускания (красный цвет на рис. 5.3). Значения  $\varepsilon_f^0$  для двух исследованных образцов незначительно отличаются и составляют  $\varepsilon_f^0 = 1.816$  для образца толщиной 0.6 мм и  $\varepsilon_f^0 = 1.810$  для образца толщиной 2.2 мм. Это отличие связано с неоднородностью образцов,

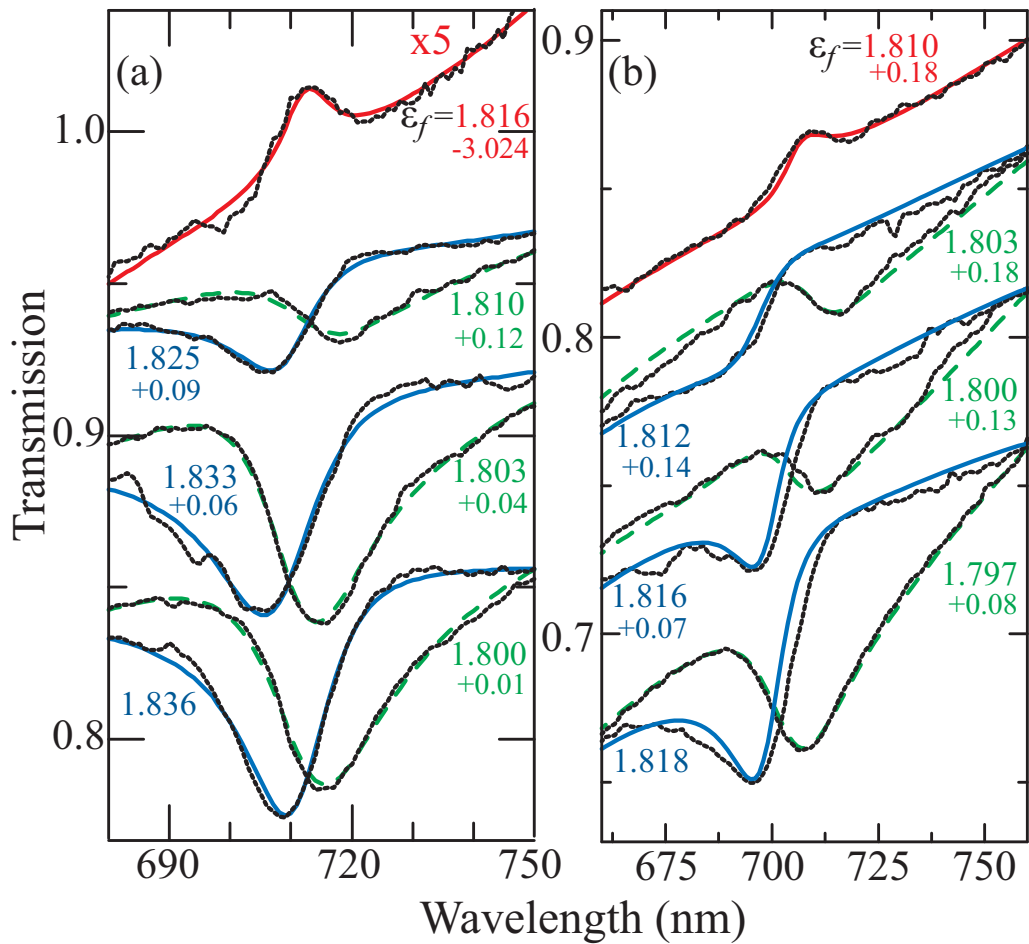


Рис. 5.3. Измеренные спектры пропускания образца синтетического опала ( $D = 316$  нм) в  $\Gamma \rightarrow L$  геометрии рассеяния при изменении диэлектрической проницаемости заполнителя (черный пунктир). Цветные кривые – результат обработки экспериментальных спектров по формуле Фано (5.8). Образец толщиной 0.6 мм (а) и 2.2 мм (б). Величина смещения спектров по вертикали на (а,б) указана около каждого спектра вместе со значением  $\varepsilon_f$ .

которая была описана в Главе 3 (напомним, что образец 0.6 мм был вырезан из образца 2.2 мм, является более однородным, а их усредненные параметры, включая брэгговскую длину волны, несколько разнятся). Эффект обращения брэгговской полосы отражения в брэгговский пик пропускания наблюдается в крайне узком диапазоне значений диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$  и для образца 0.6 мм составляет  $\varepsilon_f \approx 1.816 \pm 0.003$ .

### 5.3. Расчет фотонной зонной структуры опалов, образованных идентичными неоднородными сферами $a\text{-SiO}_2$

В Главе 4 были описаны оптические эффекты, связанные с неоднородностью распределения диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(r)$  внутри частиц  $a\text{-SiO}_2$ . В свете этих результатов возникает естественный вопрос: может ли этот тип неоднородности приводить к возникновению резонанса Фано в спектрах пропускания опалоподобных ФК? Чтобы ответить на этот вопрос можно, например, провести анализ ширины полосы (111) в спектре пропускания опалов в зависимости от  $\varepsilon_f$  и сравнить ее с теоретической зависимостью, которая рассчитывается для идеальной плотноупакованной ГЦК-структуры с точечным касанием неоднородных сфер  $a\text{-SiO}_2$ .

Расчеты фотонной зонной структуры опалов, в том числе с учетом неоднородности сфер  $a\text{-SiO}_2$ , были выполнены с использованием метода разложения собственных электромагнитных состояний по базису плоских волн (см. Приложение А). Расчет выполнялся разложением по  $N = 4096$  ( $16 \times 16 \times 16$ ) плоским волнам, при этом каждый из 4096 элементов основного разбиения примитивной ячейки ГЦК решетки дополнительно разбивался на 125 ( $5 \times 5 \times 5$ ) субэлементов для нахождения матрицы эффективной диэлектрической проницаемости. Отметим, что стоп-зону (111) определяют первые четыре дисперсионные ветви, попарно вырожденные по поляризации из-за того, что ось  $\Gamma \rightarrow L$  обладает симметрией  $C_3$ .

Фотонная зонная структура ГЦК-решетки с точечным касанием плотноупакованных сфер была рассчитана для трех моделей: (i) двухкомпонентный ФК с однородными сферами  $\varepsilon_s = \text{const}$ , (ii) трехкомпонентный ФК со сферами, состоящими из однородного ядра  $\varepsilon_n = \text{const}$  и тонкой оболочки  $\varepsilon_c = \text{const}$ ,

(iii) Многокомпонентный ФК со сферами, имеющими неоднородный профиль  $\varepsilon_s(r)$ , представленный на рис. 4.9. В каждой из этих моделей диэлектрический профиль был выбран так, чтобы зона (111) исчезала при  $\varepsilon_f^0 = 1.816$ .

В результате расчетов было установлено, что спектральное положение стоп-зоны чувствительно к выбору модели профиля  $\varepsilon_s(r)$ : двухкомпонентная модель (i) при сравнении с данными эксперимента ( $\lambda_{111}$  и  $\varepsilon_{f111}^0$ ) дает диаметр сфер  $D = 324$  нм; многокомпонентные модели (ii) и (iii) дают значение  $D = 317$  нм, что практически совпадает с данными СЭМ  $\bar{D} = 316$  нм. Результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными для опала, заполненного пропиленгликолем, когда достаточно большая ширина полосы (111) может быть определена с хорошей точностью.

Было установлено, что расчетная ширина стоп-зоны слабо зависит от выбора модели профиля  $\varepsilon_s(r)$ . Отметим, что модель (ii) (ядро в оболочке) позволяет использовать определенную свободу в выборе параметров, благодаря чему для первых четырех ветвей фотонной зонной структуры можно добиться совпадения с расчетами в модели (iii). Это обстоятельство указывает на некоторый произвол в выборе диэлектрического профиля  $\varepsilon_s(r)$ .

На рис. 5.4 представлены результаты расчета методом плоских волн дисперсии собственных электромагнитных состояний по направлению  $\Gamma \rightarrow L$  зоны Бриллюэна ГЦК решетки трехкомпонентного опала. Обсудим первые четыре низкочастотные дисперсионные ветви. Из-за вырождения по поляризации четыре дисперсионные ветви на рисунке отображаются лишь двумя кривыми (две сплошные для  $\varepsilon_f^0 = 1.816$  и две пунктирные для пропиленгликоля  $\varepsilon_f = 2.053$ ). При заполнении опала пропиленгликолем существует область длин волн между  $\sim 725$  и  $\sim 732$  нм, в которой фотонные состояния отсутствуют – это и есть стоп-зона (111). Ширина зоны (111) [слабо зависящая от выбора модели сферы  $\varepsilon_s(r)$ ] при заполнении опала пропиленгликолем составляет величину  $\sim 7$  нм, что существенно меньше экспериментально

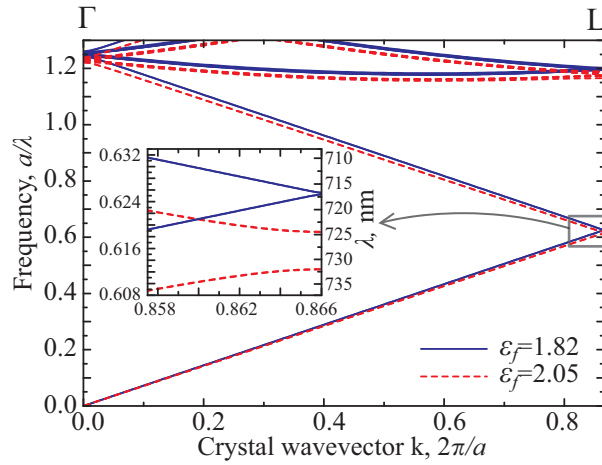


Рис. 5.4. Расчет дисперсии собственных фотонных состояний для направления  $\Gamma \rightarrow L$  зоны Бриллюэна ГЦК-решетки. Расчет выполнен для структуры, состоящей из сфер с диаметром  $D = 317$  нм, имеющих оболочку  $W = 10.86$  нм, с диэлектрическими проницаемостями ядра  $\varepsilon_n = 1.85$  и оболочки  $\varepsilon_c = 2.13$ , для двух значений однородного заполнителя  $\varepsilon_f = 1.82$  (сплошная линия) и  $\varepsilon_f = 2.05$  (штриховая линия).  $a$  – постоянная ГЦК-решетки. На вставке – область, примыкающая к границе зоны Бриллюэна (L-точка) и соответствующая по энергии стоп-зоне (111).

наблюдаемой ширины области непропускания  $\sim 25$  нм (напр., рис. 3.4). В случае заполнения жидкостью с  $\varepsilon_f^0 = 1.816$  все четыре ветви пересекаются в точке L на границе зоны Бриллюэна (на длине волны  $\sim 717$  нм), т.е. наблюдается полное иммерсионное исчезновение стоп-зоны (111).

Результаты расчета положения  $\lambda_{(111)}$  и ширины стоп-зоны (111) в зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$  приведены на рис. 5.5. На основании результатов расчета можно сделать следующие выводы:

- (i) Расчетная зависимость центра зоны  $\lambda_{111}$  подчиняется закону Брэгга.
- (ii) Для идеальной ГЦК структуры с точечным касанием неоднородных сферических частиц расчетная ширина стоп-зоны (111) пропорциональна величине  $|\varepsilon_f - \varepsilon_f^0|$  и обращается в нуль при условии  $\varepsilon_f = \varepsilon_f^0$ .

Таким образом, никаких особенностей, наблюдавшихся экспериментально

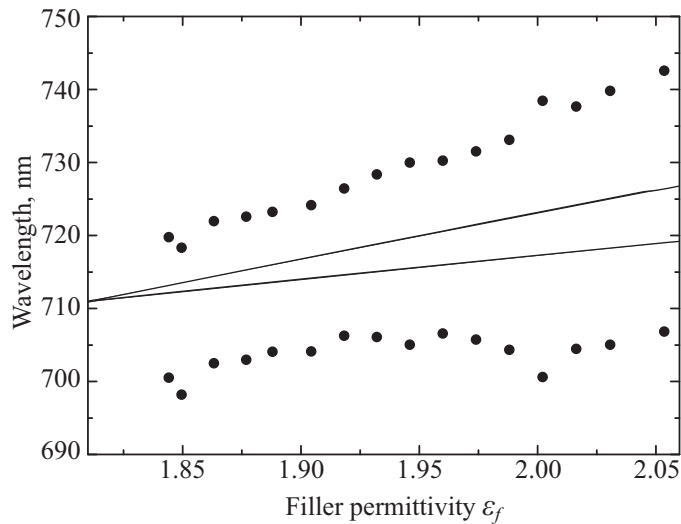


Рис. 5.5. Границы стоп-зоны (111): эксперимент (кружки) и расчет (сплошные линии) в зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ .

в области  $\varepsilon_f \approx \varepsilon_{f111}^0$  не наблюдается, и резонанс Фано в спектрах пропускания опалов не связан с внутренним строением сферических частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, при условии что все частицы одинаковы и упакованных в идеальную ГЦК решетку. Поэтому для описания наблюдаемого резонанса Фано необходимо принимать во внимание другие типы неоднородности структуры синтетических опалов.

## 5.4. Расчет спектров пропускания неупорядоченного 3D фотонного кристалла с ГЦК-решеткой

### 5.4.1. Рассеяние света на ФК с идеальной структурой

Рассеяние света на структуре ФК удобно описывать следующим образом [10]. Рассмотрим плоскую волну, падающую на ФК, состоящий из упорядоченных сфер. Рассеявшись на частице, волна приобретает фазовый сдвиг по сравнению с фазой падающей волны. Этот фазовый сдвиг можно вычислить с помощью теории Ми [232]. После того, как волна, рассеянная на одной сфере, достигает другой, она снова может рассеяться с тем же самым фазовым

сдвигом. Серию таких элементарных актов рассеяния  $M_i$  можно записать в виде ряда Борна:

$$\mathbf{S}\mathbf{t} + \mathbf{S}\mathbf{t}\mathbf{S}\mathbf{t} + \mathbf{S}\mathbf{t}\mathbf{S}\mathbf{t}\mathbf{S}\mathbf{t} + \dots, \quad (5.3)$$

где  $\mathbf{t}$  – матрица, описывающая рассеяние света на отдельной частице (рассеяние  $M_i$ ), включающая в себя изменение амплитуды и фазовые сдвиги,  $\mathbf{S}$  – матрица, связанная с геометрическим расположением сфер, т.е. с типом кристаллической решетки ФК. Процесс рассеяния света на структуре ФК является многоуровневым процессом. Первый уровень представляет собой элементарный акт рассеяния электромагнитной волны на сферических частицах, формирующих опалоподобный ФК ( $\mathbf{t}$ -матрица). Вторым уровнем связан с интерференцией волн, возникших в результате элементарных актов рассеяния. Теорема Блоха [233] и зонная теория определяют вид, к которому сходится ряд Бона (5.3), а именно блоховскую волну. В результате интерференции возникают либо собственные состояния ФК, когда свет может распространяться по структуре без потерь, либо запрещенные состояния, т.е. стоп-зоны. Важно подчеркнуть, что первичное рассеяние, которое описывается матрицей  $\mathbf{t}$ , оказывается «скрытым» в блоховской волне.

#### 5.4.2. Рассеяние света на ФК с неупорядоченной структурой

В случае структуры, близкой к идеальной, каждой частице можно поставить в соответствие свою матрицу рассеяния  $\mathbf{t} = \mathbf{t}_0 + \delta\mathbf{t}$ , где  $\mathbf{t}_0$  – усредненное значение матрицы для всех частиц, а  $\delta\mathbf{t}$  – матрица, описывающая случайные вариации амплитуды и фазовых сдвигов для каждой из частиц. Аналогичным образом можно представить матрицу  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_0 + \delta\mathbf{S}$ . Опишем, как влияют вариации этих матриц на процесс рассеяния. В первом приближении вариация фазовых сдвигов и геометрических параметров  $\delta\mathbf{S}$  приводит к «деградации» блоховских мод, что и наблюдалось в работах [163–168]. Вариация ампли-



тудных параметров приводит к появлению дополнительного (остаточного) рассеяния, которое уже не является «скрытым» в блоховской волне, причем эти две (блоховская и дополнительная) рассеянные волны когерентны друг другу. Поэтому в случае неупорядоченных ФК можно выделить третий уровень рассеяния: интерференцию между волной, возникающей в результате брэгговского рассеяния (запрещенное блоховское состояние), и волной, связанной с индуцированным неупорядоченностью остаточным рассеянием. Эта интерференция создает условия для возникновения резонанса Фано.

Таким образом, теория рассеяния света в неупорядоченных опалоподобных ФК должна естественным образом включать в себя два механизма рассеяния - рассеяние Брэгга и рассеяние Ми. В данной работе для описания экспериментально наблюдаемых иммерсионных зависимостей спектров пропускания опалов использовалась следующая «квази-3D» модель, состоящая из двух последовательных этапов.

(i) Расчет рассеяния света на неупорядоченном слое (111).

На первом этапе вычислялись коэффициенты рассеяния плоской электромагнитной волны вперед и назад на неупорядоченном слое, соответствующем ростовому слою (111) ГЦК решетки. При этом эффекты, связанные с внутрислоевым многократным рассеянием не учитывались, что ограничивает применение модели условием малого диэлектрического контраста. Таким образом, мы пренебрегаем внутрислоевым положением частиц. В таком приближении коэффициенты пропускания и отражения слоя можно представить через амплитуды рассеяния вперед  $S(\theta = 0)$  и назад  $S(\theta = 180^\circ)$ , вычисленные с помощью теории Ми (см. [232]). Выражения для коэффициентов пропускания и отражения имеют вид:

$$t_n = e^{ikh} \left( 1 - \frac{2\pi\eta}{k^2} \tilde{S}_n(\theta = 0) \right), \quad (5.4)$$

$$r_n = e^{ikh} \frac{2\pi\eta}{k^2} \tilde{S}_n(\theta = 180^\circ), \quad (5.5)$$

где  $n$  – номер слоя,  $k$  – модуль волнового вектора волны, распространяющейся в заполнителе,  $h$  – толщина слоя,  $\eta$  – концентрация частиц. Значок «тильды» над амплитудами рассеяния подразумевает внутрислоевое усреднение по радиусам частиц  $r$ , а также по диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  (данная модель для простоты предполагает, что сферы однородны по диэлектрической проницаемости). Такое внутрислоевое усреднение выполняется отдельно для каждого слоя, при этом используется численное интегрирование амплитуд рассеяния в области усредненных значений  $\tilde{\varepsilon}_n$  и  $\tilde{r}_n$ , которые, в свою очередь, варьируются от слоя к слою:

$$\tilde{S}_n(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} S(\theta, \varepsilon, r) f_n(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_n, r - \tilde{r}_n) d\varepsilon dr, \quad (5.6)$$

где  $f_n(\varepsilon, r)$  – плотность вероятности, в качестве которой использовались нормальное (гауссово), однородное (прямоугольное), и треугольное распределение (рис. 5.6).

