

МЕТОД ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ УПОРЯДОЧЕННЫХ ЧАСТИЦ ПО ДАННЫМ О ФОТОННОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ

*А. А. Мискевич**, *В. А. Лойко***

*Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси
220072, Минск, Беларусь*

Поступила в редакцию 15 ноября 2013 г.

Предложен метод восстановления показателя преломления сферических частиц, организованных в упорядоченные структуры. Он основан на решении обратной задачи по данным о фотонной запрещенной зоне. Решение получено в рамках квазикристаллического приближения теории многократного рассеяния волн и метода матрицы переноса. Количественные результаты приведены для систем, состоящих из частиц оксида кремния. Найдены значения эффективного показателя преломления частиц искусственного опала по известным экспериментальным данным о спектральном положении фотонной запрещенной зоны. Описанная методика применима для восстановления не только показателя преломления частиц, но и других характеристик упорядоченных дисперсных структур по спектрам коэффициента когерентного пропускания.

DOI: 10.7868/S0044451014080045

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди большого разнообразия природных и искусственных дисперсных сред особое место занимают системы с упорядоченной структурой. К ним относятся, в частности, фотонные кристаллы (ФК) [1–4]. Интерес к их исследованию обусловлен тем, что на их спектрах существует фотонная запрещенная зона (ФЗЗ) [5] — диапазон длин волн, в котором имеет место резкое уменьшение пропускания и возрастание отражения [2]. Эффект ФЗЗ обусловлен интерференцией волн при взаимодействии излучения с упорядоченной структурой. Фотонные кристаллы используются для создания полосовых фильтров, селективных отражателей, волноводов, при изготовлении линейных и нелинейных оптических и электрооптических устройств: светодиодов, солнечных элементов, дисплеев, лазеров и т. д. [6–13]. В связи с развитием техники и технологии появляется возможность создавать все более совершенные ФК [14].

Глубина, ширина и спектральное положение ФЗЗ

зависят от структуры ФК и показателя преломления составляющих его частиц. Поэтому важным является изучение взаимосвязи ФЗЗ и характеристик структуры.

В работах [15, 16] в рамках метода связанных волн были исследованы брэгговская дифракция и отражение второго порядка в ФК и получено аналитическое выражение для эффективности дифракции. В работе [17] при описании процессов взаимодействия излучения с трехмерной структурой ФК на основе искусственного опала последняя рассматривалась в виде мультислоя, состоящего из монослоев независимых частиц. При этом сначала в рамках приближения однократного рассеяния рассчитывались коэффициенты пропускания и отражения отдельных монослоев, а затем полученные коэффициенты использовались для расчета пропускания и отражения мультислоя в рамках метода матрицы переноса [18]. Корреляция между частицами и эффекты многократного рассеяния в отдельных монослоях здесь не учитывались. Представление трехмерной структуры ФК в виде набора монослоев частиц было использовано при теоретическом описании в работе [19]. Здесь учтена пространственная корреляция частиц в отдельных монослоях, которые рассматривались как частично упорядоченные, т. е. имею-

*E-mail: miskevic@dragon.bas-net.by

**E-mail: loiko@dragon.bas-net.by

щие ближний порядок в расположении частиц. Коэффициенты пропускания и отражения монослоев рассчитывались в квазикристаллическом приближении (ККП) [20, 21] теории многократного рассеяния волн. Переотражение между ними рассчитывалось в рамках метода самосогласования.

В работах [22, 23] трехмерный ФК рассматривался в виде набора пространственно-упорядоченных монослоев с дальним порядком, коэффициенты пропускания и отражения которых рассчитывались в рамках ККП. Упорядоченность частиц в монослоях характеризовалась радиальной функцией распределения (РФР), моделирующей двумерный массив регулярно расположенных частиц (двумерный планарный ФК). Метод нахождения РФР двумерного планарного кристалла, позволяющий учитывать дальний порядок в расположении частиц и неидеальность решетки, описан в работах [24, 25]. Многократное переотражение между монослоями учитывалось в рамках метода матрицы переноса [26, 28]. Результаты расчета, полученные с использованием такой РФР, показали хорошее согласие [23] с экспериментальными данными работы [19] по спектральному положению минимумов ФЗЗ.

В изучении взаимодействия электромагнитного излучения с различными объектами можно выделить две взаимосвязанные задачи — прямую и обратную [29–39]. Прямая задача состоит в расчете характеристик излучения по заданным параметрам объекта, обратная — в нахождении (восстановлении) параметров объекта по известным характеристикам излучения.

В данной работе объектом исследования является трехмерная упорядоченная структура частиц — ФК. Кратко изложено решение прямой задачи. Оно состоит в расчете коэффициента когерентного пропускания структуры и нахождении на его спектре минимума ФЗЗ. Решение основано на методах, развитых нами в работах [22–25]. Его можно использовать для восстановления характеристик структуры по данным о глубине и/или положению минимума ФЗЗ. В качестве примера рассмотрена задача восстановления показателя преломления частиц. Она возникает, в частности, при создании коллоидных кристаллов, синтетических опалов [3, 4, 13, 19, 40–43], исследовании ряда биологических объектов [44–48].

Метод восстановления состоит в использовании данных о спектральном положении (длине волны λ_{PBG}) и значении (T_{PBG}) минимума коэффициента когерентного пропускания ФЗЗ исследуемой структуры. Изменяя показатель преломления n_p частиц и решая прямую задачу, мы находим такое его значе-

ние $n_{p,ret}$, при котором совпадают минимумы ФЗЗ на измеренных и рассчитанных спектрах коэффициента пропускания. Найденное значение $n_{p,ret}$ считаем восстановленным показателем преломления частиц на длине волны λ_{PBG} . Для восстановления показателя преломления на других длинах волн необходимо изменение спектрального положения минимума ФЗЗ. Это можно сделать, например, помещая структуру в среды с различными показателями преломления. При заполнении пространства между частицами иммерсионной средой изменяется относительный показатель преломления частиц и, как следствие, положение и глубина ФЗЗ.

Количественные результаты получены для ФК, состоящих из частиц оксида кремния (SiO_2). Восстановлены значения показателя преломления частиц с использованием данных численного моделирования спектров пропускания структуры. Сделана детальная оценка погрешности восстановления по данным о глубине и положении минимума ФЗЗ.

Разработанный метод использован для нахождения значений показателя преломления частиц искусственного (синтетического) опала [40–43] по данным эксперимента, опубликованным в работе [41].

2. ПРЯМАЯ ЗАДАЧА

Мы рассматриваем пространственно-упорядоченную трехмерную структуру частиц как многослойную систему (мультислой), состоящую из набора плоскопараллельных монослоев частиц.

Прямая задача состоит в нахождении спектра коэффициента когерентного пропускания мультислоя по заданным параметрам системы. Для ее решения использовано квазикристаллическое приближение статистической теории многократного рассеяния волн и метод матрицы переноса. Найденны спектры амплитудных коэффициентов когерентного пропускания и отражения отдельных монослоев и с их использованием — спектры когерентного пропускания и отражения всей системы.

2.1. Монослой частиц

Рассмотрим пространственно-упорядоченный монослой монодисперсных сферических частиц (планарный кристалл) с известными характеристиками: показателем преломления, размером и концентрацией частиц, типом и степенью их пространственной упорядоченности. Пусть монослой находится в однородной среде с известным спектром

показателя преломления и освещается по нормали плоской волной. Найдем его коэффициенты когерентного пропускания и отражения.

Воспользуемся квазикристаллическим приближением [20, 21] теории многократного рассеяния волн для решения этой задачи. Суть приближения состоит в предположении, что среднее (когерентное) поле при одной фиксированной частице совпадает со средним полем при двух фиксированных частицах [21]. Оно выполняется тем лучше, чем более детерминировано взаимное расположение частиц в среде. Это условие наилучшим образом выполняется в кристаллах. Поэтому приближение было названо квазикристаллическим [21].

Когерентное поле в рамках этого приближения определяется суммой падающей волны и волн, получаемых в результате многократного рассеяния частицами слоя с учетом взаимной корреляции в их расположении. Она учитывается с помощью двух-частичной (радиальной) функцией распределения.

Методы расчета РФР частиц в монослоях с ближним порядком известны [49–54]. Они успешно применяются при расчете когерентного пропускания и отражения частично упорядоченных монослоев частиц в ККП. Использование таких монослоев для моделирования планарных кристаллов ограничено, поскольку в этом случае не учитываются регулярность упаковки и дальний порядок в расположении частиц, характерные для кристаллов. Кроме того, значения коэффициента заполнения η (отношение площади проекций всех частиц к площади слоя, на которой они расположены) частично упорядоченного монослоя, при которых в ККП могут быть проведены физически корректные расчеты, как правило, не превышают величины $\eta = 0.7$. Отметим, что максимальный коэффициент заполнения монослоя монодисперсных сфер реализуется в планарном кристалле с треугольной решеткой. Его значение $\eta = \eta_{max} = \pi/2\sqrt{3} \approx 0.9069$.

Нахождение РФР монослоя с дальним порядком (планарного кристалла) и ее адаптация для использования в ККП являются сложными задачами, поскольку необходимы учет большого числа частиц и нахождение способа обеспечения сходимости функции к единице. Отметим также, что с ростом степени упорядоченности системы увеличиваются вычислительные ресурсы, требуемые для расчета.

Подход к нахождению РФР планарного кристалла описан нами в работах [24, 25]. Здесь мы кратко изложим его суть. Центр любой частицы выбирается за начало координат. Относительно него рассчитываются радиусы координационных окружностей

[55] идеальной решетки и число центров частиц, лежащих на каждой из них. Функция, описывающая зависимость числа центров частиц от расстояния в идеальной решетке, состоит из бесконечно узких пиков на расстояниях, равных радиусам координационных окружностей. Соответственно, РФР частиц идеального кристалла представляет собой набор таких пиков на тех же расстояниях. В реальных кристаллах неидеальность решетки приводит к тому, что координационные окружности превращаются в «кольца» с размытыми границами. Выражение для РФР $g(u)$ реального планарного кристалла (т. е. монослоя с неидеальной решеткой) может быть записано в виде [24, 25]

$$g(u) = \frac{1}{\rho_0} \sum_i \frac{N_i}{2\pi R_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma(u)} \times \exp \left[-\frac{(u - R_i)^2}{2\sigma^2(u)} \right]. \quad (1)$$

Здесь $\sigma(u)$ — функция размытия, характеризующая «размытие» (уширение) координационных окружностей кристалла в зависимости от расстояния u относительно начала координат.

Анализ показывает, что целесообразно использовать линейную функцию размытия

$$\sigma(u) = \sigma_0(au + b). \quad (2)$$

Она позволяет моделировать РФР планарного кристалла в широком интервале отклонений пространственного расположения частиц относительно узлов идеальной решетки. В формулах (1) и (2) параметр $u = R/D$ — безразмерное расстояние, выраженное в диаметрах D частиц ($u \geq 1$), R — расстояние в плоскости монослоя относительно начала координат, ρ_0 — средняя числовая концентрация частиц в монослое, N_i — число центров частиц, находящихся на координационной окружности радиуса R_i идеального кристалла, σ_0 — безразмерная начальная дисперсия радиусов координационных окружностей, выраженная в диаметрах частиц, a и b — коэффициенты, зависящие от η , типа решетки и σ_0 . Изменяя σ_0 , можно задавать степень упорядоченности моделируемого кристалла, а изменяя коэффициенты a и b — «дальность» его пространственного порядка. Радиальная функция, полученная с использованием линейной функции размытия (2), хорошо адаптирована для применения в ККП. Кроме того, ее расчет является быстрым и не требовательным к вычислительным ресурсам. Отметим, что при $\sigma(u) = \text{const}$ формула (1) переходит в известное выражение для радиальной функции, описывающей

гауссово размытие координационных окружностей в кристалле [56, 57].

