

09 Определение области применимости упрощенного закона Брэгга—Снелла для фотонных кристаллов из анодного оксида алюминия

© М.В. Пятнов^{1,2}, М.М. Соколов², С.Я. Ветров^{1,2}, И.В. Тимофеев^{1,2}

¹ Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

² Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
E-mail: mpyatnov@iph.krasn.ru

Поступило в Редакцию 9 сентября 2025 г.

В окончательной редакции 20 ноября 2025 г.

Принято к публикации 21 ноября 2025 г.

Представлены результаты сравнения отклонений положения фотонной запрещенной зоны по общей и приближенной формулам Брэгга—Снелла, используемым при описании спектральных свойств фотонных кристаллов из анодного оксида алюминия, при варьировании различных параметров.

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

DOI: 10.61011/PJTF.2026.06.62456.20494

Фотонный кристалл (ФК) — твердое тело, представляющее собой периодическую пространственную структуру с меняющейся диэлектрической проницаемостью и характерным размером структурного элемента порядка длины оптической волны. Простейшим примером ФК является структура, состоящая из двух чередующихся типов параллельных оптических слоев, каждый из которых обладает своей диэлектрической проницаемостью и толщиной. Основное свойство ФК, проявляющееся при взаимодействии с электромагнитным излучением, заключается в возникновении запрещенных зон — особых спектральных областей, в которых излучение частично или полностью отражается кристаллом в одном или во всех направлениях за счет конструктивной интерференции. Интерес к таким структурам вызван в первую очередь применением ФК в качестве манипуляторов и сборщиков световой энергии [1,2].

Среди существующих способов изготовления ФК одним из простейших, но при этом многообещающих является анодирование металлической фольги. Основными материалами, используемыми при таком синтезе кристаллов, являются титан и алюминий. Наибольшие успехи были достигнуты в анодировании алюминиевой фольги, на поверхности которой успешно выращиваются ФК из анодного оксида алюминия (АОА) Al_2O_3 [3]. Изменение условий анодирования позволяет манипулировать пористостью АОА и формой пор, и от этого напрямую зависят оптические свойства ФК. При этом оксид алюминия является диэлектрическим материалом с низким коэффициентом поглощения света в видимой области и ближнем инфракрасном диапазоне [4]. Благодаря указанным свойствам такая периодическая структура обеспечивает множество возможностей для применения, например, в качестве оптических фильтров, датчиков и пр. [5–9].

Закон Брэгга—Снелла, также называемый законом Брэгга, позволяет находить углы и длины волн, соответствующие максимумам отражения или минимумам пропускания. В ряде публикаций [8–11], посвященных ФК АОА, используется упрощенное выражение закона Брэгга

$$m\lambda = 2d\sqrt{n_{eff}^2 - n_A^2 \sin^2 \varphi}, \quad (1)$$

где λ — длина волны центра запрещенной зоны, m — порядок запрещенной зоны, d — период структуры, φ — угол падения света, n_{eff} — эффективный показатель преломления кристалла, n_A — показатель преломления окружающей среды.

Эмпирическим путем установлено, что формула (1) позволяет определить положение запрещенной зоны ФК АОА с высокой степенью точности. Однако для прочих материалов такого согласия не наблюдается. Несмотря на активное использование соотношения (1) для описания свойств ФК АОА, нам неизвестны публикации, в которых обсуждались бы условия применимости этой формулы для данных сред. Настоящая работа посвящена исправлению данного пробела и определению области применимости соотношения (1) численным методом.