(ii) Расчет спектров пропускания неупорядоченного 3D ФК, состоящего из неупорядоченных слоев (111).

На втором этапе оптические спектры опалоподобного 3D ФК, обладающего ГЦК решеткой и построенного из последовательности таких (111) слоев, вычислялись с помощью метода матриц переноса. Для каждого слоя вычислялась своя матрица переноса через комплексные коэффициенты пропускания и отражения, полученные на предыдущем этапе [234]:

$$M = \begin{pmatrix} t' - \frac{rr'}{t} & \frac{r}{t} \\ -\frac{r'}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

где  $t$  и  $r$  – коэффициенты пропускания и отражения: без штрихов – при распространении света слева направо; со штрихом – справа налево (в нашем случае  $t = t'$ ,  $r = r'$ ). Эти коэффициенты вычисляются с учетом неупорядоченности: диэлектрическая проницаемость и радиусы варьировались от слоя

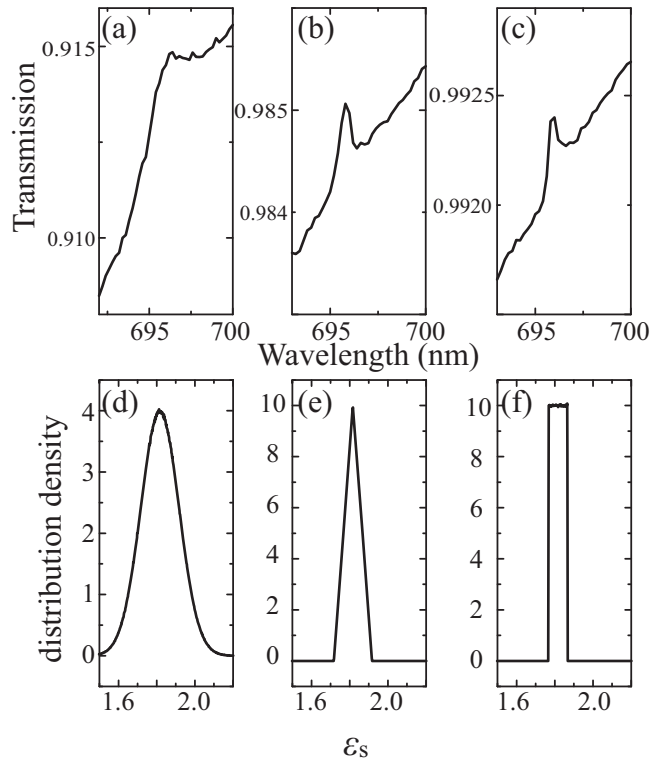


Рис. 5.6. Рассчитанные спектры пропускания неупорядоченной 3D ГЦК-структуры при  $q = 0$  (a-c) для разной вероятности распределения  $f_n(\epsilon)$  вариации диэлектрической проницаемости опаловых сфер (d-f).

к слою.

На последнем этапе итоговый амплитудный коэффициент пропускания через структуру усреднялся по большому ансамблю реализаций неупорядоченного ФК ( $\sim 10^3$ - $10^4$  реализаций). Описанную модель можно назвать «квази-3D», так как учитывается брэгговское рассеяние в одном измерении (вдоль направления [111]), в то время как индуцированное неупорядоченностью остаточное рассеяние учитывается для 3D задачи, при этом рассматривается как внутрислоевой, так и межслоевой беспорядок.

На рис. 5.7 сопоставлены экспериментальные данные (a) с результатами расчета спектров пропускания (b), выполненных с использованием описанной «квази-3D» модели при нормальном распределении параметров частиц (радиус и диэлектрическая проницаемость) с полушириной 7.2%. В данных расчетах мы ориентировались на результаты, представленные в Главе 2: при

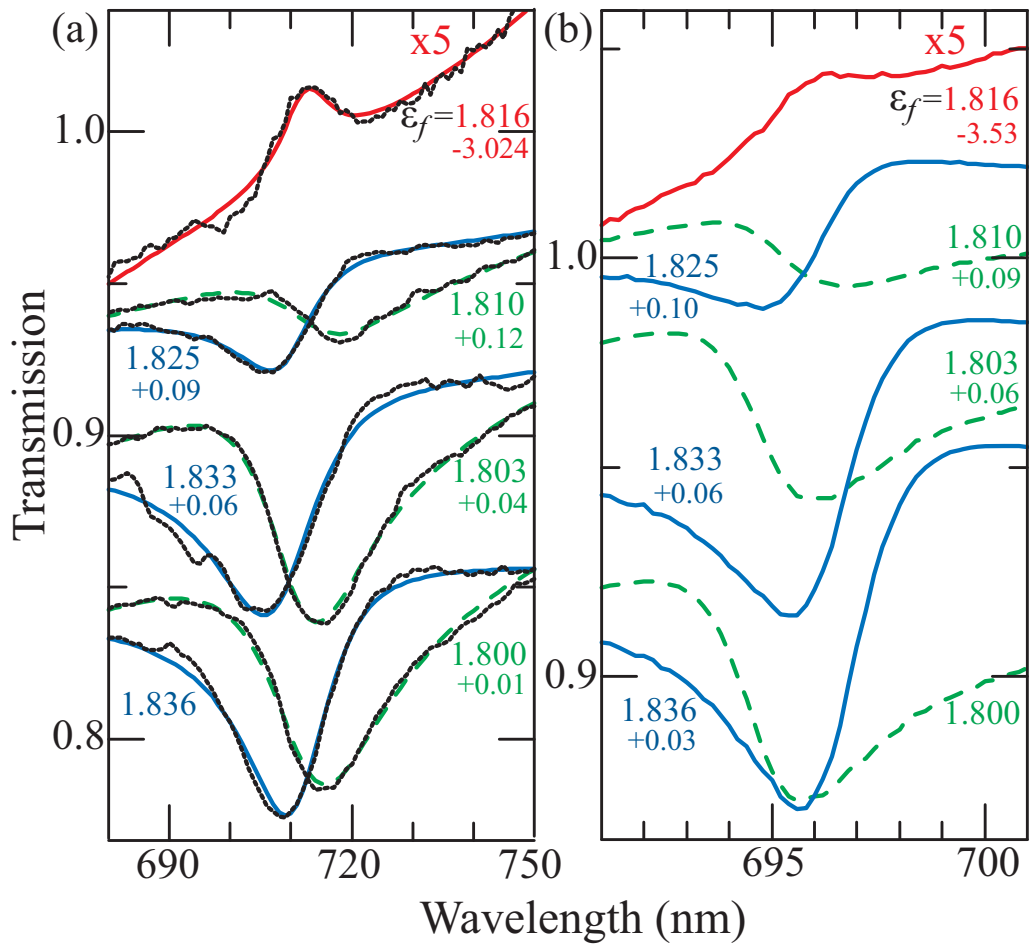


Рис. 5.7. Резонанс Фано в спектрах пропускания ФК опал-заполнитель. (а) Черные кривые – измеренные спектры пропускания образца толщиной  $\sim 0.6$  мм,  $\bar{D} = 316$  нм в области брэгговской линии (111). Цветные кривые – результат аппроксимации экспериментальных спектров по формуле Фано (5.8). (б) результаты расчета спектров пропускания неупорядоченного ФК опал-заполнитель с использованием «квази-3D» модели. Величина смещения спектров по вертикали на (а,б) указана около каждого спектра вместе со значением  $\epsilon_f$ .

обработке СЭМ изображения того же образца ( $\bar{D} = 316$  нм) был определен разброс диаметров 7.2% (по уровню 0.5 функции распределения) для ансамбля частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, принадлежащих ростовой плоскости (111). Т.к. мы не имели никакой количественной информации о распределении диэлектрической проницаемости, для нее в расчетах использовалось то же самое значение (7.2%). Как видно из рис. 5.7, все экспериментально наблюдаемые особенности спектров пропускания, и, в первую очередь, возникновение пика в про-

пускании на брэгговской длине волны, а также изменение асимметрии линии в области  $\varepsilon_f^0$  воспроизводятся в расчетах. Важно подчеркнуть, что резонанс Фано определяется, в первую очередь, неупорядоченностью по диэлектрической проницаемости, в то время как неупорядоченность по размеру приводит лишь к уширению брэгговской линии (111).

Дополнительно были проведены расчеты спектров пропускания для других функций плотности распределения  $f_n(\varepsilon)$ . Помимо нормального распределения, рассчитаны спектры для однородного и треугольного распределений. Результаты расчета показали, что для всех этих функций распределения  $f_n(\varepsilon)$  наблюдается характерная картина резонанса Фано. Однако, в зависимости от вида этой функции, спектральные особенности выражены более или менее контрастно (рис. 5.6).

## 5.5. Аппроксимация спектров с помощью формулы Фано

### 5.5.1. Анализ формулы Фано

В своем классическом виде формула Фано (5.1) в большинстве случаев не пригодна для аппроксимации экспериментально наблюдаемых спектров. Дело в том, что реальные спектры имеют, во-первых, хоть и медленно, но меняющуюся фоновую компоненту и, во-вторых, узкая полоса в спектрах, как правило, не достигает теоретических экстремумов (0 и 1) на частоте  $\omega = \omega_B$ .

Тем не менее, формула Фано широко используется для аппроксимации различных спектров. Чтобы адаптировать формулу Фано для обработки спектров необходимо, во-первых, домножить формулу (5.1) на функцию  $I_{bg}$ , описывающую медленно меняющийся фон. Как было показано в работе [235], эта функция зависит от фазы волны, распространяющейся по каналу, определя-

ющему фоновое рассеяние. Вторую проблему (теоретических экстремумов) можно решить, феноменологически добавив коэффициент  $\eta \in [0, 1]$ . В некоторых случаях [214, 215] физический смысл подобного коэффициента состоит в разделении фонового рассеяния на когерентную часть  $\eta$ , которая интерферирует с узкой линией и определяет ее резонансную форму, и некогерентную часть  $1 - \eta$ , которая не интерферирует с узкой линией. Вклад в спектры некогерентной части приводит к тому, что минимум узкой линии в спектре не достигает нулевого значения.

Таким образом, формула Фано примет вид:

$$\left( \frac{(q + \Omega)^2}{1 + \Omega^2} \eta + (1 - \eta) \right) I_{bg}. \quad (5.8)$$

Резонанс Фано является интерференционным процессом. Покажем, как получить феноменологическую формулу (5.8), рассмотрев интерференцию между двумя волнами: волной с узким спектральным контуром  $\frac{A}{1+i\Omega}$  (лоренцевой формы) и волну с медленно изменяющейся амплитудой  $Be^{i\delta}$ . Здесь  $A$ ,  $B$  - положительные вещественные числа,  $\delta$  - фаза, а  $\Omega$  - безразмерная энергия. Коэффициенты  $B$  и  $\delta$  могут иметь зависимость от энергии. Вычислим амплитуду волны, которая получается в результате интерференции двух описанных волн с узким и широким спектром:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{A}{1+i\Omega} + Be^{i\delta} \right) \left( \frac{A}{1-i\Omega} + Be^{-i\delta} \right) = \\ & = \frac{A^2 + AB e^{i\delta}(1+i\Omega) + AB e^{-i\delta}(1-i\Omega)}{1 + \Omega^2} + B^2 = \\ & = \frac{A^2 + 2AB \cos \delta - 2AB\Omega \sin \delta}{1 + \Omega^2} + B^2. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Теперь установим связь между коэффициентами  $A, B, \delta$  и параметрами  $q, I_{bg}, \eta$  из формулы (5.8). Для этого приравняем эти выражения:

$$\frac{q^2 + 2q\Omega - 1}{1 + \Omega^2} \eta I_{bg} + I_{bg} = \frac{A^2 + 2AB \cos \delta - 2AB\Omega \sin \delta}{1 + \Omega^2} + B^2. \quad (5.10)$$

в результате чего получаем систему уравнений

$$\begin{cases} (q^2 - 1)\eta I_{bg} = A^2 + 2AB \cos \delta \\ q\eta I_{bg} = -AB \sin \delta \\ I_{bg} = B^2 \end{cases} \quad (5.11)$$

Исключая  $I_{bg}$  и  $\eta$ , найдем квадратное уравнение относительно параметра  $q$

$$q^2 + q \frac{A + 2B \cos \delta}{B \sin \delta} - 1 = 0. \quad (5.12)$$

Таким образом, имеем

$$q = -\frac{A + 2B \cos \delta \pm \sqrt{A^2 + 4AB \cos \delta + 4B^2}}{2B \sin \delta}, \quad (5.13)$$

следовательно, можно определить  $\eta$

$$\eta = -\frac{A \sin \delta}{qB}. \quad (5.14)$$

Отметим, что одному из двух значений  $q$  соответствует отрицательная величина  $\eta$ .

В результате имеем соответствие:

$$\begin{cases} q = -\frac{A + 2B \cos \delta + \sqrt{A^2 + 4AB \cos \delta + 4B^2}}{2B \sin \delta} \\ \eta = -\frac{A \sin \delta}{qB} \\ I_{bg} = B^2 \end{cases} \quad (5.15)$$

Таким образом, интерференция двух волн, которые характеризуются узким и широким спектром, приводит к резонансу Фано.

### 5.5.2. Аппроксимация экспериментальных данных

В данной работе экспериментальные данные были обработаны по модифицированной формуле Фано (5.8). Необходимо было выяснить, действительно

ли экспериментальные спектры с хорошей точностью аппроксимируются формулой Фано, и, если это так, то определить параметр Фано  $q$  и связать его с характеристиками ФК.

В главе 3 было показано, что спектры пропускания опалов имеют выраженную зависимость от толщины образца. Поэтому, как и при определении интенсивности спектральных линий, будем аппроксимировать формулой Фано спектр экстинкции  $\chi(\lambda) = -\ln T(\lambda)/d$ . Следует отметить, что профиль брэгговской линии не описывается функцией Лоренца. По этой причине обработка спектров пропускания по формуле Фано оправдана настолько, насколько уместно применение функции Лоренца. Такое приближение соответствует условию малого диэлектрического контраста. Отметим, что в шкале энергий расчетный брэгговский профиль симметричен, т.е. перед обработкой спектры пропускания следует перевести из шкалы длин волн в шкалу энергий.

Чтобы получить целостную картину резонанса Фано в опалах, все экспериментальные спектры, измеренные на трех образцах с разной толщиной 0.6, 0.8, и 2.2 мм (образец  $\bar{D} = 316$  нм), были обработаны по формуле (5.8). Медленно меняющийся фон описывался полиномом (приведенная аппроксимация получена для полинома 3-й степени). Расчетные кривые, полученные по формуле Фано, прекрасно описывают экспериментальные спектры, рис. 5.3. В результате аппроксимации было установлено, что параметр Фано  $q$  монотонно возрастает от отрицательных до положительных значений при увеличении диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$  в исследованном нами диапазоне  $1.778 \leq \varepsilon_f \leq 2.053$ . Важно отметить, что результаты, полученные при обработке спектров трех образцов с разной толщиной 0.6, 0.8, и 2.2 мм, находятся в прекрасном согласии (рис. 5.8). Из рисунков 5.3 и 5.8 следует, что при обращении параметра Фано  $q$  в нуль происходит зеркальная инверсия брэгговской полосы *в шкале интенсивности*, т.е. превращение брэгговской линии непропускания (отражения) в пик брэгговского пропускания. В области этой



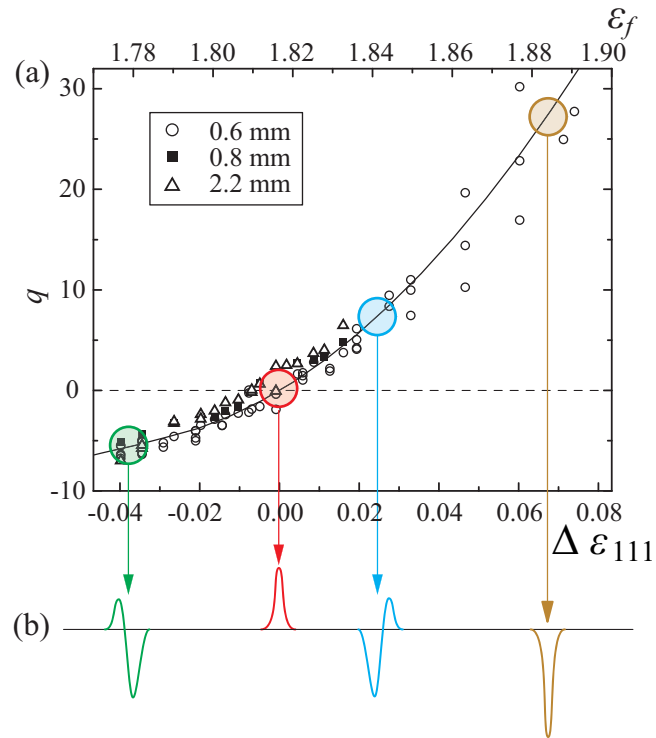


Рис. 5.8. (a) Параметр Фано  $q$  в зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ . Параметр  $q$  определен в результате фитирования спектров экстинкции по формуле Фано (5.8). Использовались спектры трех образцов разной толщины 0.6, 0.8, 2.2 мм ( $\bar{D} = 316$  нм). (b) Схематическое изображение различных форм брэгговской линии, наблюдавшиеся в спектрах пропускания опалов при изменении диэлектрической проницаемости заполнителя  $\varepsilon_f$ , т.е. при изменении параметра Фано  $q$ .

