

УДК 538.958

Математическое моделирование оптических эффектов в сенсорах на основе самоорганизующихся фотонно-кристаллических структур

Мукминов Наиль Рамилевич^(*)

nail5258@mail.ru

Панфилова Екатерина Вадимовна^(*)

panfilova.e.v@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Аннотация. Рассмотрены оптические сенсоры на основе самоорганизующихся фотонно-кристаллических пленок. Выполнен обзор представленных в литературе моделей их структуры и ожидаемого оптического отклика. Продемонстрирован широкий вариатив возможностей применения структур, сформированных на базе фотонных кристаллов, получаемых посредством самоорганизации сферических микро и наночастиц.

Ключевые слова: фотонные кристаллы, оптические сенсоры, самоорганизация, тонкие пленки, моделирование

Mathematical modeling of optical effects in sensors based on self-organizing photonic crystal structures

Mukminov Nail Ramilevich^(*)

nail5258@mail.ru

Panfilova Ekaterina Vadimovna^(*)

panfilova.e.v@bmstu.ru

BMSTU, Moscow, Russia

Abstract. Optical sensors based on photonic crystal structures are considered. A review of their structure models and expected optical response presented in the literature is provided. A wide range of application possibilities for structures formed on the basis of photonic crystals obtained by self-organization of spherical micro and nanoparticles is demonstrated.

Keywords: photonic crystals, optical sensors, self-organization, thin films, modeling

Введение. Химические сенсоры являются одним из наиболее востребованных инструментов современной аналитической химии, биологии и медицины. В последнее время для аналитических целей стали использовать устройства, действие которых основано на регистрации изменения цвета при отражении видимого излучения от поверхности фотонных кристаллов (ФК) — наноразмерных регулярных структур, имеющих периодический коэффициент преломления. Преимуществами их применения являются возможность визуального детектирования соединений, относительно высокая чувствительность, а также возможность изменять свойства сенсоров путем варьирования элементной базы ФК [1].

Фотонные наноструктуры можно классифицировать как одно-, двух- или трехмерные в зависимости от того, в какой периодичности находится их

структура. На основе ФК имеется возможность создания физических датчиков для определения температуры и механического давления; химических сенсоров — для обнаружения небольших ионов, молекул, органических растворителей, паров и для оценки ионной силы и pH раствора; биологических — для детектирования ДНК, обнаружения белков, токсинов, бактерий и вирусов [2–4]. Оптические характеристики фотонных кристаллов — положение пика фотонной запрещенной зоны (ФЗЗ) λ (nm), его ширина Δ (nm) и интенсивность R (%), определяются материалом фотонного кристалла и его структурой. В данной работе проанализированы различные варианты строения фотонно-кристаллических структур и показаны результаты моделирования соответствующего оптического отклика.

Материалы и методы. Оптические свойства фотонно-кристаллических структур определяются сочетанием явлений интерференции и дифракции. Волна, проходящая через регулярно упорядоченную структуру фотонного кристалла, подчиняется условию Вульфа — Брэггов [3]:

$$m\lambda = 2nds\sin\theta, \quad (1)$$

где m — порядок дифракционного максимума; λ — длина волны отраженного света; n — средний показатель преломления периодической структуры; d — период кристаллической решетки в направлении распространения света; θ — угол скольжения (брэгговский угол).

Пленка со структурой фотонного кристалла, состоящая из монослоя сфер одинаковых диаметров с показателем преломления $n_{\text{сф}}$ и воздуха в межсферичном пространстве с показателем преломления $n_{\text{возд}}$ (рис. 1, а), имеет эффективный показатель преломления, определяемый выражением [1]:

$$n_{\text{эф}} = \sqrt{n_{\text{сф}}^2 f_{\text{сф}} + n_{\text{возд}}^2 f_{\text{возд}}}, \quad (2)$$

где $f_{\text{сф}}$ — коэффициент заполнения кристалла сферами; $f_{\text{возд}}$ — коэффициент заполнения межсферичного пространства кристалла воздухом.