Рассмотрим распространение света через структуру, состоящую из двух чередующихся типов параллельных оптических слоев. Обозначим символом λ длину волны запрещенной зоны, соответствующую порядку m , где m — целое положительное число; d_1, d_2 — толщины слоев с показателями преломления n_1, n_2 соответственно; n_A — показатель преломления внешней среды; φ — угол падения электромагнитной волны на слоистую структуру, отсчитываемый от нормали к поверхности. На рис. 1 представлен ход двух лучей через такую структуру. Оптическая длина пути луча, отражающегося

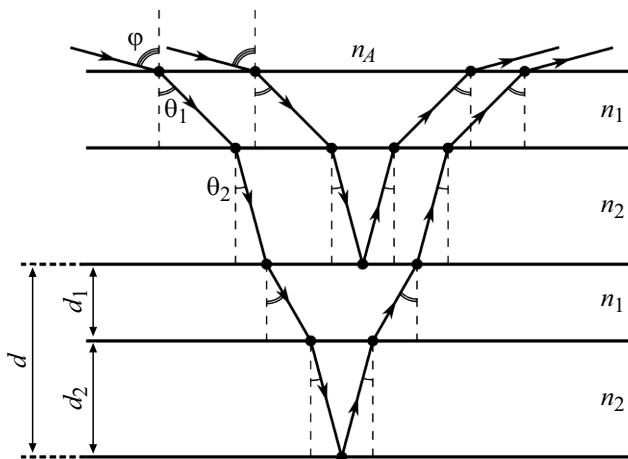


Рис. 1. Ход лучей через структуру, состоящую из двух чередующихся типов параллельных оптических слоев.

от более глубоких слоев кристалла, имеет вид

$$L = 2(d_1 n_1 \cos \theta_1 + d_2 n_2 \cos \theta_2). \quad (2)$$

С помощью закона Снелла найдем уравнения, связывающие φ , θ_1 , θ_2 :

$$\begin{aligned} \sin \theta_1 &= \frac{n_A}{n_1} \sin \varphi, \\ \sin \theta_2 &= \frac{n_1}{n_2} \sin \theta_1 = \frac{n_A}{n_2} \sin \varphi. \end{aligned} \quad (3)$$

Тогда условие интерференционного максимума двух отраженных лучей примет вид

$$L = d_1 \sqrt{n_1^2 - n_A^2 \sin^2 \varphi} + d_2 \sqrt{n_2^2 - n_A^2 \sin^2 \varphi} = \frac{\lambda}{2} m. \quad (4)$$

Полученное выражение представляет собой широко известный закон Брэгга–Снелла [12].

В том случае, если n_1 и n_2 имеют близкие значения, путем алгебраических преобразований уравнения (4) можно получить соотношение (1). Подобное приближение характерно для синтезируемых ФК АОА. Эффективный показатель преломления кристалла можно найти следующим образом:

$$n_{eff}^2 = \frac{d_1}{d_1 + d_2} n_1^2 + \frac{d_2}{d_1 + d_2} n_2^2. \quad (5)$$

Если в выражении (5) заменить n_1 на n_2 или n_2 на n_1 , исходя из условия, что $n_1 \approx n_2$, то можно получить равенство $n_1 \approx n_2 \approx n_{eff}$. Заменив в (4) n_1 и n_2 на n_{eff} , получим выражение (1).

Область применимости соотношения (1) можно найти путем прямого сравнения с формулой (4). Рассмотрим зависимость погрешности $\Delta\lambda/\lambda_1$ от n_2/n_1 (рис. 2), где $\Delta\lambda = |\lambda_1 - \lambda_2|$, λ_1 вычисляется по формуле (4), λ_2 вычисляется по формуле (1), n_1 и n_2 — показатели преломления слоев ФК. Параметры одного из слоев зафиксированы: $n_1 = 1.2$, $d_1 = 150$ nm (рис. 2, а) и $n_1 = 1.2$,

$d_1 = 450$ nm (рис. 2, б), $n_1 = 1.5$, $d_1 = 150$ nm (рис. 2, с) и $n_1 = 1.5$, $d_1 = 450$ nm (рис. 2, д). Параметры другого слоя d_2 , n_2 , а также угол падения излучения на ФК, измеренный от нормали к поверхности, варьируются.

