

Учреждение Российской академии наук
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

На правах рукописи



Самусев Антон Кириллович

**ОПТИЧЕСКАЯ И МАЛОУГЛОВАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ
НА ОПАЛОПОДОБНЫХ ФОТОННЫХ СТРУКТУРАХ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2011

Работа выполнена в *Учреждении Российской академии наук
Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН.*

Научный руководитель: *доктор физико-математических наук*
Лимонов Михаил Феликсович

Официальные оппоненты: *доктор физико-математических наук,
профессор*
Желтиков Алексей Михайлович

доктор физико-математических наук
Кумзеров Юрий Александрович

Ведущая организация: *Учреждение Российской академии наук
Центр фотохимии РАН*

Защита состоится 15 декабря 2011 г. в 15 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 002.205.01 при *Учреждении Российской академии наук Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН*, расположенном по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *ФТИ им. А.Ф. Иоффе*.

Автореферат разослан 11 ноября 2011 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



А.А. Петров

Общая характеристика работы

Дифракция представляет собой одно из наиболее фундаментальных и широко распространенных физических явлений, которое наблюдается во всем диапазоне электромагнитных волн, а также при рассеянии частиц (электронов, нейтронов), проявляющих волновые свойства. В частности, брэгговская дифракция света на среде с периодической модуляцией диэлектрической проницаемости приводит к образованию запрещенных фотонных зон в энергетическом спектре собственных электромагнитных состояний соответствующих структур, получивших название фотонных кристаллов (ФК). В зависимости от симметрии кристаллической решетки и от глубины модуляции диэлектрической проницаемости возможно образование одномерных стоп-зон в некоторых заданных направлениях в ФК, либо трехмерной (полной) запрещенной фотонной зоны для всех направлений распространения света.

В 1995 г. сотрудниками ФТИ им. А.Ф. Иоффе экспериментально продемонстрировано, что в синтетических опалах (структурах, образованных плотноупакованными сферическими частицами аморфного кварца $a\text{-SiO}_2$) существуют фотонные стоп-зоны, наблюдаемые непосредственно в оптических спектрах [1]. Опалы являются трехмерными (3D) ФК, которые обладают фотонными стоп-зонами в видимом спектральном диапазоне благодаря характерному размеру частиц $a\text{-SiO}_2$ в несколько сотен нанометров. В результате экспериментатор получает уникальную возможность изучать фотонные свойства не только такими традиционными методами, как спектроскопия пропускания либо отражения, но и непосредственно наблюдать картины оптической дифракции и, анализируя их, определять фотонную зонную структуру опалов. Тем не менее, к началу данной работы наиболее интересные результаты были получены традиционным методом при изучении спектров пропускания опалов. К таким результатам можно отнести селективное выключение различных $\{hkl\}$ стоп-зон при изменении диэлектрической проницаемости заполнителя опаловой матрицы [2] и резонанс Фано, связанный с интерференцией узкой полосы, обусловленной рассеянием Брэгга на системе плоскостей (111), и широкополосного фона (рассеяние Ми), который появляется из-за разброса средней диэлектрической проницаемости частиц $a\text{-SiO}_2$. Интерференция приводит к появлению асимметрии брэгговской полосы в спектрах и даже к ее перевероту, т.е. превращению стоп-зоны в зону усиленного пропускания света [3].

Таким образом, возникает вопрос – какие задачи при исследовании оптических свойств опалов может решать дифракционная методика? Ответом на этот вопрос являются результаты данной работы, в которой использовались две дифракционные методики – метод оптической дифракции, позволяющий исследовать низкоиндексные $\{hkl\}$ фотонные стоп-зоны и метод малоугловой рентгеновской дифракции. Отметим оригинальное использование метода малоугловой рентгеновской

дифракции, который в данном случае применялся не для изучения внутренней структуры частиц α -SiO₂, а для исследования высокоиндексных $\{hkl\}$ стоп-зон и для трехмерной реконструкции обратной решетки опалов [4].

Актуальность данной работы определяется двумя факторами. Во-первых, сочетанием в одной работе двух взаимодополняющих дифракционных методик – оптической и малоугловой рентгеновской. Учитывая дифракционную природу фотонных стоп-зон, изучение дифракции следует признать прямым методом исследования фотонной зонной структуры произвольного ФК. Во-вторых – объектом исследования – фотонными структурами на основе синтетических опалов, которые являются уникальной и уже общепризнанной модельной 3D структурой для исследования фотонных свойств в видимом диапазоне спектра. Изучение опалов позволяет обнаружить и исследовать принципиально новые физические эффекты и, тем самым, существенно расширяет область применения ФК.

Основными целями диссертационной работы являлись:

1. Создание оригинальной установки для регистрации картин оптической дифракции, разработка пакета программ для их обработки и оригинального метода представления результатов дифракционных исследований.
2. Экспериментальное исследование дифракции белого света на опаловых пленках различной толщины и изучение перехода от двумерной (2D) дифракции света к трехмерной (3D) брэгговской дифракции.
3. Аналитические и численные расчеты картин 2D и 3D дифракции и анализ перехода 2D → 3D в режимах оптической дифракции.
4. Изучение эффектов, связанных с селективным выключением рефлексов в картинах дифракции ФК опал-заполнитель методом иммерсионной спектроскопии.
5. Исследование малоугловой рентгеновской дифракции с целью обнаружения высокоиндексных $\{hkl\}$ дифракционных рефлексов и реконструкции обратной решетки реальных образцов синтетических опалов.

Научная новизна определяется тем, что в работе впервые экспериментально и теоретически исследован переход от двумерной дифракции к трехмерной брэгговской дифракции света на опалоподобных структурах. Показано, что на опаловых пленках толщиной в несколько слоев дифракция имеет двумерный характер, а при увеличении толщины до нескольких десятков слоев наблюдается переход к режиму трехмерной дифракции. Численные и аналитические расчеты картин дифракции прекрасно описывают экспериментальные данные. Впервые продемонстрирован эффект селективного выключения $\{hkl\}$ дифракционных рефлексов при варьировании диэлектрической проницаемости заполнителя опаловой матрицы. В совокупности все эти результаты позволили представить полную картину оптической дифракции света на опалоподобных фотонных структурах.

Практическая ценность работы состоит в том, что автором предложен новый метод представления дифракционных картин – в осях «угол падения - угол наблюдения». Метод может быть использован для анализа и интерпретации результатов дифракционных экспериментов, полученных на объектах любой размерности. Кроме того, экспериментально продемонстрировано, что в ФК на основе опалов реализуется селективное выключение $\{hkl\}$ дифракционных рефлексов, т.е. показана возможность селективного управления пучками, распространяющимися в различных направлениях на разных длинах волн. Результаты демонстрируют новые возможности управления световыми потоками с помощью ФК.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Оригинальный метод представления дифракционных картин в осях «угол падения - угол наблюдения» позволяет однозначно разделить двумерную и трехмерную дифракцию света на синтетических опалах.
2. Дифракция света на тонких опаловых пленках имеет двумерный характер. Вывод подтверждается совпадением экспериментальных картин дифракции на образце толщиной 6 слоев частиц α -SiO₂ с результатами численных и аналитических расчетов.
3. С увеличением числа слоев опаловой пленки до нескольких десятков происходит переход от двумерной к трехмерной брэгговской дифракции света.
4. Экспериментально определенные иммерсионные зависимости интенсивности (hkl) дифракционных рефлексов в фотонных кристаллах опал-заполнитель описываются в рамках аналитической теории, основанной на анализе фактора рассеяния. Эффект селективного погасания (hkl) дифракционных рефлексов связан с неоднородностью частиц α -SiO₂, образующих опалы.
5. Экспериментальное исследование малоугловой рентгеновской дифракции на пленках синтетического опала позволяет выполнить реконструкцию обратной решетки. Проявление в реконструированной обратной решетке исследованных пленок опала протяженных «узловых цепочек», ориентированных вдоль направления $\Gamma \rightarrow L$, является следствием двух факторов: относительно малой толщины образца (44 слоя α -SiO₂) и двойникованной структуры опала.