Нанокompозитная фотонно-кристаллическая пленка (рис. 1, б) представляет собой структуру, модифицированную внедрением частиц дополнительных материалов с целью корректировки выходных оптических параметров или усовершенствования функций структуры. Внедренные функциональные фрагменты с собственным показателем преломления $n_{\text{внедр}}$ частично занимают место воздуха, в связи с чем вводится коэффициент заполнения материалом внедрения $f_{\text{внедр}}$. В таком случае эффективный показатель преломления можно вычислить следующим образом [1]:

$$n_{\text{эф}} = \sqrt{n_{\text{сф}}^2 f_{\text{сф}} + n_{\text{возд}}^2 f_{\text{возд}} + n_{\text{внедр}}^2 f_{\text{внедр}}}. \quad (3)$$

Коэффициент заполнения объема фотонного кристалла тем или иным компонентом определяется отношением объема, занимаемого компонентом, к объему структуры в целом так, что $f_{\text{сф}} + f_{\text{внедр}} + f_{\text{возд}} = 1$.



Рис. 1. Пленки со структурой фотонного кристалла (а) и нанокомпозитного фотонного кристалла (б) [1]

Пленки со структурой градиентного фотонного кристалла представляет собой твердотельную упорядоченную структуру, сформированную из частиц с послойным изменением диаметра. Такие структуры обладают особым оптическим свойством, поскольку каждый из слоев характеризуется последовательно изменяющимся диаметром частиц, совокупность слоев позволяет получить набор запрещенных зон в спектре отражения света.

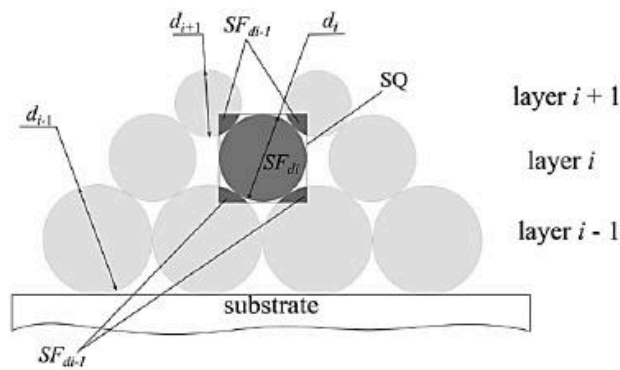


Рис. 2. Пленка со структурой градиентного фотонного кристалла [5]

Выражение для расчета коэффициента заполнения объема материалом сфер в градиентном фотонном кристалле представлена в работе [5]. Расчетная схема предложена на рис. 2, где темной заливкой выделена единичная площадь скола фотонного кристалла SQ . Эта область включает в себя сферу расчетного слоя i и фрагменты окружающих слоев. Выражением (4) определяется значение коэффициента заполнения кристалла материалом сфер:

$$f_{сф} = \frac{S_{di} + 2 \cdot SF_{d(i+1)} + 2 \cdot SF_{d(i-1)}}{SQ}. \quad (4)$$

Практический интерес представляют структуры, полученные осаждением тонких пленок функционального материала на фотонно-кристаллическую пленку. В работе [6] описаны технология изготовления данной структуры и ее анализ. Показатель преломления микросфер определяется из анализа спектров брэгговского отражения исходной пленки (обозначенной как опаловый кремний на рис. 3), он принимается равным 1,92 и предполагается не зависящим от длины волны.