Полученные зависимости (рис. 2) соответствуют варьированию двух параметров второго слоя: толщины d_2 и показателя преломления n_2 , принимающих значения, характерные для синтезируемых ФК. Это дает возможность сравнить влияние толщины слоя (показателя преломления) при сохранении определенного значения показателя преломления (толщины слоя) соответственно на итоговое значение погрешности.

Для всех значений параметров толщин и показателей преломления слоев характерно значительное влияние угла падения излучения φ на скорость роста погрешности. С увеличением угла погрешность растет. Этот рост имеет наиболее явный вид при стремлении n_2 к единице, что характерно для кристаллов с высокой пористостью [5].

Рис. 2, с соответствует низкому значению толщины слоя и относительно высокому показателю преломления. Из сравнения с рис. 2, д (большая толщина слоя) видно, что с увеличением толщины слоя производная погрешности по модулю увеличивается. Из сравнения рис. 2, с с рис. 2, а (меньший показатель преломления) видно, что с уменьшением показателя преломления производная погрешности по модулю увеличивается. На рис. 2, б, соответствующем большому значению толщины слоя и малому показателю преломления, наблюдается наибольшая по амплитуде производная погрешности среди всех представленных графиков.

Определим конкретные значения погрешности при $\varphi = 0$. Максимальную погрешность имеют точки на графиках, соответствующие значениям n_2 , стремящимся либо к 1, либо к ∞ . В первом случае погрешность принимает следующие значения:

- рис. 2, а — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/1.2) \approx 0.3\%$,
- рис. 2, б — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/1.2) \approx 0.4\%$,
- рис. 2, с — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/1.5) \approx 1.8\%$,
- рис. 2, д — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/1.5) \approx 1.6\%$.

Второй случай определенно не имеет смысла рассматривать ввиду его несоответствия задаче, однако уже при $n_2 = 2n_1$ погрешность имеет достаточно большое значение:

- рис. 2, а — $\Delta\lambda/\lambda_1(2) \approx 3\%$,
- рис. 2, б — $\Delta\lambda/\lambda_1(1) \approx 5.4\%$,
- рис. 2, с — $\Delta\lambda/\lambda_1(2) \approx 3\%$,
- рис. 2, д — $\Delta\lambda/\lambda_1(2) \approx 5.4\%$.

При больших углах φ погрешность будет увеличиваться, как упоминалось ранее.

На длине волны 555 nm монокристалл оксида алюминия имеет показатель преломления 1.63 [4]. Из рис. 2 следует, что для предельного для ФК значения $n_2 = 1.63$ при $\theta = 0$ погрешность равна:

- рис. 2, а — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/n_1) \approx 1.3\%$,
- рис. 2, б — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/n_1) \approx 1.85\%$,

