## ОДНОМЕРНЫЙ ФОТОННЫЙ КРИСТАЛЛ НА ОСНОВЕ НАНОКОМПОЗИТА: МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ - ДИЭЛЕКТРИК

П.Н. Дьяченко<sup>1</sup>, Ю.В. Микляев<sup>1</sup> <sup>1</sup>Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

#### Аннотация

В работе исследован одномерный фотонный кристалл на основе нанокомпозита: металлические наночастицы - диэлектрик. Предсказано возникновение эффекта расщепления единой зоны на поляритонную и структурную фотонную запрещенную зону. Найдено различие в поведении структурной фотонной запрещенной зоны при изменении концентрации металлических наночастиц, в зависимости от ее положения относительно поляритонной фотонной запрещенной зоны. Рассмотренные эффекты позволяют расширить возможности создания новых фотонных кристаллов с заданными свойствами.

Фотонными кристаллами называют структуры, с периодической модуляцией показателя преломления, обладающие фотонной запрещенной зоной (ФЗЗ) [1]. Уже в 1972 г. в работе Быкова [2] было показано, что такие структуры позволяют управлять спонтанным излучением у внедренных в матрицу структуры молекул или атомов. Начиная с работ Яблоновича [3] и Джона [4], концепция фотонных кристаллов стала одной из наиболее исследуемых в современной оптике. При наличии полной ФЗЗ распространение свет подавлено в любом направлении в спектральном диапазоне, совпадающем с запрещенной зоной. Данное свойство очень важно для возможных применений фотонных кристаллов в системах оптической связи и передачи информации, лазерной технике.

В первых теоретических работах изучались фотонные кристаллы, получаемые из непоглощающих и бездисперсионных материалов [5]. В данных исследованиях был произведен поиск периодических структур имеющих полные ФЗЗ при высоких показателях преломления. На данный момент, наименьший показатель преломления, позволяющий существовать полной ФЗЗ, равен *n*=1,9 для алмазной решетки [6]. Это накладывает серьезные ограничения на выбор материала, т. к. в видимой области спектра не существует стекл и полимеров с таким показателем преломления. В дальнейших работах стали исследоваться материалы, обладающие поглощением и значительной дисперсией. В частности, фотонные кристаллы, состоящие из ионного материала или имеющие металлические включения. Используя метод конечных разностей, вычислены коэффициенты пропускания гранецентрированной кубической (ГЦК) и алмазных решеток, состоящих из идеально проводящих металлических шаров [7]. В результате в работе [7] было показано, что такая алмазная решетка имеет полную ФЗЗ размером более 45%, что является большим, чем у любого известного диэлектрического фотонного кристалла. Используя для диэлектрической проницаемости металлов приближение Друде, которое позволяет учитывать дисперсию и поглощение, установлено, что ГЦК решетка, состоящая из частиц благородных металлов (например серебра), размером порядка 160 нм, имеет большую полную ФЗЗ [8]. Авторы объясняют это тем, что в области частот, в диапазоне которых образуется ФЗЗ, диэлектрическая проницаемость металлов принимает большие отрицательные значения, тем самым, образуя значительный контраст диэлектрических свойств, что является благоприятным для открытия полных ФЗЗ [1]. В работе [9] исследован диэлектрический волновод, покрытый с одной стороны одним слоем металлических наночастиц, упорядоченных в квадратную решетку. В результате, было обнаружено, что в такой структуре в оптическом диапазоне могут распространяться как волноводные, так и плазмонные моды.

Ионные материалы в инфракрасной области спектра имеют диапазон частот  $\omega_T < \omega < \omega_I$ , для которого материал оптически подобен металлу, то есть диэлектрическая проницаемость отрицательна и имеет сильную дисперсию [10]. Фотонные кристаллы, полученные из ионного материала (поляритонные фотонные кристаллы) исследованы в работах [11,12]. Показано, что в результате фотонфононного взаимодействия может образоваться поляритонная ФЗЗ, которую следует отличать от структурной ФЗЗ, образовывающейся в результате брэгговской дифракции собственных электромагнитных состояний на краю зоны Бриллюэна. ФЗЗ, возникающая в результате взаимодействия с коллективными оптическими возбуждениями, такими, как оптические фононы, плазмоны, экситоны, называется поляритонной ФЗЗ. В [13] обнаружен эффект слияния поляритонной и структурной ФЗЗ, который дает новый инструмент для получения структур с ФЗЗ.

