

09.4

Трехмерное моделирование спектров фотонного кристалла на основе анодного оксида алюминия

© М.В. Пятнов^{1,2}, Р.Г. Бикбаев^{1,2}, С.Я. Ветров^{1,2}, И.В. Тимофеев^{1,2}¹ Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия² Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

E-mail: MaksPyatnov@yandex.ru

Поступило в Редакцию 20 ноября 2023 г.

В окончательной редакции 22 марта 2024 г.

Принято к публикации 22 марта 2024 г.

Осуществлено трехмерное оптическое моделирование фотонного кристалла с цилиндрическими порами на основе анодного оксида алюминия методом конечных разностей во временной области. Показано влияние радиуса пор и угла падения света на положение фотонной запрещенной зоны. Результаты расчетов сравниваются с результатами одномерного расчета с использованием теории эффективной среды. Несмотря на то что обе теории показали хорошее согласие друг с другом, одномерный расчет не позволяет учесть влияние инородных материалов на спектральные свойства структуры, чем и объясняется необходимость развития трехмерного моделирования.

Ключевые слова: фотонный кристалл, оксид алюминия, пористый материал, фотонная запрещенная зона, анодирование, эффективный показатель преломления.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.13.58162.19808

В последние годы нанопористые материалы приобрели большую актуальность в таких областях, как биотехнологии и медицинские науки [1], энергетика [2]. Оптические свойства указанных материалов представляют особый интерес, поскольку многие из их приложений основаны на их взаимодействии с фотонами, например для фотоэлектрического преобразования энергии [3,4]. Таким образом, способность прогнозировать оптическое поведение пористых материалов имеет решающее значение для проектирования и оптимизации структуры материала с целью его применения. Поэтому численное моделирование оптических свойств материалов [5] обеспечивает теоретическую основу для анализа их оптического поведения и характеристик устройств на их основе.

Производство нанопористых материалов может осуществляться с помощью электрохимического анодирования таких материалов, как кремний [6], титан [7] и алюминий [8,9]. В частности, благодаря своим физическим и химическим свойствам анодный оксид алюминия является хорошей платформой для устройств, связанных с сенсингом, доставкой лекарств и энергетикой. Периодическое изменение условий анодирования позволяет получать материалы с периодической модуляцией показателя преломления в пространстве. Это приводит к возникновению фотонных запрещенных зон, т.е. спектральных областей, в которых распространение фотонов через структуру не происходит в одном, в двух или во всех трех направлениях. Такие структуры называются фотонными кристаллами (ФК). ФК из анодного оксида алюминия используются в качестве оптических филь-

тров [10,11], датчиков [12,13], лазеров и усилителей люминесценции [14].

Оптическое моделирование ФК на основе анодного оксида алюминия должно учитывать его различные геометрические характеристики. Такой ФК представляет собой самоупорядоченный пористый материал с порами, перпендикулярными поверхности в шестиугольном расположении, полученный электрохимическим травлением алюминия. Форма пор зависит от режимов анодирования. Чаще всего встречаются ФК с цилиндрическими [15] и ветвящимися порами [16]. Основными геометрическими параметрами, которые следует учитывать в дополнение к показателям преломления материалов при моделировании оптических свойств, являются расстояние между порами (a), радиус пор (r), толщина барьерного слоя и длина пор (L).

Существуют два основных подхода к моделированию спектральных свойств такого фотонного кристалла. Первый заключается в одномерном расчете с помощью метода трансфер-матрицы и базируется на разбиении ФК на однородные слои. Показатель преломления каждого слоя определяется с помощью теории эффективной среды. Недостатком первого метода является невозможность строго учесть влияние инородных материалов [17,18] на спектральные свойства структуры. Второй метод — прямое трехмерное моделирование, например, методом конечных разностей во временной области (FDTD) — позволяет учесть свойства всех материалов. В рамках настоящей работы использованы оба метода и проведено сравнение результатов между собой.

Схематическое изображение исследуемого ФК из анодного оксида алюминия представлено на рис. 1.