Достоверность и надежность результатов определяется: (i) хорошим согласованием данных, полученных разными экспериментальными методиками (оптическая дифракция и спектроскопия пропускания, малоугловая рентгеновская дифракция); (ii) использованием современного оборудования, в том числе работ в Европейском центре синхротронного излучения (Гренобль, Франция); (iii) полным соответствием экспериментальных результатов с результатами теоретических расчетов, выполненных различными методами.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на VI Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике (С.-Петербург, 2004); 13th Int. Symp. «Nanostructures:

Physics and Technology» (С.-Петербург, 2005); «PECS-VI: International Symposium on Photonic and Electromagnetic Crystal Structures» (Crete, Greece, 2005); I Всероссийской конференции «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» (Москва, 2008); «SPIE Photonics Europe» (Strasbourg, France, 2008); Первом международном форуме по нанотехнологиям (Москва, 2008); Всероссийской конференции "Опалоподобные структуры"(Санкт-Петербург, 2010); «PECS IX: 9th International Photonic & Electromagnetic Crystal Structures Meeting» (Granada, Spain, 2010); «Международной зимней школе по физике полупроводников» (Зеленогорск, 2011); «Annual international conference: Days on Diffraction» (С.-Петербург, 2009, 2011); «PLASMETA'11 - 1st International Conference on Electrodynamics of complex Materials for Advanced Technologies», (Самарканд, 2011); «IQEC/CLEO Pacific Rim: International Quantum Electronics / Lasers and Electro-Optics Conference» (Sydney, Australia, 2011) и обсуждались на семинарах в ФТИ им. А.Ф. Иоффе и Австралийском национальном университете (Канберра).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 9 печатных работ, 8 из которых – в изданиях, входящих в список ВАК.

Личный вклад автора заключается в создании экспериментальной установки для изучения оптической дифракции, измерениях и обработке оптических и рентгеновских картин дифракции на опалоподобных фотонных структурах, участии в написании статей.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, двух приложений и списка цитируемой литературы. Диссертация содержит 161 страницу, 49 рисунков и 189 библиографических ссылок.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность тематики и научная новизна, изложены основные положения, выносимые на защиту, кратко описана структура диссертации. Сформулированы основные цели и задачи работы.

В первой главе представлен обзор литературы, посвященной исследованиям оптической и малоугловой рентгеновской дифракции на различных фотонных структурах и, в первую очередь, на опалоподобных фотонных структурах. Детально проанализированы преимущества и недостатки двух взаимодополняющих дифракционных методик – оптической и малоугловой рентгеновской дифракции.

Основным фактором, определяющим условия дифракции, является соотношение между длиной волны падающего излучения λ и характерным параметром исследуемой структуры (рис. 1). Предметом данного исследования являются фотонные зоны, спектральное положение которых определяется межплоскостными расстояниями в гранцентрированной кубической (ГЦК) решетке опалов. Поэтому величину λ следует сравнивать с диаметром сферических частиц α -SiO₂, кото-

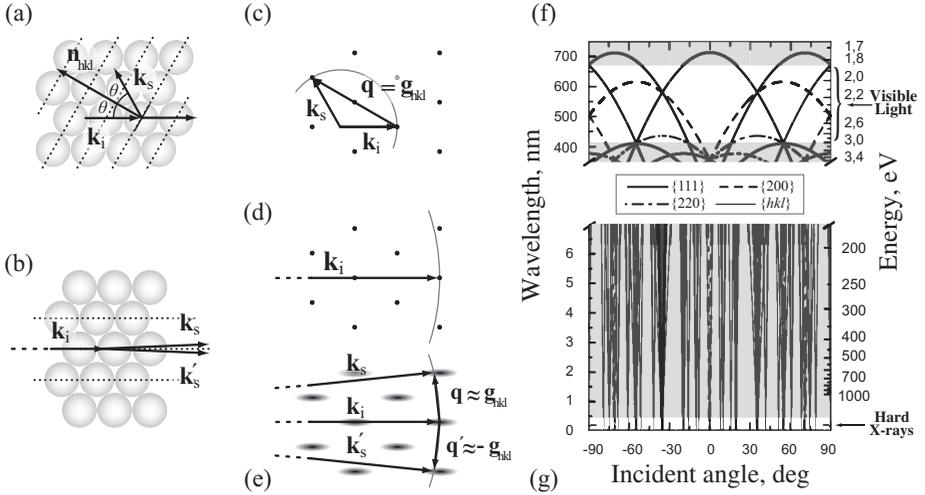


Рис. 1. (a) Схема, иллюстрирующая брэгговскую дифракцию света на системе (hkl) плоскостей в опалах, прямое пространство. (b) Малоугловая рентгеновская дифракция на системе (hkl) плоскостей, прямое пространство. (c) Сфера Эвальда в обратном пространстве для случая брэгговской дифракции света. (d) Условие малоугловой дифракции (построение Эвальда) для идеального бесконечного кристалла. (e) Условие малоугловой дифракции для реального кристалла с уширенными узлами обратной решетки. (f) Фотонная зонная структура опалов в видимом диапазоне. (g) Экстраполяция фотонной структуры опалов в рентгеновский диапазон.

рый в использованных нами образцах составлял $D \sim (3 - 7) \cdot 10^2$ нм. Для оптической дифракции выполняется соотношение $\lambda_{opt} \sim D$, или $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_s| \sim |\mathbf{g}|$, где \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_s – волновые вектора падающей и рассеянной волн (рассматривается случай упругого рассеяния), \mathbf{g} – вектор обратной решетки ГЦК структуры. В результате дифракция от разных плоскостей может наблюдаться под определенными углами в различных геометриях рассеяния (рис. 1c). Для рентгеновского синхротронного излучения ($\lambda_{X-ray} \sim 10^{-1}$ нм) соотношения радикально меняются: $\lambda_{X-ray} \ll D$, $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_s| \gg |\mathbf{g}|$. В этом случае условие дифракции $\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i \equiv \mathbf{q} = \mathbf{g}$ определяет единственно возможную геометрию эксперимента – «скользящее» падение пучка на систему плоскостей (hkl) , т.е. малоугловое рассеяние, рис. 1b,d,e.

Во второй главе описаны оптические экспериментальные методики, разработанные и использованные в данной работе, оригинальный алгоритм, который был предложен для обработки картин дифракции видимого излучения на ФК, а также исследованные в работе образцы.