Композитные среды с наночастицами благородных металлов представляют большой практический интерес при разработке различных оптических устройств. Линейные и нелинейные оптические свойства таких сред определяются плазмонным резонансом металлических наночастиц и свойствами прозрачной матрицы. Авторами [14,15] предсказано возникновение резонанса диэлектрической проницаемости в нанокомпозите, состоящем из металлических наночастиц, взвешенных в прозрачной матрице, причем положение резонанса зависит как от диэлектрической проницаемости исходных материалов, так и от концентрации наночастиц. Форма резонансов диэлектрической проницаемости такого нанокомпозита, совпадает с формой резонансов ионного материала, но резонанс лежит в области видимого света. Представляет большой интерес, как с прикладной, так и с фундаментальной точки зрения, использование таких нанокомпозитов в качестве материалов фотонных кристаллов. В нашей работе мы вычисляем коэффициенты пропускания, отражения, поглощения для одномерного фотонного кристалла, состоящего из нанокомпозита: металлические наночастицы, распределенные случайным образом в прозрачной матрице.

Для того чтобы найти диэлектрическую проницаемость нанокомпозита  $\varepsilon_{mix}(\omega)$ , используем формулу Максвелла-Гарнета:

$$\frac{\varepsilon_{\min}(\omega) - \varepsilon_d}{\varepsilon_{\min}(\omega) + 2\varepsilon_d} = f \frac{\varepsilon_m(\omega) - \varepsilon_d}{\varepsilon_m(\omega) + 2\varepsilon_d}$$
(1)

где f - относительный объем занимаемый наночастицами,  $\varepsilon_{\rm m}(\omega)$  - диэлектрическая проницаемость металла, из которого изготовлены наночастицы,  $\varepsilon_d$  - диэлектрическая постоянная матрицы, в которую погружаются наночастицы,  $\omega$  - частота излучения.

Наночастицы распределены в матрице случайным образом, но однородно. Будем считать, что наночастицы имеют форму шара, с радиусом в пределах нескольких нанометров, что значительно меньше длины волны и глубины проникновения поля в материал. Диэлектрическую проницаемость металла, из которого изготовлены наночастицы, найдем, используя приближение Друде, в следующем виде:

$$\varepsilon_{\rm m}(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \tag{2}$$

где  $\varepsilon_0$  - постоянная ( $\varepsilon_0$ =5 для серебра),  $\omega_p$  - плазменная частота ( $\omega_p$ =9 эВ для серебра),  $\gamma$  - релаксационная постоянная ( $\gamma$ =0,02 эВ для серебра [16]). Для определенности, во всех дальнейших расчетах в качестве металла мы будем использовать серебро. Следует отметить, что соотношение (1) можно получить, если применить формулу Клаузиуса-Моссотти к расположенным в вакууме наночастицам с нормированной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_m(\omega)/\varepsilon_d$  [17]. Подставив (2) в (1), найдем  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  в виде:

$$\varepsilon_{\min}(\omega) = \varepsilon'_{\min}(\omega) + i\varepsilon''_{\min}(\omega)$$
(3)

На рис. 1 представлены зависимости  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  и  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  при f = 0, 2,  $\varepsilon_d = 2,56$ . Можно увидеть, что кривые на рис. 1 имеют резонансный характер (вид кривых аналогичен случаю ионного материала [10]). Пренебрегая малым фактором  $\gamma^2$ , найдем, что функция  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  обращается в ноль в точках:

$$\omega_{10} = \omega_p \sqrt{\frac{1 - f}{\varepsilon_0 + 2\varepsilon_d - f(\varepsilon_0 - \varepsilon_d)}}$$
(4)

$$\omega_{20} = \omega_p \sqrt{1 + \frac{\varepsilon_0 (\varepsilon_0 + 2\varepsilon_d - f(\varepsilon_0 - \varepsilon_d))}{\varepsilon_d (\varepsilon_0 + 2\varepsilon_d + 2f(\varepsilon_0 - \varepsilon_d))}}$$
(5)

 $(\omega_{10} / \omega_p = 0,288$  и  $\omega_{20} / \omega_p = 0,355$ , при f = 0,2,

 $\varepsilon_d = 2,56$ ). На промежутке  $[\omega_{10}, \omega_{20}]$  функция  $\varepsilon_{mix}(\omega)$ принимает отрицательные значения, а значит, в этой области частот нанокомпозит оптически подобен металлу. Следовательно, можно ожидать появления поляритонных ФЗЗ в этом промежутке частот.