Используя рассматриваемый подход, можно рассчитывать коэффициенты когерентного пропускания и отражения монослоев с неидеальными решетками [24, 25]. Степень их неидеальности задается с помощью функции размытия (2). Заметим, что неидеальность состоит только в отклонении положения частиц относительно узлов идеальной решетки (вакансии, дислокации и другие дефекты решетки не рассматриваются).

Сравним результаты расчетов в рамках разрабатываемой модели с известными литературными данными, полученными по методу, описанному в работах [58–60]. Он основан на теории дифракции низкоэнергетических электронов, развитой на случай электромагнитных полей. Сопоставим результаты, полученные в рамках этого метода для идеальных решеток, с результатами для сильноупорядоченных монослоев с близкими к идеальным решетками, рассчитанными по разрабатываемому нами методу. Для моделирования монослоя с решеткой, близкой к идеальной, функция размытия (2) задавалась в виде $\sigma(u) = \sigma_0 u$, где $\sigma_0 = 0.001$. Такие параметры, с одной стороны, позволяют описывать сильноупорядоченный монослой с малыми отклонениями центров частиц от узлов идеальной решетки, а с другой стороны, обеспечивают приемлемое количество необходимых вычислительных ресурсов.

Рассчитанный нами спектр отражения монослоя, имеющего близкую к идеальной треугольную решетку с коэффициентом заполнения $\eta = 0.9$, показан на рис. 1а штриховой линией. Сплошной линией на этом рисунке показаны результаты расчета работы [60] для монослоя с идеальной треугольной решеткой с максимальным коэффициентом заполнения $\eta = \eta_{max} = \pi/2\sqrt{3} \approx 0.9069$ (см. рис. 2 работы [60]).

Как видно из рис. 1а, в области значений параметра ω ($\omega = \sqrt{3}a/2\lambda$, где a — постоянная решетки, λ — длина падающей волны) меньших единицы, результаты расчетов, полученных обоими методами, за исключением узких областей резонансных пиков, практически совпадают.

При $\omega > 1$ значения R_c различаются. Вероятно, это обусловлено тем, что ККП не учитывает ближнее поле, которое при большой концентрации частиц может влиять на результирующую когерентную составляющую прошедшей и отраженной волн. На рис. 1б приведена зависимость максимальной интенсивности ближнего поля $|E|_{max}^2(\omega)$ на расстоянии $D/2$ от плоскости монослоя (D — диаметр частиц),

полученная в работе [60] (см. рис. 3 в этой работе). В области $1.00 < \omega < 1.53$ различия результатов существенны (см. рис. 1а). При $1.53 < \omega < 1.70$ они уменьшаются (см. рис. 1а), хотя в этой области максимальная интенсивность ближнего поля $|E|_{max}^2(\omega)$ имеет заметные значения (рис. 1б). Мы полагаем, что при дальнейшем росте параметра ω оба подхода будут давать еще более близкие результаты, поскольку влияние переоблучения между частицами на когерентное поле уменьшается с ростом их размера и/или уменьшением концентрации [24, 25, 61]. Таким образом, как следует из анализа данных, приведенных на рис. 1, различия в результатах, получаемых в рамках указанных методов, малы а) при малых значениях ближнего поля, б) для систем больших относительно длины волны частиц и в) для систем с малыми концентрациями частиц.

Как видно из рис. 1а, расчет обоими методами показывает наличие резких резонансных пиков на спектрах регулярно упакованных монослоев частиц. Авторы работы [60] указывают, что такие пики совпадают с пиками ближнего поля (см. рис. 1б), которые, в свою очередь, обусловлены преимущественно эванесцентными волнами. Отметим, что результаты, полученные нами в ККП, не учитывающем влияние ближнего поля и эванесцентных волн на когерентное пропускание и отражение монослоя, дают хорошее согласие с результатами работы [60] по положению резонансных пиков. При этом в областях значений $\omega < 1$ и $\omega > 1.5$ пики на спектрах отражения, полученные в рамках обоих подходов, совпадают по спектральному положению и близки по величине (см. рис. 1а).

На рис. 1б приведены зависимости коэффициента когерентного пропускания $T_c(\omega)$ и суммы $T_c(\omega) + R_c(\omega)$, рассчитанные в ККП. Видно, что при $\omega < 1$ сумма $T_c + R_c$, за исключением узких областей пиков, равна единице, т. е. в этой области некогерентная составляющая практически отсутствует.

Разработанный нами подход позволяет моделировать монослои с разной степенью пространственной упорядоченности частиц. Однако, как отмечено выше, он не учитывает влияние ближнего поля и некогерентной составляющей на коэффициенты когерентного пропускания T_c и отражения R_c мультислоя. Поэтому расчеты для многослойных систем мы проводим в спектральном диапазоне, где эти факторами можно пренебречь. Он соответствует значениям ω , находящимся слева от первого резонансного пика. Для рассмотренного монослоя это диапазон $\omega < 0.68$ (см. рис. 1а). Однако заметим, что качественно правильные результаты имеют ме-

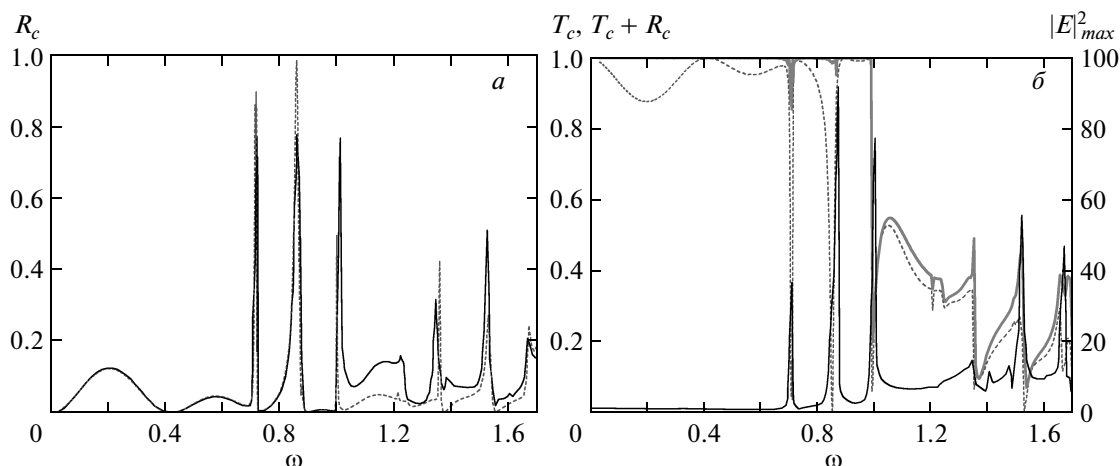


Рис. 1. Зависимости от параметра ω коэффициентов когерентного отражения R_c (а), когерентного пропускания T_c , суммы $T_c + R_c$, а также максимальной интенсивности ближнего поля $|E|_{max}^2(\omega)$ на расстоянии $D/2$ от плоскости монослоя [60] (б) для монослоя с треугольной решеткой из монодисперсных диэлектрических сфер с показателем преломления $n = 1.6$: а — данные работы [60], $D/a = 1.0$, $\eta = \eta_{max} = \pi/2\sqrt{3} \approx 0.9069$ (сплошная линия); результаты расчета в ККП, $\eta = 0.9$, радиальная функция рассчитана при $\sigma(u) = \sigma_0 u$, $\sigma_0 = 0.001$ (штриховая линия); б — расчет в КПП величин T_c (штриховая линия) и $T_c + R_c$ (серая сплошная); данные работы [60] для $|E|_{max}^2$ (черная сплошная)

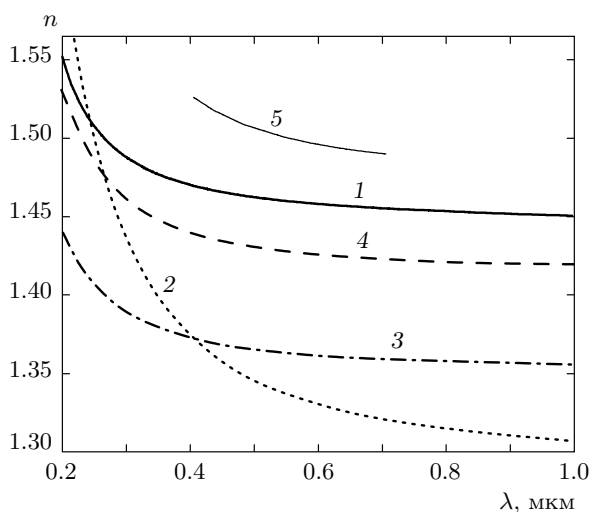


Рис. 2. Зависимости показателя преломления n оксида кремния (кривая 1) [62], метанола (2), этанола (3), циклогексана (4) [64] и толуола (5) [63] от длины волны λ

сто в более широкой области параметров.

При решении прямой и обратной задач мы рассматриваем систему, состоящую из монослоев однородных монодисперсных частиц оксида кремния (SiO_2) в нескольких окружающих средах: воздухе, метаноле, этаноле, циклогексане и толуоле. Показа-

тель преломления воздуха считаем равным единице. Спектральные зависимости показателя преломления $n(\lambda)$ остальных веществ приведены на рис. 2. Значения показателя преломления оксида кремния n_{SiO_2} получены путем линейной интерполяции по данным, приведенным для набора длин волн в [62], а значения показателя преломления толуола — по данным, приведенным в [63]. Показатели преломления метанола, этанола и циклогексана вычислялись с использованием дисперсионных формул [64].

Рассчитанные спектры коэффициентов когерентного пропускания и отражения монослоя с неидеальной треугольной решеткой из частиц SiO_2 в перечисленных средах приведены на рис. 3.

С ростом различия показателей преломления частиц n_p и окружающей среды n_{env} глубина резонансных пиков на спектрах коэффициентов когерентного пропускания и отражения регулярно упакованного монослоя увеличивается. Они наиболее сильно выражены для монослоя в воздухе (см. на рис. 3 диапазон длин волн 0.26–0.29 мкм). В спектральном диапазоне $0.4 \text{ мкм} < \lambda < 1.0 \text{ мкм}$ сумма $T_c + R_c$ равна единице для всех рассмотренных сред.

Расчеты для мультислоев проведены в спектральных диапазонах, находящихся в длинноволновой относительно положения резонансных пиков области, где сумма $T_c + R_c$ отдельных монослоев равна единице.