На рис. 2a-с представлена традиционная схема проведения оптических ди-

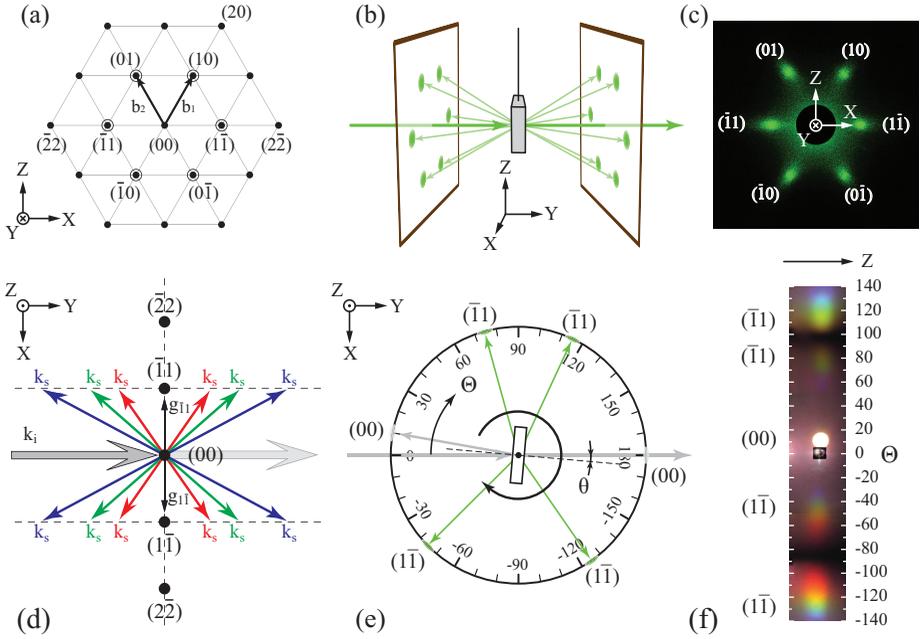


Рис. 2. (a) Обратная решетка 2D гексагонального слоя, состоящая из набора узлов, положение которых задается вектором $\mathbf{g}_{hk} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$. Окружностями обведены узлы, определяющие дифракцию первого порядка (при нормальном падении луча вдоль оси Y). (b) Схема установки для наблюдения дифракции света на плоском экране при прохождении или отражении света. (c) Экспериментальная картина дифракции монохроматического света ($\lambda = 532$ нм) на пленке опала, наблюдаемая на плоском экране, расположенном за образцом. (d) Схематическое изображение условий 2D дифракции $\mathbf{q}_{||} = \mathbf{g}_{11}$ и $\mathbf{q}_{||} = \mathbf{g}_{\bar{1}\bar{1}}$ при падении света вдоль оси Y на гексагональный слой, расположенный в плоскости XZ . (e) Схема установки для наблюдения дифракции света на цилиндрическом экране. Показаны шесть дифрагированных пучков, три из которых рассеяны вперед относительно падающего по оси Y луча, а три – назад. θ – угол падения света на образец, Θ – угол регистрации рассеянного света. Рисунок приведен для $\theta = 5^\circ$. (f) Развертка картины дифракции белого света на пленке опала, которая наблюдается на цилиндрическом экране в плоскости XY при $\theta = 5^\circ$.

фракционных экспериментов на синтетических опалах, когда рефлексы наблюдаются на плоском экране, расположенном за образцом. К недостаткам такой схемы относится искажение изображения из-за несферичности экрана и ограниченность

телесного угла регистрации изображения. Поэтому в данной работе использовался цилиндрический экран, в центре которого закреплялся образец (рис. 2е). Отметим, что относительно светового пучка, распространяющегося по оси [111] (ось Y на рис. 2), ростовой слой опалов (111) и двойникованная ГЦК структура опалов имеют симметрию C_6 , а недвойникованная ГЦК структура – C_3 . С учетом такой симметрии, информации о дифракционных рефлексах в плоскости XY (рефлексы $(\bar{1}1)$ и $(1\bar{1})$ на рис. 2с) оказывается достаточно для описания полной картины дифракции света на опалах. На рис. 2f приведена «развертка» дифракционной картины, наблюдаемой на цилиндрическом экране в плоскости XY. Эта развертка получена путем фотографирования экрана с трех различных фиксированных точек и дальнейшей обработки изображений (трансформации и сшивки) с помощью специально разработанной программы.

В диссертационной работе исследовались опаловые пленки различной толщины, выращенные и протестированные в лаборатории физики аморфных полупроводников ФТИ им. А.Ф.Иоффе Е.Ю. Трофимовой и Д.А. Курдюковым (зав. лабораторией В.Г. Голубев).

Третья глава посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию оптической дифракции на тонких опаловых пленках $a\text{-SiO}_2$. В главе проведены расчеты картин дифракции двумя методами: путем численного расчета структурного фактора и аналитическим методом.

В двумерном случае из уравнений Лауэ $\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi h$ и $\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi k$ ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – вектора прямой 2D решетки; h, k – целые числа) получаем условие 2D дифракции:

$$\mathbf{q}_{||} = \mathbf{g}_{hk}, \quad (1)$$

где $\mathbf{q}_{||}$ – компонента вектора $\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$ в рассеивающей плоскости (в нашем случае это ростовая плоскость опалов (111)); $\mathbf{g}_{hk} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$ – двумерный вектор обратной решетки плоскости (111) с базисными векторами \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 (рис. 2а). Из формулы (1) получаем выражение для длины волны света, дифрагированного на 2D решетке:

$$\lambda_{hk} = \frac{D\sqrt{\varepsilon_{av}}}{2} \left(\frac{3}{h^2 + hk + k^2} \right)^{1/2} |\sin(\Theta - \theta) - \sin\theta| \quad (2)$$

где θ и Θ – углы падения и регистрации рассеянного света (рис. 2е), D – диаметр частиц $a\text{-SiO}_2$, ε_{av} – усредненная по структуре диэлектрическая проницаемость.

Чтобы однозначно интерпретировать экспериментальные результаты, нами был предложен следующий метод представления дифракционных картин: в декартовых координатах на осях отложены угол падения света на образец θ и угол регистрации дифрагированного света Θ (оси абсцисс и ординат на рис. 3), а результаты представлены в виде цветного изображения, полученного из совокупности большого количества фотографий цилиндрического экрана. Отметим, что

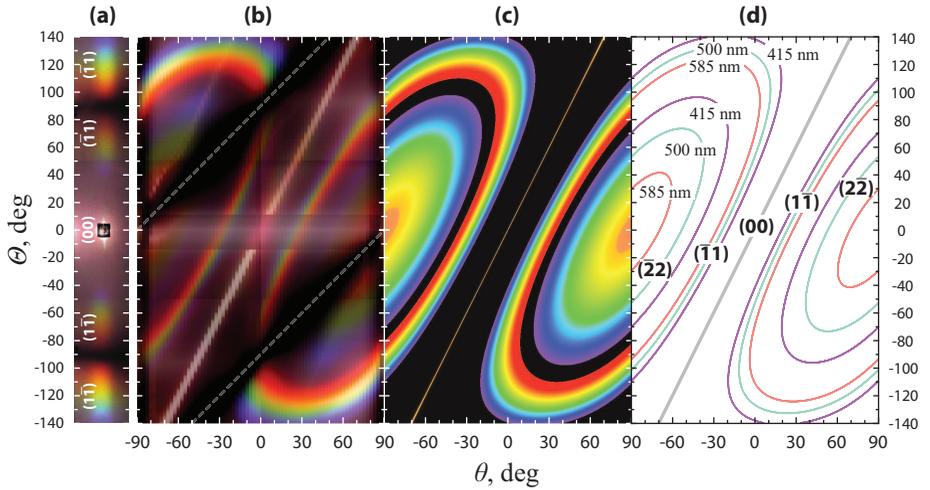


Рис. 3. (a) Развертка картины дифракции белого света на пленке опала (шесть слоев частиц $a\text{-SiO}_2$ диаметром 720 нм), зарегистрированной на цилиндрическом экране при нормальном падении светового пучка $\theta = 0$. (b) Общая экспериментальная картина дифракции света в горизонтальной плоскости XY (Рис. 2e), представленная в системе координат (θ, Θ) при изменении угла падения $-90^\circ < \theta < 90^\circ$. Пунктирные линии соответствуют углам $\Theta = \theta \pm 90^\circ$. (c) Расчет картин 2D дифракции численным методом в борновском приближении теории рассеяния. (d) Расчет положения 2D дифракционных рефлексов нулевого, первого и второго порядков из уравнений Лауэ для трех длин волн $\lambda = 415, 500, 585$ нм.

в случае 2D дифракции уравнение (2) неявно задает нелинейную зависимость между Θ и θ . В то же время 3D брэгговская дифракция сводится к зеркальному отражению пучка от систем плоскостей и описывается простым линейным соотношением $\Theta = 2(\theta - \theta_{hkl})$, где θ_{hkl} – угол между нормальными к системам плоскостей (111) и (hkl) . Поэтому в координатах (θ, Θ) разрешенные брэгговские рефлексы будут представлены в виде параллельных прямых линий, что дает возможность однозначно разделить режимы 2D и 3D дифракции.

В эксперименте фотографирование дифракционных картин на цилиндрическом экране производилось для углов падения $-90^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ с шагом $\Delta\theta = 2.5^\circ$. Таким образом были получены 72 узкие «картины-полоски», аналогичные полоскам, представленным на рис. 2f ($\theta = 5^\circ$) и рис. 3a ($\theta = 0^\circ$). Итоговый экспериментальный результат, представленный на рис. 3b, составлен из этих 72 полосок, «сжатых» по «ширине» и объединенных в единый рисунок. Представленный на рис. 3b результат был получен на пленке, образованной шестью слоями частиц

a -SiO₂ диаметром 720 нм.