Рис. 1. Функции  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  и  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  для серебряных наночастиц, взвешенных в прозрачной матрице, при  $f = 0,2, \ \varepsilon_d = 2,56$ 

Рассмотрим одномерный фотонный кристалл, состоящий из N элементарных ячеек с периодом a. Каждая ячейка состоит из слоя толщиной d<sub>1</sub> с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_{mix}(\omega)$  и слоя толщиной  $d_2$  с диэлектрической проницаемостью равной 1. Период ячейки *a* равен  $a = d_1 + d_2$ . Во всех случаях рассматривается нормальное падение электромагнитной волны на фотонный кристалл. Для нахождения коэффициентов пропускания, отражения, поглощения использовался метод конечных разностей [18]. Коэффициенты пропускания и поглощения показаны на рис. 2, при N = 16, f = 0,2,  $d_1/a = 0,5$ ,  $a/\lambda_p = 1$ . На графике частота указана в единицах плазменной частоты  $\omega_p$ . На рис. 3 представлено изменение ФЗЗ в зависимости от размера элементарной ячейки a, при N = 16, f = 0, 2,  $d_1/a = 0,5$ . Под ФЗЗ понимается такой диапазон частот, для которого коэффициент пропускания меньше 0,1.

На графике размер элементарной ячейки *a* отмечен в единицах плазменной длины волны  $\lambda_p$ , равной  $\lambda_p = 2\pi c / \omega_p$ , где *c* - скорость света в вакууме, а частота в единицах плазменной частоты  $\omega_p$ . Пустыми кругами отмечается нижний край ФЗЗ, а закрашенными - верхний.



Рис. 3. Поведение Ф33 в зависимости от размера элементарной ячейки а при N = 16, f = 0,2,  $d_1/a = 0,5$ 

На рис. 3 можно заметить, что при  $a/\lambda_p = 1,3$ единая Ф33 расщепляется на поляритонную и структурную Ф33. Для того, чтобы это доказать, необходимо исследовать поведение этих Ф33 при изменении фактора заполнения нанокомпозитом, т.е. при изменении отношения  $d_1/a$ . Как показано в [13], поляритонная Ф33 увеличивается в размерах при увеличении фактора заполнения материалом, тогда как структурная Ф33 достигает максимума и начинает уменьшаться в размере. Изменение Ф33 при варьировании фактора заполнения нанокомпозитом представлено на рис. 4, при  $a/\lambda_p = 2$ . Можно наблюдать, что поляритонная Ф33 с центром между  $\omega_{10} - \omega_{20}$  увеличивается в размере, при увеличении отношения  $d_1/a$ , тогда как структурная ФЗЗ, лежащая ниже, достигает максимума в размере и начинает уменьшаться. Эффект расщепления ФЗЗ на поляритонную и структурную дает нам новый инструмент в проектировании фотонных кристаллов. Данный эффект дает нам возможность, не меняя фактора заполнения нанокомпозитом, изменяя характерные размеры ячейки фотонного кристалла, кардинально изменять оптические свойства. В обычных диэлектрических фотонных кристаллах, меняя размеры ячейки (при постоянном факторе заполнения), мы только сдвигаем ФЗЗ, но не меняем ее структуру.



Рис. 4. Зависимость Ф33 от фактора заполнения нанокомпозитом  $d_1/a$  при  $a/\lambda_p=2$ , N=16, f=0,2

Следует так же отметить, что, уменьшая концентрацию металлических наночастиц, мы понижаем поглощение в нанокомпозите. В металлических фотонных кристаллах поглощение очень существенно, вследствие высокой концентрации металла. Кроме того, металлические фотонные кристаллы достаточно сложно создать экспериментально, из-за необходимости периодически выстроить субмикронные металлические объекты. В исследуемом нанокомпозите металлические частицы распределены случайным образом, а однородность распределения в пространстве мы можем реализовать, используя кулоновское взаимодействие заряженных металлических шаров.