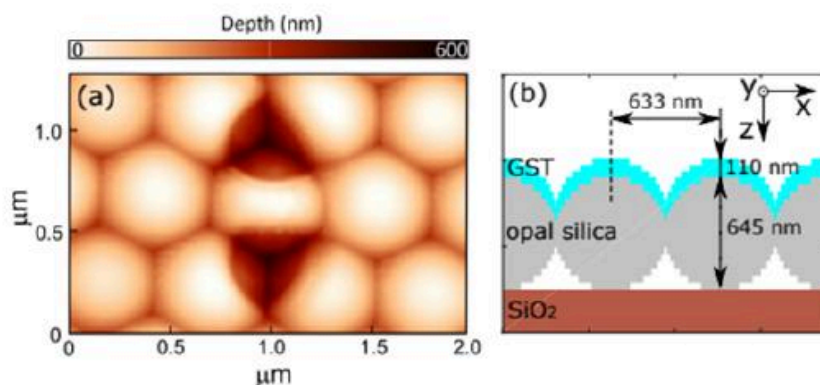


Рис. 3. АСМ-изображение фрагмента структуры (а), где пленка (светло-коричневая) частично отсутствует, а сферы SiO₂ (темно-коричневые) видны. Схематическое изображение структуры, использованной в расчетах методом матрицы рассеяния (б) [6]

Дисперсионное уравнение рассчитывается для новой эффективной структуры, состоящей из однородных изотропных слоев, соответствующих последовательным ступеням лестничного представления гибридной структуры. Эффективные диэлектрические проницаемости этих слоев рассчитываются по теории эффективной среды:

$$\varepsilon_{eff} = \frac{\sum \alpha \varepsilon_{\alpha} f_{\alpha}}{\sum \alpha f_{\alpha}}, \quad (5)$$

где ε_{α} — диэлектрическая проницаемость α -го компонента в слое; f_{α} — коэффициент заполнения α -го компонента.

Результаты. Представленные выше модели были апробированы на практике. В работе [7] показано сравнение спектров пленок со структурой фотонного кристалла в зависимости от размеров сфер.

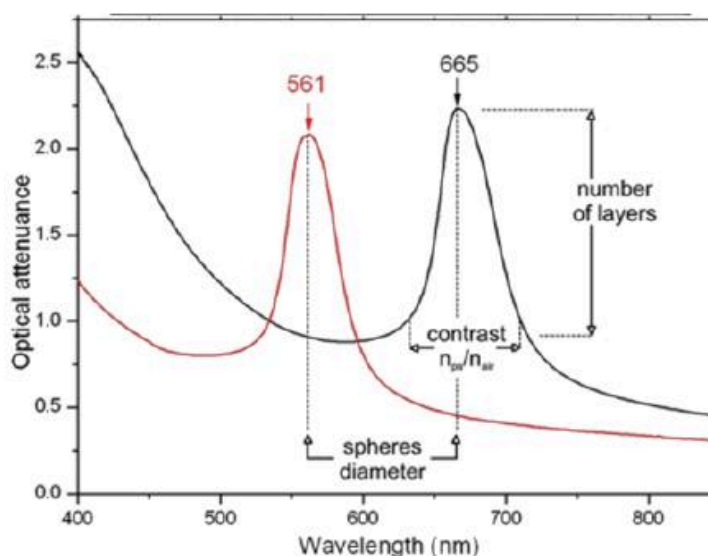


Рис. 4. Типичные спектры оптического поглощения коллоидных фотонных кристаллов из кремниевых сфер диаметром 258 нм (красный) и 305 нм (черный), измеренные перпендикулярно подложке [7]

В статье [5] приведен спектр градиентного образца. Анализируя спектры отражения от поверхности, параллельной поверхности подложки (рис. 5), по наличию трех ФЗЗ можно сделать вывод о формировании структуры, содержащей слои из частиц различающихся диаметров. В работе [7], результаты которой представлены на рис. 6, приводятся спектры при различных толщинах пленки функционального материала. В работе [8] представлены результаты исследования сложной структуры, полученной нанесением пленки на поверхность фотонного кристалла с одновременным его внедрением в поверхностные слои кристалла (рис. 7).

