#### Лабораторная работа №1

## Фотонные кристаллы

14.09.2023

#### Выполнили:

Ширшов Дмитрий, Замятин Матвей

**Цель работы:** изучение физики фотонных кристаллов и параметров, влияющих на их спектральные характеристики.

Объект исследования: фотонный кристалл.

## Сведения из теории

Для начала рассмотрим, как световая волна отражается от одной оптической ячейки, состоящей из двух слоев с различными показателями преломления  $n_1$  и  $n_2$  (рис.2). Для определенности будем считать, что  $n_1 > n_2$ .

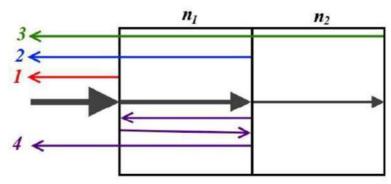
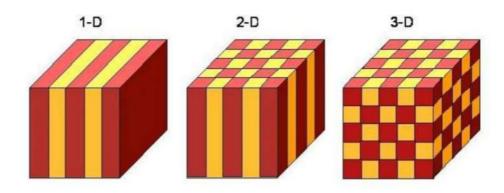


Рисунок 2 - Многолучевая интерференция в двухслойной пластине

Свет, попав в такую пленку, испытывает многократные отражения и преломления, в результате чего возникает множество волн, интерференция которых и определяет, какая часть падающей энергии отразится от пленки, а какая пройдет сквозь нее. Отраженная волна в основном формируется волнами 1, 2 и 3 (рис.2.). Для того чтобы ее амплитуда была максимальной, необходимо синфазное сложение этих волн, т.е. необходимо, чтобы



**Рисунок 1** – Схематическое изображение структуры фотонных кристаллов: одномерного (1D), двумерного (2D) и трехмерного (3D) [3]

разность хода между ними составляла целое число длин волн. Разность хода между волнами 1, 2 и 3 определяется разностью их оптических путей, которые равны соответственно:

$$s_1 = \frac{\lambda_0}{2}$$
,  $s_2 = 2d_1n_1$ ,  $s_3 = 2(d_1n_1 + d_2n_2)$ ,

где  $d_1$  и  $d_2$  — толщины слоев, а  $\lambda_0$  — длина волны света в воздухе. В этих формулах учтен тот факт, что при отражении света от оптически более плотной среды его фаза меняется на  $\pi$ , или, другими словами, «теряется» половина длины волны. В противоположном случае, когда волна отражается от оптически менее плотной среды, этого не происходит. Условия синфазности можно достичь, сделав, например, слои такой толщины, чтобы в первом укладывалось одна четверть длины волны, а во втором — одна вторая длины волны. Отметим, что, выбрав толщины слоев, таким образом, мы добились синфазности не всех многократно прошедших лучей, а только их «наиболее весомой» части. Например, волна, пробежавшая по фотонному кристаллу путь 4, выйдет из него в противофазе с первыми тремя волнами, так как ее оптический путь равен  $s_4 = \lambda_0$ .

Представим теперь, что рассмотренная оптическая ячейка (см. рис.2) с правой стороны граничит не с воздухом, а с достаточно толстой подложкой, имеющей показатель преломления  $n_1$ . Это сильно изменит условия взаимного усиления отраженных волн, поскольку теперь волна 3, отражаясь от задней границы ячейки, потеряет полволны. Чтобы на выходе из пленки она вновь была в фазе с двумя другими волнами, следует толщину второго слоя сделать четвертьволновой. Этот случай наиболее приближен к структуре одномерного фотонного кристалла, состоящего из большого числа оптических ячеек, расположенных последовательно одна за другой. Ведь при таком чередовании слои с показателями преломления  $n_2$  граничат со слоями с большим показателем преломления  $n_1$ , а отнюдь не с воздухом. Условие резонансного усиления отраженных волн для фотонного кристалла в общем виде можно записать:

$$d_1 = \frac{(2m+1)\lambda_0}{4n_1} \quad \text{if} \quad d_2 = \frac{(2l+1)\lambda_0}{4n_2}, \tag{1}$$

где m и l — произвольные натуральные числа. Здесь мы учли, что отраженные волны являются синфазными не только при равенстве четверти длины волны их оптических путей в каждом слое, но и в случае, когда эти оптические пути равны нечетному числу четвертей длины волны в веществе. Таким образом, максимум отражения наблюдается только в том случае, если на толщине каждого слоя укладывается нечетное число четвертей длин волн.

# Дефекты фотонных кристаллов и разрешенные уровни в запрещенной зоне.

Итак, если на фотонный кристалл падает немонохроматическое излучение, то через кристалл пройдет только его часть, образованная волнами, длины которых не попали в фотонную запрещенную зону. Получается оптический фильтр с широкой полосой пропускания, поскольку расстояние между запрещенными зонами может быть велико обычно оно составляет несколько сот нанометров. В то же время в оптике часто нужны гораздо более узкополосные фильтры, которые вырезали бы только узкий интервал длин волн шириной 1 нм и меньше. Оказывается, при использовании фотонных кристаллов эта проблема решаема.