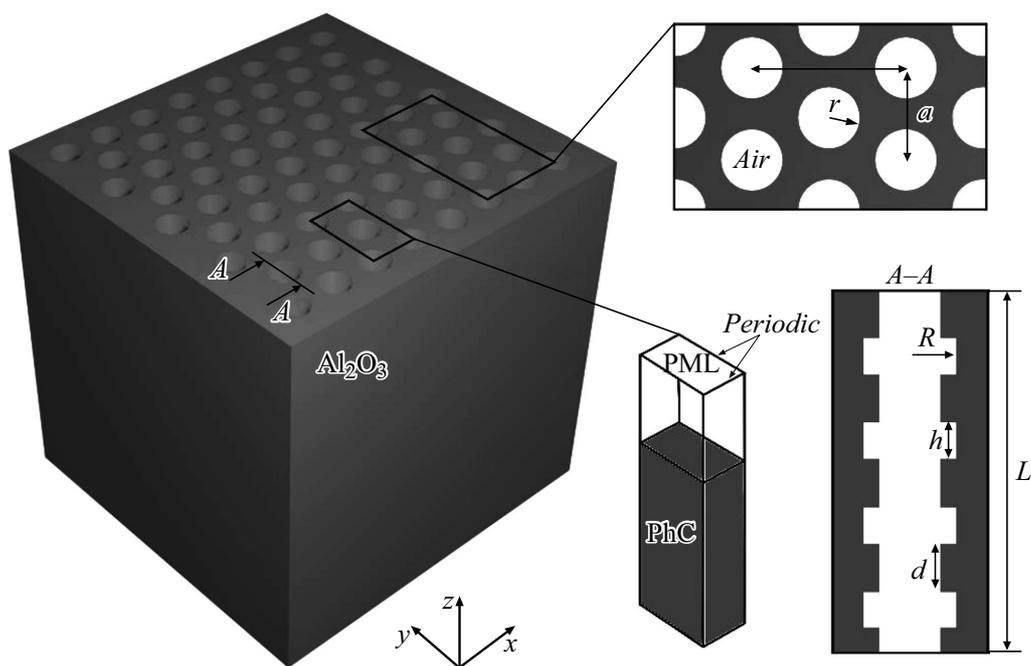


Рис. 1. Схематическое изображение ФК (PhC) из анодного оксида алюминия. ФК представляет собой слой Al_2O_3 , содержащий треугольную решетку воздушных цилиндров длиной $L = 3.71 \mu\text{m}$ и радиусом $r = 40 \text{ nm}$. Расстояние между порами $a = 160 \text{ nm}$. Вдоль поверхности цилиндров на расстоянии $d = 110 \text{ nm}$ равномерно расположены 20 кольцевых воздушных утолщений с внешним радиусом $R = 60 \text{ nm}$ и высотой $h = 70 \text{ nm}$. Показатель преломления $n_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 1.77$.

Оптические свойства структуры были рассчитаны методом FDTD. Структура освещалась сверху плоской волной с нормальным падением вдоль оси z и направлением поляризации вдоль оси y . Коэффициент отражения рассчитывался в верхней части окна моделирования. На боковых границах блока моделирования применялись периодические граничные условия, а на верхней и нижней сторонах использовались граничные условия идеально согласованного слоя (PML). Адаптивная сетка использовалась для точного воспроизведения формы пор. Хотя метод FDTD является комплексным и хорошо зарекомендовавшим себя инструментом, который показывает превосходное согласие с экспериментальными результатами для ФК [19], были проведены обширные тесты сходимости для каждого набора параметров, чтобы избежать нежелательных отражений в PML.

Отметим, что помимо метода FDTD для подобных структур может использоваться метод конечных элементов или фурье-модальный метод. Тем не менее авторам неизвестны работы, в которых проводился бы 3D-расчет спектров фотонного кристалла на основе анодного оксида алюминия.

Ширина запрещенной зоны ФК определяется контрастом показателя преломления его слоев. Чем больше контраст, тем шире запрещенная зона. В пористых ФК показатель преломления слоев зависит от объемной концентрации пор, их показателя преломления и показателя преломления матрицы. В исследуемом ФК из анодного

оксида алюминия пористость слоев и, как следствие, их показатель преломления зависят от радиусов r , R и расстояния между порами (рис. 1). Управление этими параметрами в процессе анодирования позволяет изготовить ФК с требуемой шириной запрещенной зоны. Для демонстрации этого эффекта нами были рассчитаны зависимости коэффициента отражения ФК от длины волны падающего света и радиуса r при фиксированном радиусе утолщений $R = 60 \text{ nm}$ и расстоянии между порами $a = 160 \text{ nm}$. Результаты расчета представлены на рис. 2.

Видно, что при увеличении r ширина запрещенной зоны уменьшается, так как оптический контраст между слоями ФК становится меньше. Так, при $r = 60 \text{ nm}$ показатели преломления слоев сравниваются и, как следствие, запрещенная зона исчезает. Следует отметить, что уменьшение показателя преломления одного из слоев ФК приводит не только к уменьшению ширины запрещенной зоны, но и к изменению ее положения. Так, центр запрещенной зоны при увеличении радиуса r с 40 до 50 nm сдвигается на 51.1 (с 541.1 до 490 nm).