Из формулы (2) следует, что нулевому порядку 2D дифракции соответствует условие $(h^2 + hk + k^2)^{1/2} = 0$. В этом случае уравнение (2) имеет решения при $\sin(\Theta - \theta) = \sin \theta$, т.е. $\Theta = 180^\circ$ (прямое прохождение луча, рис. 2е) и $\Theta = 2\theta$ (неселективное по длине волны зеркальное отражение пучка от 2D плоскости). Первый порядок дифракции отвечает условию $(h^2 + hk + k^2)^{1/2} = 1$. Это условие выполняется для пар индексов (h, k) равных $(\bar{1}1)$, $(1\bar{1})$, $(1,0)$, $(0,1)$, $(0\bar{1})$, $(\bar{1}0)$ (рис. 2а), однако в плоскости XY наблюдается дифракция, определяемая только узлами обратной решетки $(\bar{1}\bar{1})$ и $(1\bar{1})$. Аналогично анализируются условия дифракции высших порядков. Например, условие $(h^2 + hk + k^2)^{1/2} = 2$ отвечает дифракции второго порядка, при этом в плоскости XY наблюдаются рефлексы, определяемые узлами $(\bar{2}2)$ и $(2\bar{2})$.

Для расчета картин дифракции в низкоконтрастных ФК (к которым относятся синтетические опалы), достаточно использовать борновское приближение теории рассеяния. Основные особенности дифракции света определяются структурным фактором рассеяния и форм-фактором рассеяния. Проведенные нами расчеты показали, что для описания экспериментальных данных (рис. 3б) достаточно учесть только структурный фактор рассеяния $S(\mathbf{q})$, который в первом борновском приближении рассчитывается по формуле [5]:

$$S^2(\mathbf{q}) = \frac{1}{NLM} \cdot \frac{\sin^2(N\mathbf{q}\mathbf{a}_1/2)}{\sin^2(\mathbf{q}\mathbf{a}_1/2)} \cdot \frac{\sin^2(L\mathbf{q}\mathbf{a}_2/2)}{\sin^2(\mathbf{q}\mathbf{a}_2/2)} \cdot \frac{\sin^2(M\mathbf{q}\mathbf{a}_3/2)}{\sin^2(\mathbf{q}\mathbf{a}_3/2)}, \quad (3)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$; $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ - вектора трансляций примитивной ячейки ГЦК-решетки опала. Выражение (3) позволяет рассчитать значение $S^2(\mathbf{q})$ для различных углов рассеяния и ориентации образца, определяемых направлениями векторов \mathbf{k}_s и \mathbf{k}_i . Параметром расчета является размер образца, заданный количеством рассеивателей N, L, M в направлениях векторов $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ и \mathbf{a}_3 соответственно. При вычислениях использовались значения $N = 1, L = M = 3000$, что соответствует линейным размерам образца порядка миллиметра и толщине в 1 слой частиц a -SiO₂. Результаты численного расчета прекрасно совпадают с экспериментальными данными, как видно из рис. 3б,с. Однако этот численный расчет не позволяет интерпретировать все особенности картин дифракции.

Для интерпретации экспериментальных данных был проведен аналитический расчет по формуле (2) для монохроматического света с длинами волн: $\lambda = 415, 500, 585$ нм ($D = 720$ нм). Из расчета (рис. 3д) видно, что при данных параметрах образца для указанных длин волн можно ожидать наблюдения рефлексов, отвечающих нулевому, первому и второму порядкам рассеяния при $h = -k = 0, \pm 1, \pm 2$. Красная граница более высоких порядков дифракции лежит в ультрафиолетовой (UV) области спектра. Основываясь на результатах расчета проведем интерпретацию картины дифракции. Нулевой порядок дифракции соответствует условию

$\Theta = 2\theta$ и наблюдается экспериментально в виде белой диагональной полосы на рис. 3б. Эта полоса делит рис. 3б на две части, одна из которых соответствует рефлексам (1 $\bar{1}$) и (2 $\bar{2}$) (рассеяние «направо» в плоскости ХУ по отношению к направлению вектора \mathbf{k}_i – рис. 2д), а вторая часть соответствует рефлексам ($\bar{1}1$) и (22) (рассеяние «налево»). Теоретические зависимости $\Theta = f(\theta, \lambda)$ представляют собой вложенные замкнутые кривые (овалы), причем для данной длины волны овал, отвечающий большему порядку дифракции, находится внутри овала меньшего порядка. Отметим, что дифракцию не удастся наблюдать в эксперименте при углах, близких к $\Theta = \theta \pm 90^\circ$, которые обозначены пунктиром на рис. 3б. Такая геометрия предполагает распространение дифрагированного луча внутри опаловой пленки, что приводит к потере интенсивности наблюдаемого рефлекса.

Таким образом, сопоставление экспериментальных и расчетных данных однозначно свидетельствует о том, что дифракция на пленках опала толщиной в несколько слоев носит чисто двумерный характер.

В Четвертой главе экспериментально и теоретически исследован переход от режима двумерной дифракции к режиму трехмерной брэгговской дифракции (2D \rightarrow 3D), происходящий при увеличении числа слоев тонкопленочной опаловой структуры. Наибольший интерес представляет вопрос – как на картине дифракции в осях (θ, Θ) широкие овальные кольца, соответствующие 2D дифракции в видимом диапазоне спектра, будут трансформироваться в набор параллельных прямых, ожидаемых в случае брэгговской 3D дифракции? Для ответа на этот вопрос были проведены расчеты структурного фактора для пленок различной толщины с учетом двойникования.

Для моделирования 2D \rightarrow 3D перехода в режимах дифракции опалов был проведен численный расчет квадрата структурного фактора рассеяния $S^2(\mathbf{q})$ в первом борновском приближении по формуле (3). Вектора \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 были выбраны лежащими в плоскости (111), вектор \mathbf{a}_1 определял относительное положение кристаллографических плоскостей системы (111). Модули векторов трансляций примитивной ячейки равнялись диаметру сфер α -SiO₂. Отметим важную структурную особенность реальных образцов опалов, а именно – двойникование ГЦК структуры вдоль ростовой оси опала [111]. Двойникование в трехмерной плотноупакованной ГЦК структуре связано с нарушением чередования трех различных положений слоев (111), обычно обозначаемых как А, В и С. Беспорядок приводит к возникновению ростовых двойников, т.е. к появлению последовательно чередующихся двух «зеркальных» ГЦК упаковок АВСАВС... (ГЦК-I) и СВАСВА... (ГЦК-II). В расчетах двойникование образца учитывалось в предположении, что оба двойника вносят одинаковый вклад в картину дифракции.

Рассеяние света на отдельном гексагональном слое (111), образованном плотноупакованными сферами α -SiO₂, отвечает случаю идеальной 2D дифракции ($N=1$). Расчетная картина дифракции видимого света (400 ÷ 700 нм) на опа-

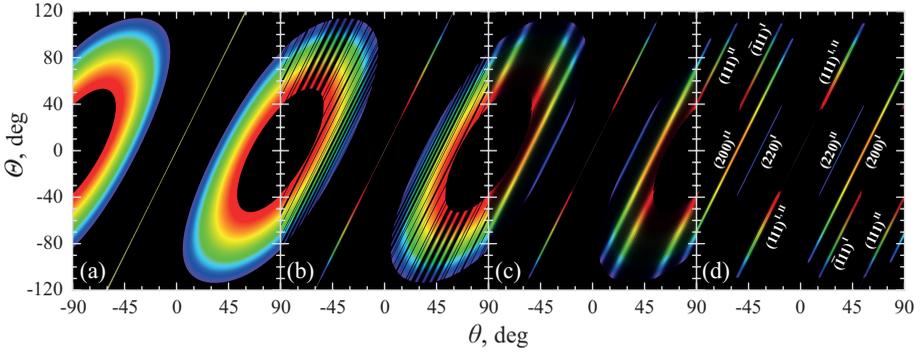


Рис. 4. Интенсивность дифракции видимого света ($400 \div 700$ нм) на двойникованной ГЦК структуре опала с разным числом слоев: $N=1$ (a), $N=20$ (b), $N=50$ (c), $N=3000$ (d). θ – угол падения света на образец, Θ – угол регистрации рассеянного света. Расчеты квадрата структурного фактора рассеяния $S^2(\mathbf{q})$ выполнены для структур с диаметром α -SiO₂ частиц 330 нм, наполнитель опалов – вода ($\epsilon_{H_2O} = 1.78$). Интерпретация (hkl) дифракционных рефлексов (фотонных стоп-зон) приведена на панели (d).