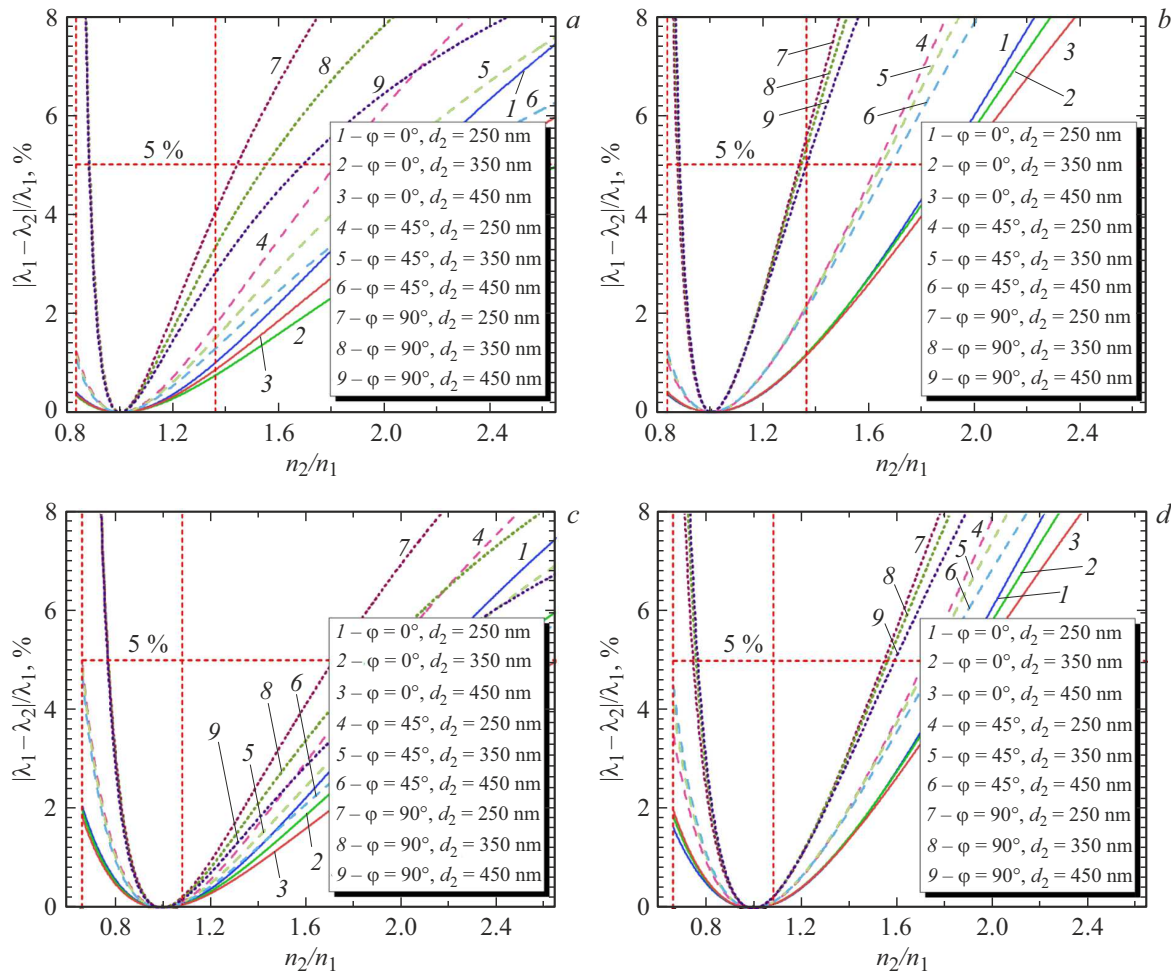


Рис. 2. Отклонения положения запрещенной зоны при различных параметрах ФК. *a* — $d_1 = 150$ nm, $n_1 = 1.2$; *b* — $d_1 = 450$ nm, $n_1 = 1.2$; *c* — $d_1 = 150$ nm, $n_1 = 1.5$; *d* — $d_1 = 450$ nm, $n_1 = 1.5$. Вертикальные штриховые линии соответствуют значениям $n_2 \rightarrow 1$ (левая), $n_2 = n_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 1.63$ (правая).

рис. 2, *c* — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/n_1) \approx 0.25\%$,

рис. 2, *d* — $\Delta\lambda/\lambda_1(1/n_1) \approx 0.33\%$.

Таким образом, для ФК АОА погрешность в случае применения формулы (1) незначительна.

Положение запрещенной зоны одномерного ФК описывается законом Брэгга–Снелла. В качестве упрощения при определении свойств ФК используется приближенная формула, однако вопрос определения области ее применимости остается неизученным. Численными методами было показано, какую ошибку вносит упрощенная формула. Для реальных ФК АОА ее применение полностью оправдано ввиду крайне малой вносимой погрешности.