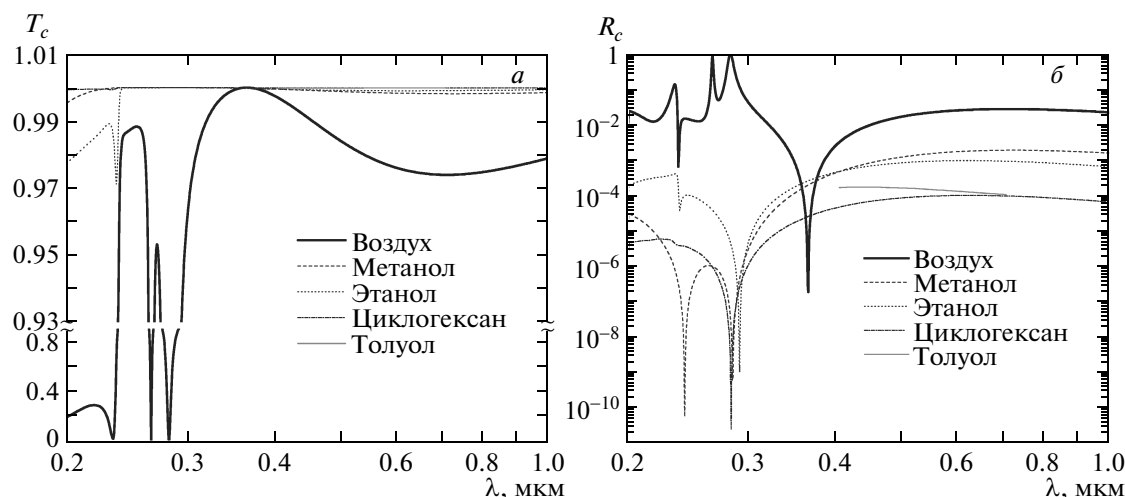


Рис. 3. Спектры коэффициентов когерентного пропускания T_c (а) и отражения R_c (б) монослоя с треугольной решеткой из частиц SiO_2 в воздухе, метаноле, этаноле, циклогексане и толуоле. Диаметр частиц $D = 0.2$ мкм, коэффициент заполнения монослоя $\eta = 0.5$, функция размытия $\sigma(u) = 0.01u$

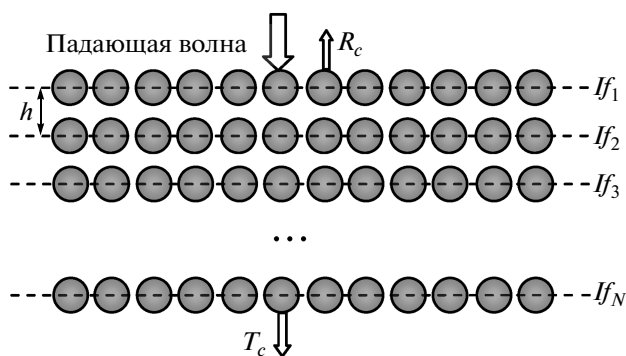


Рис. 4. Схематическое изображение многослойной системы (мультислоя), состоящей из монослоев сферических частиц (вид сбоку). Штриховыми линиями обозначены плоскости монослоев, h — расстояние между соседними монослоями, If_i — номера интерфейсов, T_c и R_c — соответственно коэффициенты когерентного пропускания и отражения

2.2. Мультислой

Рассмотрим систему (мультислой), состоящую из плоскопараллельных периодически расположенных монослоев частиц (рис. 4). На спектрах таких систем имеет место ФЗЗ — диапазон длин волн, в котором подавляется прохождение света. В этом же диапазоне резко возрастает отражение. Глубина, ширина и спектральное положение ФЗЗ зависят от свойств как системы в целом (числа монослоев, расстояния между ними), так и составляющих ее монослоев

(размера, показателя преломления и концентрации частиц, степени их упорядоченности и т. д.).

Найдем в рамках метода матрицы переноса [26–28] коэффициенты когерентного пропускания T_c и отражения R_c системы, используя рассчитанные в ККП амплитудные коэффициенты когерентного пропускания и отражения отдельных монослоев.

Будем рассматривать монослои как интерфейсы, характеризующиеся амплитудными коэффициентами пропускания и отражения, а пространства между ними как слои, характеризующиеся толщиной h (см. рис. 4). При расчете коэффициентов когерентного пропускания и отражения системы монослоев мы основываемся на выражениях, опубликованных в работах [22, 23].

Сравним результаты решения прямой задачи с экспериментальными данными по спектрам искусственного опала [41]. В частности, на рис. 2 в [41] показана измеренная спектральная зависимость коэффициента пропускания опала в среде с показателем преломления $n_{env} = 1.361$ (этанол). На ней наблюдаются два минимума: в области длин волн $\lambda = 0.35$ мкм и $\lambda = 0.67$ мкм [41]. Полученные нами результаты расчета спектра пропускания $T_c(\lambda)$ мультислоя, моделирующего указанную структуру, показаны на рис. 5 сплошной линией. Расчеты проведены при следующих параметрах: отдельные монослои имеют треугольную решетку из сферических частиц SiO_2 с коэффициентом заполнения $\eta = 0.68$, что соответствует отношению диаметра D частиц к

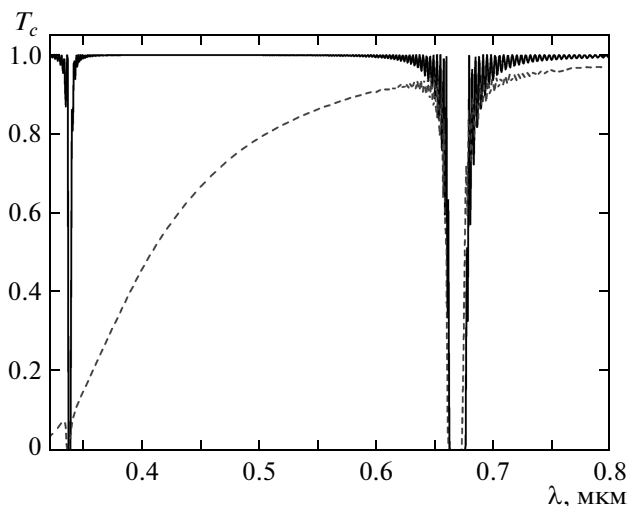


Рис. 5. Зависимости коэффициента когерентного пропускания T_c мультислой, состоящего из монослоев частиц SiO_2 , от длины волны λ . Число монослоев $N_{mnl} = 200$, расстояние между соседними монослоями $h = 0.239$ мкм, диаметр частиц $D = 0.3$ мкм. Сплошная линия — отдельные монослои имеют треугольную решетку, коэффициент заполнения $\eta = 0.68$, функция размытия $\sigma(u) = 0.01u$. Штриховая линия — отдельные монослои имеют частично упорядоченную структуру, $\eta = 0.6$

постоянной решетки a_t : $D/a_t = \sqrt{3}/2$. Диаметр частиц $D = 0.3$ мкм. Радиальная функция монослоев рассчитывалась при $\sigma(u) = 0.01u$. Число монослоев $N_{mnl} = 200$, расстояние между соседними монослоями $h = 0.239$ мкм. Эти параметры выбраны таким образом, чтобы спектральные положения экспериментального и теоретического минимумов ФЗЗ ($\lambda_{PVG} \approx 0.67$ мкм) имели наилучшее совпадение.

Для сравнения на рис. 5 (штриховая линия) приведена рассчитанная зависимость $T_c(\lambda)$ мультислой, состоящего из частично упорядоченных монослоев, имеющих коэффициент заполнения $\eta = 0.6$. Результаты для частично упорядоченного монослоя получены в ККП с использованием РФР, рассчитанной итерационным методом [51] численного решения интегрального уравнения Орнштейна–Цернике [65] в приближении Перкуса–Йефика [66] для твердых сфер. Как видно из рис. 5, оба спектра пропускания имеют два минимума, обусловленные периодичностью структуры в направлении волнового вектора падающей волны.

Мультислой, состоящий из монослоев с дальним порядком, практически не рассеивает излуче-

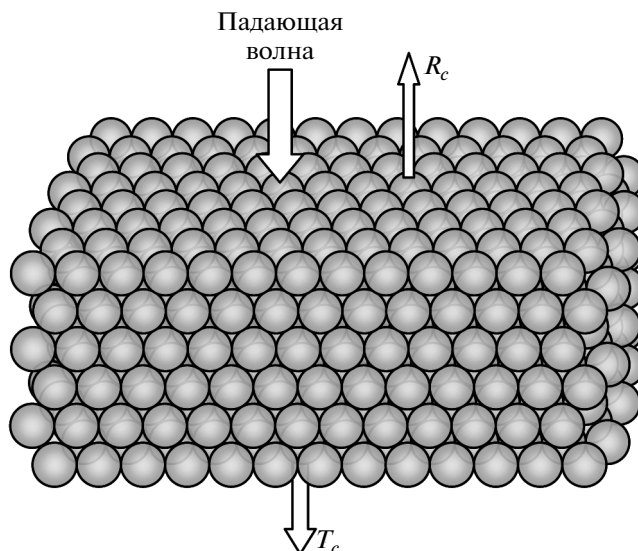


Рис. 6. Схематическое изображение сильноконцентрированного мультислой, состоящего из монослоев с треугольной решеткой монодисперсных сферических частиц

ние в рассмотренном спектральном диапазоне, что обусловлено большой степенью пространственной упорядоченности структуры (сплошная линия на рис. 5). Вследствие этого обе ФЗЗ ярко выражены на фоне практически полного пропускания системы вне этих областей. Неидеальность структуры обуславливает появление рассеяния, что приводит к сильному уменьшению коэффициента когерентного пропускания мультислой в коротковолновой области (штриховая линия на рис. 5). Тем не менее даже на фоне малых значений T_c спектр пропускания такой системы имеет минимум на длине волны $\lambda \approx 0.336$ мкм. Таким образом, штриховая кривая на рис. 5 качественно описывает вид экспериментальной зависимости [41]. Результаты расчетов показывают, что тип пространственной упорядоченности в отдельных монослоях практически не влияет на глубину и спектральное положение минимума ФЗЗ при одинаковых коэффициентах заполнения монослоев [23]. Уменьшение концентрации частиц приводит к коротковолновому сдвигу спектрального положения ФЗЗ.

Как отмечено выше, модель частично упорядоченных монослоев для описания ФК можно использовать в ограниченном диапазоне коэффициентов заполнения, не превышающих, как правило, значение $\eta = 0.7$. Фотонный кристалл типа искусственного опала может иметь коэффициент заполнения,

близкий к предельному. Его структура показана схематически на рис. 6.

На рис. 7 показаны спектры коэффициента когерентного пропускания структуры, состоящей из частиц оксида кремния ($n_p = n_{\text{SiO}_2}$), и структур частиц с показателями преломления $n_p = 1.4$ и $n_p = 1.38$ [41]. Расчеты выполнены для систем монослоев с треугольной решеткой в этаноле. Диаметр частиц $D = 0.3$ мкм. Расстояние между соседними монослоями $h = 0.245$ мкм. При уменьшении относительного показателя преломления частиц глубина ФЗЗ уменьшается. Поэтому было выбрано число монослоев $N_{mnl} = 200$ для системы частиц с $n_p = n_{\text{SiO}_2}$ и $N_{mnl} = 500$ для систем с $n_p = 1.4$ и $n_p = 1.38$.

Как видно из сравнения результатов на рис. 5 и 7, спектральные положения минимумов ФЗЗ, соответствующих экспериментальным, можно получить при разных параметрах системы. Однако глубина и ширина ФЗЗ будут различными. Таким образом, спектральное положение, глубина и ширина ФЗЗ могут быть использованы для восстановления характеристик системы.

Приведем результаты решения прямой задачи, которые будут использованы при восстановлении показателя преломления частиц. На рис. 8 показаны рассчитанные спектры коэффициентов когерентного пропускания T_c и отражения R_c мультислоя, состоящего из 200 монослоев ($N_{mnl} = 200$), спектры пропускания и отражения которых приведены на рис. 3.

Минимумы ФЗЗ реализуются на следующих длинах волн: $\lambda_{PBG} = 0.4614$ мкм для системы в воздухе; $\lambda_{PBG} = 0.5469$ мкм в метаноле; $\lambda_{PBG} = 0.5543$ мкм в этаноле; $\lambda_{PBG} = 0.5737$ мкм в циклогексане; $\lambda_{PBG} = 0.5953$ мкм в толуоле. Им соответствуют максимумы на спектрах когерентного отражения (см. рис. 8б).

3. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА

Пусть известны характеристики дисперсной структуры, показатель преломления n_{env} окружающей структуру среды, длина волны λ_{PBG} , на которой имеет место минимум коэффициента когерентного пропускания ФЗЗ, но неизвестен показатель преломления частиц n_p . Рассмотрим задачу его восстановления.

Для нахождения показателя преломления частиц будем изменять его в диапазоне возможных (предполагаемых) значений и решать для каждого из них прямую задачу. Восстановленным показате-

лем преломления частиц будем считать такое его значение $n_{p,ret}$, при котором на длине волны λ_{PBG} минимума ФЗЗ, известной из реального эксперимента или результатов компьютерного моделирования, достигается рассчитанный минимум ФЗЗ. Такой способ назовем восстановлением по спектральному положению минимума ФЗЗ.

Если известно не только спектральное положение (λ_{PBG}), но и значение (T_{PBG}) минимума ФЗЗ на этой длине волны, то восстановленным показателем преломления частиц будем считать такое его значение $n_{p,ret}$, при котором на длине волны λ_{PBG} рассчитанный минимум ФЗЗ, $T_{PBG,ret}$, наиболее близок к T_{PBG} . Такой способ назовем восстановлением по значению минимума коэффициента когерентного пропускания ФЗЗ, или, для краткости, по значению минимума ФЗЗ. Оба способа детально рассмотрены в следующем разделе.

Описываемый подход позволяет восстановить показатель преломления частиц на длине волны, соответствующей минимуму ФЗЗ структуры, в среде с известным показателем преломления. Для нахождения показателя преломления частиц на других длинах волн необходимо изменение спектрального положения ФЗЗ. Это можно сделать, например, помещая структуру в различные среды.

Рассмотрим задачу восстановления показателя преломления частиц мультислоя, состоящего из монослоев однородных сферических монодисперсных частиц оксида кремния (SiO_2).

3.1. Восстановление показателя преломления частиц при глубоких ФЗЗ

Рассмотрим влияние изменения показателя преломления частиц на спектр коэффициента когерентного пропускания мультислоя на примере простейшей модели. На рис. 9а показаны спектры показателя преломления оксида кремния n_{SiO_2} и «модельные» спектры показателя преломления частиц, определяемые следующим образом: $n_1^* = n_{\text{SiO}_2} - 0.02$, $n_2^* = n_{\text{SiO}_2} - 0.01$, $n_3^* = n_{\text{SiO}_2} + 0.01$, $n_4^* = n_{\text{SiO}_2} + 0.02$. На рис. 9б показаны спектры коэффициента когерентного пропускания мультислоя, состоящего из 200 монослоев в метаноле, в области ФЗЗ, рассчитанные с использованием приведенных на рис. 9а спектров.

Приведенные результаты показывают чувствительность спектра пропускания в области ФЗЗ к изменению показателя преломления частиц.

Восстановим показатель преломления частиц на длинах волн минимумов фотонных запрещенных

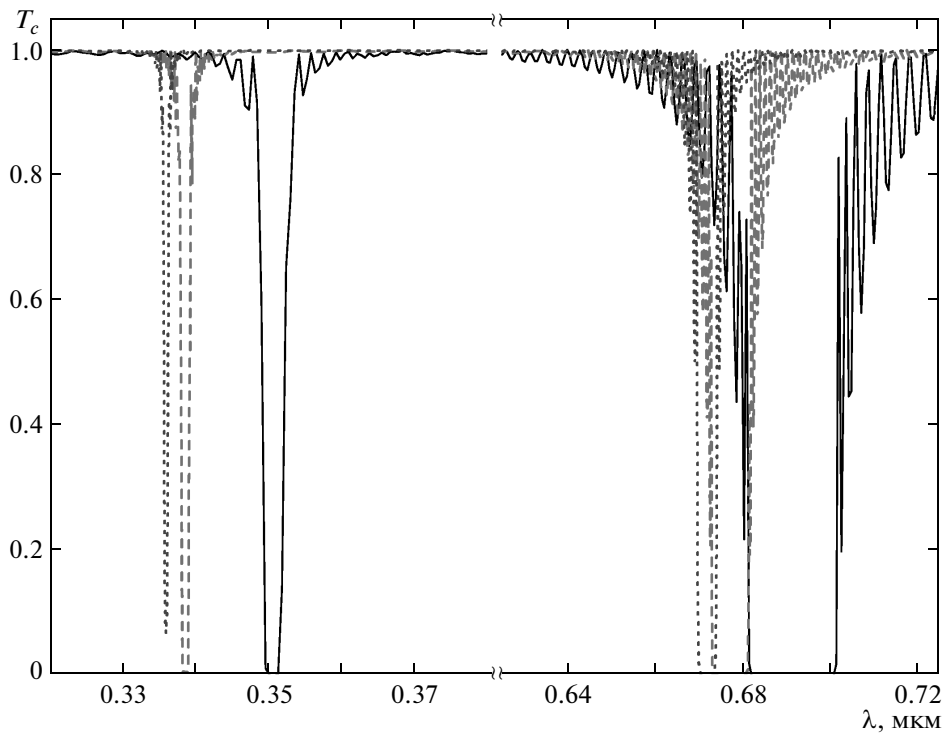


Рис. 7. Зависимость коэффициента когерентного пропускания T_c мультислоя от длины волны λ . $D = 0.3$ мкм, $\eta = 0.9$, $\sigma(u) = 0.001u$, $h = 0.245$ мкм, $n_{env} = 1.361$ (этанол). Отдельные монослои имеют треугольную решетку. Сплошная линия — $N_{mnl} = 200$, $n_p = n_{SiO_2}$; штриховая линия — $N_{mnl} = 500$, $n_p = 1.4$; пунктирная линия — $N_{mnl} = 500$, $n_p = 1.38$

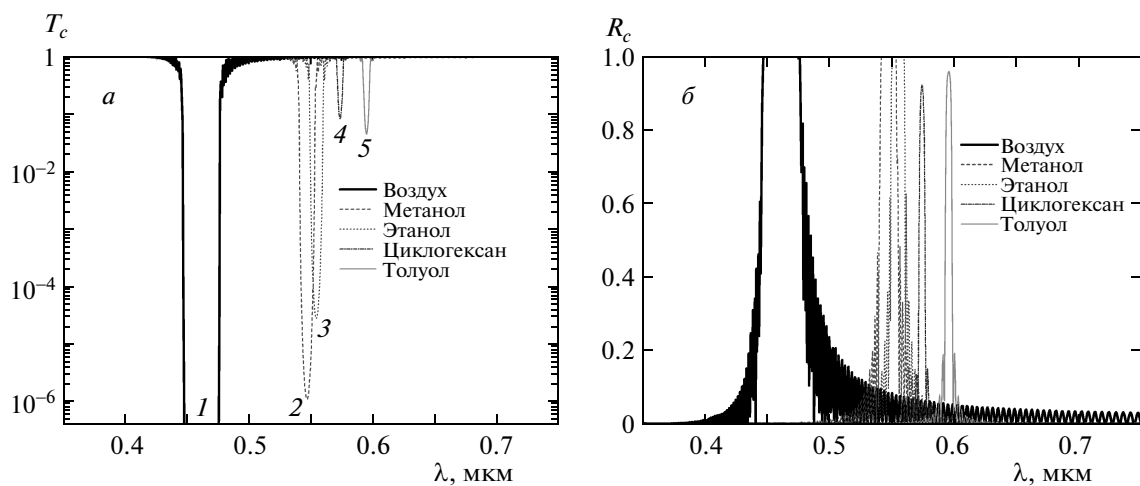


Рис. 8. Спектры коэффициента когерентного пропускания T_c (а) и отражения R_c (б) мультислоя, состоящего из 200 монослоев с треугольной решеткой из частиц SiO_2 в воздухе, метаноле, этаноле, циклогексане и толуоле. $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$. Число монослоев $N_{mnl} = 200$, расстояние между монослоями $h = 0.2$ мкм. Цифрами обозначены номера минимумов ФЗЗ на спектрах мультислоя в воздухе, $\lambda_{PBG} = 0.4614$ мкм (1), метаноле, $\lambda_{PBG} = 0.5469$ мкм (2), этаноле, $\lambda_{PBG} = 0.5543$ мкм (3), циклогексане, $\lambda_{PBG} = 0.5737$ мкм (4), толуоле, $\lambda_{PBG} = 0.5953$ мкм (5)

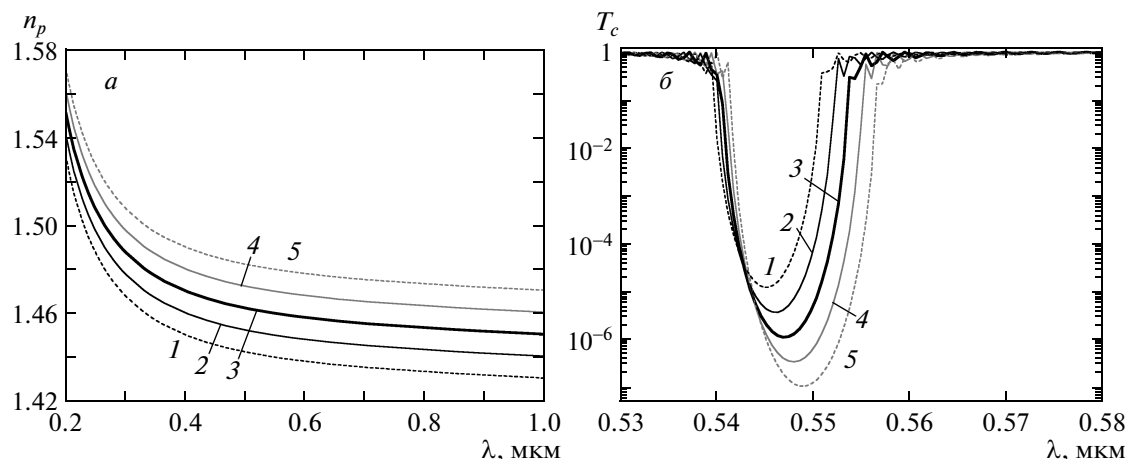


Рис. 9. а) Спектры показателя преломления частиц оксида кремния n_{SiO_2} (кривая 3) и частиц с показателями преломления $n_1^* = n_{\text{SiO}_2} - 0.02$ (1), $n_2^* = n_{\text{SiO}_2} - 0.01$ (2), $n_3^* = n_{\text{SiO}_2} + 0.01$ (4), $n_4^* = n_{\text{SiO}_2} + 0.02$ (5). б) Спектры коэффициента когерентного пропускания мультислоя частиц SiO_2 (кривая 3), $\lambda_{\text{PBG}} = 0.5469$ и мультислоя частиц с показателем преломления $n_1^* = n_{\text{SiO}_2} - 0.02$ (1, $\lambda_{\text{PBG}} = 0.5452$), $n_2^* = n_{\text{SiO}_2} - 0.01$ (2, $\lambda_{\text{PBG}} = 0.5463$), $n_3^* = n_{\text{SiO}_2} + 0.01$ (4, $\lambda_{\text{PBG}} = 0.5480$), $n_4^* = n_{\text{SiO}_2} + 0.02$ (5, $\lambda_{\text{PBG}} = 0.5492$) в метаноле; $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $N_{\text{mnl}} = 200$, $h = 0.2$ мкм. В скобках указаны значения длин волн λ_{PBG} [мкм] минимумов ФЗЗ для каждого спектра

зон, показанных выше на рис. 8. Рассмотрим восстановление по спектральному положению λ_{PBG} (способ 1) и по значению T_{PBG} (способ 2) минимума ФЗЗ, т.е. по значению коэффициента когерентного пропускания на длине волны λ_{PBG} минимума ФЗЗ.