ловой пленке с диаметром α -SiO₂ сфер $D=330$ нм в системе координат (θ, Θ) и диапазоне углов $-90^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ состоит из двух полуколец и разделяющей их диагональной прямой линии (рис. 4a). Если эти же результаты представить в диапазоне углов $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$, то два полукольца сольются в единое кольцо овальной формы. Прямая линия отвечает условию $\Theta = 2\theta$ и соответствует зеркальному отражению света от гексагонального слоя. Отметим, что такую же картину 2D дифракции можно получить из системы уравнений Лауэ, которая в двумерном случае содержит лишь два уравнения.

С ростом толщины N рассеивающей пленки происходит переход от двумерной к трехмерной дифракции. В последнем случае система уравнений Лауэ включает в себя уже три уравнения, что накладывает дополнительные ограничения на условия дифракции. Рис. 4 наглядно демонстрирует, каким образом происходит трансформация картин дифракции при переходе 2D \rightarrow 3D. Во-первых, диагональ $\Theta = 2\theta$, которая в 2D случае наблюдалась во всем диапазоне $-90^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ в виде белой полосы, разрывается и, так же как и овалы, становится окрашенной. Во-вторых, наблюдается погасание определенных областей в полукольцах по сравнению с исходной картиной 2D дифракции. При этом замкнутые полукольца сначала «разрываются», затем оставшиеся фрагменты колец сужаются и, в 3D случае ($N=3000$, рис. 4d), превращаются в набор параллельных отрезков. Эти отрезки соответствуют зеркальному брэгговскому отражению света от различных систем плоскостей (hkl) и лежат на прямых $\Theta = 2(\theta - \theta_{hkl})$, где θ_{hkl} – угол между нормальными к системам плоскостей (111) и (hkl) . Величины углов

θ_{hkl} для ГЦК решетки хорошо известны, что позволяет легко интерпретировать все (hkl) дифракционные рефлексы (или, что тоже самое в данном случае – фотонные (hkl) стоп-зоны) – рис. 4d. В частности, для плоскости (111), общей для двойников ГЦК-I и ГЦК-II, имеем $\theta_{111} = 0^\circ$, т.е. $\Theta = 2\theta$. Для других (hkl) плоскостей ГЦК-I: $(\bar{1}11)$: $\Theta = 2(\theta - 70.5^\circ)$, (200): $\Theta = 2(\theta + 54.7^\circ)$, (022): $\Theta = 2(\theta - 35.3^\circ)$. Для ГЦК-II: $(\bar{1}11)$: $\Theta = 2(\theta + 70.5^\circ)$, (200): $\Theta = 2(\theta - 54.7^\circ)$, (022): $\Theta = 2(\theta + 35.3^\circ)$.

Важную информацию для интерпретации (hkl) рефлексов получаем из анализа формулы, описывающей зависимости брэгговской длины волны дифрагированного пучка от угла падения θ белого света на 3D ГЦК решетку опала [2]:

$$\lambda_{hkl}(\theta) = \sqrt{\frac{8}{3}} D \sqrt{\varepsilon_{av}} \left(\frac{3}{h^2 + k^2 + l^2} \right)^{1/2} |\cos(\theta - \theta_{hkl})|, \quad (4)$$

где угол θ отсчитывается от нормали к плоскости (111). Формула (4) позволяет проследить изменение цвета каждой из дифракционных полос на рис. 4d. Отметим, что присутствие на рис. 4d ограниченного числа рефлексов (семейства $\{111\}$, $\{200\}$ и $\{220\}$) связано с тем, что более высокоиндексные $\{hkl\}$ рефлексы для структуры с диаметром сфер $D = 330$ нм попадают в UV диапазон спектра $\lambda_{(hkl)}(\theta) < 400$ нм и не наблюдаются в эксперименте. По этой же причине на рис. 4d дифракционная картина представлена в виде отрезков прямых. Вершины отрезков определяются из уравнения (4) при подстановке в него граничных значений видимого диапазона $\lambda = 400$ нм (условная граница с UV диапазоном) и 700 нм (условная граница с IR диапазоном).

Результаты экспериментального исследования дифракции на пленке опала толщиной в несколько десятков слоев продемонстрировали достаточно хорошее согласие с расчетом. В экспериментальной картине дифракции в осях (θ, Θ) наблюдаются разрывы овалов, свидетельствующие о начале перехода 2D \rightarrow 3D. Экспериментальные результаты, полученные на пленках большей толщины прекрасно совпадают с расчетами 3D дифракции и подробно обсуждаются в Главе 5.

Пятая глава посвящена теоретическому анализу оптических свойств многокомпонентных фотонных кристаллов (МФК) и экспериментальному исследованию проявления многокомпонентности структуры опалов в картинах дифракции. МФК представляют собой фотонные структуры, состоящие из трех или более однородных компонент или из неоднородных компонент. Синтетические опалы относятся классу 3D МФК, т.к. образующие их частицы $a\text{-SiO}_2$ обладают неоднородной внутренней структурой: рыхлое ядро, состоящее из более мелких (~ 20 нм) частиц аморфного диоксида кремния, заключено в тонкую плотную оболочку. На примере 3D МФК было показано [2], что такие структуры обладают квазипериодической резонансной зависимостью условий выключения (hkl) стоп-зон от длины вектора обратной решетки $|\mathbf{g}|$. Вне резонанса любая (hkl) стоп-зона может быть выключена подбором диэлектрической проницаемости одной из компонент. Для резонансной стоп-зоны такое выключение невозможно.

В данной работе проанализированы условия селективного выключения стоп-зон в 1D и 2D МФК и проведено сравнение с результатами, полученными ранее для 3D МФК [2]. Теоретическое описание селективного выключения стоп-зон в МФК основано на том, что существование фотонной стоп-зоны обусловлено брэгговской дифракцией света на определенной системе плоскостей, и, соответственно, пропадание дифракции влечет за собой «выключение» стоп-зоны, т.е. пропадание соответствующей полосы в оптических спектрах пропускания. Это утверждение справедливо в случае применимости двухволнового приближения: для структур с низким диэлектрическим контрастом и в отсутствие многоволновой дифракции света. Задача сводится к нахождению диэлектрической проницаемости одной из компонент МФК, значение которой определяет выключение наперед заданной стоп-зоны. Для примера рассмотрим зависимости от ε_f – диэлектрической проницаемости однородного заполнителя. Величину диэлектрической проницаемости заполнителя, определяющую условие выключения фотонной стоп-зоны, обозначим $\varepsilon_f^0(g)$. Отметим, что сами стоп-зоны однозначно задаются модулем вектора обратной решетки $g = |\mathbf{g}|$. Величина $\varepsilon_f^0(g)$ определяется как:

$$\varepsilon_f^0(g) = \frac{\sin(gr_s)}{g \int_0^{r_s} \frac{1}{\varepsilon_s(r)} \cos(gr) dr}; \quad \frac{r_s J_1(gr_s)}{g \int_0^{r_s} \frac{1}{\varepsilon_s(r)} r J_0(gr) dr}; \quad \frac{R(gr_s)}{g^2 \int_0^{r_s} \frac{1}{\varepsilon_s(r)} r \sin(gr) dr} \quad (5)$$

для 1D, 2D и 3D МФК соответственно. В формуле (5) $J_0(x)$ и $J_1(x)$ – функции Бесселя первого рода нулевого и первого порядка, а $R(x) \equiv \sin(x) - x \cos(x)$ – функция Релея-Ганса. В выражения (5) входят также геометрические и диэлектрические параметры МФК, детально описанные в работах [A2,A3].