Помимо прямого 3D-моделирования спектральные свойства ФК на основе анодного оксида алюминия могут быть рассчитаны с помощью 1D-метода трансфер-матрицы. Эффективные показатели преломления слоев n_{eff} ФК в этом случае будут представлять собой комбинацию показателей преломления воздуха n_{air} и оксида алюминия $n_{\text{Al}_2\text{O}_3}$. Существуют различные приближения эффективной среды [9], позволяющие

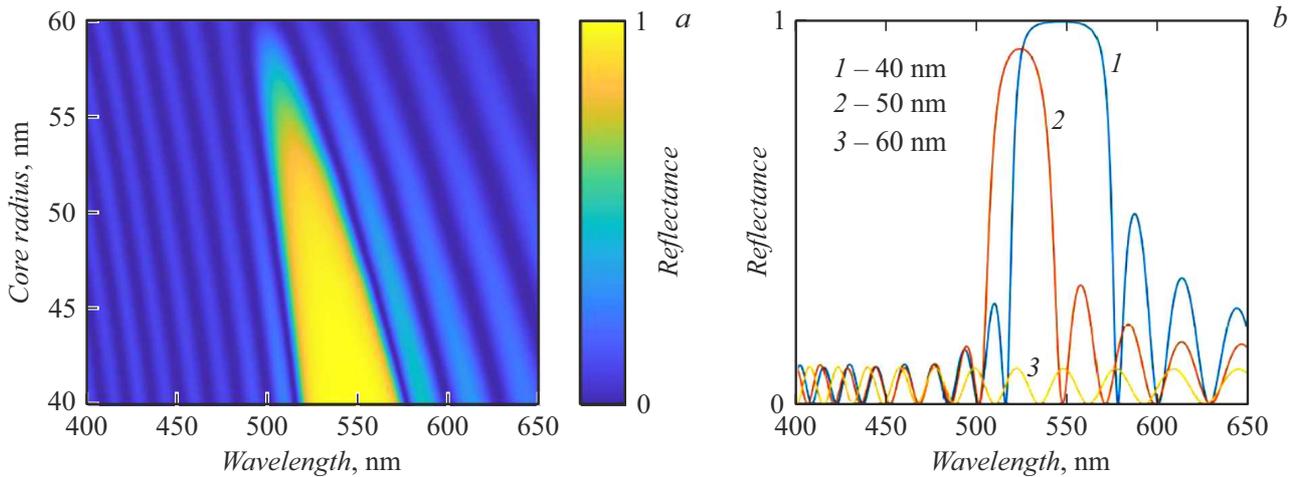


Рис. 2. *a* — спектры отражения ПК при различных значениях радиусов воздушных пор r . *b* — спектры отражения ПК при $r = 40$ (1), 50 (2), 60 nm (3) и фиксированных других параметрах структуры.

определить оптические свойства подобных сред, среди которых подходы Бруггемана, Максвелла Гарнетта, Ландау–Лившица/Луенга, Монеке, Лоренца–Лоренца и метод комплексного показателя преломления. Каждая из теорий описывает эффективную диэлектрическую проницаемость гетерогенной двухкомпонентной среды, содержащей включения различной формы и объемной доли компонентов. Несмотря на то что каждая из моделей эффективной среды имеет свои границы применимости, удивительным кажется тот факт, что все они дают близкие значения показателей преломления для слоев ПК из Al_2O_3 [20].

Пористость слоев исследуемого ПК определяется как

$$f_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{a} \right)^2, \quad f_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{R}{a} \right)^2. \quad (1)$$

В настоящей работе для определения эффективных показателей преломления слоев ПК мы использовали приближение Бруггемана

$$f \left(\frac{n_{air}^2 - n^2}{n_{air}^2 + 2n^2} \right) + (1 - f) \left(\frac{n_{\text{Al}_2\text{O}_3}^2 - n^2}{n_{\text{Al}_2\text{O}_3}^2 + 2n^2} \right) = 0, \quad (2)$$

которое предполагает близкие концентрации компонентов.