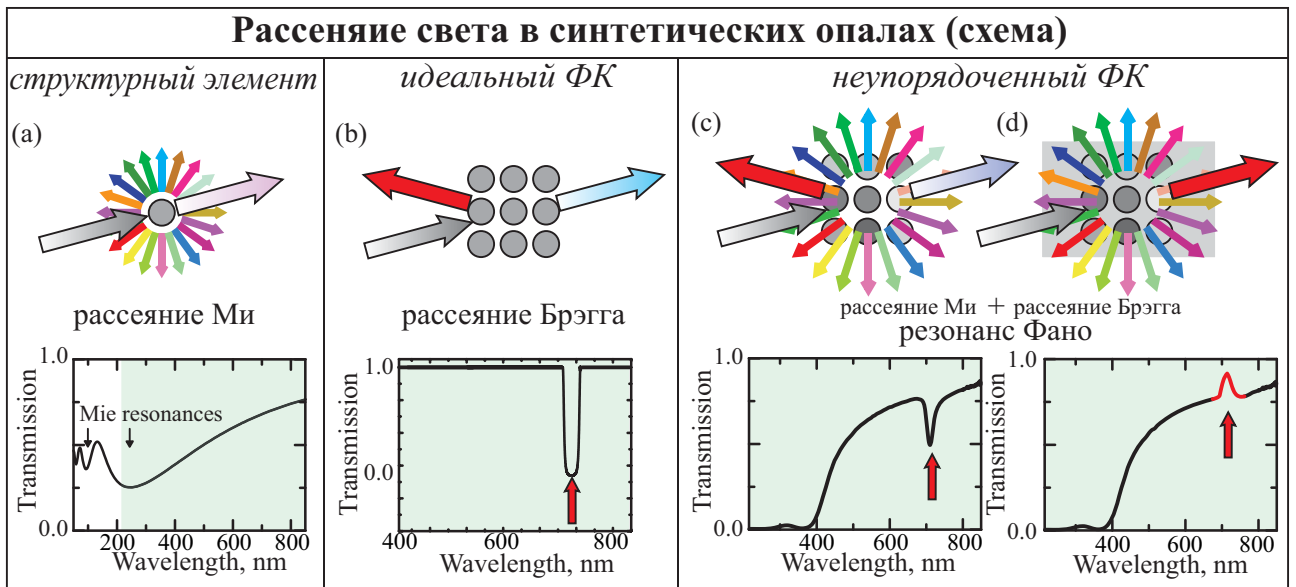


Рис. 5.9. Схематически представленная картина рассеяния света и спектры пропускания 3D ФК, состоящих из сферических частиц. (a) Рассеяние Ми на отдельной сферической частице. (b) Рассеяние Брэгга на упорядоченном ФК, образованном идентичными сферами. (c,d) Рассеяние света на неупорядоченном ФК, образованном неидентичными сферами: резонанс Фано между рассеянием Ми и Брэгга, приводящий к появлению брэгговского пика пропускания при  $\epsilon_f = \epsilon_f^0$ .

же особой точки, при переходе от  $q < 0$  к  $q > 0$ , наблюдается зеркальная инверсия профиля полосы в шкале длин волн (энергий), т.е. асимметрия контура брэгговской линии меняется на зеркальную. Таким образом, на примере спектров пропускания опалов мы наблюдали полную картину резонанса Фано, которая описывается формулой (5.8).

## 5.6. Анализ механизмов рассеяния света в неупорядоченных фотонных кристаллах

На рис. 5.9 схематически представлена картина формирования спектров пропускания ансамбля сферических частиц, образующих ФК (a), упорядоченного ФК (b) и неупорядоченного ФК (c,d). На схеме представлен случай 3D опалоподобных структур, однако точно такие же механизмы формиру-

ют оптические спектры и других ФК, состоящих из различных структурных элементов, таких как однородные слои (1D ФК), цилиндры (2D ФК) и др. В неупорядоченных ФК нарушаются условия конструктивной и деструктивной интерференции, приводящие к формированию блоховских состояний, которые определяют оптические свойства идеальной структуры. В результате помимо «деградировавших» блоховских состояний остается нескомпенсированное рассеяние со спектральными характеристиками, соответствующими рассеянию на ансамбле структурных элементов. В случае сферических структурных элементов остаточное рассеяние характеризуется медленно меняющимся спектром, определяемым теорией Ми, и играет роль фоновой компоненты в концепции резонанса Фано. При этом как фоновое, так и брэгговское рассеяние порождены одним и тем же источником, т.е. соответствующие волны должны интерферировать между собой. Эта интерференция и отвечает за наблюдаемый в экспериментальных и расчетных спектрах пропускания резонанс Фано.

В данной главе мы рассмотрели общие механизмы формирования оптических спектров ФК, проследив их шаг за шагом в последовательности:

**структурный элемент  $\Rightarrow$  упорядоченный ФК  $\Rightarrow$  неупорядоченный ФК**

Было продемонстрировано, что при переходе от упорядоченного ФК к ФК с неупорядоченностью по диэлектрической проницаемости оптические спектры претерпевают качественные изменения. В спектрах появляется остаточное рассеяние, связанное с неидентичностью сферических частиц  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. В результате узкая стоп-зона (111) оказывается наложенной на этот медленно меняющийся фон, что приводит к возникновению резонанса Фано.

## Основные результаты и выводы

1. В спектрах пропускания фотонных кристаллов на основе опалов обнаружен резонанс Фано между узкой полосой, обусловленной рассеянием Брэгга на системе плоскостей (111), и широким фоном, связанным с рассеянием Ми на неоднородных по диэлектрической проницаемости частицах  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>.
2. Параметр Фано  $q$ , определяющий форму брэгговской полосы (111) в спектрах пропускания опалов, связан с контрастом диэлектрической проницаемости  $[\varepsilon_f - \varepsilon_f^0(G_{111})]$ .
3. При нулевом контрасте ( $q = 0$ ) в спектрах возникает брэгговский пик пропускания вместо обычно наблюдаемой брэгговской полосы непропускания. Кроме того, при  $q = 0$  наблюдается зеркальная (в шкале длин волн) трансформация ассиметричной полосы (111): при  $q > 0$  более затянутым является коротковолновое крыло, а при  $q < 0$  – длинноволновое крыло.
4. Теоретическая «квази-3D» модель количественно описывает все экспериментально наблюдаемые эффекты.

Результаты данной главы излагаются в работах [236, 237].

# Заключение

Сформулируем основные результаты и выводы работы.

1. Исследованы спектры пропускания ФК опал–заполнитель в зависимости от основных параметров эксперимента (поляризация и геометрия рассеяния) и образца (толщина, контраст диэлектрической проницаемости). В спектрах впервые наблюдались стоп–зоны  $\{311\}$ ,  $\{222\}$ ,  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  и  $\{333\}$ .
2. Выполнен расчет дисперсионных зависимостей  $(hkl)$  стоп–зон в брэгговском приближении для ГЦК решетки. Установлено, что определенные из эксперимента дисперсионные зависимости  $(hkl)$  стоп–зон в низкоконтрастных опалах хорошо описываются в брэгговском приближении.
3. Разработана аналитическая модель, описывающая условия выключения  $(hkl)$  стоп–зон в трехкомпонентных ФК. Зависимость условий выключения  $(hkl)$  стоп–зон от длины вектора обратной решетки имеет квазипериодический резонансный характер. Вне резонанса любая стоп–зона может быть выключена подбором диэлектрической проницаемости одной из компонент. Для резонансной стоп–зоны такое выключение невозможно.
4. Экспериментально исследованы иммерсионные зависимости  $(hkl)$  стоп–зон в ФК опал–заполнитель. Определены значения диэлектрической проницаемости заполнителя, соответствующие выключению  $(hkl)$  стоп–зон:  $\varepsilon_{f_{111}}^0 = 1.82$ ,  $\varepsilon_{f_{200}}^0 = 1.63$ ,  $\varepsilon_{f_{220}}^0 = 1.93$ ,  $\varepsilon_{f_{311}}^0 = 1.75$ . Стоп–зона  $(222)$  не меняет своей интенсивности при изменении диэлектрической проницаемости заполнителя, т.е. относится к классу резонансных. Разработанная аналитическая модель прекрасно описывает эксперименталь-

ные данные.

5. Широкополосный фон, который наблюдается в спектрах пропускания ФК опал–заполнитель, связан с рассеянием Ми на ансамбле неидентичных квазисферических частиц  $a\text{-SiO}_2$ .
6. В спектрах пропускания опалоподобных ФК наблюдается резонанс Фано между узкой полосой, обусловленной рассеянием Брэгга на системе плоскостей (111), и широким фоном, связанным с рассеянием Ми на частицах  $a\text{-SiO}_2$ .
7. Параметр Фано  $q$ , определяющий форму брэгговской полосы (111), связан с величиной  $\Delta\varepsilon_{111} = \left[ \varepsilon_f - \varepsilon_{f111}^0 \right]$ . При  $q = 0$  ( $\Delta\varepsilon_{111} = 0$ ) в спектрах возникает брэгговский пик пропускания вместо обычно наблюдаемой полосы брэгговского отражения. Кроме того, при  $q = 0$  наблюдается зеркальная (в шкале длин волн) трансформация ассиметричной полосы (111): при  $q > 0$  более затянутым является коротковолновое крыло, а при  $q < 0$  – длинноволновое крыло.
8. Теоретическая «квази-3D» модель описывает все экспериментально наблюдаемые эффекты, включая возникновение брэгговского пика пропускания вместо полосы непропускания. Не существует такого значения  $\varepsilon_f$ , при котором брэгговская полоса полностью пропадает в спектре неупорядоченного ФК.

## Благодарности

В заключение я хочу выразить искреннюю благодарность моему научному руководителю Михаилу Феликсовичу Лимонову за всестороннюю помощь и постоянную поддержку в течение всей диссертационной работы. Я глубоко благодарен А.А. Каплянскому за поддержку, ценные замечания и доброжелательное отношение.

Я признателен всем тем, кто составляет нашу научную группу, во-первых, К.Б. Самусеву, а также А.В. Барышеву, О.А. Кавтревой, А.В. Морозу и А.К. Самусеву за помощь и плодотворные дискуссии, которые во многом способствовали улучшению данной работы.

Я благодарен А.Б. Ханикаеву и А.В. Селькину за их большой вклад в теоретическую часть диссертационной работы.

Я признателен В.Г. Голубеву, С.Ф. Каплану, В.А. Кособукину, Д.А. Курдюкову, А.Б. Певцов и А.П. Скворцову за дискуссии, советы и поддержку.

Считаю своим приятным долгом выразить благодарность М.И. Самойловичу за предоставленные образцы синтетических опалов, а также Г.Н. Юшину и А.В. Анкудинову за характеристику образцов, исследованных в диссертационной работе, методами электронной и атомно-силовой микроскопии.

Я благодарен всему коллективу лаборатории спектроскопии твердого тела ФТИ им. А.Ф. Иоффе за товарищеское отношение и всестороннюю помощь при выполнении настоящей работы.

Отдельной строкой я хочу выразить сердечную благодарность моей жене Елене за любовь и поддержку, которая придавала мне силы и терпение во время выполнения диссертационной работы. Я глубоко благодарен моему отцу Валерию Васильевичу за советы, поддержку, обсуждение, наставления, помощь, заботу.

# Приложение А

## Метод плоских волн

В данном приложении изложен метод численного решения уравнений Максвелла для периодической структуры (т.е. для идеального ФК) с помощью разложения по базису плоских волн (plane wave expansion method) [27, 28, 175, 177]. В результате вычисляются собственные состояния электромагнитного поля, распространяющегося в периодической структуре ФК. Этот метод уже давно применяется для расчета зонной структуры электронов в твердом теле [238].

Алгоритм метода плоских волн предполагает последовательное решение следующих задач: (i) Разделение координатной и временной переменных в уравнениях Максвелла. (ii) Сведение дифференциальных уравнений (с координатной переменной) к линейной алгебраической задаче, благодаря переходу к базису плоских волн. (iii) Сведение бесконечномерной алгебраической задачи к конечномерной, путем пренебрежения малыми членами, которые соответствуют векторам обратной решетки с большим модулем (iv) Решение алгебраической задачи на собственные числа и собственные вектора.

Последнюю задачу можно решать двумя способами. Первый способ [27] предполагает нахождение матрицы в явном виде. Второй [176] – сводится к поиску нескольких наименьших собственных значений без нахождения матрицы в явном виде. В свою очередь, задача о поиске «минимальных пар» (пара – собственное значение и вектор) сводится к задаче о нахождении минимума отношения Рэлея, которую можно решать итерационными методами, например, алгоритмом сопряженных градиентов [239, 240].

Отметим, что впервые метод плоских волн на случай ФК был адаптирован в приближении скалярных волн [241]. Однако последующие расчеты [27, 175]



показали, что учет векторной природы электромагнитного поля существенно увеличивает точность решения.

## А.1. Сведение уравнений Максвелла к линейной алгебраической задаче

Запишем уравнения Максвелла для случая отсутствия зарядов и токов [173]

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} = 0 \quad , \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = 0 \quad , \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \mathbf{D} = 0 \quad , \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \mathbf{H} = 0 \quad , \quad (\text{A.4})$$

а также материальные уравнения:

$$\mathbf{D} = \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{B} = \mu(\mathbf{r})\mathbf{H}. \quad (\text{A.6})$$

Разделив переменные, получим волновые уравнения для электрического поля

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} \quad (\text{A.7})$$

и магнитного поля

$$\frac{1}{\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}, \quad (\text{A.8})$$

где  $\omega$  - частота электромагнитной волны. Уравнение (A.7) и (A.8) является уравнениями на собственные числа. В случае, когда  $\mu$  не зависит от координаты (в оптике обычно  $\mu = 1$ ), уравнение (A.8) является уравнением на собственные числа с эрмитовым оператором, поэтому далее будем рассматривать именно это уравнение. Диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(\mathbf{r})$  у ФК

обладает трансляционной симметрией. Соответственно, дифференциальный оператор в уравнении (A.8) также обладает трансляционной симметрией, и, следовательно, можно применить векторную теорему Блоха (вывод которой аналогичен выводу теоремы Блоха для скалярных операторов - см., напр., [233]), согласно которой решение записывается в виде:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.9})$$

причем функция  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  – обладает той же самой трансляционной симметрией, что и дифференциальный оператор. Подставляя (A.9) в (A.8) получаем

$$(\nabla + i\mathbf{k}) \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}(\nabla + i\mathbf{k}) \times \mathbf{H}_{\mathbf{k}} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{H}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.10})$$

Так как функция  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  обладает трансляционной симметрией решетки, то её можно разложить в ряд Фурье, который определим как

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{f}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (\text{A.11})$$

где коэффициенты Фурье выражаются по формуле:

$$\mathbf{f}_{\mathbf{G}} = \frac{1}{V_{cell}} \iiint \mathbf{F}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (\text{A.12})$$

здесь  $V_{cell}$  – объем ячейки,  $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$  – вектор обратной решетки с базисными векторами  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  и  $\mathbf{b}_3$ . Разложим вектор  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$  под оператором (A.10) в ряд Фурье

$$\sum_{\mathbf{g}} (\nabla + i\mathbf{k}) \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} e^{i\mathbf{g}\mathbf{k}} (i\mathbf{g} + i\mathbf{k}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{g}} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{H}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.13})$$

Далее у фурье-компонент будем опускать индекс  $\mathbf{k}$ . Найдем значение коэффициента Фурье от правой и левой части (A.13)

$$\sum_{\mathbf{g}} (i\mathbf{g}' + i\mathbf{k}) \times \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}'-\mathbf{g}} (i\mathbf{g} + i\mathbf{k}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{g}} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{h}_{\mathbf{g}'}, \quad (\text{A.14})$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}'-\mathbf{g}} = \frac{1}{V_{cell}} \iiint d\mathbf{r} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} e^{i(\mathbf{g}'-\mathbf{g})\mathbf{r}} \quad (\text{A.15})$$

– фурье-компонента обратной диэлектрической проницаемости. Уравнение (A.14) можно переписать в матричном виде:

$$\hat{\mathbf{M}}\mathbf{h} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{h}, \quad (\text{A.16})$$

где элементы матрицы-оператора представимы как

$$\hat{\mathbf{M}}_{\mathbf{g}',\mathbf{g}} = -(\mathbf{g}' + \mathbf{k}) \times \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}'-\mathbf{g}}(\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times . \quad (\text{A.17})$$

Далее будем решать секулярное уравнение (A.16) на собственные числа и вектора, ограничиваясь разложением по  $N^3$  векторов обратной решетки.

Стоит отметить, что поиск собственных значений и собственных чисел оператора Максвелла для блоховской амплитуды магнитного поля, заданного через коэффициенты Фурье (A.16), усложняется тем, что этот оператор не является положительно определенным. Чтобы это показать, обратимся к уравнению Максвелла для дивергенции магнитного поля (A.4). После применения теоремы Блоха и разложения в ряд Фурье, это уравнение примет следующий вид:

$$(\mathbf{g} + \mathbf{k})\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}} = 0. \quad (\text{A.18})$$

Если не принимать во внимание это ограничение, то можно выбрать  $N^3$  векторов с тривиальным собственным решением. Покажем как можно построить эти вектора. Выберем произвольный вектор с гармоникой  $\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}$ , параллельной вектору  $(\mathbf{g} + \mathbf{k})$ , а остальными гармониками равными нулю. Векторное произведение в матрице-операторе (A.17) обратит такой вектор в нуль. То есть, оператор  $\hat{\mathbf{M}}$  имеет собственные числа равные нулю для линейно независимых векторов, число которых равно  $N^3$ . Поэтому для корректного решения задачи необходимо учитывать условие (A.18). Для каждого вектора обратной

решетки в разложении Фурье выберем двумерный базис  $\mathbf{u}_g, \mathbf{v}_g$  такой, что эти два вектора будут ортогональны вектору  $(\mathbf{g} + \mathbf{k})$ . Выберем вектора таким образом, чтобы  $\mathbf{u}_g, \mathbf{v}_g$  и  $(\mathbf{g} + \mathbf{k})$  составляли правую тройку. Тогда векторную амплитуду фурье-компоненты можно записать в виде линейной комбинации

$$\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}} = \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \mathbf{u}_g + \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \mathbf{v}_g. \quad (\text{A.19})$$

Т.е.

$$\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}} \mathbf{U}_{\mathbf{k},\mathbf{g}} \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^{2D}, \quad (\text{A.20})$$

где

$$\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^{2D} = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \\ \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \end{pmatrix}, \quad (\text{A.21})$$

$$\mathbf{U}_{\mathbf{k},\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{g,x} & \mathbf{v}_{g,x} \\ \mathbf{u}_{g,y} & \mathbf{v}_{g,y} \\ \mathbf{u}_{g,z} & \mathbf{v}_{g,z} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.22})$$

При этом обратная в обобщенном смысле матрица к матрице  $\mathbf{U}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}$  будет равна  $\mathbf{U}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^T$ , так как вектора  $\mathbf{u}_g$  и  $\mathbf{v}_g$  ортогональны друг другу:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_{g,x} & \mathbf{u}_{g,y} & \mathbf{u}_{g,z} \\ \mathbf{v}_{g,x} & \mathbf{v}_{g,y} & \mathbf{v}_{g,z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{g,x} & \mathbf{v}_{g,x} \\ \mathbf{u}_{g,y} & \mathbf{v}_{g,y} \\ \mathbf{u}_{g,z} & \mathbf{v}_{g,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

В результате получаем окончательный вид задачи на собственные значения:

$$\mathbf{U}_{\mathbf{k}}^T \hat{\mathbf{M}} \mathbf{U}_{\mathbf{k}} \mathbf{h}_{\mathbf{k}}^{2D} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{h}_{\mathbf{k}}^{2D}, \quad (\text{A.24})$$

где  $\mathbf{U}_{\mathbf{k}}$  – матрица  $2N \times 3N$  с блоком (A.22). При этом оператор (A.24) является эрмитовым, так как оператор  $\hat{\mathbf{M}}$  – эрмитов.