Реальные n_p и восстановленные $n_{p,\text{ret}}$ значения показателя преломления частиц SiO_2 для длин волн λ_{PBG} минимумов ФЗЗ показаны на рис. 10а. На рис. 10б показана относительная погрешность ε_{rel} их восстановления, рассчитываемая по формуле

$$\varepsilon_{\text{rel}} = \frac{n_{p,\text{ret}} - n_p}{n_p} \cdot 100\%. \quad (3)$$

Поиск значений $n_{p,\text{ret}}$ проводился в диапазоне от 1.0 до 2.0 с шагом 0.0002.

При восстановлении по спектральному положению минимума ФЗЗ (способ 1) восстановленным считаем такое значение показателя преломления $n_{p,\text{ret}}$, при котором на длине волны λ_{PBG} рассчитанный минимум коэффициента когерентного пропускания T_c имеет наименьшее значение.

При восстановлении по значению минимума ФЗЗ (способ 2) восстановленным считаем такое значение $n_{p,\text{ret}}$, при котором на длине волны λ_{PBG} рассчитанный минимум коэффициента когерентного пропускания T_c наиболее близок к T_{PBG} .

Для нахождения именно минимума $T_{c,\text{min}}$ коэффициента когерентного пропускания, а не наимень-

шего значения T_c для данного значения λ_{PBG} расчеты проводились не только для длины волны λ_{PBG} , но и для двух соседних, близких к λ_{PBG} длин волн ($\lambda_1 = \lambda_{\text{PBG}} - 0.2$ нм, $\lambda_2 = \lambda_{\text{PBG}} + 0.2$ нм). Мы считали, что значение коэффициента когерентного пропускания мультислоя на длине волны λ_{PBG} является минимумом ($T_c(\lambda_{\text{PBG}}) = T_{c,\text{min}}(\lambda_{\text{PBG}})$), если $T_c(\lambda_{\text{PBG}}) < T_c(\lambda_1)$ и $T_c(\lambda_{\text{PBG}}) < T_c(\lambda_2)$. При этом предполагалось, что значения показателя преломления частиц на длинах волн λ_{PBG} , λ_1 и λ_2 совпадают.

Как видно из рис. 10, восстановленные значения показателя преломления частиц, полученные по данным численного моделирования λ_{PBG} и T_{PBG} , имеют хорошее соответствие с реальными значениями ($|\varepsilon_{\text{rel}}| < 0.12\%$). Лучшее соответствие имеет место при восстановлении по значению минимума ФЗЗ (способ 2). Однако, с точки зрения реального эксперимента, в некоторых случаях этот способ восстановления может оказаться неприемлемым, например когда невозможно определить значение минимума ФЗЗ с достаточной точностью.

Отметим, что точность восстановления сильно зависит от точности нахождения минимума ФЗЗ (см. разд. 3.3). Приведенные выше погрешности восстановления получены в условиях, когда модельный спектр $T_c(\lambda)$ рассчитывался с шагом 0.57 нм.

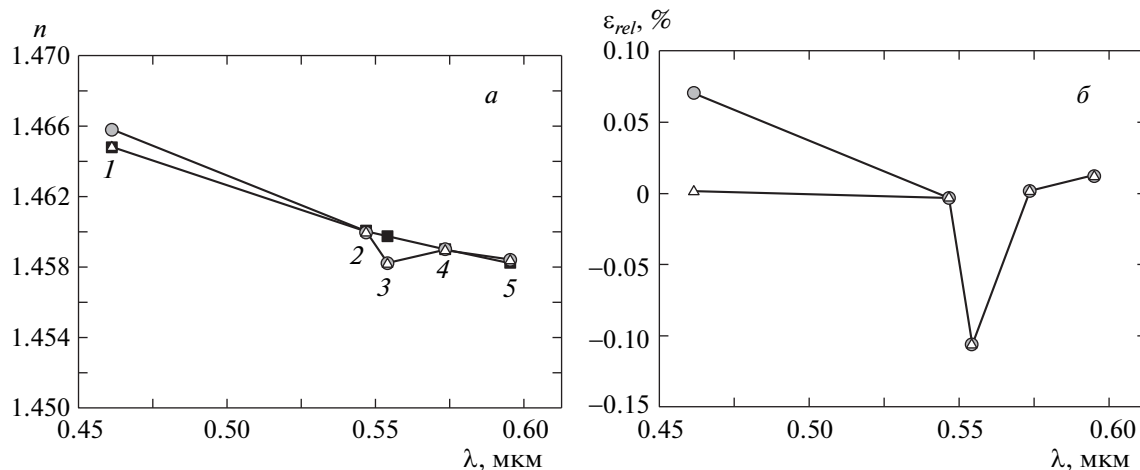


Рис. 10. а) Реальные (■ — n_{SiO_2} [62]) и восстановленные значения показателя преломления частиц SiO_2 на длинах волн λ_{PBG} минимумов ФЗЗ (серые кружки — $n_{p,ret,\lambda_{PBG}}$, Δ — $n_{p,ret,T_{PBG}}$). Расчеты проведены для мультислоя, состоящего из 200 монослоев ($N_{mnl} = 200$) с треугольной решеткой из частиц SiO_2 в воздухе, метаноле, этаноле, циклогексане и толуоле. Диапазон поиска значений показателя преломления частиц $1.0 < n_p < 2.0$. $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $h = 0.2$ мкм. Цифрами обозначены номера длин волн минимума фотонной запрещенной зоны λ_{PBG} на спектрах мультислоя в воздухе, $\lambda_{PBG} = 0.4614$ мкм (1), метаноле, $\lambda_{PBG} = 0.5469$ мкм (2), этаноле, $\lambda_{PBG} = 0.5543$ мкм (3), циклогексане, $\lambda_{PBG} = 0.5737$ мкм (4), толуоле, $\lambda_{PBG} = 0.5953$ мкм (5). б) Относительная погрешность восстановления: серые кружки — λ_{PBG} ; Δ — T_{PBG}

3.2. Восстановление показателя преломления при неглубоких ФЗЗ

В ряде случаев, например при малом числе монослоев или малом контрасте показателей преломления частиц и окружающей среды, глубина ФЗЗ мала. Рассмотрим восстановление показателя преломления частиц при неглубоких ФЗЗ.

На рис. 11 показаны рассчитанные спектры коэффициента когерентного пропускания мультислоя, состоящего из 30, 60 и 100 монослоев сферических частиц оксида кремния, находящихся в толуоле. Видно, как изменяется глубина ФЗЗ с ростом количества монослоев. Отметим, что на начальной стадии формирования ФЗЗ при изменении числа монослоев изменяется не только глубина, но и спектральное положение минимума ФЗЗ (см. значения λ_{PBG} указанные в подписи к рис. 11).

В таблице указаны реальное (n_{SiO_2}) и восстановленные ($n_{p,ret,\lambda_{PBG}}$, $n_{p,ret,T_{PBG}}$) значения показателя преломления частиц SiO_2 для систем с разным количеством N_{mnl} монослоев. Их спектры представлены на рис. 11.

Как видно из результатов расчетов, приведенных в таблице, при восстановлении по λ_{PBG} для системы из 30 и 60 монослоев имеют место значительные ошибки восстановления n_p . При восстановлении по

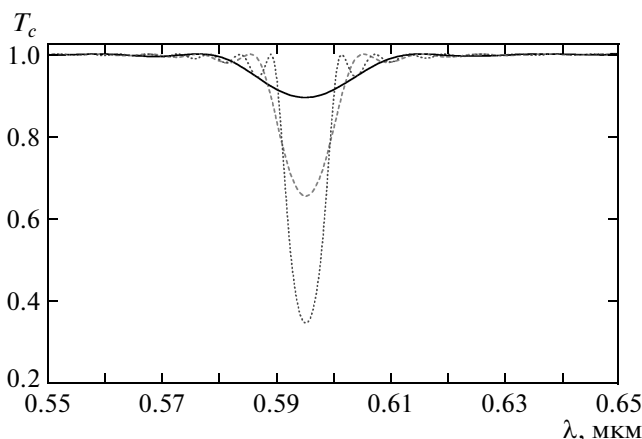


Рис. 11. Спектры коэффициента когерентного пропускания мультислоя, состоящего из 30 (сплошная линия, $\lambda_{PBG} = 0.5952$), 60 (штриховая линия, $\lambda_{PBG} = 0.5953$) и 100 (пунктирная линия, $\lambda_{PBG} = 0.5953$) монослоев частиц оксида кремния SiO_2 в толуоле; $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $h = 0.2$ мкм

T_{PBG} для всех рассмотренных систем и по λ_{PBG} для системы из 100 монослоев погрешность мала: $\epsilon_{rel} = 0.012\%$.

Для выяснения причины большой погрешности

Таблица

n_{SiO_2}	N_{mnl}	$n_{p,ret,\lambda_{PBG}}$	$\varepsilon_{rel,\lambda_{PBG}}, \%$	$n_{p,ret,T_{PBG}}$	$\varepsilon_{rel,T_{PBG}}, \%$
1.4582	30	1.0022	-31.27	1.4584	0.012
	60	1.2208	-16.28		
	100	1.4584	0.012		

Примечание. Значения $n_{p,ret,\lambda_{PBG}}$ и $\varepsilon_{rel,\lambda_{PBG}}$ ($n_{p,ret,T_{PBG}}$ и $\varepsilon_{rel,T_{PBG}}$) — соответственно результат и погрешность восстановления показателя преломления (по λ_{PBG} (T_{PBG}))

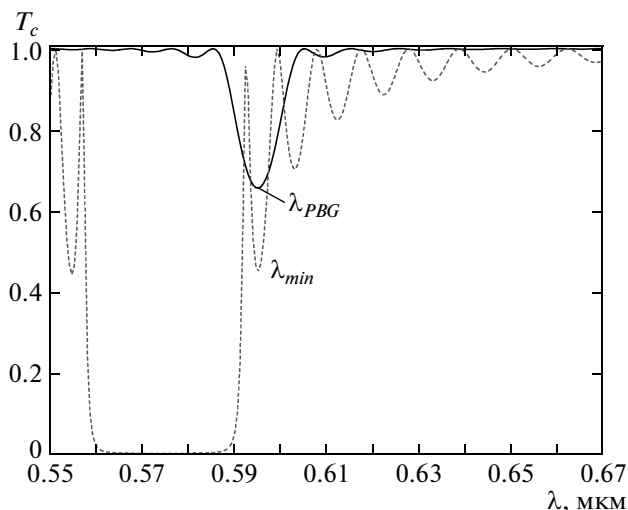


Рис. 12. Спектры коэффициента когерентного пропускания мультислоя из 60 монослоев частиц SiO₂ (сплошная линия) и частиц с показателем преломления $n_p = 1.2208$ (штриховая линия), находящихся в толуоле; $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $h = 0.2$ мкм