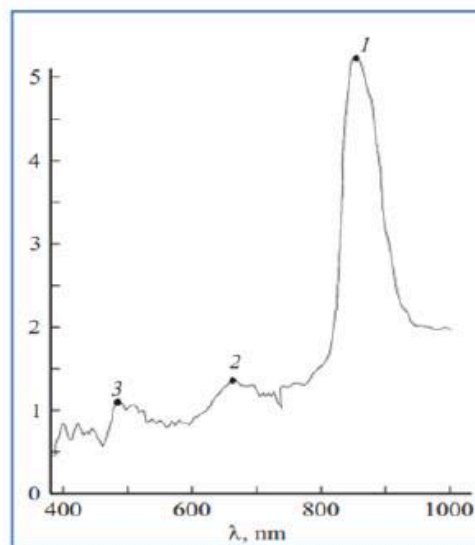


Рис. 5. Спектр отражения образца, отделенного от подложки, снятый со стороны градиентной структуры [5]

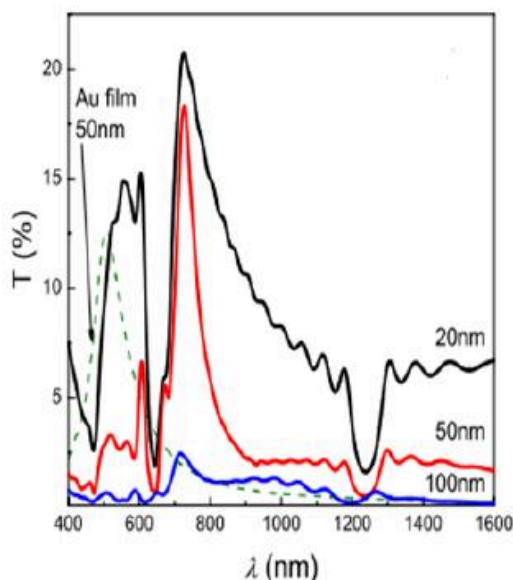


Рис. 6. Спектры пропускания пленок золота на фотонном кристалле с диаметром сфер 560 нм. Пунктирная линия показывает спектр пропускания пленки Au толщиной 50 нм [7]

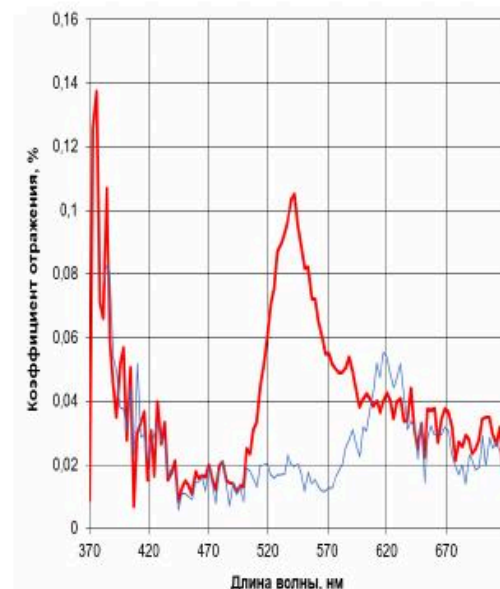


Рис. 7. Спектр отражения пленки фотонно-кристаллической пленки (красный цвет) и гетероструктуры (синий цвет), полученной осаждением никеля на эту пленку [8]

Обсуждение полученных результатов. Таким образом, на основе фотонно-кристаллических структур можно создавать оптические сенсоры с контролируемым откликом. Важно, что в них, в отличие от электронных, не нужно будет периодически заменять расходные материалы. Этому способствует использование природной структуры опала.

На рис. 8 показан оптический отклик фотонно-кристаллических структур, после воздействия паров о-ксилола. Спектральные линии, полученные в результате экспериментального исследования образцов различных фотонно-кристаллических структур, демонстрируют соответствие теоретическим моделям образования фотонной запрещенной зоны.