Результаты экспериментального исследования дифракции белого света на пленочном образце синтетического опала толщиной 34 слоя, образованного частицами $a\text{-SiO}_2$ с диаметром $D \sim 330$ нм, в зависимости от диэлектрической проницаемости заполнителя ε_f приведены на рис. 5. Основу экспериментальной методики составляла иммерсионная спектроскопия, т.е. исследование дифракционных картин в зависимости от контраста диэлектрической проницаемости компонент МФК. В нашем случае этими компонентами являются опаловая «матрица», образованная спеченными частицами $a\text{-SiO}_2$, и жидкость, заполняющая свободное пространство между этими частицами. Для проведения иммерсионных экспериментов цилиндрическая кювета с образцом заполнялась жидкостью, которая являлась одновременно и заполнителем опала, и средой, окружающей образец. В экспериментах использовались две жидкости – дистиллированная вода ($\varepsilon_{H_2O} = 1.78$) и глицерин ($\varepsilon_{gl} = 2.16$), а также их смеси, что позволяло варьировать диэлектрическую постоянную заполнителя в диапазоне $1.78 \leq \varepsilon_f \leq 2.16$.

Рис. 5 демонстрирует полную теоретическую (панели a-f) и экспериментальную (g-j) картину трансформации дифракционных рефлексов (в плоскости XY)

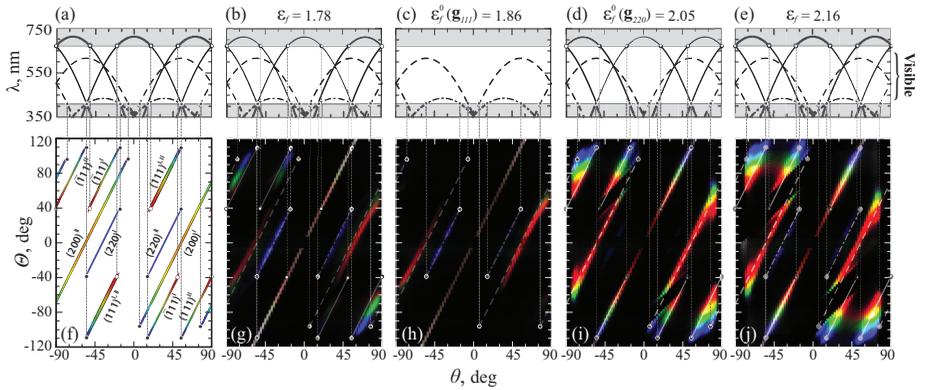


Рис. 5. (a-e) Дисперсионные зависимости брэгговских длин волн $\lambda_{(hkl)}(\theta)$ для двойникованной ГЦК-решетки опала, образованного частицами $a\text{-SiO}_2$ ($D \sim 330$ нм). $\lambda_{\{111\}}(\theta)$ - непрерывные кривые, $\lambda_{\{200\}}(\theta)$ - штриховые, $\lambda_{\{220\}}(\theta)$ - штрих-пунктир. Расчет по формуле (4). На панели (c) отсутствуют зависимости $\lambda_{\{111\}}(\theta)$, на панели (d) отсутствуют зависимости $\lambda_{\{220\}}(\theta)$. В шкале электромагнитных волн горизонтальными линиями выделена видимая область. (f) Расчет интенсивности дифракции видимого света ($400 \div 700$ нм) на двойникованной ГЦК структуре погруженного в воду опала размером $3000 \times 3000 \times 3000$ ячеек. (g-j). Экспериментальные картины дифракции света на образце синтетического опала, погруженного в заполнители с $\varepsilon_f = 1.78$ (g), 1.86 (h), 2.05 (i), 2.16 (j). θ – угол падения света на ростовую плоскость (111) ГЦК-решетки опала, Θ – угол регистрации рассеянного света.

при изменении угла падения света θ на образец опала для разных значений диэлектрической проницаемости заполнителя ε_f . На верхних панелях (a-e) приведена дисперсия брэгговских длин волн $\lambda_{(hkl)}(\theta)$ для семейств $\{111\}$, $\{200\}$ и $\{220\}$ с учетом выключения семейств $\{111\}$ (c) и $\{220\}$ (d) при определенных значениях $\varepsilon_f^0(g_{hkl})$. На панелях (g-j) представлены экспериментальные данные в координатах (θ, Θ) , на панели (f) приведена интерпретация $\{hkl\}$ дифракционных рефлексов. Рис. 5 позволяет сделать главный вывод о селективном характере выключения $\{hkl\}$ дифракционных рефлексов в опалах. Как известно, такой эффект невозможен в случае рентгеновской дифракции на обычных кристаллах, однако, как продемонстрировано в данной работе, это явление наблюдается в случае дифракции света на МФК. В частности, четко проявляется эффект селективного ослабления рефлексов семейств $\{111\}$ и $\{220\}$. При $\varepsilon_f^0(g_{111}) = 1.86$ рефлексы $\{111\}$ значительно ослабляются, в то время как остальные отчетливо видны на картине дифракции (рис. 5h). Аналогично можно видеть, что интенсивность рефлексов семейства $\{220\}$ существенно падает при $\varepsilon_f^0(g_{220}) = 2.05$ (рис. 5i). Отметим доста-

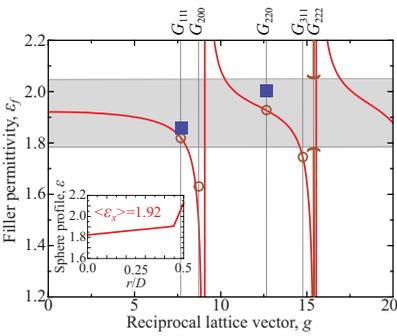


Рис. 6. Условия выключения стоп-зон в МФК опал-заполнитель: эксперимент и расчет. Кругами обозначены значения $\varepsilon_f^0(g_{hkl})$ для стоп-зон $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$ и $\{311\}$, определенные из экспериментов по пропусканию [2]. Квадраты - значения $\varepsilon_f^0(g_{hkl})$ для стоп-зон $\{111\}$ и $\{220\}$, определенные в данной работе из дифракционных экспериментов. Вертикальными прямыми отмечены значения параметра $g = g_{hkl}$ для соответствующих $\{hkl\}$ систем плоскостей. Непрерывные кривые – зависимости $\varepsilon_f^0(g)$, полученные в результате расчета по формуле (5). Профиль модельной функции $\varepsilon_s(r)$ [2] приведен на вставке.

точно хорошее соответствие между результатами дифракционных экспериментов и экспериментов по спектроскопии пропускания, в которых значения диэлектрической проницаемости для селективного выключения стоп-зон определены для объемного образца опала как $\varepsilon_f^0(g_{111}) = 1.82$ и $\varepsilon_f^0(g_{220}) = 1.92$ [2] (рис. 6).

Для нахождения функции $\varepsilon_f^0(g)$, которая определяет закон выключения $\{hkl\}$ дифракционных рефлексов, необходимо смоделировать функцию $\varepsilon_s(r)$, описывающую радиальный профиль диэлектрической проницаемости частиц $a\text{-SiO}_2$, и воспользоваться формулой (5) для случая 3D структуры. Моделирование $\varepsilon_s(r)$ было выполнено в [2] исходя из данных SEM, ТЕМ и диэлектрических параметров плавленого кварца. Моделирующая функция приведена на вставке рис. 6. В результате подстановки в (5) кусочно-линейной модели $\varepsilon_s(r)$ была получена функция $\varepsilon_f^0(g)$, которая достаточно хорошо описывает весь набор экспериментальных данных (рис. 6). Таким образом, все экспериментальные результаты, связанные с селективным выключением дифракционных рефлексов в МФК опал-заполнитель описываются в рамках теоретической модели [2].

В Шестой главе представлены результаты исследования картин малоугловой рентгеновской дифракции на синтетических опалах с целью изучения высокоиндексных (hkl) рефлексов. Эксперименты проводились в Европейском центре синхротронного излучения, Гренобль. Образец облучался монохроматическим пучком синхротронного рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.093$ нм. Аналогично экспериментам по оптической дифракции, образец вращался вокруг вертикальной оси, совмещенной с кристаллографическим направлением $[202]$, в диапазоне $-90^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ с шагом $\Delta\theta = 1^\circ$. Картины малоуглового рассеяния фиксировала CCD-камера, установленная на расстоянии 731 см от образца.