В действительности при нормальном падении излучения на ФК погрешность, вносимая формулой (1), не будет превышать значения 2%. При падении излучения под большими углами погрешность может быть существенной (6%) в том случае, если показатели преломления слоев ФК малы (≤ 1.2) либо если наблюдается большая контрастность в показателях преломления разных слоев.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках научной тематики госзадания Федерального исследовательского центра „Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Б. Салех, М. Тейх, *Оптика и фотоника. Принципы и применения*, пер. с англ. (Изд. дом „Интеллект“, Долгопрудный, 2012), т. 1 с. 372–406. [B.E.A. Saleh, M.C. Teich, *Fundamentals of photonics* (John Wiley and Sons Inc., Hoboken, 2007).]
- [2] I.A. Sukhoivanov, I.V. Guryev, *Photonic crystals: physics and practical modeling*. Springer Ser. in Optical Sciences (Springer, Berlin–Heidelberg, 2009), vol. 152. DOI: 10.1007/978-3-642-02646-1

- [3] G. Shang, D. Bi, V.S. Gorelik, G. Fei, L. Zhang, *Mater. Today Commun.*, **34**, 105052 (2023). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.105052
- [4] W.J. Tropf, M.E. Thomas, *Handbook of optical constants of solids* (Academic Press, 1997).
- [5] C.S. Law, S.Y. Lim, A.D. Abell, N.H. Voelcker, A. Santos, *Nanomaterials*, **8** (10), 788 (2018). DOI: 10.3390/nano8100788
- [6] I.A. Kalinin, I.V. Roslyakov, D. Bograchev, S.E. Kushnir, I.I. Ivanov, A.V. Dyakov, K.S. Napolskii, *Sensors Actuators B*, **404**, 135270 (2024). DOI: 10.1016/j.snb.2023.135270
- [7] A.R. Gómez, L.K. Acosta, J. Ferré-Borrull, A. Santos, L.F. Marsal, *ACS Appl. Nano Mater.*, **6** (7), 5274 (2023). DOI: 10.1021/acsanm.2c05356
- [8] S.E. Kushnir, K.S. Napolskii, *Mater. Des.*, **144**, 140 (2018). DOI: 10.1016/j.matdes.2018.02.012
- [9] М.В. Пятнов, М.М. Соколов, И.А. Киселев, Р.Г. Бикбаев, П.С. Панкин, И.Р. Волкова, В.А. Гуняков, М.Н. Волочаев, И.И. Рыжков, С.Я. Ветров, И.В. Тимофеев, В.Ф. Шабанов, *ЖТФ*, **94** (2), 278 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.02.57083.218-23 [M.V. Pyatnov, M.M. Sokolov, I.A. Kiselev, R.G. Bikbaev, P.S. Pankin, I.R. Volkova, V.A. Gunyakov, M.N. Volochaev, I.I. Ryzhkov, S.Ya. Vetrov, I.V. Timofeev, V.F. Shabanov, *Tech. Phys.*, **69** (2), 265 (2024).].
- [10] В.С. Горелик, М.М. Яшин, D. Bi, G.T. Fei, *Оптика и спектроскопия*, **124** (2), 171 (2018). DOI: 10.21883/OS.2018.02.45519.177-17 [V.S. Gorelik, M.M. Yashin, D. Bi, G.T. Fei, *Opt. Spectrosc.*, **124** (2), 167 (2018). DOI: 10.1134/S0030400X18020078].
- [11] П.П. Свербиль, В.С. Горелик, D. Bi, G.T. Fei, S.H. Xu, X.D. Gao, *Оптика и спектроскопия*, **127** (4), 548 (2019). DOI: 10.21883/OS.2019.10.48355.176-19 [P.P. Sverbil, V.S. Gorelik, D. Bi, G.T. Fei, S.H. Xu, X.D. Gao, *Opt. Spectrosc.*, **127** (4), 602 (2019). DOI: 10.1134/S0030400X1910028X].
- [12] А. Ярив, П. Юх, *Оптические волны в кристаллах*, пер. с англ. (Мир, М., 1987), с. 169–195. [A. Yariv, P. Yeh, *Optical waves in crystals* (Wiley, N.Y., 1984).].