восстановления по λ_{PBG} при больших T_{PBG} рассмотрим спектры пропускания многослойной системы частиц с показателем преломления SiO₂ и с показателем преломления, восстановленным с большой ошибкой (см. вторую строку в таблице). На рис. 12 показаны спектры коэффициента когерентного пропускания системы из 60 монослоев частиц SiO₂ и частиц с $n_p = 1.2208$. При большом различии показателей преломления частиц и окружающей среды, ФЗЗ мультислоя становится глубокой и широкой, а на спектре коэффициента пропускания около границ ФЗЗ возникают большие осцилляции (рис. 12). Спектральное положение минимума осцилляции $\lambda_{min} = 0.5953$ может совпасть с положением искомого минимума ФЗЗ ($\lambda_{PBG} = 0.5953$ мкм, $T_{PBG} = 0.6556$ мкм), а его значение $T_{min} = 0.4495$

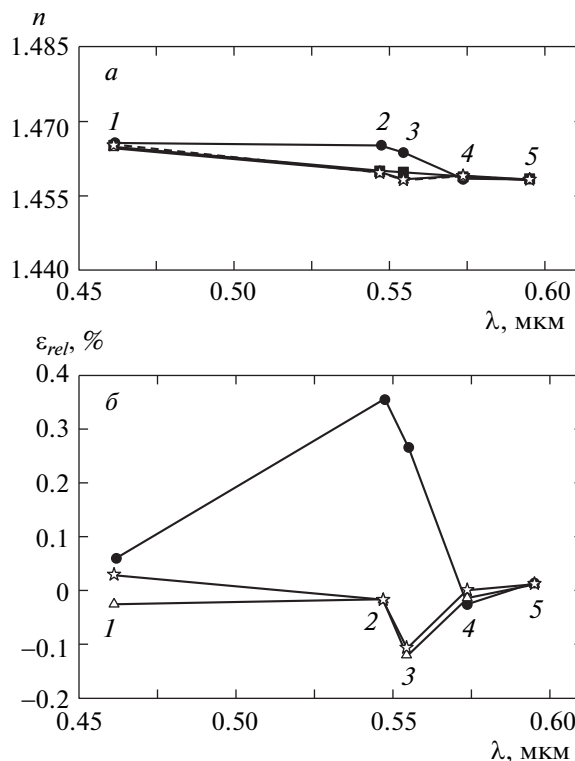


Рис. 13. а) Реальные (квадраты) и восстановленные по спектральному положению (λ_{PBG}) значения абсолютного показателя преломления частиц SiO₂ для системы из 30 (кружки), 60 (треугольники) и 100 (звездочки) монослоев. Диапазон поиска значений показателя преломления частиц $1.3 < n_p < 1.6$; $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $h = 0.2$ мкм. б) Относительная погрешность восстановления. Цифрами обозначены среды, в которых находятся частицы: воздух (1), метанол (2), этанол (3), циклогексан (4), толуол (5)

может оказаться наименьшим из всех найденных. Таким образом, критерии восстановления по спектральному положению выполняются, но найденное значение $n_{p,ret}$ сильно отличается от искомого. По-

добная ошибка может иметь место и при восстановлении по T_{PBG} , однако для ее возникновения должны совпасть не только спектральные положения, но и значения минимумов коэффициента когерентного пропускания. Вероятность такого события гораздо меньше.

Одним из способов обеспечения хорошей точности восстановления по λ_{PBG} является уменьшение диапазона поиска показателя преломления частиц. Он особенно эффективен, если известна априорная информация о возможных значениях n_p , поскольку таким образом можно не только исключить неправильные значения $n_{p,ret}$, но и значительно ускорить процесс восстановления. Предположим, что показатель преломления n_p рассматриваемых нами частиц оксида кремния находится в области значений $1.3 < n_p < 1.6$. На рис. 13а показаны реальные и восстановленные по λ_{PBG} значения показателя преломления частиц SiO_2 , а на рис. 13б — относительная погрешность их восстановления.

Анализ полученных результатов показывает, что уменьшение диапазона поиска возможных значений приводит к исключению ошибок восстановления, обусловленных совпадением спектрального положения минимума осцилляции с λ_{PBG} , что особенно важно для случаев неглубоких ФЗЗ. Погрешность восстановления по спектральному положению (λ_{PBG}) приближается к погрешности восстановления по значению минимума ФЗЗ (T_{PBG}), которая для системы в рассмотренных на рис. 13 средах составляет $|\varepsilon_{rel, T_{PBG}}| < 0.3\%$.

3.3. Моделирование погрешности измерений

Рассмотрим влияние неточности измерения (или задания — в случае моделирования) значения T_{PBG} на результат восстановления n_p . На рис. 14 показаны реальные и восстановленные по T_{PBG} значения абсолютного показателя преломления частиц SiO_2 системы, спектры которой показаны на рис. 8. На рис. 15 приведена относительная погрешность восстановления. Восстановление проводилось при значении минимума ФЗЗ (T_{PBG}), полученном при решении прямой задачи, и значениях T_{PBG}^* , моделирующих погрешность задания T_{PBG} . Они определялись следующим образом:

$$T_{PBG}^* = T_{PBG} + \varepsilon_T T_{PBG}, \quad (4)$$

где ε_T — относительная погрешность измерения (задания) T_{PBG} .

Как следует из результатов расчетов, при неточном задании значений минимума ФЗЗ увеличивает-

ся погрешность восстановления показателя преломления частиц. Ее величина различна при отклонении T_{PBG}^* в большую и меньшую стороны относительно T_{PBG} . Так, при отклонении T_{PBG}^* более чем на 5% в сторону меньших значений, результат восстановления n_p практически не изменяется (см. рис. 14а и 15а). При отклонении T_{PBG}^* в сторону больших значений погрешность восстановления в целом возрастает пропорционально величине ε_T (см. рис. 14б и 15б). Тем не менее для рассмотренных значений ε_T максимальная погрешность восстановления $|\varepsilon_{rel}| < 0.25\%$.

Таким образом, из полученных результатов следует, что даже при значительной ошибке в задании T_{PBG} , разрабатываемый подход позволяет получать хорошую точность восстановления показателя преломления частиц при достаточно глубоких ФЗЗ.

Для оценки погрешности измерения T_{PBG} в случае неглубоких ФЗЗ мы восстановили показатель преломления частиц SiO_2 системы из 60 монослоев в разных средах при $\varepsilon_T = 0$, $\varepsilon_T = \pm 0.01$, $\varepsilon_T = \pm 0.05$, $\varepsilon_T = \pm 0.1$, $\varepsilon_T = \pm 0.3$ и $\varepsilon_T = \pm 0.5$. Анализ показал, что при больших значениях T_{PBG} значительная погрешность восстановления n_p может иметь место уже при $\varepsilon_T = \pm 0.05$.

На рис. 16а показаны реальные и восстановленные по T_{PBG} значения абсолютного показателя преломления частиц SiO_2 при $\varepsilon_T = 0$ и $\varepsilon_T = \pm 0.1$, а на рис. 16б — относительная погрешность восстановления. Видно, что при $\varepsilon_T = \pm 0.1$ имеет место большая погрешность восстановления показателя преломления частиц для системы в циклогексане и толуоле. Для системы в циклогексане восстановленное значение $n_{p,ret, T_{PBG}} = 1.7816$. Эта величина сильно отличается от реальных значений показателя преломления оксида кремния (см. рис. 2).

Рассмотрим причину возникновения большой погрешности восстановления. Рассчитаем спектры коэффициента когерентного пропускания системы частиц оксида кремния (T_{c, SiO_2}) и системы частиц с показателем преломления $n_p = 1.7816$ в циклогексане. Они показаны на рис. 17. Видно, что неточное определение минимума ФЗЗ приводит к тому, что минимум осцилляции на рассчитанном спектре T_c практически совпадает с T_{PBG}^* . Он является наиболее близким к T_{PBG}^* среди найденных минимумов коэффициента пропускания. Это и является причиной большой ошибки восстановления n_p . Для исключения таких ошибок восстановления, если невозможно увеличить точность измерения T_{PBG} , следует уменьшать диапазон поиска n_p (см. разд. 3.2).

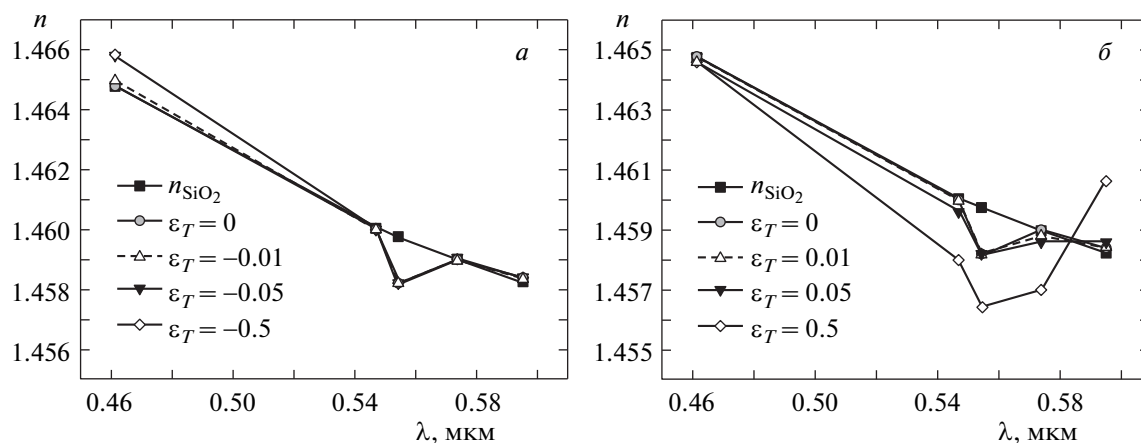


Рис. 14. Реальные (квадраты) и восстановленные по T_{PVG} значения абсолютного показателя преломления частиц SiO_2 для системы из 200 монослоев при $\epsilon_T = 0$ (а, б), $\epsilon_T = -0.01, -0.05, -0.5$ (а) и $\epsilon_T = 0.01, 0.05, 0.5$ (б). Диапазон поиска значений показателя преломления частиц $1.0 < n_p < 2.0$; $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $h = 0.2$ мкм

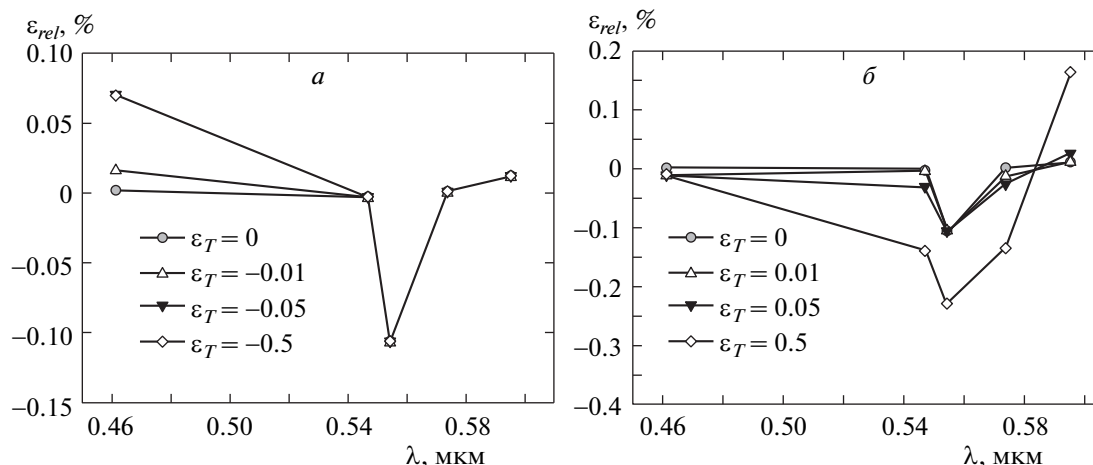


Рис. 15. Относительная погрешность восстановления n_p (по данным рис. 14)

4. РЕЗУЛЬТАТЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМУ ДАННОМУ О ФЗЗ ИСКУССТВЕННОГО ОПАЛА

Искусственные (синтетические) опалы являются объектами интенсивных исследований. Это обусловлено относительной простотой создания на их основе ФК для видимой области спектра. Такие ФК используются в линейных и нелинейных оптических устройствах [13, 19, 40–43, 67]. Частицы оксида кремния, из которого состоит опал [19, 41, 67], имеют показатель преломления, близкий к показателям преломления, характерным для жидкостей. Заполняя пустоты между частицами жидкостями с различны-

ми показателями преломления, можно достаточно просто изменять оптические характеристики системы и создавать структуры типа обратного опала.