## А.2. Два метода решения задачи на собственные числа

Первый способ решения линейной задачи на собственные числа и вектора (А.24) состоит в вычислении матрицы  $\mathbf{U}_k^T \hat{\mathbf{M}} \mathbf{U}_k$  в явном виде. Таким методом следовали авторы работ [27, 28, 175]. Отметим, что фурье-компоненту диэлектрической проницаемости можно вычислить численно, а в некоторых случаях и аналитически, как, например, для случая сферических рассеивателей (см. разд. 4.2.1). Собственные числа и собственные значения такой матрицы вычисляются с помощью QR-алгоритма или другим численным методом [239]. Этот способ требует хранения в памяти всей матрицы, при этом скорость нахождения собственных значений  $\sim O(PN^6)$ , где  $P$  – число итераций, а  $N^3$  – число плоских волн по которым выполняется разложение. В работах [176, 177] был использован подход, применявшийся ранее для расчетов электронных состояний [242, 243], который и будет обсуждаться далее. Идея заключается в том, чтобы работать попеременно в двух базисах: обычном базисе пространственных координат и базисе плоских волн. Переход от одного базиса к другому выполняется с помощью дискретного преобразования Фурье (ДПФ), а также обратного преобразования. В настоящее время разработаны быстрые алгоритмы вычисления ДПФ (фактически за счет «расстановки скобок») производительностью  $\sim O(N^3 \log(N^3))$  [244]. Известно, что в базисе плоских волн оператор дифференцирования имеет диагональный вид, в то время как оператор умножения на обратную диэлектрическую проницаемость имеет диагональный вид в базисе пространственных координат. Предложенный метод предполагает вычислять действие оператора (А.10) на вектор в несколько этапов: (i) вычисляется результат действия ротора на вектор, который изначально задается в базисе плоских волн; (ii) вектор преобразуется к базису пространственных координат с помощью быстрого обратного ДПФ; (iii) полученный вектор умножается на обратную диэлектрическую

проницаемость; (iv) с помощью быстрого ДПФ вектор преобразуется обратно к базису плоских волн; (v) вычисляется действие второго ротора. Таким образом, дифференциальный оператор и соответствующая задача на собственные числа может быть записана в матричном виде следующим образом:

$$-\mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{E}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{h} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{h}, \quad (\text{A.25})$$

где  $\mathbf{V}$  – блочно-диагональная матрица с блоком

$$V_{ii} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -g_z - k_z & g_y + k_y \\ g_z + k_z & 0 & -g_x - k_x \\ -g_y - k_y & g_x + k_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

$\mathbf{T}$  – матрица ДПФ,  $T_{ts} = \exp(2\pi\frac{its}{N})$ ,  $\mathbf{E}$  – блочно-диагональная матрица отвечающая за эффективную обратную диэлектрическую проницаемость (см. далее. А.3) с блоком

$$E_{ii} = \frac{1}{\langle \varepsilon_i \rangle} I + \left( \left\langle \frac{1}{\varepsilon_i} \right\rangle - \frac{1}{\langle \varepsilon_i \rangle} \right) \mathbf{n}_i \mathbf{n}_i^T, \quad (\text{A.27})$$

где  $\mathbf{n}$  – направление градиента диэлектрической проницаемости.

Можно убедиться в том, что полученная матрица-оператор является эрмитовой. Действительно, так как  $\mathbf{V}$  – кососимметрическая матрица,  $\mathbf{E}$  – симметрическая,  $\mathbf{T}^* = \frac{1}{N^3}\mathbf{T}^{-1}$  и  $(\mathbf{T}^{-1})^* = N^3\mathbf{T}$ , получаем:

$$(\mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{E}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V})^* = \mathbf{V}^T \frac{1}{N^3} \mathbf{T} \mathbf{E} N^3 \mathbf{T}^{-1} \mathbf{V}^T = \mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{E}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}. \quad (\text{A.28})$$

И, наконец, применяя условие поперечности (А.18) получаем

$$\mathbf{U}_k^T \mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{E}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U}_k \mathbf{h}_k = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{h}_k. \quad (\text{A.29})$$

Именно эту задачу на собственные числа мы и будем решать.

### А.3. Эффективная диэлектрическая проницаемость

В данном разделе мы будем придерживаться подхода, предложенного в работах [176, 177, 245]. Вычисление оператора (А.10), действующего на вектор  $\mathbf{H}_k$ , подразумевает умножение на обратную диэлектрическую проницаемость. Поскольку в численном расчете мы имеем дело дискретным представлениям поля, возникает вопрос, что следует дискретизировать диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon(\mathbf{r})$ ? Для ответа на этот вопрос вернемся к тому, каким образом этот параметр появляется в формуле (А.10). При объединении двух уравнений Максвелла, содержащих роторы, необходимо преобразовать вектор электрического смещения к электрическому вектору. Для вычисления действия оператора (А.10) на вектор мы разбиваем кристаллическую ячейку на  $N^3$  малых субъячеек, подобных кристаллической ячейке по геометрической форме.

Определим вектор, который следует умножить на обратную диэлектрическую проницаемость

$$(\nabla + i\mathbf{k}) \times \mathbf{H}_k = (\nabla + i\mathbf{k}) \times (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{H}(\mathbf{r})) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = ie^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\omega}{c} \mathbf{D}(\mathbf{r}). \quad (\text{А.30})$$

Таким образом, учитывая уравнения Максвелла с роторами, получаем условие на эффективную диэлектрическую проницаемость  $\varepsilon_{eff}(\mathbf{r})$ :

$$\frac{1}{\varepsilon_{eff}(\mathbf{r})} \left\langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\omega}{c} \mathbf{D}(\mathbf{r}) \right\rangle = \left\langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\omega}{c} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \right\rangle, \quad (\text{А.31})$$

где усреднение берется по малой субъячейке. Вынесем  $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  из-под операции усреднения. Это можно сделать, если положить

$$k\Delta r \ll 2\pi, \quad (\text{А.32})$$

здесь  $\Delta r$  – модуль любого смещения вектора  $\mathbf{r}$  в пределах малой ячейки, а  $k$  – модуль волнового вектора  $\mathbf{k}$ . Можно написать аналогичное, но более простое выражение, учитывая, что максимальное значение квазиволнового вектора

приходится на границу зоны Бриллюэна:

$$\frac{\pi 2a}{a N} \ll 2\pi, \quad (\text{A.33})$$

где  $a$  – модуль вектора решетки,  $N$  – число элементов разбиения. В результате рассматриваемое условие можно окончательно переписать в виде:

$$N \gg 1. \quad (\text{A.34})$$

Сделаем еще одно допущение. Предположим, что внутри малой субъячейки для всех точек вектор градиента диэлектрической проницаемости практически не меняет направление. Т.е. существует выделенное направление, вдоль которого изменяется диэлектрическая проницаемость. Тем самым мы аппроксимируем субъячейку слоистой средой. Основываясь на этих двух приближениях, найдем выражение для эффективной диэлектрической проницаемости.

Значение электрического вектора  $\mathbf{E}$  и вектора электрического смещения  $\mathbf{D}$ , усредненные по малому объему субъячейки, можно выразить по формулам:

$$\langle \mathbf{E} \rangle = \frac{1}{M} \sum \mathbf{E}_m, \quad (\text{A.35})$$

$$\langle \mathbf{D} \rangle = \frac{1}{M} \sum \mathbf{D}_m, \quad (\text{A.36})$$

где  $M$  – количество субсубъячеек, на которые разбивается субъячейка. Теперь выразим  $\langle \mathbf{E} \rangle$  через  $\langle \mathbf{D} \rangle$ . Компонента электрического смещения, нормальная к слоям внутри субъячейки, будет непрерывна на границах слоев согласно граничным условиям уравнений Максвелла. Будем считать ее постоянной во всех точках малой ячейки  $\langle \mathbf{D}^{(n)} \rangle = \mathbf{D}_m^{(n)}$ , подставим это значение в (A.35)

$$\langle \mathbf{E}^{(n)} \rangle = \frac{1}{M} \sum \mathbf{E}_m^{(n)} = \frac{1}{M} \sum \frac{1}{\varepsilon_m} \mathbf{D}_m^{(n)} = \mathbf{D}^{(n)} \frac{1}{M} \sum \frac{1}{\varepsilon_m} = \mathbf{D}^{(n)} \left\langle \frac{1}{\varepsilon} \right\rangle. \quad (\text{A.37})$$

С другой стороны, согласно граничным условиям, тангенциальная компонента электрического вектора будет непрерывной на границах между слоями,



также будем считать ее постоянной внутри малой ячейки.  $\langle \mathbf{E}^{(\tau)} \rangle = \mathbf{E}_m^{(\tau)}$ . Подставим это выражение в (A.36)

$$\langle \mathbf{D}^{(\tau)} \rangle = \frac{1}{M} \sum \mathbf{D}_m^{(\tau)} = \frac{1}{M} \sum \varepsilon_m \mathbf{E}_m^{(\tau)} = \mathbf{E}^{(\tau)} \frac{1}{M} \sum \varepsilon_m = \mathbf{E}^{(\tau)} \langle \varepsilon \rangle. \quad (\text{A.38})$$

Предположение, что нормальная компонента вектора электрического смещения и тангенциальная компонента электрического вектора практически не меняются внутри субъячейки, неявным образом связано с выбором числа разбиения таким образом, что субъячейку можно аппроксимировать слоями.

Итак, эффективная обратная диэлектрическая проницаемость может быть представлена тензором

$$\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)_{eff} = \hat{\varepsilon} = \left\langle \frac{1}{\varepsilon} \right\rangle \mathbf{nn}^T + \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) = \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \mathbf{I} + \left( \left\langle \frac{1}{\varepsilon} \right\rangle - \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \right) \mathbf{nn}^T, \quad (\text{A.39})$$

где,  $\mathbf{n}$  – вектор нормали к слоям. Вектор нормали к слоям, можно вычислить через среднее значение градиента

$$\langle \mathbf{g} \rangle = \frac{1}{M} \sum \mathbf{g}_m \quad (\text{A.40})$$

по формуле

$$\mathbf{n} = \frac{\langle \mathbf{g} \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{g} \rangle^T \langle \mathbf{g} \rangle}}. \quad (\text{A.41})$$

#### A.4. Алгоритм решения задачи на собственные значения

Рассматриваемая группа алгоритмов [176, 177, 242, 243] не предполагает хранения матрицы-оператора в явном виде, что позволяет проводить вычисления для больших значений  $N^3$ . Такие методы описаны, например, в книге [239]. Далее мы будем рассматривать реализацию алгоритма поиска собственных значений с помощью минимизации отношения Рэлея методом сопряженных градиентов (conjugate gradient method), основываясь на работе [177].

### А.4.1. Метод сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов [239, 240] – это итерационный метод, позволяющий находить решение системы линейных уравнений с положительно определенной вещественной симметрической матрицей

$$2\mathbf{Ax} + \mathbf{b} = 0. \quad (\text{A.42})$$

Для нас важно то обстоятельство, что задача (A.42) эквивалентна поиску минимума квадратичной формы

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{x}^T \mathbf{b}. \quad (\text{A.43})$$

Метод сопряженных градиентов основан на методе наискорейшего спуска [239, 240]. При этом последующие направления спуска выбираются таким образом, чтобы они дополнительно были бы сопряжены («ортогональны») относительно матрицы  $\mathbf{A}$ , ко всем предыдущим направлениям, по которым осуществлялся спуск. В этом случае алгоритм находит минимум (A.43) за количество итераций, не превосходящее размерность матрицы. Этот метод можно оптимизировать. Если собственные числа матрицы  $\mathbf{A}$  имеют большой разброс, то изоуровни функции будут представлять собой сильно вытянутые гиперэллипсоиды. Для большинства пробных точек (векторов)  $\mathbf{x}_0$  направление наискорейшего спуска (антиградиент) будет иметь направление, проходящее далеко от центра. Напротив, если собственные числа матрицы близки друг к другу, то изоуровни будут близки к гиперсферам, поэтому градиент будет иметь направление, проходящее вблизи от центра. Следовательно, минимум будет найден за небольшое число итераций. Введем вспомогательную матрицу-прекондиционер  $\mathbf{C}$  (preconditioner; в русском переводе встречается термин переобуславливатель [240]), которая будет преобразовывать матрицу  $\mathbf{A}$  к некоей матрице, собственные числа которой близки друг к другу. Оптимальный выбор матрицы-прекондиционера – это матрица, обратная к  $\mathbf{A}$ .

Однако, если известна обратная матрица, то известно и решение задач (A.42) и (A.43). Поэтому в качестве прекондicionера используют матрицу, обратную к матрице, похожей на  $\mathbf{A}$ , например диагональ матрицы  $\mathbf{A}$ . Умножим уравнение (A.42) на прекондicionер слева. В результате этого получим эквивалентное уравнение

$$2\mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{C}\mathbf{b} = 0, \quad (\text{A.44})$$

после чего будем решать задачу о минимизации соответствующей квадратичной формы. Однако нет никаких гарантий, что матрица  $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}$  окажется симметрической и в общем случае алгоритм сопряженных градиентов может работать некорректно. Тем не менее, в нашем случае этой проблемы не возникает. Покажем это, выполнив разложение матриц на факторы Холецкого [239].

Согласно теореме о разложении Холецкого, положительно определенную симметрическую матрицу  $\mathbf{A}$  можно однозначно представить в виде  $\mathbf{A} = \mathbf{R}^T\mathbf{R}$ , где  $\mathbf{R}$  верхняя треугольная матрица с положительными элементами на диагонали. Обратная матрица от верхней (нижней) треугольной матрицы тоже верхняя (нижняя) треугольная матрица.

Так как  $\mathbf{R}^T\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}^{-1T} = \mathbf{I}$ , то  $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}^{-1T}$  – разложение, симметрическое разложению Холецкого по нижней треугольной матрице, которое тоже однозначно.

Разложим матрицу  $\mathbf{A}$  на факторы Холецкого

$$\mathbf{A} = \mathbf{R}^T\mathbf{R}. \quad (\text{A.45})$$

Если  $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{A}$ , то  $\mathbf{C} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}^{-1T}$ . В случае когда  $\mathbf{C}^{-1} \approx \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{C} = \tilde{\mathbf{R}}\tilde{\mathbf{R}}^T$  соответственно  $\tilde{\mathbf{R}} \approx \mathbf{R}^{-1}$ . Поэтому вместо умножения на обратную матрицу можно «обернуть» матрицу  $\mathbf{A}$ . В результате чего получим  $\tilde{\mathbf{R}}^T\mathbf{A}\tilde{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{R}}^T\mathbf{R}^T\mathbf{R}\tilde{\mathbf{R}} \approx \mathbf{I}$ . Можно показать, что  $\tilde{\mathbf{R}}^T\mathbf{A}\tilde{\mathbf{R}}$  симметрическая, положительно определенная матрица.

Помножим уравнение (A.42) слева на  $\tilde{\mathbf{R}}^T$  и, вставив единичную матрицу  $\tilde{\mathbf{R}}\tilde{\mathbf{R}}^{-1} = \mathbf{I}$  между  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{x}$ , получим

$$2\tilde{\mathbf{R}}^T \mathbf{A} \tilde{\mathbf{R}} \tilde{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{R}}^T \mathbf{b} = 0. \quad (\text{A.46})$$

Таким образом, система уравнений (A.42) эквивалентна лучше обусловленной системе уравнений

$$2\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{b}} = 0, \quad (\text{A.47})$$

где  $\tilde{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{R}}^T \mathbf{A} \tilde{\mathbf{R}}$ ,  $\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{x}$ ,  $\tilde{\mathbf{b}} = \tilde{\mathbf{R}}^T \mathbf{b}$ .

Оказывается, что для поиска минимума (A.43) достаточно проводить вычисления действия матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{C}$  на произвольный вектор. В результате, одну итерацию для алгоритма сопряженных градиентов с прекондиционером можно выполнить в четыре приема:

$$(i) \quad \gamma_k = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{C} \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{C} \mathbf{g}_{k-1}}, \quad (\text{A.48})$$

$$(ii) \quad \mathbf{p}_k = \mathbf{C} \mathbf{g}_k + \gamma_k \mathbf{p}_{k-1}, \quad (\text{A.49})$$

$$(iii) \quad \alpha_k = -\frac{\mathbf{p}_k^T \mathbf{g}_k}{2\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}, \quad (\text{A.50})$$

$$(iv) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k, \quad (\text{A.51})$$

где  $\mathbf{g}_k = 2\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x}_k + \tilde{\mathbf{b}}$  – вектор градиента на  $k$ -й итерации, а  $\mathbf{p}_k$  – направление смещения в новый пробный вектор. На первом шаге  $\gamma_1 = 0$ .

Таким образом, шаги (i)-(iv) представляют собой алгоритм сопряженных градиентов для поиска минимума квадратичной формы.

#### **A.4.2. Поиск собственного вектора с минимальным собственным значением**

Рассмотрим задачу на собственные значения эрмитовой положительно определенной матрицы:

$$\mathbf{M}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}, \quad (\text{A.52})$$

Домножим (A.52) справа на сопряженный вектор

$$\mathbf{x}^* \mathbf{M} \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}^* \mathbf{x} \quad (\text{A.53})$$

после чего будем исследовать значение  $\lambda(\mathbf{x})$

$$R(\mathbf{x}) = \lambda(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^* \mathbf{M} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^* \mathbf{x}}. \quad (\text{A.54})$$

Это выражение носит название отношения Рэля. Свойства положительно определенной матрицы  $\mathbf{M}$  позволяют заключить, что числитель будет вещественным положительным числом, т.е. функция  $R(\mathbf{x})$  имеет вещественные положительные значения.

Можно показать, что минимальное значение отношения Рэля (A.54) достигается, когда вектор  $\mathbf{x}$  равен собственному вектору, соответствующему минимальному собственному значению. Максимальное значение отношения Рэля достигается, когда вектор  $\mathbf{x}$  равен собственному вектору, соответствующему максимальному собственному значению. Таким образом, поиск пары собственных значений может быть осуществлен минимизацией отношения Рэля. Стоит отметить, что  $R(\mathbf{x})$  содержит только один минимум – наименьшее значение.