Так, для структуры, изображенной на рис. 1, пористости слоев составили $f_1 = 22.6\%$ и $f_2 = 51\%$ соответственно. На основе f_1 , f_2 и формулы (2) были рассчитаны показатели преломления слоев ПК: $n_1 = 1.59$ и $n_2 = 1.36$ соответственно. Методом трансфер-матрицы с использованием толщин слоев d и h и показателей преломления n_1 и n_2 был рассчитан спектр отражения ПК. Сравнение спектров, рассчитанных методом FDTD и методом трансфер-матрицы, представлено на рис. 3, *a*. Видно, что результаты, полученные двумя разными способами, имеют очень хорошее согласие.

При близости показателей преломления слоев ПК $n_1 \approx n_2$ спектральное положение запрещенной зоны ПК удовлетворяет закону Брэгга–Снелла, который может быть записан в виде [9]:

$$m\lambda = 2\Lambda \sqrt{n_{eff}^2 - n_{air}^2 \sin^2 \theta}, \quad (3)$$

где λ — длина волны центра запрещенной зоны, m — порядок зоны, $\Lambda = d + h$ — период структуры, θ — угол падения, n_{eff} — эффективный показатель преломления ПК, n_{air} — показатель преломления окружающей среды.

Эффективный показатель преломления ПК и показатели преломления n_1 и n_2 слоев связаны друг с другом и толщинами слоев d и h как

$$n_{eff}^2 = \frac{d}{\Lambda} n_1^2 + \frac{h}{\Lambda} n_2^2. \quad (4)$$

На рис. 3, *b* изображена угловая зависимость спектра отражения ПК из анодного оксида алюминия, рассчитанная методом конечных разностей во временной области. Из рисунка видно, что запрещенная зона ПК сдвигается в синюю область спектра, как это и предсказывает выражение (3). Важно отметить, что результаты, полученные с помощью выражения (3), имеют хорошее согласие с результатами прямого численного счета.

Таким образом, в работе представлена процедура численного 3D FDTD-расчета спектральных свойств фотонного кристалла на основе анодного оксида алюминия. Преимуществом метода является возможность учета спектральных и структурных особенности материалов. Рассчитаны спектры отражения при варьировании диаметра пор, а также угла падения света. Проведено сравнение результатов с результатами 1D-расчета методом трансфер-матрицы. Для нахождения показателей преломления слоев кристалла была использована теория эффективной среды в приближении Бруггемана.

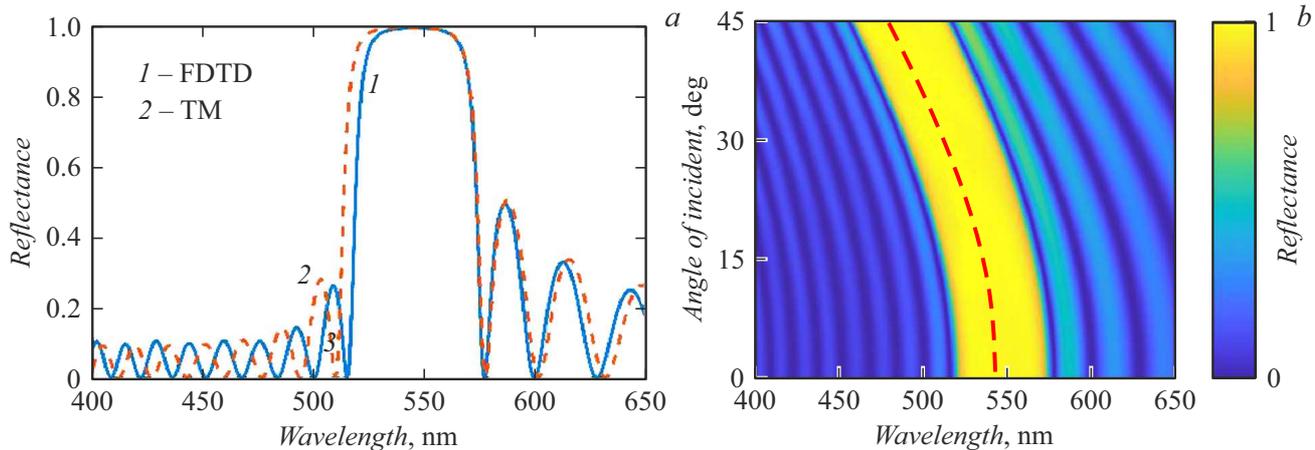


Рис. 3. *a* — спектры отражения ФК из анодного оксида алюминия, рассчитанные методом FDTD и методом трансфер-матрицы с учетом модели эффективной среды Бруггемана. Неточность модели эффективной среды приводит к незначительному уширению запрещенной зоны. *b* — угловая зависимость спектра отражения ФК для ТЕ-поляризованной волны. Штриховой линией показано положение центра запрещенной зоны, рассчитанное по формуле (3).