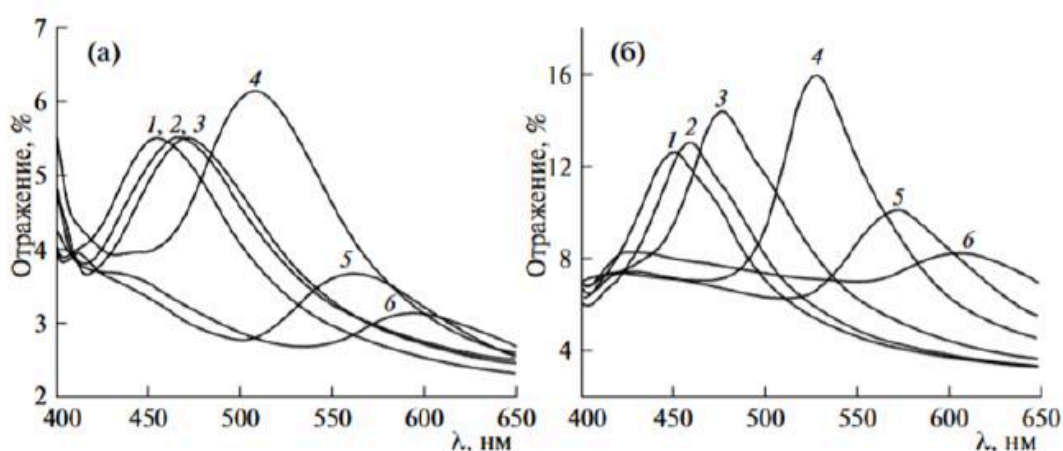


Рис. 8. Положение запрещенной зоны ФК (на стеклянной (а) и поликарбонатной (б) подложках) на спектре диффузного отражения при воздействии насыщенных паров о-ксилола: 1 — исходное; 2, 3, 4, 5 и 6 — смещение при взаимодействии аналита в течение 15, 30, 60, 120 и 240 мин соответственно [2]

Заключение. Фотонно-кристаллические структуры на основе упорядоченных матриц сферических частиц обладают выраженной запрещенной зоной, положение которой крайне чувствительно к изменению показателя преломления окружающей среды. Представленные результаты моделирования продемонстрировали высокую потенциальную чувствительность сенсоров на их основе. Материалы работы могут быть использованы при разработке конструкций таких сенсоров.

Список источников

- [1] Панфилова Е.В., Медведева О.М., Минько К.Р. Анализ механизма формирования фотонных запрещенных зон в гетероструктурах, получаемых при осаждении тонких пленок на поверхность коллоидных пленок. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2022, № 2 (122). <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2022-2-2157>
- [2] Большаков Е.С. Сенсор на основе фотонного кристалла для обнаружения паров бензола, толуола и о-ксилола. *Журнал физической химии*, 2018, т. 92, № 8, с. 1283–1288.
- [3] Козлов А.А. Химические сенсоры на основе фотонных коллоидных кристаллов. *Тонкие химические технологии*, 2023, т. 18 (4), с. 392–407. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2023-18-4-392-407>

- [4] Михайлова Э.В., Целищев Д.В. Фотонный кристалл опал: инновационный датчик влажности. *Мавлютовские чтения*, 2020, с. 50–50.
- [5] Егорова Е.Н., Панфилова Е.В., Азарнин И.О., Кузикова М.С. Особенности расчета и исследование оптических характеристик градиентного фотонного кристалла. *Письма в ЖТФ*, 2025, № 51:8, с. 11–15.
- [6] Dyakov S.A. Optical properties of opaline photonic crystals covered by phase-change material Ge₂Sb₂Te₅. *Arxiv preprint arXiv:1611.09789*, 2016.
- [7] González-Urbina L. Linear and nonlinear optical properties of colloidal photonic crystals. *Chemical reviews*, 2012, vol. 112, no. 4, pp. 2268–2285.
- [8] Панфилова Е.В., Медведева О.М., Минько К.В. Анализ механизма формирования фотонных запрещенных зон в гетероструктурах, получаемых при осаждении тонких пленок на поверхность коллоидных пленок. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2022, № 2(122). <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2022-2-2157>