### **A.4.3. Аппроксимация отношения Рэля квадратичной формой**

Будим искать минимум отношения Рэля методом сопряженных градиентов. Для этого в окрестности пробной точки функцию  $R(\mathbf{x})$  аппроксимируем квадратичной формой. Предположим, что мы имеем дело с вещественными числами. Разложим отношение Рэля (в окрестности заданной точки  $\mathbf{x}'$ ) в ряд Тейлора, включая вторую степень:

$$R(\mathbf{x}) \approx c + (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T \mathbf{b} + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.55})$$

где вектор

$$\mathbf{b} = \nabla R(\mathbf{x}') \quad (\text{A.56})$$

– градиент функции  $R(\mathbf{x})$  в точке  $\mathbf{x}'$ ,

$$\mathbf{A} = \nabla \nabla^T R(\mathbf{x}') \quad (\text{A.57})$$

– матрица-оператор Гессе в точке  $\mathbf{x}'$ ,

$$c = R(\mathbf{x}') \quad (\text{A.58})$$

– значение функции в точке  $\mathbf{x}'$ . Стоит отметить, что в случае комплексных чисел отношение Рэля произвольной матрицы может не являться регулярной функцией. Следовательно, градиент функции  $R(\mathbf{x})$  не определен. Однако можно показать, что в случае эрмитовых матриц, функция  $R(\mathbf{x})$  регулярна и можно использовать все формулы, приведенные в данном разделе.

Приведем (A.55) к виду (A.43).

$$R(\mathbf{x}) \approx c' + \mathbf{x}^T \mathbf{b}' + \mathbf{x}^T \mathbf{A}' \mathbf{x}, \quad (\text{A.59})$$

где

$$\mathbf{A}' = \frac{1}{2} \mathbf{A}, \quad (\text{A.60})$$

$$\mathbf{b}' \equiv \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}', \quad (\text{A.61})$$

$$\mathbf{c}' \equiv c - \mathbf{x}'^T \mathbf{b} + \frac{1}{2} \mathbf{x}'^T \mathbf{A} \mathbf{x}'. \quad (\text{A.62})$$

Выражение (A.59) позволяет выполнить аппроксимацию отношения Рэля квадратичной формой, т.е. искать минимум отношения Рэля методом сопряженных градиентов.

#### **А.4.4. Метод сопряженных градиентов для минимизации отношения Рэля**

Найдем минимум отношения Рэля с помощью метода сопряженных градиентов. На каждом шаге итерации будем выполнять квадратичную аппроксимацию (A.59). Вычислим градиент для этой квадратичной формы:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}') = 2\mathbf{A}'\mathbf{x}' + \mathbf{b}' = \mathbf{A}\mathbf{x}' + \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}' = \nabla R(\mathbf{x}'), \quad (\text{A.63})$$

т.е., учитывая (A.56), градиенты функции  $R(\mathbf{x})$  и её квадратичной аппроксимации совпадают. Также можно показать, что

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}') = \nabla R(\mathbf{x}) = 2\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}^T}{(\mathbf{x}^T\mathbf{x})}\right)\frac{\mathbf{M}\mathbf{x}}{(\mathbf{x}^T\mathbf{x})}. \quad (\text{A.64})$$

Далее, выпишем шаги алгоритма сопряженных градиентов (i)-(iv) в случае минимизации квадратичной аппроксимации отношения Рэлея. Итак, для определения направления спуска можно использовать формулы

$$(i)\gamma_k = \frac{(\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})^T \mathbf{C}\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{C}\mathbf{g}_{k-1}} \quad (\text{A.65})$$

или

$$(i')\gamma_k = \frac{(\mathbf{g}_k)^T \mathbf{C}\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{C}\mathbf{g}_{k-1}} \quad (\text{A.66})$$

– подходы предложенные Полаком и Рибьером (Polak-Ribière) и Флетчером и Ривсом (Fletcher-Reeves) соответственно.

$$(ii)\mathbf{p}_k = \mathbf{C}\mathbf{g}_k + \gamma_k\mathbf{p}_{k-1}. \quad (\text{A.67})$$

Для нахождения расстояния, на которое следует сместиться, вычислим минимум функции  $R(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{p})$

$$(iii)\alpha_{\min} = \frac{\mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{x}\mathbf{p}^*\mathbf{p} - \mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{p}\mathbf{x}^*\mathbf{x} - \sqrt{D}}{(\mathbf{p}^*\mathbf{p}(\mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{p}) - (\mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{p})\mathbf{p}^*\mathbf{p})}, \quad (\text{A.68})$$

где

$$\begin{aligned} D = & (\mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{x}\mathbf{p}^*\mathbf{p} - \mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{p}\mathbf{x}^*\mathbf{x})^2 - \\ & - (\mathbf{p}^*\mathbf{p}(\mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{p}) - (\mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{p})\mathbf{p}^*\mathbf{p}) \times \\ & \times ((\mathbf{p}^*\mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{p})\mathbf{x}^*\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\mathbf{M}\mathbf{x}(\mathbf{p}^*\mathbf{x} + \mathbf{x}^*\mathbf{p})). \end{aligned} \quad (\text{A.69})$$

После чего, как и в случае минимизации квадратичной формы сместимся в новую точку:

$$(iv)\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{p}_k. \quad (\text{A.70})$$

В результате мы нашли новые шаги (i)-(iv) алгоритма сопряженных градиентов, адаптированного на случай минимизации отношения Рэлея.

#### А.4.5. Прекондиционер

Как было указано выше, в оптимальном случае прекондиционер должен быть обратной матрицей к (А.29). Однако матрица  $\mathbf{V}$  является сингулярной, т.е. матрицы, обратной ей не существует. Рассмотрим блок (А.26). Он представляет собой векторное произведение в матричном виде. Если мы предположим, что вектор до действия матрицы был ортогонален вектору  $\mathbf{g} + \mathbf{k}$ , то его можно найти с помощью матрицы

$$\tilde{\mathbf{V}}_{ii} \equiv \frac{1}{|\mathbf{g} - \mathbf{k}|^2} \begin{pmatrix} 0 & g_z + k_z & -g_y - k_y \\ -g_z - k_z & 0 & g_x + k_x \\ g_y + k_y & -g_x - k_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{А.71})$$

В силу поперечности электромагнитных колебаний, Фурье-компоненты вектора магнитного поля перпендикулярны вектору  $\mathbf{g} + \mathbf{k}$  изначально. Этого нельзя сказать про вектор, на который действует матрица  $\mathbf{V}$  после преобразований Фурье и умножения на матрицу  $\mathbf{E}$ . Тем не менее, как и в работе [177] будем использовать матрицу с блоком (А.71) в качестве обратной матрицы. Этот прекондиционер использовался при вычислениях.

#### А.4.6. Понижение размерности задачи

Итак, метод сопряженных градиентов позволяют найти минимальное (максимальное) собственное значение и соответствующий собственный вектор. После того, как собственный вектор и собственное значение найдены, эту пару необходимо каким-либо образом исключить из задачи, что в силу ортогональности собственных векторов приводит к понижению ее размерности, т.е. делает ее более «плоской». Для обозначения такой процедуры в англоязычной литературе используется термин deflation т.е. «уплощение». Рассмотрим метод Виеландта [246] – метод понижения размерности, который требует знание



всего лишь собственного вектора и порядка величины максимального или минимального собственного значения.

Пусть мы знаем экстремальную пару - собственный вектор и собственное значение (неважно, максимальное или минимальное) некоторой задачи

$$\mathbf{A}\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}. \quad (\text{A.72})$$

Тогда следующая экстремальная пара будет первой экстремальной парой для матрицы

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \sigma\mathbf{y}_1\mathbf{y}_1^*, \quad (\text{A.73})$$

где  $\mathbf{y}_1$  - экстремальный собственный вектор,  $\sigma$  - параметр сдвига собственного значения.

Напишем формулу для вычисления произведения произвольного вектора  $\mathbf{x}$  на новую матрицу

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \sigma\mathbf{y}_1\mathbf{y}_1^*. \quad (\text{A.74})$$

Таким образом, с помощью изложенных алгоритмов можно найти минимальное собственное значение и собственный вектор. После чего, с помощью метода Виеландта, преобразуем исходную матрицу так, чтобы минимальным было уже следующее наименьшее собственное значение. Таким образом, мы имеем возможность находить несколько пар с наименьшими собственными значениями и собственными векторами.

## Заключение

В Приложении изложен метод разложения по плоским волнам, а также описан метод для непосредственного вычисления фотонной зонной структуры. С помощью этого метода в Главе 5 проводились вычисления ширины и положения стоп-зоны (111). Кроме того, основываясь на результатах насто-

ящего Приложения, в Приложении Б анализируются условия выключения различных  $(hkl)$  стоп-зон.

## Приложение Б

# Теоретический анализ ширины фотонной СТОП-ЗОНЫ

### Б.1. Двухволновое приближение

В книге [172] излагается метод анализа ширины фотонной стоп-зоны на основе двухволнового приближения. В основе метода - анализ разложения электрической компоненты поля по плоским волнам. Однако, как было указано в приложении А, в случае электрической задачи на собственные числа является неэрмитовой. Приведем подобные вычисления для магнитного вектора  $\mathbf{H}$  с учетом поляризации света. Уравнение (А.24) представляет собой задачу в базисе плоских волн.

Рассмотрим амплитуду фурье-компоненты, соответствующей вектору обратной решетки  $\mathbf{g}$ . Выберем вспомогательные единичные вектора  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$  таким образом, чтобы  $(\mathbf{k} + \mathbf{g}), \mathbf{u}, \mathbf{v}$  составляли правую тройку. Действие матрицы  $\mathbf{U}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}$  на  $\mathbf{g}$ -й элемент вектора  $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}^{2D}$  можно представить как  $\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \mathbf{u} + \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \mathbf{v}$ .

Выпишем матричное произведение для  $\mathbf{g}$ -го элемента вектора  $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}^{2D}$ :

$$\frac{\omega^2}{c^2} (\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \mathbf{u} + \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \mathbf{v}) = -\tilde{\varepsilon}_0(\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times (\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \mathbf{u} + \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \mathbf{v}) + R^u \mathbf{u} + R^v \mathbf{v}, \quad (\text{Б.1})$$

где коэффициенты  $R$  обозначают остальные члены разложения, не содержащие  $\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}$ . Раскрыв скобки получим

$$\frac{\omega^2}{c^2} (\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \mathbf{u} + \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \mathbf{v}) = \tilde{\varepsilon}_0 |\mathbf{g} + \mathbf{k}|^2 (\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^u \mathbf{u} + \mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^v \mathbf{v}) + R^u \mathbf{u} + R^v \mathbf{v} \quad (\text{Б.2})$$

после чего выразим фурье-компоненты

$$\mathbf{h}_{\mathbf{k},\mathbf{g}}^{u,v} = \frac{R^{u,v}}{\frac{\omega^2}{c^2} - \tilde{\varepsilon}_0 |\mathbf{g} + \mathbf{k}|^2}. \quad (\text{Б.3})$$

Таким образом, в разложении в ряд Фурье гармоника, соответствующая вектору обратной решетки  $\mathbf{g}$ , оказывается доминирующей при выполнении условия

$$|\mathbf{g} + \mathbf{k}| \approx \frac{\omega}{c\sqrt{\tilde{\varepsilon}_0}}. \quad (\text{Б.4})$$

В случае, когда  $\mathbf{g} = 0$ , мы имеем основную гармонику, соответствующей плоской волне с волновым вектором

$$k = \frac{\omega}{c} \left\langle \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \right\rangle^{-1/2}, \quad (\text{Б.5})$$

т.е. получаем режим распространения света в эффективно однородной среде. При выполнении условия (Б.4) еще для одного вектора обратной решетки  $\mathbf{g}$ , что соответствует одному из вариантов записи уравнения Лауэ [233]

$$|\mathbf{g} + \mathbf{k}| = |\mathbf{k}|, \quad (\text{Б.6})$$

мы получаем уже две доминирующих гармоники. Фактически это означает, что между амплитудами двух плоских волн, составляющих блоховское состояние, имеется резонансная связь [172]. Далее будем рассматривать эту ситуацию, т.е. учитывать только две волны, предполагая при этом отсутствие режима многоволновой брэгговской дифракции.

## Б.2. Ширина фотонной стоп-зоны

Пренебрегая остальными фурье-компонентами разложения магнитного поля, запишем секулярное уравнение с блочной матрицей 2 на 2:

$$\begin{pmatrix} \hat{M}_{00} & \hat{M}_{0\mathbf{g}} \\ \hat{M}_{\mathbf{g}0} & \hat{M}_{\mathbf{g}\mathbf{g}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\tilde{\varepsilon}_0 \mathbf{k} \times \mathbf{k} \times & -\tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{g}} \mathbf{k} \times (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \\ -\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}} (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \mathbf{k} \times & -\tilde{\varepsilon}_0 (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \end{pmatrix}. \quad (\text{Б.7})$$

Такое приближение достаточно хорошо выполняется, например, для случая стоп-зоны (111) в ФК на основе опалов для волновых векторов  $\mathbf{k}$ , находящихся вне областей многоволновой брэгговской дифракции.

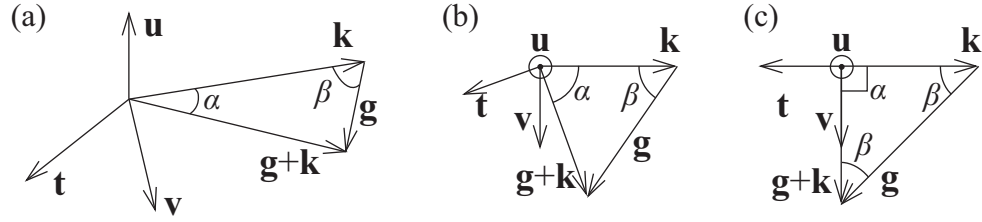


Рис. Б.1. Взаимная ориентация векторов  $\mathbf{k}$ ,  $(\mathbf{k} + \mathbf{g})$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{t}$ . (а) Изометрическая проекция. (б) Проекция в плоскости, образованной векторами  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{t}$  в общем случае. (с) Проекция в плоскости, образованной векторами  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{t}$  в квазибрюстеровском случае ( $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 45^\circ$ ).

Выберем три нормированные вектора  $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{t}$  такие, чтобы вектора  $\mathbf{k}, \mathbf{u}, \mathbf{v}$  и  $(\mathbf{k} + \mathbf{g}), \mathbf{u}, \mathbf{t}$  составляли правые тройки рис. Б.1. Тогда вектора фурье-компоненты  $\mathbf{h}_{\mathbf{g}}$  представимы в виде

$$\mathbf{h}_0 = \mathbf{u}h_{0,u} + \mathbf{v}h_{0,v}, \quad (\text{Б.8})$$

$$\mathbf{h}_{\mathbf{g}} = \mathbf{u}h_{\mathbf{g},u} + \mathbf{t}h_{\mathbf{g},t}. \quad (\text{Б.9})$$

Вычислим векторные произведения:

$$\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{h}_0 = -k^2(\mathbf{u}h_{0,u} + \mathbf{v}h_{0,v}), \quad (\text{Б.10})$$

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{g}} = -|g + k| (|\mathbf{k} \times \mathbf{t}| \mathbf{u}h_{\mathbf{g},u} + k\mathbf{v}h_{\mathbf{g},t}), \quad (\text{Б.11})$$

$$(\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \mathbf{k} \times \mathbf{h}_0 = -k(|(\mathbf{g} \times \mathbf{v} - \mathbf{u}k)| \mathbf{u}h_{0,u} + k\mathbf{t}h_{0,v}), \quad (\text{Б.12})$$

$$(\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times (\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{g}} = -(\mathbf{g} + \mathbf{k})^2(\mathbf{u}h_{\mathbf{g},u} + \mathbf{t}h_{\mathbf{g},t}). \quad (\text{Б.13})$$

Уравнение на собственные числа для матрицы (Б.7) можно записать в виде системы двух векторных уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\varepsilon}_0 k^2(\mathbf{u}h_{0,u} + \mathbf{v}h_{0,v}) + \tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{g}} |g + k| (|\mathbf{k} \times \mathbf{t}| \mathbf{u}h_{\mathbf{g},u} + k\mathbf{v}h_{\mathbf{g},t}) = \frac{\omega^2}{c^2}(\mathbf{u}h_{0,u} + \mathbf{v}h_{0,v}) \\ \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}} k(|(\mathbf{g} \times \mathbf{v} - \mathbf{u}k)| \mathbf{u}h_{0,u} + k\mathbf{t}h_{0,v}) + \tilde{\varepsilon}_0 (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2(\mathbf{u}h_{\mathbf{g},u} + \mathbf{t}h_{\mathbf{g},t}) = \\ = \frac{\omega^2}{c^2}(\mathbf{u}h_{\mathbf{g},u} + \mathbf{t}h_{\mathbf{g},t}) \end{array} \right. \quad (\text{Б.14})$$

Отметим, что векторные уравнения можно разделить на четыре скалярных. Первое уравнение в базисе  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ , а второе – в базисе  $\mathbf{u}, \mathbf{t}$ . При этом вектор  $\mathbf{u}$  определяет  $p$ -компоненту поляризации, а вектора  $\mathbf{v}$  и  $\mathbf{t}$  –  $s$ -компоненту.

### Б.2.1. Ширина расщепления в $s$ -поляризации

#### Приближение пустой решетки

В приближении пустой решетки все фурье-компоненты обратной диэлектрической проницаемости кроме  $\tilde{\varepsilon}_0$  обратятся в нуль. В результате матрица (Б.7) окажется диагональной для обеих поляризаций. Собственным числам будут соответствовать две дисперсионные ветви

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{c} &= \sqrt{\tilde{\varepsilon}_0} |\mathbf{k}| - \text{ветвь с нулевым вектором обратной решетки,} \\ \frac{\omega}{c} &= \sqrt{\tilde{\varepsilon}_0} |\mathbf{g} + \mathbf{k}| - \text{ветвь с вектором } \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (\text{Б.15})$$

Собственные вектора, т.е. решения, будут иметь вид  $(1,0)$  и  $(0,1)$  соответственно.

#### Структура фотонного кристалла

Для ФК, т.е. структуры с модуляцией диэлектрической проницаемости, уравнение для собственных значений находим, приравняв соответствующий детерминант нулю

$$\left(\tilde{\varepsilon}_0 k^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\right) \left(\tilde{\varepsilon}_0 (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\right) - \tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{g}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}} k^3 |\mathbf{g} + \mathbf{k}| = 0, \quad (\text{Б.16})$$

т.е.