Из-за особенностей создания искусственных опалов частицы оксида кремния, из которых он состоит, могут иметь не однородную, а пористую структуру [19, 41, 67–69]. Это приводит к тому, что эффективный (средний по объему частицы) показатель преломления частиц $n_{\text{SiO}_2}^*$ отличается от показателя преломления n_{SiO_2} однородного SiO_2 . По оценкам, приведенным в работах [19, 67], $n_{\text{SiO}_2}^* < 1.46$.

Используя описанный выше подход, найдем показатель преломления частиц искусственного опала

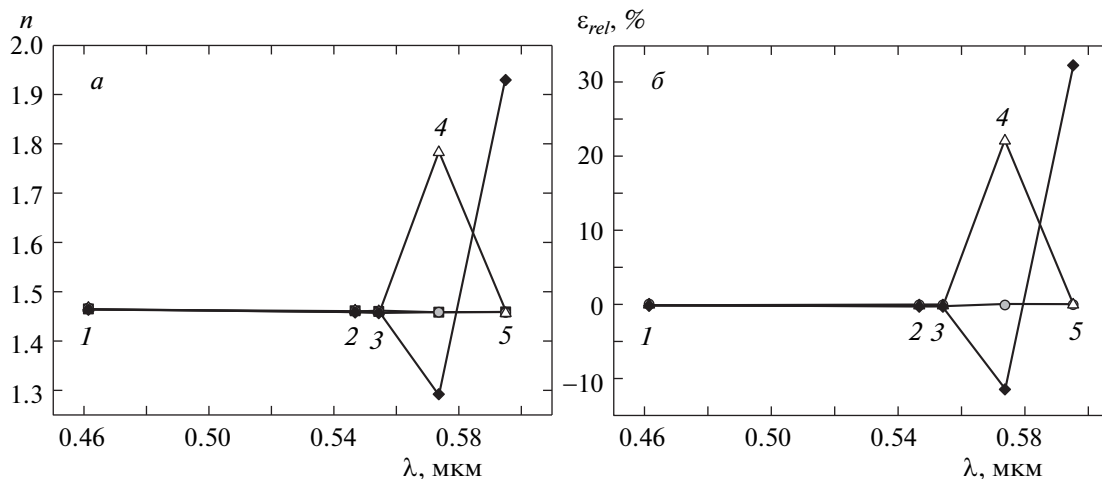


Рис. 16. а) Реальные (квадраты) и восстановленные по T_{PBG} значения абсолютного показателя преломления частиц SiO_2 для системы из 60 монослоев при $T_{PBG}^* = T_{PBG}$ (кружки) и отклонении значения минимума ФЗЗ, задаваемого при восстановлении, на -10% (треугольники) и 10% (ромбы) от T_{PBG} . Диапазон поиска значений показателя преломления частиц $1.0 < n_p < 2.0$; $D = 0.2$ мкм, $\eta = 0.5$, $\sigma(u) = 0.01u$, $h = 0.2$ мкм. б) относительная погрешность восстановления для частиц в воздухе (1), метаноле (2), этаноле (3), циклогексане (4), толуоле (5)

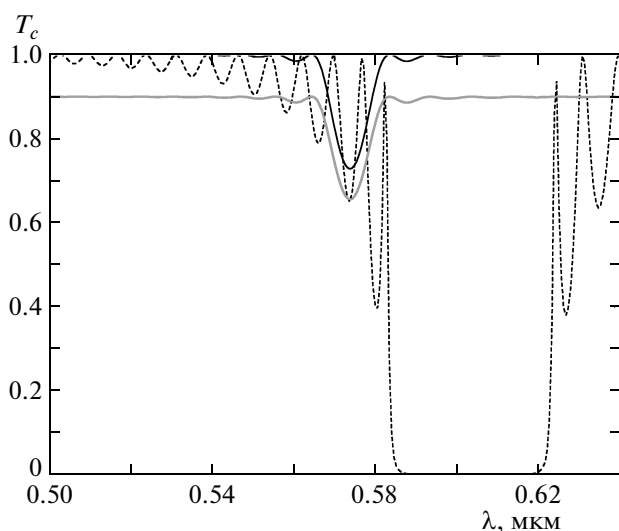


Рис. 17. Спектры коэффициента когерентного пропускания системы из 60 монослоев для частиц оксида кремния SiO_2 , T_{c,SiO_2} (черная сплошная линия, $\lambda_{PBG} = 0.5737$ мкм, $T_{PBG} = 0.728$) и частиц с $n_p = 1.7816$ (штриховая линия, $\lambda_{min} = 0.5737$ мкм, $T_{min} = 0.650$) в циклогексане, а также спектр $T_{c^*} = T_{c,\text{SiO}_2} - 0.1T_{c,\text{SiO}_2}$ (серая сплошная линия, $T_{PBG} = 0.655$)

по экспериментальным данным о ФЗЗ на его спектре. Воспользуемся результатами измерений, опубликованными в работе [41].

На рис. 18а приведены экспериментальные [41] и рассчитанные нами зависимости спектрального положения минимума ФЗЗ (λ_{PBG}) искусственного опала от показателя преломления n_{env} окружающей среды. Показаны пять рассчитанных зависимостей $\lambda_{PBG}(n_{env})$ для разных значений показателя преломления частиц n_p . Верхняя и нижняя зависимости на рис. 18а получены при $n_p = 1.4528$ и $n_p = 1.33$, соответственно. При этих n_p совпадают экспериментальные и рассчитанные значения λ_{PBG} на спектрах опалов, поры которых заполнены жидкостями с показателями преломления $n_{env} = 1.328$ и $n_{env} = 1.432$. Кроме названных на рис. 18а представлены еще две зависимости $\lambda_{PBG}(n_{env})$, полученные для структур из частиц с показателями преломления $n_p = 1.4$ и $n_p = 1.382$ [41]. Результаты рассчитаны для значений n_{env} , приведенных в [41]. На рис. 18а они обозначены символами. Можно видеть, что зависимость $\lambda_{PBG}(n_{env})$ линейна при постоянном n_p . Соответственно, если предположить, что структура образца одинакова в разных экспериментах, то следует сделать вывод, что изменяется эффективный показатель преломления частиц.

На рис. 18б показаны восстановленные значения эффективного показателя преломления частиц $n_{p,ret,\lambda_{PBG}}$. Они получены по данным о спектральных положениях минимумов ФЗЗ на экспериментальной зависимости $\lambda_{PBG}(n_{env})$ [41]. На рис. 18б показаны также значения показателя преломления

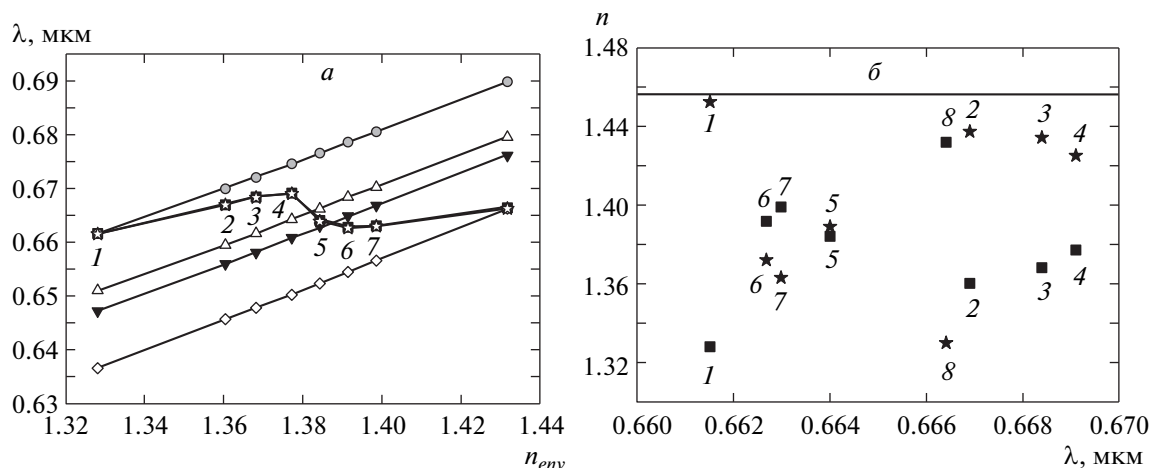


Рис. 18. а) Зависимости спектрального положения λ_{PBG} минимума пропускания ФЗЗ искусственного опала, помещенного в разные среды, от показателя преломления среды n_{env} : квадраты — данные эксперимента работы [41], остальные символы — результаты расчета для $n_p = 1.4528$ (кружки), 1.400 (белые треугольники), 1.382 (черные треугольники), 1.330 (ромбы), $n_{p,ret}$ (звездочки). б) Восстановленные по данным о λ_{PBG} работы [41] значения показателя преломления $n_{p,ret}, \lambda_{PBG}$ частиц (звездочки), значения показателя преломления жидкостей n_{env} [41] (квадраты) и зависимость показателя преломления SiO_2 от длины волны (сплошная линия). Диаметр частиц $D = 0.3$ мкм, коэффициент заполнения отдельного монослоя с треугольной решеткой $\eta = 0.68$, количество монослоев $N_{mnl} = 200$, расстояние между монослоями $h = 0.2395$ мкм. Радиальная функция регулярно упакованного монослоя частиц рассчитана при $\sigma(u) = 0.01u$. Цифрами обозначены номера экспериментов

n_{env} жидкостей и спектральная зависимость показателя преломления SiO_2 [62]. Видно, что все восстановленные значения меньше n_{SiO_2} . Для экспериментов 1–4 и 6–8 значения эффективного показателя преломления частиц больше и меньше показателя преломления жидкостей, соответственно. В экспериментах 5 и 6 они близки к показателям преломления жидкостей. Эти результаты согласуются с оценкой относительного показателя преломления частиц, сделанной в [41].

Из данных рис. 18б видно, что эффективный показатель преломления частиц зависит от показателя преломления иммерсионной жидкости. Это может быть обусловлено пористой структурой частиц, что согласуется с экспериментальными данными [19, 67, 68]. При частичном заполнении пор жидкостью эффективный показатель преломления частиц изменяется. Как видно из рис. 18б, он уменьшается с ростом n_{env} . Это дает основание сделать вывод о неоднородном распределении открытых и закрытых пор по объему частицы.

В простейшем варианте частица рассматриваемого искусственного опала может быть представлена как двуслойная [70, 71], состоящая из ядра с закрытыми порами и оболочки, имеющей открытые поры. Когда открытые поры заполняются жидко-

стью, изменяется эффективный показатель преломления оболочки. Эффективный показатель преломления ядра не изменяется. Восстанавливаемый в рамках используемой модели эффективный показатель преломления частиц искусственного опала является характеристикой, которая определяет положение фотонной запрещенной зоны структуры.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод восстановления показателя преломления частиц, образующих упорядоченную дисперсную структуру, по спектральному положению и значению минимума коэффициента когерентного пропускания фотонной запрещенной зоны.