На рис. 5 показано изменение ФЗЗ в зависимости от концентрации металлических наночастиц f, при N = 8,  $d_1/a = 0.5$ ,  $a/\lambda_p = 1$ . В следствие того, что с увеличением f ширина отрезка  $[\omega_{10}, \omega_{20}]$  увеличивается, мы наблюдаем рост размера поляритонной ФЗЗ. Структурная ФЗЗ ведет себя более сложным образом, при f = 0.15 она достигает максимального размера, затем уменьшается до нуля. Следует так же заметить, что центр структурной ФЗЗ перемещается в более высокие частоты, при увеличении f.

Противоположное поведение структурной Ф33 наблюдается при  $a/\lambda_p = 2$ , что показано на рис. 6.



В этом случае, при увеличении f структурная ФЗЗ практически не изменяется в размерах, причем ее центр смещается в более низкие частоты [14]. Данный эффект, зависимости поведения структурной ФЗЗ от ее положения относительно поляритонной ФЗЗ, может оказаться полезным при проектировании фотонных кристаллов с необходимыми свойствами. Изменяя концентрацию металлических наночастиц, мы можем добиться того, что ФЗЗ окажется в нужных частотах.

Возможность изменения параметра f выгодно отличает нанокомпозит от ионного материала. В ионных материалах положение пика резонанса нельзя изменять, что может негативно сказаться на возможностях производства фотонных кристаллов, из этих материалов. Также важно и то, что фотонные кристаллы на основе нанокомпозита, позволяют работать в видимом диапазоне частот.

#### Заключение

В данной работе исследовано поведение Ф33 при изменении размера элементарной ячейки и концентрации металлических наночастиц.

Предсказано возникновение эффекта расщепления единой Ф33 на поляритонную и структурную Ф33.

Найдено различие в поведении структурной Ф33 при изменении концентрации металлических наночастиц, в зависимости от ее положения относительно поляритонной Ф33. Рассмотренные эффекты позволяют расширить возможности создания новых фотонных кристаллов с заданными свойствами.

#### Литература

- Joannopoulos J.D., Meade R.D., Winn J.N. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light // Princeton University Press, Singapore, 1999.
- Bykov V.P. Spontaneous emission in a periodic structure // Sov. Phys. JETP, 1972. V. 35. P. 269-273.
- Yablonovich E., Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics // Phys. Rev. Lett., 1987, V. 58, P. 2059-2061.
- John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices // Phys. Rev. Lett., 1987, V. 58, P. 2486-2488.
- Ho K.M., Chan C.T., Soukoulis C.M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures // Phys. Rev. Lett., 1990. V. 65. P. 3152-3155.
- Sharp D.N., Turberfield A.J., Denning R.G. Holographic photonic crystals with diamond symmetry // Phys. Rev. B, 2003. V. 68. P. 205102-205108.
- Fan S., Villeneuve P. R., Joannopoulos J. D. Large omnidirectional band gaps in metallodielectric photonic crystals // Phys. Rev. B, 1996. V. 54. P. 11245-11251.
- Wang Z., Chan C.T., Zhang W., et al., Threedimensional self-assembly of metal nanoparticles: possible photonic crystal with a complete gap below the plasma frequency // Phys. Rev. B, 2001. V. 64. P. 113108-113113.
- Gantzounis G., Stefanou N., Yannopapas Y., Optical properties of a periodic monolayer of metallic nanospheres on a dielectric waveguide // J. Phys.: Condens. Matter, 2005. V. 17. P. 1791-1802.
- Kittel C., Introduction to Solid State Physics. // 7th ed. Wiley, New York, 1966.
- Siglas M.M., Soukoulis C.M., Chan C.T., et al. Electromagnetic-wave propagation through dispersive and absorptive photonic-band-gap materials // Phys. Rev. B, 1994. V. 49. P. 11080-11087.
- Huang K.C., Bienstman P., Joannopoulos J.D., et al. Field expulsion and reconfiguration in polaritonic photonic crystals // Phys. Rev. Lett., 2003. V. 90. P. 196402-196406.
- Runs A., Ribbing C.G. Polaritonic and photonic gap interactions in a two-dimensional photonic crystals // Phys. Rev. Lett., 2004. V. 92. P. 123901-123905.
- Ораевский А.Н., Проценко И.Е. Высокий показатель преломления и другие оптические свойства гетерогенных сред // Письма в ЖЭТФ, 2000. Т. 72. С. 641-646.
- Ораевский А.Н., Проценко И.Е. Оптические свойства гетерогенных сред // Квантовая Электроника, 2001. Т. 31. С. 252-256.
- 16. Johnson P.B., Christy R.W. Optical constant of the noble metals // Phys. Rev. B, 1972. V. 6. P. 4370-4379.
- Levy O., Bergman D.J. Clausius-Mossotti approximation for family of nonlinear composites // Phys. Rev. B, 1992. V. 46. P. 7189-7192.
- Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method // Artech House INC, Norwood, 1995.