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\tilde{\varepsilon}_0 (k^2 + (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2) \pm D^{1/2}}{2}, \quad (\text{Б.17})$$

где

$$D \equiv \tilde{\varepsilon}_0^2 (k^2 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2)^2 + 4\tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{g}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}} k^3 |\mathbf{g} + \mathbf{k}|. \quad (\text{Б.18})$$

Сравним данное решение с результатами, полученными в приближении пустой решетки, т.е. рассмотрим разность решений, определяемых уравнениями (Б.15) и (Б.17):

$$\Delta_s \frac{\omega^2}{c^2} = \tilde{\varepsilon}_0 k^2 - \frac{\tilde{\varepsilon}_0(k^2 + (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2) + D^{1/2}}{2} = \frac{\tilde{\varepsilon}_0((\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 - k^2) + D^{1/2}}{2}. \quad (\text{Б.19})$$

Максимума данная разность достигает при условии

$$(\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 = k^2 \quad (\text{Б.20})$$

т.е. при выполнении брэгговских условий. Аналогичным образом можно найти разность другой пары состояний, которые определяются уравнениями (Б.15) и (Б.17) (причем в последнем выбран знак «минус»), и получить аналогичное условие.

Ширина расщепления квадратов частот равна корню из детерминанта. При этом надо учитывать, брэгговские условия (Б.6), полученные в приближении пустой решетки

$$D \equiv 4\tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{g}}\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}k^4, \quad (\text{Б.21})$$

$$\Delta_s = 2|\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}|c^2k^2. \quad (\text{Б.22})$$

Таким образом, ширина расщепления квадратов частот зависит от фурье-компоненты (соответствующей вектору обратной решетки  $\mathbf{g}_{hkl}$ ) обратной диэлектрической проницаемости, а также от квадрата модуля волнового вектора.

### Б.2.2. Ширина расщепления в $p$ -поляризации

В  $p$ -поляризации вывод формул аналогичен приведенному выше для  $s$ -поляризации, с единственным отличием в члене, включенном в детерминант

$$D_p \equiv \tilde{\varepsilon}_0^2(k^2 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2)^2 + 4\tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{g}}\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}k |(\mathbf{g} \times \mathbf{v} - \mathbf{u}k)| |\mathbf{g} + \mathbf{k}| |\mathbf{k} \times \mathbf{t}|. \quad (\text{Б.23})$$

В этом случае ширина расщепления квадратов частот будет равна

$$\Delta_p = 2c^2 |\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}| k \sqrt{|(\mathbf{g} + \mathbf{k}) \times \mathbf{v}| |\mathbf{k} \times \mathbf{t}|} = 2c^2 |\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}| k^2 \sqrt{|\sin(\pi/2 - \alpha) \sin(\pi/2 + \alpha)|}, \quad (\text{Б.24})$$

где  $\alpha$  – угол между векторами  $(\mathbf{g} + \mathbf{k})$  и  $\mathbf{k}$  (рис. Б.1). Учитывая условие (Б.6), ширину расщепления квадратов частот можно записать через угол  $\beta$  между направлениями, заданными векторами  $-\mathbf{k}$  и  $\mathbf{g}$ , как

$$\alpha = \pi - 2\beta, \quad (\text{Б.25})$$

т.е.

$$\Delta_p = 2c^2 |\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}| k^2 |\cos 2\beta| \quad (\text{Б.26})$$

можно сделать вывод о том, что в  $p$ -поляризации стоп-зона исчезает в случае, когда угол между направлениями  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{g}$  будет составлять величину  $\beta = \pi/4 = 45^\circ$ .

### Б.2.3. Ширина стоп-зоны

Теперь вычислим ширину стоп-зоны, т.е. расщепление частот через найденную разность квадратов частот  $\Delta$ . Пусть,

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 - \Delta/2 \quad (\text{Б.27})$$

$$\omega_2^2 = \omega_0^2 + \Delta/2, \quad (\text{Б.28})$$

где  $\omega_1$  и  $\omega_2$  определяют границы стоп-зоны. Тогда

$$(\omega_1 + \omega_2)^2 = 2\omega_0^2 + 2\sqrt{\omega_0^4 - \Delta^2/4} \approx 4\omega_0^2, \quad (\text{Б.29})$$

$$\omega_{gap} = \omega_2 - \omega_1 = \frac{\omega_2^2 - \omega_1^2}{\omega_2 + \omega_1} \approx \frac{\Delta}{2\omega_0}. \quad (\text{Б.30})$$

Итак, ширина стоп-зоны выражается по формулам

$$\omega_{gap} = ck \frac{|\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}|}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_0}} \text{ для } s\text{-поляризации}, \quad (\text{Б.31})$$



$$\omega_{gap} = ck \frac{|\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}|}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_0}} |\cos 2\beta| - \text{для } p\text{-поляризации.} \quad (\text{Б.32})$$

В результате можно сделать вывод, что ширина стоп-зоны пропорциональна  $|\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{g}}|$

$$\omega_{gap} = \kappa \int_{WS} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \exp(-i\mathbf{g}\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{Б.33})$$

а в  $p$ -поляризации ширина стоп-зоны, кроме того пропорциональна  $|\cos 2\beta|$

$$\omega_{gap} = \mu |\cos 2\beta|. \quad (\text{Б.34})$$

Стоит отметить, что угол  $\beta$  соответствует углу  $\theta_{int}$ , который при условии низкого диэлектрического контраста близок к  $\theta_{ext}$ . Экспериментальные данные (рис. 3.6, 4.10, 4.11) демонстрируют исчезновение стоп-зон в  $p$ -поляризации при  $\theta_{ext} \approx \theta_{int} = 45^\circ$ . Т.е. значение квазибрюстеровского угла  $\theta^{qB}$  можно вычислить из условия  $\cos 2\beta = 0$  (направление падающего и рассеянного лучей ортогональны). Эта ситуация является прямой аналогией с классическим эффектом Брюстера, который наблюдается, когда направление прошедшего луча ортогонально направлению отраженного луча.

## Литература

- [1] *Eli Yablonovitch*. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58. — Pp. 2059–2062.
- [2] *Sajeev John*. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58. — Pp. 2486–2489.
- [3] *Lord Rayleigh*. On the Maintenance of Vibrations by Forces of Double Frequency, and on the Propagation of Waves through a Medium endowed with a Periodic Structure // *Phil. Mag. S. 5.* — 1887. — August. — Vol. 24. — P. 145–159.
- [4] *Lord Rayleigh*. On the Remarkable Phenomenon of Crystalline Reflexion described by Prof. Stokes // *Phil. Mag. S. 5.* — 1888. — Vol. 26. — Pp. 256–265.
- [5] *В.П. Быков*. Спонтанное излучение в периодической структуре // *ЖЭТФ*. — 1972. — Т. 62. — С. 505–513.
- [6] *Vladimir P. Bykov*. Spontaneous emission from a medium with a band spectrum // *Sov. J. Quantum Electron.* — 1975. — Vol. 4. — Pp. 861–871.
- [7] *E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, K. M. Leung*. Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms // *Phys. Rev. Lett.* — 1991. — Vol. 67. — Pp. 2295 – 2298.
- [8] *V. Mizeikis, S. Juodkazis, A. Marcinkevicius et al.* Tailoring and characterization of photonic crystals // *J. Photochem. Photobiol. C.* — 2001. — Vol. 2, no. 1. — Pp. 35 – 69.
- [9] *J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, R. D. Meade*. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. — 2nd edition. — Princeton Univ. Press, 2008.

- [10] Photonic Crystals: Physics, Fabrication and Applications, Ed. by K. Inoue, K. Ohtaka. — Springer, 2004.
- [11] *K. Sakoda*. Optical Properties of Photonic Crystals. — 2nd edition. — Springer, 2004.
- [12] *J.-M. Lourtioz, H. Benisty, V. Berger et al.* Photonic Crystals: Towards Nanoscale Photonic Devices. — Springer, 2005.
- [13] *K. Busch, S. Lölkes, R. B. Wehrspohn, H. Föll*. Photonic Crystals: Advances in Design, Fabrication, and Characterization. — Wiley-VCH, 2004.
- [14] *C. Sibilia, T.M. Benson, M. Marciniak, T. Szoplik*. Photonic Crystals: Physics and Technology. — Springer, 2008.
- [15] *Eli Yablonovich*. Photonic band-gap crystals // *J. Phys.: Condens. Matter*. — 1993. — Vol. 5. — P. 2443.
- [16] *Cefe López*. Materials Aspects of Photonic Crystals // *Adv. Mater.* — 2003. — Vol. 15. — P. 1679 – 1704.
- [17] *C. López*. Three-dimensional photonic bandgap materials: semiconductors for light // *J. Opt. A*. — 2006. — Vol. 8, no. 5. — Pp. R1–R14.
- [18] *J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, S. Fan*. Photonic crystals: putting a new twist on light // *Nature*. — 1997. — Vol. 386. — P. 143.
- [19] *M. Bertolotti*. Wave interactions in photonic band structures: an overview // *J. Opt. A*. — 2006. — Vol. 8, no. 4. — Pp. S9–S32.
- [20] *J.O. Vasseur, P.A. Deymier, G. Frantzikonis et al.* Experimental evidence for the existence of absolute acoustic band gaps in two-dimensional periodic composite media // *J. Phys.: Condens. Matter*. — 1998. — Vol. 10, no. 27. — Pp. 6051–6064.

- [21] *S.A. Nikitov, P. Tailhades, C.S. Tsai*. Spin waves in periodic magnetic structures-magnonic crystals // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2001. — Vol. 236. — Pp. 320–330.
- [22] *Ю.В. Гуляев, С.А. Никитов*. Магнонные кристаллы – спиновые волны в периодических структурах // *Доклады Академии Наук*. — 2001. — Т. 380. — С. 469.
- [23] *V.M. Shalaev, A.K. Sarychev*. *Electrodynamics of Metamaterials*. — World Scientific, 1997.
- [24] *D. R. Smith, J. B. Pendry, M. C. K. Wiltshire*. Metamaterials and Negative Refractive Index // *Science*. — 2004. — Vol. 305, no. 5685. — Pp. 788–792.
- [25] *Costas M. Soukoulis, Stefan Linden, Martin Wegener*. Negative Refractive Index at Optical Wavelengths // *Science*. — 2007. — Vol. 315, no. 5808. — Pp. 47–49.
- [26] *W.L. Bragg*. The Specular Reflection of X-rays // *Nature*. — 1912. — Vol. 90. — P. 410.
- [27] *K.M. Ho, C.T. Chan, C.M. Soukoulis*. Existence of a Photonic Gap in Periodic Dielectric Structures // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 65. — P. 3152.
- [28] *K. Busch, S. John*. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems // *Phys. Rev. E*. — 1998. — Vol. 58. — P. 3896.
- [29] *Susumu Noda, Masayuki Fujita, Takashi Asano*. Spontaneous-emission control by photonic crystals and nanocavities // *Nat. Photon.* — 2007. — Vol. 1, no. 8. — Pp. 449–458.
- [30] *A.V. Baryshev, A.B. Khanikaev, M. Inoue et al.* Resonant Behavior and Selective Switching of Stop Bands in Three-Dimensional Photonic Crystals

with Inhomogeneous Components // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 063906.

- [31] *Jean Pol Vigneron, Jean-François Colomer, Nathalie Vigneron, Virginie Lousse.* Natural layer-by-layer photonic structure in the squamae of *Hoplia coerulea* (Coleoptera) // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 72, no. 6. — P. 061904.
- [32] *Jean Pol Vigneron, Marie Rassart, Zofia Vértesy et al.* Optical structure and function of the white filamentary hair covering the edelweiss bracts // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 71, no. 1. — P. 011906.
- [33] *Yu. N. Kulchin, A. V. Bezverbny, O. A. Bukin et al.* Biosilica in Evolution, Morphogenesis, and Nanobiotechnology // Ed. by W. E. G. Müller, M. A. Grachev. — Springer, 2009. — Vol. 47. — Pp. 315–340.
- [34] *Jean Pol Vigneron, Krisztián Kertész, Zofia Vértesy et al.* Correlated diffraction and fluorescence in the backscattering iridescence of the male butterfly *Troides magellanus* (Papilionidae) // *Phys. Rev. E.* — 2008. — Vol. 78, no. 2. — P. 021903.
- [35] *Jean Pol Vigneron, Jean-François Colomer, Marie Rassart et al.* Structural origin of the colored reflections from the black-billed magpie feathers // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 73, no. 2. — P. 021914.
- [36] *T. Fuhrmann, S. Landwehr, M. El Rharbi-Kucki, M. Sumper.* Diatoms as living photonic crystals // *Appl. Phys. B.* — 2004. — Vol. 78, no. 3. — Pp. 257–260.
- [37] *Allan W. Eckert.* The world of Opals. — John Willey and Sons, 1997.
- [38] *J.V. Sanders.* Colour of Precious Opal // *Nature.* — 1964. — Vol. 204. — Pp. 1151–1153.

- [39] *J.B. Jones, J.V. Sanders, E.R. Segnit.* Structure of opal // *Nature*. — 1964. — Vol. 204. — Pp. 990–991.
- [40] *J.V. Sanders.* Diffraction of Light by Opals // *Acta Cryst. Sec. A*. — 1968. — Vol. 24. — P. 427.
- [41] *В.Б. Татарский.* Кристаллооптика и иммерсионный метод исследования минералов. — Недра. Москва., 1965.
- [42] *О.А. Кавтрева, А.В. Анжудинов, А.Г. Баженова и др.* Оптическая характеристика натуральных и синтетических опалов методом спектроскопии брэгговского отражения // *ФТТ*. — 2007. — Т. 49. — С. ФТТ.
- [43] *Y. Sugimoto, N. Ikeda, N. Carlsson et al.* Fabrication and characterization of different types of two-dimensional AlGaAs photonic crystal slabs // *Journal of Applied Physics*. — 2002. — Vol. 91, no. 3. — Pp. 922–929.
- [44] *S. McNab, N. Moll, Yu. Vlasov.* Ultra-low loss photonic integrated circuit with membrane-type photonic crystal waveguides // *Opt. Express*. — 2003. — Vol. 11. — Pp. 2927–2939.
- [45] *Thomas F. Krauss, Richard M. De La Rue, Stuart Brand.* Two-dimensional photonic-bandgap structures operating at near-infrared wavelengths // *Nature*. — 1996. — Vol. 383, no. 6602. — Pp. 699–702.
- [46] *C. C. Cheng, A. Scherer.* Fabrication of photonic band-gap crystals // *J. Vac. Sci. Technol. B*. — 1995. — Vol. 13, no. 6. — Pp. 2696–2700.
- [47] *C. C. Cheng, A. Scherer, V. Arbet-Engels, E. Yablonovitch.* Lithographic band gap tuning in photonic band gap crystals // *J. Vac. Sci. Technol. B*. — 1996. — Vol. 14. — Pp. 4110–4114.

- [48] *S. Y. Lin, J. G. Fleming, D. L. Hetherington et al.* A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths // *Nature*. — 1998. — Vol. 394, no. 6690. — Pp. 251–253.
- [49] *S. Noda, N. Yamamoto, H. Kobayashi et al.* Optical properties of three-dimensional photonic crystals based on III–V semiconductors at infrared to near-infrared wavelengths // *Applied Physics Letters*. — 1999. — Vol. 75, no. 7. — Pp. 905–907.
- [50] *S. Noda, N. Yamamoto, A. Sasaki.* New Realization Method for Three-Dimensional Photonic Crystal in Optical Wavelength Region // *Japanese Journal of Applied Physics*. — 1996. — Vol. 35, no. Part 2, No. 7B. — Pp. L909–L912.
- [51] *N. Yamamoto, S. Noda, A. Chutinan.* Development of One Period of a Three-Dimensional Photonic Crystal in the 5–10  $\mu\text{m}$  Wavelength Region by Wafer Fusion and Laser Beam Diffraction Pattern Observation Techniques // *Japanese Journal of Applied Physics*. — 1998. — Vol. 37, no. Part 2, No. 9A/B. — Pp. L1052–L1054.
- [52] *S. Kawakami, T. Kawashima, T. Sato.* Mechanism of shape formation of three-dimensional periodic nanostructures by bias sputtering // *Appl. Phys. Lett.* — 1999. — Vol. 74, no. 3. — Pp. 463–465.
- [53] *T. Kawashima, K. Miura, T. Sato, S. Kawakami.* Self-healing effects in the fabrication process of photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2000. — Vol. 77, no. 16. — Pp. 2613–2615.
- [54] *M. Campbell, D. N. Sharp, M. T. Harrison et al.* Fabrication of photonic crystals for the visible spectrum by holographic lithography // *Nature*. — 2000. — Vol. 404, no. 6773. — Pp. 53–56.

- [55] *D. N. Sharp, A. J. Turberfield, R. G. Denning.* Holographic photonic crystals with diamond symmetry // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68, no. 20. — P. 205102.
- [56] *Kuon Inoue, Mitsuo Wada, Kazuaki Sakoda et al.* Fabrication of Two-Dimensional Photonic Band Structure with Near-Infrared Band Gap // *Japanese Journal of Applied Physics.* — 1994. — Vol. 33, no. Part 2, No. 10B. — Pp. L1463–L1465.
- [57] *E. Yablonovitch, T. J. Gmitter.* Photonic band structure: The face-centered-cubic case // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 63. — Pp. 1950 – 1953.
- [58] *E. Özbay, A. Abeyta, G. Tuttle et al.* Measurement of a three-dimensional photonic band gap in a crystal structure made of dielectric rods // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 50, no. 3. — Pp. 1945–1948.
- [59] *R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, J. D. Joannopoulos.* Existence of a photonic band gap in two dimensions // *Appl. Phys. Lett.* — 1992. — Vol. 61. — Pp. 495–497.
- [60] *W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade et al.* Measurement of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — Mar. — Vol. 68, no. 13. — Pp. 2023–2026.
- [61] *P.J. Darragh, A.J. Gaskin, B.C. Terrell, J.V. Sanders.* Origin of Precious Opal // *Nature.* — 1966. — Vol. 209. — P. 13.
- [62] *Н.Д. Денискина, Д.В. Калинин, Л.К. Казанцева.* Благородные опалы, их синтез и генезис в природе. — Новосибирск, Наука, 1980. — С. 184.
- [63] *W. Stöber, A. Fink, E. Bohn.* Controlled growth of monodisperse silica



spheres in the micron size range // *J. Colloid Interface Sci.* — 1968. — Vol. 26. — Pp. 62–69.