Как видно из рис. 1g, дифракция рентгеновского излучения на ГЦК-решетке наблюдается лишь при определенных углах ориентации образца θ одновременно для целых наборов $\{hkl\}$ систем плоскостей, вдоль которых распространяется зондирующий пучок. Типичные картины малоугловой рентгеновской дифракции,

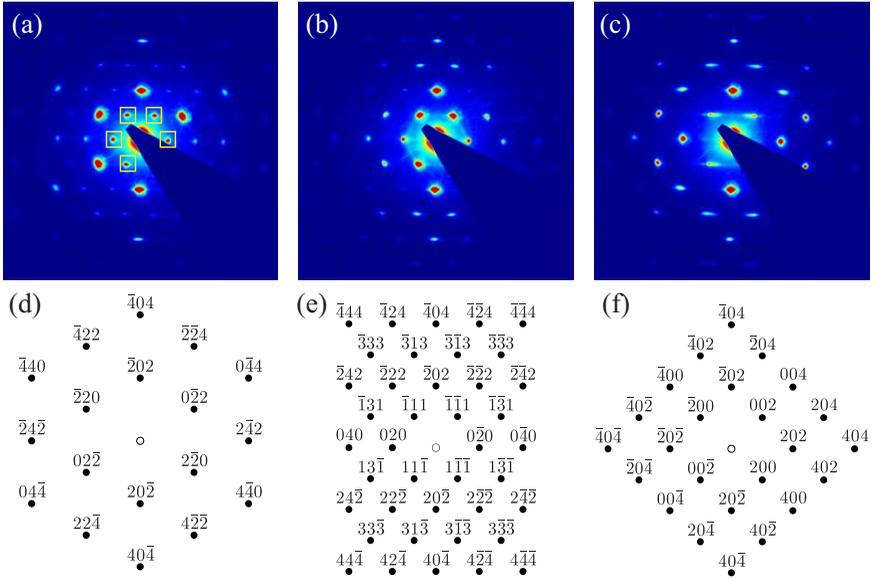


Рис. 7. Картины малоугловой рентгеновской дифракции на пленке опала толщиной 44 слоя при нормальном падении $\theta = 0^\circ$ (a) и при углах ориентации образца $\theta = -35.3^\circ$ (b) и $\theta = 54.7^\circ$ (c). (d-f) наборы брэгговских рефлексов ГЦК-структуры в геометриях эксперимента, соответствующих картинам (a-c). На панели (a) квадратами выделены рефлексы, дополнительные по отношению к рефлексам идеальной ГЦК-структуры.

полученные на пленке опала толщиной 44 слоя, приведены на рис. 7a-с. Важно отметить, что большое количество рефлексов, наблюдаемое экспериментально при фиксированном θ , обусловлено их уширением, как изображено на рис. 1e. При вращении образца были обнаружены два типа рефлексов. Рефлексы первого типа вспыхивали и погасали в узком диапазоне углов θ . Все эти рефлексы удалось интерпретировать, поставив им в соответствие (hkl) узлы обратной решетки двойнированной ГЦК-структуры (ГЦК-I + ГЦК-II). Рефлексы второго типа при повороте образца смещались, при этом их интенсивность существенно варьировалась, но, тем не менее, они не пропадали в относительно широком диапазоне углов θ . Такие рефлексы наблюдались, в частности, при нормальном ($\theta = 0^\circ$) падении пучка (рис. 7a).

Полученные экспериментальные данные обрабатывались с помощью специально разработанного пакета программ. В результате процедуры, которую принято называть реконструкцией обратного пространства [4], была восстановлена обратная решетка исследованного образца опала. В случае малоугловой рентгеновской дифракции сферу Эвальда с большой точностью можно считать плоской (рис. 1e), поэтому каждая из картин дифракции представляет собой сечение обратного про-

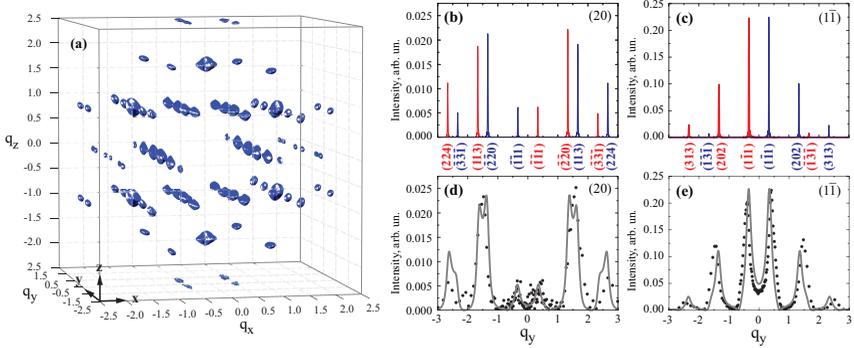


Рис. 8. (a) Реконструированная обратная решетка образца опала толщиной 44 слоя, состоящего из сфер $a\text{-SiO}_2$ с диаметром $D = 590$ нм. (b, c) Расчет профилей распределения интенсивности (hkl) узлов обратной решетки вдоль цепочек (20) и ($1\bar{1}$) для идеальной структуры ГЦК-I (синяя линия) и ее двойникае двойника ГЦК-II (красная линия). Цепочки обозначены в соответствии с нумерацией узлов двумерной решетки (hk) на рис. 2a. (d, e) Профили распределения интенсивности вдоль цепочек узлов (20) и ($1\bar{1}$): экспериментальные данные для исследованного образца опала (точки) и численный расчет (непрерывные кривые). По оси ординат отложена координата вдоль цепочек (направление $\Gamma \rightarrow L$), пересчитанная в единицы вектора обратной решетки $g_{(111)}$.

странства образца плоскостью, перпендикулярной к направлению распространения зондирующего пучка. В результате объединения этих сечений (для всех углов поворота образца θ), была получена трехмерная функция интенсивности, представляющая собой реконструкцию обратной решетки пленочного образца опала (рис. 8a). Элементы, образующие обратную решетку, можно условно разделить на две группы. Во-первых, это уединенные в \mathbf{k} -пространстве узлы, которые не перекрываются с соседними узлами и соответствуют «быстро погасающим» дифракционным рефлексам. Анализ взаимного расположения этих узлов позволил определить диаметр сфер $a\text{-SiO}_2$ $D \sim 590$ нм. Ко второй группе мы отнесли цепочки частично перекрывающихся узлов, ориентированные по направлению $\Gamma \rightarrow L$ и отвечающие рефлексам второго типа.

Как известно, обратная решетка одиночного слоя состоит из бесконечных «стержней» (rods), ориентированных перпендикулярно плоскости слоя [5]. С увеличением числа слоев стержни рвутся на части, уменьшаются по длине и, в конце концов, превращаются в узлы обратной решетки. Наличие протяженных остаточных стержней (рис. 1e) может быть связано как с конечным размером, так и с неупорядоченностью структуры (например, с двойникованием ГЦК-решетки). При обработке экспериментальных данных были получены профили стержней различных порядков (hk), два из которых - (20) и ($1\bar{1}$) - представлены на рис. 8d,e. Так как в нашем случае перекрытие контуров оказалось незначительным, мы называем эти элементы обратной решетки опалов не стержнями, а цепочками узлов.

Обсудим две основные причины, которые могут приводить к появлению узловых цепочек в обратной решетке исследованного образца. Во-первых, для пленки толщиной в несколько десятков слоев нельзя использовать модель бесконечного кристалла, а значит, необходим учет конкретных размеров образца. Во-вторых, синтетические опалы обладают двойникованием решетки в направлении [111] (направление $\Gamma \rightarrow L$ в обратном пространстве), которое нарушает ГЦК-симметрию структуры. Такой беспорядок принято характеризовать коэффициентом корреляции упаковки P [5]. Для численного моделирования профиля интенсивности цепочек была взята за основу модель [6], которая позволяет учесть оба указанных выше фактора. В результате численных расчетов, выполненных для двойникованной ГЦК-структуры толщиной 44 слоя с коэффициентом корреляции упаковки $P = 0.7$, были получены профили цепочек, которые прекрасно описывают экспериментальные данные, рис. 8d-e.