Метод основан на решении прямой задачи, которое состоит в расчете спектров коэффициента когерентного пропускания трехмерной упорядоченной структуры частиц и нахождении на них минимумов ФЗЗ. Оно получено в рамках ККП теории многократного рассеяния волн и метода матрицы переноса. Упорядоченная структура рассмотрена в виде набора плоскопараллельных монослоев с дальним порядком в расположении частиц. В ККП рассчита-

ны амплитудные коэффициенты когерентного пропускания и отражения отдельных монослоев. Они использованы для нахождения коэффициентов пропускания и отражения многослойной системы в рамках метода матрицы переноса.

Проведено сравнение результатов расчета коэффициента когерентного отражения планарного кристалла с теоретическими данными работы [60], полученными в рамках подхода, основанного на теории дифракции электронов, развитой на случай электромагнитных полей.

Рассмотрены два способа восстановления: по спектральному положению и по значению минимума коэффициента пропускания ФЗЗ. Количественные результаты получены для систем из однородных монодисперсных частиц оксида кремния в различных окружающих средах.

Проведена оценка погрешности восстановления. Показано, что восстановление по значению T_{PBG} точнее, чем по спектральному положению λ_{PBG} минимума фотонной запрещенной зоны. Предложен способ уменьшения погрешности восстановления. Относительная погрешность восстановления показателя преломления частиц оксида кремния меньше 0.12 % в условиях проведенного нами численного моделирования.

Рассмотрено влияние погрешности измерения значений T_{PBG} на результат восстановления показателя преломления частиц. Показано, что при достаточно малых значениях T_{PBG} (т. е. в случае глубоких ФЗЗ) даже значительная погрешность в измерении T_{PBG} (до 50 %) позволяет восстановить показатель преломления частиц с относительной погрешностью $|\varepsilon_{rel}| < 0.25$ %.

Разработанный подход использован для нахождения эффективного показателя преломления частиц, образующих многослойную плотноупакованную упорядоченную структуру (искусственный опал), на основе известных экспериментальных данных о спектральном положении ФЗЗ. Найдено, что в рассмотренном эксперименте эффективный показатель преломления частиц искусственного опала уменьшается с ростом показателя преломления n_{env} иммерсионной жидкости. Такой характер зависимости дает основание сделать вывод о неоднородном распределении открытых и закрытых пор по объему частиц.

Значения эффективного показателя преломления, получаемые в рамках разработанного подхода, могут быть использованы для расчета спектров упорядоченных систем и оценки внутренней структуры частиц, из которых они состоят.

Описанная методика позволяет находить не только показатель преломления частиц, но и другие характеристики упорядоченных дисперсных структур и сред, в которых они находятся, по данным о ФЗЗ.

Работа выполнена при частичной поддержке научно-технической программы Беларуси «Электроника и фотоника».

ЛИТЕРАТУРА

1. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn et al., *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, Princeton Univ. Press, Princeton (2008).
2. I. A. Sukhoivanov and I. V. Guryev, *Photonic Crystals: Physics and Practical Modeling*, Springer-Verlag, New York (2009).
3. H. Cong, B. Yu, J. Tang et al., *Chem. Soc. Rev.* **42**, 7774 (2013).
4. H. S. Lee, T. S. Shim, H. Hwang et al., *Chem. Mater.* **25**, 2684 (2013).
5. E. Yablonovitch and T. J. Gmitter, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1950 (1989).
6. J. J. Wierer, Jr, A. David, and M. M. Megens, *Nature Photonics* **3**, 163 (2009).
7. A. Chutinan, N. P. Kherani, and S. Zukotynski, *Opt. Exp.* **17**, 8871 (2009).
8. S. Guldin, S. Hüttner, M. Kolle et al., *Nano Lett.* **10**, 2303 (2010).
9. A. C. Arsenault, D. P. Puzzo, I. Manners et al., *Nature Photonics* **1**, 468 (2007).
10. D. Sizov, R. Bhat, and C. E. Zah, *J. Lightwave Technol.* **30**, 679 (2012).
11. K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer-Verlag, New York (2005).
12. J. B. Wright, S. Liu, G. T. Wang et al., *Sci. Rep.* **3**, 2982 (2013).
13. V. S. Gorelik, A. D. Kudryavtseva, and N. V. Tcherniega, *J. Rus. Laser Res.* **29**, 551 (2008).
14. И. И. Шишкин, К. Б. Самусев, М. В. Рыбин и др., *Письма в ЖЭТФ* **95**, 518 (2012).
15. M. V. Vasnetsov, V. Yu. Bazhenov, S. S. Slussarenko et al., *J. Opt. Soc. Amer. B* **26**, 684 (2009).

16. M. V. Vasnetsov, V. Yu. Bazhenov, S. S. Slussarenko et al., *J. Opt. Soc. Amer. B* **26**, 1975 (2009).
17. M. V. Rybin, A. B. Khanikaev, M. Inoue et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 023901 (2009).
18. P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media*, Wiley-Interscience, New York (2005).
19. V. N. Bogomolov, S. V. Gaponenko, I. N. Germanenko et al., *Phys. Rev. E* **55**, 7619 (1997).
20. M. Lax, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 287 (1951).
21. M. Lax, *Phys. Rev.* **85**, 621 (1952).
22. A. A. Miskevich and V. A. Loiko, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **136**, 58 (2014).
23. В. А. Лойко, А. А. Мискевич, *Опт. и спектр.* **115**, 316 (2013).
24. А. А. Мискевич, В. А. Лойко, *ЖЭТФ* **140**, 5 (2011).
25. A. A. Miskevich and V. A. Loiko, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **112**, 1082 (2011).
26. C. C. Katsidis and D. I. Siarkas, *Appl. Opt.* **41**, 3978 (2002).
27. E. Centurioni, *Appl. Opt.* **44**, 7532 (2005).
28. M. C. Troparevsky, A. S. Sabau, A. R. Lupini et al., *Opt. Exp.* **18/24**, 24715 (2010).
29. C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley-Intersci., New York (1983).
30. S. Twomey, *Introduction to the Mathematics of Inversion in Remote Sensing and Indirect Measurements*, Elsevier, Sci. Publ., Amsterdam (1977).
31. R. Xu, *Particle Characterization: Light Scattering Methods*, Kluwer Acad. Publ. (2000).
32. A. N. Tichonov and V. Y. Arsenin, *Solutions of Ill-Posed Problems*, Wiley, New York (1977).
33. E. Kissa, *Dispersions: Characterization, Testing, and Measurement*, Surfactant Science Series, Vol. 84, Marcel Dekker, New York (1999).
34. Y. Wang, S. Fan, X. Feng et al., *Appl. Opt.* **45**, 7456 (2006).
35. V. V. Berdnik, V. A. Loiko, and A. P. Ivanov, *J. Opt. Soc. Amer. A* **14**, 1880 (1997).
36. В. А. Лойко, А. В. Конколович, А. А. Мискевич, *Опт. и спектр.* **101**, 683 (2006).
37. V. A. Loiko, A. V. Konkolovich, and A. A. Miskevich, *Phys. Rev. E* **74**, 031704 (2006).
38. V. Berdnik, R. Mukhamedyarov, and V. Loiko, *Opt. Lett.* **29**, 1019 (2004).
39. V. A. Loiko and V. V. Berdnik, *Appl. Opt.* **48**, 6178 (2009).
40. S. A. Grudinkin, S. F. Kaplan, N. F. Kartenko et al., *J. Phys. Chem. C* **112**, 17855 (2008).
41. M. V. Vasnetsov, T. N. Orlova, V. Yu. Bazhenov et al., *Appl. Phys. B* (2013), DOI:10.1007/s00340-013-5730-9.
42. C. I. Aguirre, E. Reguera, and A. Stein, *Adv. Funct. Mater.* **20**, 2565 (2010).
43. C. G. Schäfer, M. Gallei, G. P. Hellmann, et al., *Proc. SPIE* 8816, 88160V (2013), DOI:10.1117/12.2023876.
44. O. Deparis, C. Vandembem, M. Rassart et al., *Opt. Exp.* **14**, 3547 (2006).
45. J. A. Noyes, P. Vukusic, and I. R. Hooper, *Opt. Exp.* **15**, 4351 (2007).
46. P. Vukusic, B. Hallam, and J. Noyes, *Science* **315**, 348 (2007).
47. C. Pouya, D. G. Stavenga, and P. Vukusic, *Opt. Exp.* **19**, 11355 (2011).
48. H. L. Tam, K. W. Cheah, D. T. P. Goh et al., *Opt. Mater. Exp.* **3**, 1087 (2013).
49. K. M. Hong, *J. Opt. Soc. Amer.* **70**, 821 (1980).
50. V. K. Varadan, V. N. Bringi, V. V. Varadan et al., *Radio Sci.* **18**, 321 (1983).
51. А. П. Иванов, В. А. Лойко, В. П. Дик, *Распространение света в плотноупакованных дисперсных средах*, Наука и техника, Минск (1988).
52. J. A. Lock and Ch.-L. Chiu, *Appl. Opt.* **33**, 4663 (1994).
53. L. Tsang, J. A. Kong, K.-H. Ding et al., *Scattering of Electromagnetic Waves: Numerical Simulations*, Wiley, New York (2000).
54. V. A. Loiko and A. A. Miskevich, *Appl. Opt.* **44**, 3759 (2005).
55. J. M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge Univ. Press (1979).
56. Z. Fisher, *Statistical Theory of Liquids*, University of Chicago Press (1964).
57. А. Ф. Скрышевский, *Структурный анализ жидкостей и аморфных тел*, Высш. школа, Москва (1980).

58. K. Ohtaka and M. Inoue, *Phys. Rev. B* **25**, 677 (1982).
59. M. Inoue, K. Ohtaka, and S. Yanagawa, *Phys. Rev. B* **25**, 689 (1982).
60. H. Miyazaki and K. Ohtaka, *Phys. Rev. B* **58**, 6920 (1998).
61. V. A. Loiko, V. P. Dick, and V. I. Molochko, *J. Opt. Soc. Amer. A* **15**, 2351 (1998).
62. *Handbook of Optical Constants of Solids*, ed. by E. D. Palik, Acad. Press, San Diego (1985).
63. M. Debenham and G. D. Dew, *J. Phys. E* **14**, 544 (1981).
64. <http://refractiveindex.info>.
65. L. S. Ornstein and F. Zernike, *Proc. Acad. Sci.* **17**, 793 (1914).
66. J. K. Percus and G. J. Yevick, *Phys. Rev.* **110**, 1 (1958).
67. В. Н. Богомолов, Д. А. Курдюков, А. В. Прокофьев и др., *Письма в ЖЭТФ* **63**, 496 (1996).
68. В. Н. Богомолов, Л. С. Парфеньева, А. В. Прокофьев и др., *ФТТ* **37**, 3411 (1995).
69. V. M. Masalov, N. S. Sukhinina, E. A. Kudrenko et al., *Nanotechnology* **22**, 275718 (2011).
70. V. V. Berdnik and V. A. Loiko, *Appl. Opt.* **50**, 4246 (2011).
71. V. A. Babenko, L. G. Astafyeva, and V. N. Kuzmin, *Electromagnetic Scattering in Disperse Media*, Praxis Publ., Chichester, UK (2003).