- [64] *В.Н.Богомолов, Л.М.Сорокин, Д.А.Курдюков и др.* Сравнительное изучение с помощью просвечивающей электронной микроскопии трехмерной решетки из нанокластеров теллура, полученной различными способами в опаловой матрице // *ФТТ.* — 1997. — Т. 39. — С. 2090–2095.
- [65] *И.А. Карпов, Э.Н. Самаров, В.М. Масалов и др.* О внутренней структуре сферических частиц опала // *ФТТ.* — 2005. — Т. 47. — С. 334–338.
- [66] *I.I. Bardyshev, A.D. Mokrushin, A.A. Pribylov et al.* Porous structure of synthetic opals // *Colloid Journal.* — 2006. — Vol. 68. — Pp. 20–25.
- [67] *P.J. Darragh, J.L. Perdrix.* Notes on Synthetic Precious Opal // *Jour. Gemm.* — 1975. — Vol. 14. — P. 215.
- [68] *D. J. Norris, E. G. Arlinghaus, L. Meng et al.* Opaline Photonic Crystals: How Does Self-Assembly Work? // *Adv. Mater.* — 2004. — Vol. 16. — Pp. 1393–1399.
- [69] *C. Kittel.* Introduction to Solid State Physics. — 6th edition. — John Wiley & Sons, Inc. New York, 1986.
- [70] *L. V. Woodcock.* Entropy difference between the face-centred cubic and hexagonal close-packed crystal structures // *Nature.* — 1997. — Vol. 385. — Pp. 141–143.
- [71] *A. D. Bruce, N. B. Wilding, G. J. Ackland.* Free Energy of Crystalline Solids: A Lattice-Switch Monte Carlo Method // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 79. — Pp. 3002–3005.

- [72] *S.-C. Mau, D. A. Huse*. Stacking entropy of hard-sphere crystals // *Phys. Rev. E*. — 1999. — Vol. 59. — Pp. 4396–4401.
- [73] *А.В. Барышев, А.А. Каплянский, В.А. Кособукин и др.* Дифракция света в искусственных опалах // *ФТТ*. — 2003. — Т. 45. — С. 434–445.
- [74] *A. V. Baryshev, A. A. Kaplyanskii, V. A. Kosobukin et al.* Photonic band-gap structure: From spectroscopy towards visualization // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 70. — P. 113104.
- [75] *A. V. Baryshev, V. A. Kosobukin, K. B. Samusev et al.* Light diffraction from opal-based photonic crystals with growth-induced disorder: Experiment and theory // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Vol. 73. — P. 206118.
- [76] *L.M. Sorokin, V.N Bogomolov, J.L. Hutchison et al.* TEM and HREM study of the 3D superlattices consisting of nanoclusters in synthetic opal matrix // *Nanostructured Materials*. — 1999. — Vol. 12. — Pp. 1081–1084.
- [77] *P. Jiang, J. F. Bertone, K. S. Hwang, V. L. Colvin*. Single-Crystal Colloidal Multilayers of Controlled Thickness // *Chem. Mater.* — 1999. — Vol. 11. — Pp. 2132–2140.
- [78] *Yu. A. Vlasov, V. N. Astratov, A. V. Baryshev et al.* Manifestation of intrinsic defects in optical properties of self-organized opal photonic crystals // *Phys. Rev. E*. — 2000. — Vol. 61. — Pp. 5784–5793.
- [79] *Yu. A. Vlasov, X. Z. Bo, J. C. Sturm, D. J. Norris*. On-chip natural assembly of silicon photonic band gap crystals // *Nature*. — 2001. — Vol. 414. — P. 289.
- [80] *Tao Wang, Joseph L. Keddie*. Design and fabrication of colloidal polymer

- nanocomposites // *Adv. Colloid Interface Sci.* — 2009. — Vol. 147-148. — Pp. 319–332.
- [81] *V. N. Astratov, V. N. Bogomolov, A. A. Kaplyanskii et al.* Optical spectroscopy of opal matrices with CdS embedded in its pores - quantum confinement and photonic band gap effects // *Nuovo Cimento D.* — 1995. — Vol. 17. — Pp. 1349–1354.
- [82] *Yu. A. Vlasov, V. N. Astratov, O. Z. Karimov et al.* Existence of a photonic pseudogap for visible light in synthetic opals // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55. — Pp. R13357–R13360.
- [83] *А.В. Барышев, А.В. Анкудинов, А.А. Каплянский и др.* Оптическая характеристика синтетических опалов // *ФТТ.* — 2002. — Т. 44. — С. 1573–1581.
- [84] *А.В. Барышев, А.А. Каплянский, В.А. Кособукин и др.* Спектроскопия запрещенной фотонной зоны в синтетических опалах // *ФТТ.* — 2004. — Т. 46. — С. 1291–1299.
- [85] *A. V. Baryshev, A. B. Khanikaev, H. Uchida et al.* Interaction of polarized light with three-dimensional opal-based photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73. — P. 033103.
- [86] *V.N. Bogomolov, S.V. Gaponenko, I.N. Germanenko et al.* Photonic band gap phenomenon and optical properties of artificial opals // *Phys. Rev. E.* — 1997. — Vol. 55. — Pp. 7619–7625.
- [87] *А.Г. Баженова, А.В. Селькин, А.Ю. Меньшикова, Н.Н. Шевченко.* Поляризационное подавление брэгговских рефлексов при отражении света от фотонных кристаллов // *ФТТ.* — 2007. — Т. 49. — С. 2010–2021.

- [88] *J.F. Galisteo-López, F. García-Santamaría, D. Golmayo et al.* Design of photonic bands for opal-based photonic crystals // *Photon. Nanostruct.: Fundam. Applic.* — 2004. — Vol. 2. — P. 117.
- [89] *Г.М. Гаджиев, В.Г. Голубев, М.В. Заморянская и др.* Фотонные кристаллы на основе композитов опал-GaP и опал-GaPN: получение и оптические свойства // *ФТП.* — 2003. — Т. 37, № 12. — С. 1449–1455.
- [90] *D.A. Mazurenko, R. Kerst, J.I. Dijkhuis et al.* Ultrafast optical switching in three-dimensional photonic crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91. — P. 213903.
- [91] *Г.М.Гаджиев, В.Г.Голубев, Д.А.Курдюков и др.* Характеризация фотонных кристаллов на основе композитов опал-полупроводник по спектрам брэгговского отражения света // *ФТП.* — 2005. — Т. 39. — С. 1423–1429.
- [92] *P. D. García, J. F. Galisteo-López, C. López.* Tuning and optical study of the  $\Gamma$ -X and  $\Gamma$ -L photonic pseudogaps in opals // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — Vol. 87. — P. 201109.
- [93] *B.T. Holland, C.F. Blanford, A. Stein.* Synthesis of Macroporous Minerals with Highly Ordered Three-Dimensional Arrays of Spheroidal Voids // *Science.* — 1998. — Vol. 281. — P. 538.
- [94] *J.E.G.J. Wijnhoven, W.L. Vos.* Preparation of photonic crystals made of air spheres in titania // *Science.* — 1998. — Vol. 281. — Pp. 802–804.
- [95] *A.A. Zakhidov, R.H. Baughman, Z. Iqbal et al.* Carbon Structures with Three-Dimensional Periodicity at Optical Wavelengths // *Science.* — 1998. — Vol. 282. — P. 897.

- [96] *A. Chutinan, M. Okano, S. Noda.* Wider bandwidth with high transmission through waveguide bends in two-dimensional photonic crystal slabs // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 80, no. 10. — Pp. 1698–1700.
- [97] *S. Assefa, S.J. McNab, Yu. A. Vlasov.* Transmission of slow light through photonic crystal waveguide bends // *Opt. Lett.* — 2006. — Vol. 31. — Pp. 745–747.
- [98] *M.F. Yanik, S. Fan.* Stopping Light All Optically // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92, no. 8. — P. 083901.
- [99] *T. Baba, D. Mori, K. Inoshita, Y. Kuroki.* Light localizations in photonic crystal line defect waveguides // *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* — 2004. — Vol. 10. — Pp. 484–491.
- [100] *D. Mori, T. Baba.* Dispersion-controlled optical group delay device by chirped photonic crystal waveguides // *Appl. Phys. Lett.* — 2004. — Vol. 85, no. 7. — Pp. 1101–1103.
- [101] *H. Gersen, T. J. Karle, R. J. P. Engelen et al.* Real-Space Observation of Ultraslow Light in Photonic Crystal Waveguides // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, no. 7. — P. 073903.
- [102] *Kerry J. Vahala.* Optical microcavities // *Nature.* — 2003. — Vol. 424, no. 6950. — Pp. 839–846.
- [103] *C. Sauvan, G. Lecamp, P. Lalanne, J. Hugonin.* Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in Photonic Crystal microcavities // *Opt. Express.* — 2005. — Vol. 13. — Pp. 245–255.
- [104] *M. Notomi, E. Kuramochi, H. Taniyama.* Ultrahigh-Q Nanocavity with 1D Photonic Gap // *Opt. Express.* — 2008. — Vol. 16. — Pp. 11095–11102.

- [105] *P.B. Deotare, M.W. McCutcheon, I.W. Frank et al.* High quality factor photonic crystal nanobeam cavities // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 94, no. 12. — P. 121106.
- [106] *A. A. Dukin, N. A. Feoktistov, V. G. Golubev et al.* Polarization splitting of optical resonant modes in  $a - Si : H/a - SiOx : H$  microcavities // *Phys. Rev. E.* — 2003. — Vol. 67, no. 4. — P. 046602.
- [107] *Y. Akahane, T. Asano, B.-S. Song, S. Noda.* High-Q photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal // *Nature.* — 2003. — Vol. 425, no. 6961. — Pp. 944–947.
- [108] *Kanna Aoki, Denis Guimard, Masao Nishioka et al.* Coupling of quantum-dot light emission with a three-dimensional photonic-crystal nanocavity // *Nature Photonics.* — 2008. — Vol. 2, no. 11. — Pp. 688–692.
- [109] *Y. Takahashi, H. Hagino, Y. Tanaka et al.* High-Q nanocavity with a 2-ns photon lifetime // *Opt. Express.* — 2007. — Vol. 15. — Pp. 17206–17213.
- [110] *T. Yoshie, A. Scherer, J. Hendrickson et al.* Vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in a photonic crystal nanocavity // *Nature.* — 2004. — Vol. 432, no. 7014. — Pp. 200–203.
- [111] *K. Hennessy, A. Badolato, M. Winger et al.* Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot-cavity system // *Nature.* — 2007. — Vol. 445, no. 7130. — Pp. 896–899.
- [112] *M. Scalora, J.P. Dowling, C.M. Bowden, M.J. Bloemer.* Optical Limiting and Switching of Ultrashort Pulses in Nonlinear Photonic Band Gap Materials // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 73, no. 10. — Pp. 1368–1371.

- [113] *M. Shimizu, T. Ishihara.* Subpicosecond transmission change in semiconductor-embedded photonic crystal slab: Toward ultrafast optical switching // *Applied Physics Letters*. — 2002. — Vol. 80, no. 16. — Pp. 2836–2838.
- [114] *S. W. Leonard, H. M. van Driel, J. Schilling, R. B. Wehrspohn.* Ultrafast band-edge tuning of a two-dimensional silicon photonic crystal via free-carrier injection // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 66, no. 16. — P. 161102.
- [115] *Xiaoyong Hu, Ping Jiang, Chengyuan Ding et al.* Picosecond and low-power all-optical switching based on an organic photonic-bandgap microcavity // *Nat Photon*. — 2008. — Vol. 2, no. 3. — Pp. 185–189.
- [116] *X. Wang, K. Kempa, Z. F. Ren, B. Kimball.* Rapid photon flux switching in two-dimensional photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2004. — Vol. 84, no. 11. — Pp. 1817–1819.
- [117] *M. Inoue, K. Arai, T. Fujii, M. Abe.* Magneto-optical properties of one-dimensional photonic crystals composed of magnetic and dielectric layers // *J. Appl. Phys.* — 1998. — Vol. 83, no. 11. — Pp. 6768–6770.
- [118] *M. Inoue, K. Arai, T. Fujii, M. Abe.* One-dimensional magnetophotonic crystals // *J. Appl. Phys.* — 1999. — Vol. 85, no. 8. — Pp. 5768–5770.
- [119] *A.B. Khanikaev, M. J. Steel.* Low-symmetry magnetic photonic crystals for nonreciprocal and unidirectional devices // *Opt. Express*. — 2009. — Vol. 17. — Pp. 5265–5272.
- [120] *A. B. Khanikaev, A. V. Baryshev, M. Inoue et al.* Two-dimensional magnetophotonic crystal: Exactly solvable model // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 72, no. 3. — P. 035123.

- [121] *M. Inoue, R. Fujikawa, A. Baryshev et al.* Magnetophotonic crystals // *J. Phys. D.* — 2006. — Vol. 39. — P. R151–R161.
- [122] *V. V. Pavlov, P. A. Usachev, R. V. Pisarev et al.* Enhancement of optical and magneto-optical effects in three-dimensional opal/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> magnetic photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — Vol. 93, no. 7. — P. 072502.
- [123] *V. Berger.* Nonlinear Photonic Crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81, no. 19. — Pp. 4136–4139.
- [124] *J. A. Armstrong, N. Bloembergen, J. Ducuing, P. S. Pershan.* Interactions between Light Waves in a Nonlinear Dielectric // *Phys. Rev.* — 1962. — Vol. 127, no. 6. — Pp. 1918–1939.
- [125] *T.V. Dolgova, A.I. Maidykovski, M.G. Martemyanov et al.* Giant optical second-harmonic generation in single and coupled microcavities formed from one-dimensional photonic crystals // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 2002. — Vol. 19. — P. 2129–2140.
- [126] *A. A. Fedyanin, O. A. Aktsipetrov, D. A. Kurdyukov et al.* Nonlinear diffraction and second-harmonic generation enhancement in silicon-opal photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — Vol. 87, no. 15. — P. 151111.
- [127] *Т. В. Долгова, А. И. Майдыковский, М. Г. Мартемьянов и др.* Гигантская третья гармоника в фотонных кристаллах и микрорезонаторах на основе пористого кремния // *Письма в ЖЭТФ.* — 2002. — Т. 75. — С. 17–21.
- [128] *N.G.R. Broderick, R.T. Bratfalean, T.M. Monro et al.* Temperature and wavelength tuning of second-, third-, and fourth-harmonic generation in a



- two-dimensional hexagonally poled nonlinear crystal // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 2002. — Vol. 19. — P. 2263–2272.
- [129] *B. Temelkuran, S.D. Hart, G. Benoit et al.* Wavelength-scalable hollow optical fibres with large photonic bandgaps for CO<sub>2</sub> laser transmission // *Nature.* — 2002. — Vol. 420, no. 6916. — Pp. 650–653.
- [130] *Philip Russell.* Photonic Crystal Fibers // *Science.* — 2003. — Vol. 299, no. 5605. — Pp. 358–362.
- [131] *P. St.J. Russell.* Photonic-Crystal Fibers // *J. Lightwave Tech.* — 2006. — Vol. 24, no. 12. — Pp. 4729–4749.
- [132] *А. М. Желтиков.* Микроструктурированные световоды для нового поколения волоконно-оптических источников и преобразователей световых импульсов // *Успехи физических наук.* — 2007. — Т. 177, № 7. — С. 737.
- [133] *S. O. Konorov, D. A. Akimov, A. M. Zheltikov et al.* Tuning the frequency of ultrashort laser pulses by a cross-phase-modulation-induced shift in a photonic crystal fiber // *Opt. Lett.* — 2005. — Vol. 30. — Pp. 1548–1550.
- [134] *John M. Dudley, Goëry Genty, Stéphane Coen.* Supercontinuum generation in photonic crystal fiber // *Rev. Mod. Phys.* — 2006. — Vol. 78, no. 4. — P. 1135.
- [135] *A. Guinier.* X-Ray Diffraction. In Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies. — W.H. Freeman and Co, San Francisco, 1963.
- [136] *В.Г. Голубев, Д.А. Курдюков, А.Б. Певцов и др.* Гистерезис фотонной зоны в фотонном кристалле VO<sub>2</sub> при фазовом переходе полупроводник — металл // *ФТП.* — 2002. — Т. 36, № 9. — С. 1122–1127.

- [137] *H. Míguez, C. López, F. Meseguer et al.* Photonic crystal properties of packed submicrometric SiO<sub>2</sub> spheres // *Appl. Phys. Lett.* — 1997. — Vol. 71. — P. 1148.
- [138] *M.S. Thijssen, R. Sprik, J.E.G.J. Wijnhoven et al.* Inhibited Light Propagation and Broadband Reflection in Photonic Air-Sphere Crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83. — Pp. 2730–2733.
- [139] *H. M. van Driel, W. L. Vos.* Multiple Bragg wave coupling in photonic band-gap crystals // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 9872–9875.
- [140] *S. G. Romanov, T. Maka, C. M. Sotomayor Torres et al.* Diffraction of light from thin-film polymethylmethacrylate opaline photonic crystals // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 63. — P. 056603.
- [141] *J. F. Galisteo-López, F. López-Tejeira, S. Rubio et al.* Experimental evidence of polarization dependence in the optical response of opal-based photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2003. — Vol. 82. — Pp. 4068–4070.
- [142] *J. F. Galisteo-López, E. Palacios-Lidón, E. Castillo-Martínez, C. López.* Optical study of the pseudogap in thickness and orientation controlled artificial opals // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68. — P. 115109.
- [143] *K. Wostyn, Y. Zhao, B. Yee et al.* Optical properties and orientation of arrays of polystyrene spheres deposited using convective self-assembly // *J. Chem. Phys.* — 2003. — Vol. 118. — P. 10752.
- [144] *G. M. Gajiev, V. G. Golubev, D. A. Kurdyukov et al.* Bragg reflection spectroscopy of opal-like photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 205115.