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности № 22-22-20078 (<https://rscf.ru/project/22-22-20078/>)

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] G. Rajeev, B. Prieto-Simon, L.F. Marsal, N.H. Voelcker, *Adv. Healthc. Mater.*, **7**, 1700904 (2018). DOI: 10.1002/adhm.201700904
- [2] H. Zhao, L. Liu, Y. Lei, *Front. Chem. Sci. Eng.*, **12**, 481 (2023). DOI: 10.1007/s11705-018-1707-x
- [3] F. Habibi-Hagh, L.J. Foruzin, F. Nasirpour, *Int. J. Hydr. Energy*, **48**, 11225 (2023). DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.07.158
- [4] M.V. Pyatnov, R.G. Bikbaev, I.V. Timofeev, I.I. Ryzhkov, S.Ya. Vetrov, V.F. Shabanov, *Photonics*, **10**, 64 (2023). DOI: 10.3390/photonics10010064
- [5] F. Berto-Rosello, E. Xifre-Perez, J. Ferré-Borrull, J. Pallarés, L.F. Marsal, *Nanoscale Res. Lett.*, **11**, 359 (2016). DOI: 10.1186/s11671-016-1575-6
- [6] S.E. Svyakhovskiy, A.I. Maydykovsky, T.V. Murzina, *J. Appl. Phys.*, **112**, 013106 (2012). DOI: 10.1063/1.4732087
- [7] P. Roy, S. Berger, P. Schmuki, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **50**, 2904 (2011). DOI: 10.1002/anie.201001374
- [8] C.S. Law, S.Y. Lim, A.D. Abell, N.H. Voelcker, A. Santos, *Nanomaterials*, **8**, 788 (2018). DOI: 10.3390/nano8100788
- [9] G. Shang, D. Bi, V.S. Gorelik, G. Fei, L. Zhang, *Mater. Today Commun.*, **34**, 105052 (2023). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.105052
- [10] A. Santos, C.S. Law, D.W.C. Lei, T. Pereira, D. Losic, *Nanoscale*, **8**, 18360 (2016). DOI: 10.1039/C6NR06796D
- [11] A.R. Gomez, L.K. Acosta, J. Ferré-Borrull, A. Santos, L.F. Marsal, *ACS Appl. Nano Mater.*, **6**, 5274 (2023). DOI: 10.1021/acsanm.2c05356
- [12] M. Ashurov, V. Gorelik, K. Napolskii, S. Klimonsky, *Photon. Sens.*, **10**, 147 (2020). DOI: 10.1007/s13320-019-0569-2
- [13] C.-A. Ku, C.-Y. Yu, S.C.-W. Hung, C.-K. Chung, *Nanomaterials*, **13**, 2853 (2023). DOI: 10.3390/nano13212853
- [14] W. Yang, B. Wang, A. Sun, J. Liu, G. Xu, *Mater. Lett.*, **178**, 197 (2016). DOI: 10.1016/j.matlet.2016.05.001
- [15] L. Liu, S.Y. Lim, C.S. Law, L.K. Acosta, B. Jin, A.D. Abell, L.F. Marsal, G. Ni, A. Santos, *Micropor. Mesopor. Mater.*, **312**, 110770 (2021). DOI: 10.1016/j.micromeso.2020.110770
- [16] S.E. Kushnir, K.S. Napolskii, *Mater. Des.*, **144**, 140 (2018). DOI: 10.1016/j.matdes.2018.02.012
- [17] I.I. Ryzhkov, I.A. Kharchenko, E.V. Mikhлина, A.V. Minakov, D.V. Guzei, I.V. Nemtsev, M.N. Volochaev, A.V. Korobko, M.M. Simunin, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **176**, 121414 (2021). DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121414
- [18] A.A. Noyan, Y.A. Ovchenkov, V.V. Ryazanov, I.A. Golovchanskiy, V.S. Stolyarov, E.E. Levin, K.S. Napolskii, *Nanomaterials*, **12**, 4095 (2022). DOI: 10.3390/nano12224095
- [19] A. Lavrinenko, P.I. Borel, L. Frandsen, M. Thorhauge, A. Harpøth, M. Kristensen, T. Niemi, H.M.H. Chong, *Opt. Express*, **12**, 234 (2004). DOI: 10.1364/OPEX.12.000234
- [20] G.D. Sulka, K. Hnida, *Nanotechnology*, **23**, 075303 (2012). DOI: 10.1088/0957-4484/23/7/075303