# ONE-DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTAL BASED ON NANOCOMPOSITE OF METAL NANOPARTICLES AND DIELECTRIC

P.N. Dyachenko<sup>1</sup>, Yu.V. Miklyaev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>South Ural State University (SUSU), Chelyabinsk, Russia

#### Abstract

This paper investigates a one-dimensional photonic crystal based on nanocomposite of metal nanoparticles and dielectric. The effect occurred in splitting a single zone into polariton and structure forbidden photonic band is predefined. The structure forbidden photonic band is distinguished in its behavior if the concentration of metal nanoparticles changes depending on the position to the polariton forbidden photonic band. Considered effects allow us to extend opportunities for creating new photonic crystals with given properties.

<u>Keywords</u>: one-dimensional photonic crystal, nanocomposite of metal nanoparticles and dielectric, forbidden photonic band

*Citation:* Dyachenko PN, Miklyaev YuV. One-dimensional photonic crystal based on nanocomposite of metal nanoparticles and dielectric [In Russian]. Computer Optics 2007; 31(1): 31-34.

### **References:**

- Joannopoulos JD, Meade RD, Winn JN. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. Princeton University Press, Singapore, 1999.
- [2] Bykov VP. Spontaneous emission in a periodic structure. Sov. Phys. JETP 1972; 35: 269-273.
- [3] Yablonovich E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. Phys. Rev. Lett. 1987; 58: 2059-2061.
- [4] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. Phys. Rev. Lett. 1987; 58: 2486-2488.
- [5] Ho KM, Chan CT, Soukoulis CM. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. Phys. Rev. Lett. 1990; 65: 3152-3155.
- [6] Sharp DN, Turberfield AJ, Denning RG. Holographic photonic crystals with diamond symmetry. Phys. Rev. B 2003; 68: 205102-205108.
- [7] Fan S, Villeneuve PR, Joannopoulos JD. Large omnidirectional band gaps in metallodielectric photonic crystals. Phys. Rev. B 1996; 54: 11245-11251.
- [8] Wang Z, Chan CT, Zhang W. et al. Threedimensional self-assembly of metal nanoparticles: possible photonic crystal with a complete gap below the plasma frequency. Phys. Rev. B 2001; 64: 113108-113113.
- [9] Gantzounis G, Stefanou N, Yannopapas Y. Optical properties of a periodic monolayer of metallic nanospheres on a dielectric waveguide. J. Phys.: Condens. Matter 2005; 17: 1791-1802.
- [10] Kittel C. Introduction to Solid State Physics. 7th ed. Wiley, New York, 1966.
- [11] Siglas MM, Soukoulis CM, Chan CT, et al. Electromagnetic-wave propagation through dispersive and absorptive photonicband-gap materials. Phys. Rev. B 1994; 49: 11080-11087.
- [12] Huang KC, Bienstman P, Joannopoulos JD, et al. Field expulsion and reconfiguration in polaritonic photonic crystals. Phys. Rev. Lett. 2003; 90: 196402-196406.
- [13] Runs A, Ribbing CG. Polaritonic and photonic gap interactions in a two-dimensional photonic crystals. Phys. Rev. Lett. 2004; 92: 123901-123905.
- [14] Oraevskii AN, Protsenko IE. High refractive index and other optical properties of heterogenic media [In Russia]. JETP Letters 2000; 72: 641-646.
- [15] Oraevskii AN, Protsenko IE. Optical properties of heterogeneous media [In Russia]. Quantum Electronics 2001; 31: 252-256.
- [16] Johnson PB, Christy RW. Optical constant of the noble metals. Phys. Rev. B 1972; 6: 4370-4379.
- [17] Levy O, Bergman DJ. Clausius-Mossotti approximation for family of nonlinear composites. Phys. Rev. B 1992; 46: 7189-7192.
- [18] Taflove A. Computational Electrodynamics: The FiniteDifference Time-Domain Method. Artech House INC, Norwood, 1995.