- [145] *E. Pavarini, L. C. Andreani, C. Soci et al.* Band structure and optical properties of opal photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 045102.
- [146] *H.P. Schriemer., H.M. van Driel, A.F. Koenderink, W.L. Vos.* Modified spontaneous emission spectra of laser dye in inverse opal photonic crystals // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 63, no. 1. — P. 011801.
- [147] *S.F. Kaplan, N.F. Kartenko, D.A. Kurdyukov et al.* Photo- and electroluminescence of sulfide and silicate phosphors embedded in synthetic opal // *Photon. Nanostruct.: Fundam. Applic.* — 2007. — Vol. 5. — Pp. 37–43.
- [148] *S. Gottardo, R. Sapienza, P.D. Garcia et al.* Resonance-driven random lasing // *Nature Photon.* — 2008. — Vol. 2, no. 7. — Pp. 429–432.
- [149] *A. B. Pevtsov, D. A. Kurdyukov, V. G. Golubev et al.* Ultrafast stop band kinetics in a three-dimensional opal-VO<sub>2</sub> photonic crystal controlled by a photoinduced semiconductor-metal phase transition // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 153101.
- [150] *A. V. Akimov, Y. Tanaka, A. B. Pevtsov et al.* Hypersonic Modulation of Light in Three-Dimensional Photonic and Phononic Band-Gap Materials // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101, no. 3. — P. 033902.
- [151] *R. M. Amos, J. G. Rarity, P. R. Tapster et al.* Fabrication of large-area face-centered-cubic hard-sphere colloidal crystals by shear alignment // *Phys. Rev. E.* — 2000. — Vol. 61, no. 3. — Pp. 2929–2935.
- [152] *F. García-Santamaría, J. F. Galisteo-López, P. V. Braun, C. López.* Optical diffraction and high-energy features in three-dimensional photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71, no. 19. — P. 195112.

- [153] Yu. A. Vlasov, Sh. J. McNab. Coupling into the slow light mode in slab-type photonic crystal waveguides // *Opt. Lett.* — 2006. — Vol. 31. — Pp. 50–52.
- [154] Yu. A. Vlasov, N. Moll, Sh.J. McNab. Observation of surface states in a truncated photonic crystal slab // *Opt. Lett.* — 2004. — Vol. 29. — Pp. 2175–2177.
- [155] J. M. Ziman. Models of disorder: The theoretical physics of homogeneously disordered systems. — Cambridge Univ. Press, 1979.
- [156] A. R. McGurn, K. T. Christensen, F. M. Mueller, A. A. Maradudin. Anderson localization in one-dimensional randomly disordered optical systems that are periodic on average // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47, no. 20. — Pp. 13120–13125.
- [157] V. D. Freilikher, B. A. Liansky, I. V. Yurkevich et al. Enhanced transmission due to disorder // *Phys. Rev. E.* — 1995. — Vol. 51, no. 6. — Pp. 6301–6304.
- [158] M. A. Kaliteevski, D. M. Beggs, S. Brand et al. Statistics of the eigenmodes and optical properties of one-dimensional disordered photonic crystals // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 73, no. 5. — P. 056616.
- [159] M. A. Kaliteevski, D. M. Beggs, S. Brand et al. Stability of the photonic band gap in the presence of disorder // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73, no. 3. — P. 033106.
- [160] А.А. Грешнов, М.А. Калитеевский, Р.А. Абрам и др. Плотность состояний одномерного разупорядоченного фотонного кристалла // *ФТТ.* — 2007. — Т. 49. — С. 1904–1908.

- [161] *M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C.-T. Chan, D. Turner.* Localization of electromagnetic waves in two-dimensional disordered systems // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 53, no. 13. — Pp. 8340–8348.
- [162] *M. A. Kaliteevski, D. M. Beggs, S. Brand et al.* Propagation of electromagnetic waves through a system of randomly placed cylinders: the partial scattering wave resonance // *J. Mod. Optics.* — 2006. — Vol. 53, no. 14. — Pp. 2089–2097.
- [163] *A. F. Koenderink, W. L. Vos.* Optical properties of real photonic crystals: anomalous diffuse transmission // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 2005. — Vol. 22. — Pp. 1075–1084.
- [164] *R. Biswas, M. M. Sigalas, G. Subramania et al.* Photonic band gaps of porous solids // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — Pp. 4549–4553.
- [165] *Z.-Y. Li, Z.-Q. Zhang.* Fragility of photonic band gaps in inverse-opal photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 1516–1519.
- [166] *M. Allard, E. H. Sargent.* Impact of polydispersity on light propagation in colloidal photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2004. — Vol. 85. — P. 5887.
- [167] *R. Rengarajan, D. Mittleman, C. Rich, V. Colvin.* Effect of disorder on the optical properties of colloidal crystals // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 71. — P. 16615.
- [168] *E. Palacios-Lidón, B. H. Juárez, E. Castillo-Martínez, C. López.* Optical and morphological study of disorder in opals // *J. Appl. Phys.* — 2005. — Vol. 97. — P. 63502.
- [169] *V. N. Astratov, A. M. Adawi, S. Fricker et al.* Interplay of order and dis-

- order in the optical properties of opal photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 165215.
- [170] *A.F. Koenderink, Ad Lagendijk, W.L. Vos.* Optical extinction due to intrinsic structural variations of photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 153102.
- [171] *S. G. Romanov, C. M. Sotomayor Torres.* Forward scattering of light in thin opal films // *Phys. Rev. E.* — 2004. — Vol. 69. — P. 046611.
- [172] *A. Yariv, P. Yeh.* *Optical Waves in Crystals.* — John Wiley and Sons, 1984.
- [173] *М. Борн, Э. Вольф.* *ОСНОВЫ ОПТИКИ.* — Наука, Москва, 1973.
- [174] *P. Yeh, A. Yariv, C-Sh. Hong.* Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory // *J. Opt. Soc. Am.* — 1977. — Vol. 67. — Pp. 423–437.
- [175] *H.S. Sözüer, J.W. Haus, R. Inguva.* Photonic bands: convergence problems with the plane-wave method // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 45. — P. 13962.
- [176] *R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer et al.* Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 48. — P. 8434.
- [177] *S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos.* Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis // *Opt. Express.* — 2001. — Vol. 8. — P. 173.
- [178] *J. Korrynga.* On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal // *Physica.* — 1947. — Vol. 13, no. 6-7. — Pp. 392 – 400.

- [179] *W. Kohn, N. Rostoker.* Solution of the Schrödinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium // *Phys. Rev.* — 1954. — Vol. 94, no. 5. — Pp. 1111–1120.
- [180] *X. Wang, X.-G. Zhang, Q. Yu, B. N. Harmon.* Multiple-scattering theory for electromagnetic waves // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47, no. 8. — Pp. 4161–4167.
- [181] *Alexander Moroz.* Density-of-states calculations and multiple-scattering theory for photons // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51, no. 4. — Pp. 2068–2081.
- [182] *A. Modinos, N. Stefanou, V. Yannopoulos.* Applications of the layer-KKR method to photonic crystals // *Opt. Express.* — 2001. — Vol. 8. — Pp. 197–202.
- [183] *K. Kunz, R. Luebbers.* The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics. — CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [184] *A. Taflov.* Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. — Artech House, Boston, 1995.
- [185] *J. B. Pendry, A. MacKinnon.* Calculation of photon dispersion relations // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — Vol. 69. — P. 2772.
- [186] *K. W. K. Shung, Y. C. Tsai.* Surface effects and band measurements in photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 48, no. 15. — Pp. 11265–11269.
- [187] *Kazuaki Sakoda.* Transmittance and Bragg reflectivity of two-dimensional photonic lattices // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 52, no. 12. — Pp. 8992–9002.

- [188] *A. Balestreri, L.C. Andreani, M. Agio.* Optical properties and diffraction effects in opal photonic crystals // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 74. — P. 036603.
- [189] *Yu. A. Vlasov, M. I. Kaliteevski, V. V. Nikolaev.* Different regimes of light localization in a disordered photonic crystal // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60. — P. 1555.
- [190] *Rafael C. Gonzalez, Richard E. Woods.* Digital Image Processing. — Addison-Wesley Publishing Company, 1992.
- [191] *I. Sobel.* An isotropic image gradient operator. Machine Vision for Three-Dimensional Scenes. — Academic Press, 1990.
- [192] *J. Canny.* A Computational approach to edge detection // *IEEE T. Pattern. Anal.* — 1986. — Vol. 8. — Pp. 679–698.
- [193] *M. V. Rybin, A. V. Baryshev, M. Inoue et al.* Complex interaction of polarized light with three-dimensional opal-based photonic crystals: Diffraction and transmission studies // *Phot. Nanost. Fund. Appl.* — 2006. — Vol. 4. — Pp. 146–154.
- [194] *М.В. Рыбин, К.Б. Самусев, М.Ф. Лимонов.* Экспериментальное исследование фотонной зонной структуры синтетических опалов в условиях низкого диэлектрического контраста // *ФТТ.* — 2007. — Т. 49. — С. 2174.
- [195] *К.Б. Самусев, Г.Н. Юшин, М.В. Рыбин, М.Ф. Лимонов.* Структурные параметры синтетических опалов: статистический анализ данных электронной микроскопии // *ФТТ.* — 2008. — Т. 50. — С. 1230.
- [196] *A. V. Baryshev, A. A. Kaplyanskiy, O. A. Kavtreva et al.* Bragg diffraction



of light as a powerful tool in the study of photonic crystals // Proceedings of SPIE. — Vol. 6258. — 2006. — Pp. 154–163.

- [197] *J. F. Bertone, P. Jiang, K. S. Hwang et al.* Thickness Dependence of the Optical Properties of Ordered Silica-Air and Air-Polymer Photonic Crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83. — P. 300.
- [198] *A A Dukin, N A Feoktistov, A V Medvedev et al.* Polarization inhibition of the stop-band in distributed Bragg reflectors // *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* — 2006. — Vol. 8, no. 8. — P. 625.
- [199] *M.V. Rybin, K.B. Samusev, M.F. Limonov.* High Miller-index photonic bands in synthetic opals // *Photon. Nanostruct.: Fundam. Applic.* — 2007. — Vol. 5. — P. 119.
- [200] *A.V. Baryshev, M. Inoue, A.A. Kaplyanskii et al.* Optical polarization-resolved studies of photonic bandgap structure in synthetic opals // Proc. 13th Int. Symp. “Nanostructures: Physics and Technology” (St.Petersburg, Russia, 2005). — 2005. — Pp. 123–124.
- [201] *A. Glushko, L. Karachevtseva.* PBG properties of three-component 2D photonic crystals // *Photon. Nanostruct.: Fundam. Applic.* — 2006. — Vol. 4, no. 3. — Pp. 141–145.
- [202] *H. Takeda, K. Yoshino.* Photonic band schemes of opals composed of periodic arrays of cored spheres depending on thickness of outer shells // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 80. — Pp. 4495–4497.
- [203] *H. Takeda, K. Yoshino.* Photonic band structures for three-dimensionally periodic arrays of coated spheres // *J. Appl. Phys.* — 2003. — Vol. 93, no. 6. — Pp. 3188–3193.

- [204] *G. Pan, R. Kesavamoorthy, S. A. Asher.* Optically Nonlinear Bragg Diffracting Nanosecond Optical Switches // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 78. — Pp. 3860–3863.
- [205] *M. V. Rybin, A. V. Baryshev, A. B. Khanikaev et al.* Selective manipulation of stop-bands in multi-component photonic crystals: opals as an example // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 205106.
- [206] *М. Ф. Лимонов, А. В. Барышев, М. Иноуе и др.* Многокомпонентные фотонные кристаллы: селективное управление световыми потоками и резонансные стоп-зоны // *Российские Нанотехнологии.* — 2008. — Т. 3, № 1-2. — С. 142–145.
- [207] *А.К. Самусев, М.В. Рыбин, М.Ф. Лимонов.* Селективное переключение стоп-зон в двумерных многокомпонентных фотонных кристаллах // *ФТТ.* — 2009. — Т. 51. — С. 487.
- [208] *M. F. Limonov, A. V. Baryshev, A. B. Khanikaev et al.* Two-dimensional and 3D- multi-component photonic crystals: theory and experiment // *Proceedings of SPIE.* — Vol. 6989. — 2008. — P. 698906.
- [209] *Ugo Fano.* Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts // *Phys. Rev.* — 1961. — Vol. 124. — Pp. 1866–1878.
- [210] *V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala et al.* Tunneling into a Single Magnetic Atom: Spectroscopic Evidence of the Kondo Resonance // *Science.* — 1998. — Vol. 280. — P. 567.
- [211] *N.M. Kabachnik, I.P. Sazhina.* Angular distribution and polarization of photoelectrons in the region of resonances // *J. Phys. B.* — 1976. — Vol. 9, no. 10. — Pp. 1681–1697.

- [212] *J. J. Hopfield, P. J. Dean, D. G. Thomas.* Interference between Intermediate States in the Optical Properties of Nitrogen-Doped Gallium Phosphide // *Phys. Rev.* — 1967. — Vol. 158. — Pp. 748 – 755.
- [213] *F. Cerdeira, T. A. Fjeldly, M. Cardona.* Effect of Free Carriers on Zone-Center Vibrational Modes in Heavily Doped p-type Si. II. Optical Modes // *Phys. Rev. B.* — 1973. — Vol. 8. — Pp. 4734 – 4745.
- [214] *B. Friedl, C. Thomsen, M. Cardona.* Determination of the superconducting gap in  $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 65. — Pp. 915 – 918.
- [215] *M. F. Limonov, A. I. Rykov, S. Tajima, A. Yamanaka.* Raman Scattering Study on Fully Oxygenated  $\text{YBa}_2\text{CuO}_7$  Single Crystals: x-y Anisotropy in the Superconductivity-Induced Effects // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80. — P. 825.
- [216] *A.E. Miroshnichenko, S. Flach, Y.S. Kivshar.* Fano resonance in nanoscale structures // *arXiv:0902.3014 [cond-mat.mtrl-sci]*.
- [217] *G. Levy-Yurista, A.A. Friesem.* Very narrow spectral filters with multilayered grating-waveguide structures // *Appl. Phys. Lett.* — 2000. — Vol. 77. — P. 1596.
- [218] *C. Grillet, D. Freeman, B. Luther-Davies et al.* Characterization and modeling of Fano resonances in chalcogenide photonic crystal membranes // *Opt. Express.* — 2006. — Vol. 14. — Pp. 369–376.
- [219] *S. Fan, J. D. Joannopoulos.* Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 235112.

- [220] *J. Song, R.P. Zaccaria, M.B. Yu, X.W. Sun.* Tunable Fano resonance in photonic crystal slabs // *Opt. Express.* — 2007. — Vol. 14. — Pp. 8812–8826.
- [221] *S. Fan.* Sharp asymmetric line shapes in side-coupled waveguide-cavity systems // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 80. — P. 908.
- [222] *M. Notomi, E. Kuramochi, T. Tanabe.* Large-scale arrays of ultrahigh-Q coupled nanocavities // *Nature Photonics.* — 2008. — Vol. 2. — Pp. 741 – 747.
- [223] *M. Galli, S. L. Portalupi, M. Belotti et al.* Light scattering and Fano resonances in high-Q photonic crystal nanocavities // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 94. — P. 071101.
- [224] *R. Harbers, S. Jochim, N. Moll et al.* Control of Fano line shapes by means of photonic crystal structures in a dye-doped polymer // *Appl. Phys. Lett.* — 2007. — Vol. 90. — P. 201105.
- [225] *T. Baba, H. Makino, T. Mori et al.* Experimental demonstration of Fano-type resonance in photoluminescence of ZnS:Mn/SiO<sub>2</sub> one-dimensional photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — Vol. 87. — P. 171106.
- [226] *S.A. Blokhin, O.A. Usov, A.V. Nashchekin et al.* Optical studies of a two-dimensional photonic crystal with the InAs/InGaAs quantum-dot structure as an active region // *Semiconductors.* — 2006. — Vol. 40. — Pp. 812–817.
- [227] *A.R. Cowan, J.F. Young.* Optical bistability involving photonic crystal microcavities and Fano line shapes // *Phys. Rev. E.* — 2003. — Vol. 68. — P. 046606.
- [228] *S. F. Mingaleev, A. E. Miroshnichenko, Yu. S. Kivshar, K. Busch.* All-optical switching, bistability, and slow-light transmission in photonic crys-

- tal waveguide-resonator structures // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 74. — P. 046603.
- [229] *V. Lousse, J. P. Vigneron.* Use of Fano resonances for bistable optical transfer through photonic crystal films // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69. — P. 155106.
- [230] *S.A. Asher, J.M. Weissman, A. Tikhonov et al.* Diffraction in crystalline colloidal-array photonic crystals // *Phys. Rev. E.* — 2004. — Vol. 69. — P. 066619.
- [231] *J. F. Galisteo-López, C. López.* High-energy optical response of artificial opals // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70. — P. 035108.
- [232] *C. F. Bohren, D. R. Huffman.* Absorption and scattering of light by small particles. — Wiley, New York, 1983.
- [233] *Н. Ашкрофт, Н. Мермин.* Физика твердого тела. — М.: Мир, 1979. — Т. 1.
- [234] *P. Markos, C. M. Soukoulis.* Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials. — Princeton Univ. Press, 2008.
- [235] *J.-P. Connerade, A.M. Lane.* Interacting resonances in atomic spectroscopy // *Rep. Prog. Phys.* — 1988. — Vol. 51, no. 11. — Pp. 1439–1478.
- [236] *М.В. Рыбин, К.Б. Самусев, М.Ф. Лимонов.* Об уширении полос в спектрах пропускания синтетических опалов // *ФТТ.* — 2008. — Т. 50. — С. 421.
- [237] *M. V. Rybin, A. B. Khanikaev, M. Inoue et al.* Fano resonance between Mie and Bragg scattering in photonic crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 103. — P. 023901.

- [238] *Джс. Займан.* Принципы теории твердого тела. — М. Мир., 1974.
- [239] *D.S. Watkins.* Fundamentals of Matrix Computations. — 2nd edition. — John Wiley & Sons, Inc., New York., 2002.
- [240] *Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков.* Численные методы. — 6 изд. — Бином. Лаборатория знаний, 2008. — С. 636.
- [241] *K.M. Leung, Y.F. Liu.* Photon band structures: The plane-wave method // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 41, no. 14. — Pp. 10188–10190.
- [242] *R. Car, M. Parrinello.* Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory // *Phys. Rev. Lett.* — 1985. — Vol. 55, no. 22. — Pp. 2471–2474.
- [243] *M.P. Teter, M.C. Payne, D.C. Allan.* Solution of Schrödinger's equation for large systems // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40, no. 18. — Pp. 12255–12263.
- [244] *P. Блейхуд.* Быстрые алгоритмы цифровой обработки сигналов. — Москва, Мир., 1989.
- [245] *D. E. Aspnes.* Local-field effects and effective-medium theory: A microscopic perspective // *Am. J. Phys.* — 1982. — Vol. 50, no. 8. — Pp. 704–709.
- [246] *Y. Saad.* Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems. — Manchester Univ. Press, 1992.