Таким образом, в результате обработки экспериментальных данных была проведена процедура трехмерной реконструкции обратной решетки. Выполненный анализ позволил установить, что обратная решетка исследованной опаловой пленки содержит два набора уширенных (по отношению к идеальной ГЦК структуре) узлов, отвечающих решеткам ГЦК-I и ГЦК-II.

Основные результаты и выводы работы:

1. Разработана новая методика проведения оптических дифракционных экспериментов, создан пакет программ для обработки экспериментальных данных. Предложен оригинальный способ представления дифракционных картин – в координатах «угол падения θ – угол регистрации Θ ».
2. Исследованы картины дифракции белого и монохроматического света на опаловых пленках в зависимости от ориентации и толщины структур.
3. Выполнены расчеты картин дифракции света на опаловых структурах двумя методами: путем численного расчета структурного фактора и аналитическим методом на основании уравнений Лауэ. Сопоставление экспериментальных и расчетных данных в осях (θ, Θ) однозначно свидетельствует о двумерном характере дифракции света на тонких (единицы слоев, образованных плотноупакованными частицами $\alpha\text{-SiO}_2$) опаловых пленках.
4. Экспериментально и теоретически исследован переход от режима двумерной к режиму трехмерной дифракции при изменении толщины опаловой структуры от нескольких единиц до нескольких десятков слоев частиц $\alpha\text{-SiO}_2$. В 2D случае дифракционные рефлексy в осях (θ, Θ) образуют овалы, а в 3D случае – набор параллельных прямых. В 3D случае такая картина определяется законом брэгговского зеркального отражения света от (hkl) систем плоскостей двойникованной ГЦК решетки опала.
5. В дифракционных картинах, полученных на синтетических опалах, впервые однозначно интерпретированы рефлексy, отвечающие системам плоскостей $\{200\}$ и $\{220\}$.

6. Теоретически показано, что низкоконтрастные 1D и 2D МФК (как и 3D МФК) обладают квазипериодической резонансной зависимостью условий выключения фотонных (hkl) стоп-зон (дифракционных рефлексов) от длины вектора обратной решетки. Квазипериодическая зависимость определяется характером тригонометрических функций (в случае 1D структуры), функций Бесселя (2D), функции Релея-Ганса (3D).
7. Впервые экспериментально продемонстрировано селективное выключение (hkl) дифракционных рефлексов путем изменения диэлектрической проницаемости заполнителя опалов. Иммерсионные зависимости интенсивности (hkl) рефлексов описываются в рамках аналитической теории, основанной на анализе форм-фактора рассеяния с учетом неоднородности сферических частиц $a\text{-SiO}_2$, образующих опалы.
8. Экспериментально исследовано малоугловое рассеяние рентгеновского излучения на структуре опала. В картинах дифракции обнаружены и интерпретированы рефлексы, отвечающие высокоиндексным (hkl) стоп-зонам. Данные о взаимном расположении дифракционных рефлексов позволяют определить постоянную решетки кристалла.
9. В результате процедуры реконструкции обратного пространства установлено, что обратная решетка исследованной пленки опала содержит два набора уширенных (по отношению к идеальной ГЦК структуре) узлов, отвечающих решеткам ГЦК-I и ГЦК-II.

Основные результаты диссертации отражены в следующих публикациях:

- [A1] *M.V. Rybin, A.V. Baryshev, M. Inoue, A.A. Kaplyanskii, V.A. Kosobukin, M.F. Limonov, A.K. Samusev, A.V. Sel'kin.* Complex interaction of polarized light with three-dimensional opal-based photonic crystals: Diffraction and transmission studies // *Photonics and Nanostructures (PNFA)*— 2006. — Vol. 4. — P. 146.
- [A2] *A.K. Самусев, М.В. Рыбин, М.Ф. Лимонов.* Селективное переключение стоп-зон в двумерных многокомпонентных фотонных кристаллах // *ФТТ*. — 2009. — Т. 51. — С. 487.
- [A3] *A.K. Samusev, K.B. Samusev, M.V. Rybin, M.F. Limonov.* Peculiarities of the band structure of multi-component photonic crystals with different dimensions // *J. Phys.: Condens. Matter*. — 2010. — Т. 22. — С. 115401.
- [A4] *M.V. Rybin, A.B. Khanikaev, M. Inoue, A.K. Samusev, M.J. Steel, G. Yushin, M.F. Limonov.* Bragg scattering induces Fano resonance in photonic crystals // *Photonics and Nanostructures (PNFA)*. — 2010. — Т. 8. — С. 86.
- [A5] *A.K. Самусев, К.Б. Самусев, М.В. Рыбин, М.Ф. Лимонов, Е.Ю. Трофимова, Д.А. Курдюков, В.Г. Голубев.* Двумерная дифракция света на тонких опаловых пленках // *ФТТ*. — 2011. — Т. 53. — С. 993.

- [A6] А.К. Самусев, К.Б. Самусев, И.С. Синев, М.В. Рыбин, М.Ф. Лимонов. Селективное управление световыми пучками в дифракционных экспериментах на синтетических опалах // *ФТТ*. — 2011. — Т. 53. — С. 1343.
- [A7] A.V. Baryshev, M. Inoue, A.A. Kaplyanskii, V.A. Kosobukin, M.F. Limonov, M.V. Rybin, A.K. Samusev, A.V. Sel'kin, H. Uchida. Optical polarization-resolved studies of photonic bandgap structure in synthetic opals // Proc. 13th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology" (St.Petersburg). — 2005. — P. 123.
- [A8] A.V. Baryshev, A.A. Kaplyanskii, O.A. Kavtreva, V.A. Kosobukin, M.F. Limonov, M.V. Rybin, A.K. Samusev, D.E. Usvyat. Bragg diffraction of light as a powerful tool in the study of photonic crystals // Proceedings of SPIE. — Vol. 6258. — 2006. — P. 154.
- [A9] M.F. Limonov, A.V. Baryshev, A.B. Khanikaev, M. Inoue, M.V. Rybin, A.K. Samusev, K.B. Samusev, A.V. Sel'kin, G. Yushin. Two-dimensional and 3D- multi-component photonic crystals: theory and experiment // Proceedings of SPIE. — Vol. 6989. — 2008. — P. 698906.

Цитированная литература

- [1] V. N. Astratov, V. N. Bogomolov, A. A. Kaplyanskii, A. V. Prokofiev, L. A. Samoilovich, S. M. Samoilovich, Yu. A. Vlasov. Optical spectroscopy of opal matrices with CdS embedded in its pores - quantum confinement and photonic band gap effects // *Nuovo Cimento D*. — 1995. — Vol. 17. — P. 1349.
- [2] M. V. Rybin, A. V. Baryshev, A. B. Khanikaev, M. Inoue, K. B. Samusev, A. V. Sel'kin, G. Yushin, M. F. Limonov. Selective manipulation of stop-bands in multi-component photonic crystals: opals as an example // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Vol. 77. — P. 205106.
- [3] M. V. Rybin, A. B. Khanikaev, M. Inoue, K. B. Samusev, M.J. Steel, G. Yushin, M. F. Limonov. Fano resonance between Mie and Bragg scattering in photonic crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 103. — P. 023901.
- [4] А. А. Елусеев, Д. Ф. Горожанкин, К. С. Напольский, А. В. Петухов, Н. А. Саполетова, А. В. Васильева, Н. А. Григорьева, А. А. Мистонов, Д. В. Белов, В. Г. Бауман, К. О. Квашина, Д. Ю. Чернышов, А. А. Босак, С. В. Григорьев. Определение реальной структуры искусственных и природных опалов на основе трехмерных реконструкций обратного пространства // *Письма в ЖЭТФ*. — 2009. — Vol. 90. — P. 297.
- [5] A. Guinier. X-Ray Diffraction. In Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies. — W.H. Freeman and Co, San Francisco, 1963. — P. 388.
- [6] W. Loose, B. J. Ackerson. Model calculations for the analysis of scattering data from layered structures // *J. Chem. Phys.* — 1994. — Vol. 101, no. 9. — P. 7211.