Итак, если на фотонный кристалл падает немонохроматическое излучение, то через кристалл пройдет только его часть, образованная волнами, длины которых не попали в фотонную запрещенную зону. Получается оптический фильтр с широкой полосой пропускания, поскольку расстояние между запрещенными зонами может быть велико обычно оно составляет несколько сот нанометров.

Для получения узкого пика пропускания в области запрещенной зоны в структуру фотонного кристалла вносят дефекты. Одним из структурных дефектов является изменение порядка следования слоев, из-за чего возникают области удвоенной толщины. Причину возникновения пика пропускания внутри запрещенной области легко понять на примере простейшей структуры с одним дефектом (рис. 4).

1_	$n_1$	$n_2$	$n_2$	$n_1$	
<b>*</b>					
-					

Рисунок 4 — Многолучевая интерференция в фотонном кристалле с одним дефектом

Толщина каждого слоя равняется одной четвертой длины волны света в этом слое. Отражение на границе между двумя одинаковыми слоями по понятным причинам отсутствует. Основную роль в формировании отраженной волны играют волны 1, 2, 3 и 4. Их оптические пути равны, соответственно:

$$s_1 = \frac{\lambda_0}{2}$$
,  $s_2 = \frac{\lambda_0}{2}$ ,  $s_3 = 2\lambda_0$ ,  $s_4 = 2\lambda_0$ .

Поэтому волны 1 и 3, а также 2 и 4 выходят из кристалла в противофазе и сильно ослабляют друг друга. В итоге на длине волны  $\lambda_0$ , на

которую «настроен» фотонный кристалл, возникает максимум пропускания.

### Матрица преобразования

Распространение волн в каждом из слоев фотонного кристалла можно описать с помощью волнового уравнения:

$$\Delta u - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \tag{2}$$

где u — компонента поля волны, v — фазовая скорость в среде. Направим ось Oz перпендикулярно границам раздела. Будем предполагать, что в плоскости слоев поля зависят только от одной координаты, и положим  $\partial/\partial y = 0$ . Решение волнового уравнения представим в виде  $u \sim u(z) \exp(-i\omega t + ik_x x)$ . Подставляя его в (2), получим:

$$\frac{d^2u(z)}{dz^2} - \left(k_x^2 - \frac{\omega^2}{v^2}\right)u(z) = 0.$$
 (3)

Так как фазовые скорости в слоях различны, то множитель  $k_x^2 - \omega^2/v^2$  является периодической функцией координаты z и принимает на периоде структуры два значения:  $k_x^2 - (\omega/v_1)^2$  и  $k_x^2 - (\omega/v_2)^2$ . Индексы l и l обозначают принадлежность к различным слоям. Таким образом, соотношение (3) является уравнением второго порядка с периодическим коэффициентом. Для ступенчатой функции его решение может быть получено следующим образом [4]. Представим поле на интервале l l l в виде:

$$u_1(z) = A_1 e^{ik_{z1}z} + A_2 e^{-ik_{z1}z},$$
  

$$k_{z1}^2 = (\omega/v_1)^2 - k_x^2.$$
(4)

В области второго слоя  $z=d_1\div d_1+d_2$ 

$$u_2(z) = B_1 e^{ik_{z2}z} + B_2 e^{-ik_{z2}z},$$
  

$$k_{z2}^2 = (\omega/v_2)^2 - k_x^2.$$
(5)

На плоскости раздела слоев должны выполняться граничные условия, состоящие в непрерывности, как самого слоя, так и его градиента. Так, например, на границе  $z=d_1$  имеем:

$$u_1(d_1) = u_2(d_1), \qquad \frac{du_1(d_1)}{dz} = \frac{du_2(d_1)}{dz}.$$
 (6)

Кроме того, решение должно удовлетворять условию периодичности, т.е. поля на границах периода при z=0 и z=d могут отличаться только на фазовый множитель:

$$u(0) = u(d)e^{i\bar{k}d}. (7)$$

Волновое число  $\bar{k}$  называется блоховским волновым числом. Физический смысл этой величины будет выяснен ниже.

Подставим выражения для полей (4) и (5) в соотношения (6) и (7):

$$A_{1}e^{ik_{z1}d_{1}} + A_{2}e^{-ik_{z1}d_{1}} = B_{1}e^{ik_{z2}d_{1}} + B_{2}e^{-ik_{z2}d_{1}},$$

$$k_{z1}(A_{1}e^{ik_{z1}d_{1}} - A_{2}e^{-ik_{z1}d_{1}}) = k_{z2}(B_{1}e^{ik_{z2}d_{1}} - B_{2}e^{-ik_{z2}d_{1}}),$$

$$A_{1} + A_{2} = e^{i\bar{k}d}(B_{1}e^{ik_{z2}d} + B_{2}e^{-ik_{z2}d}),$$

$$k_{z1}(A_{1} - A_{2}) = e^{i\bar{k}d}k_{z2}(B_{1}e^{ik_{z2}d} - B_{2}e^{-ik_{z2}d})$$
(8)

Эти формулы являются системой линейных однородных уравнений относительно неизвестных  $A_1, A_2, B_1$  и  $B_2$ . Ее нетривиальное решение существует лишь в том случае, если определитель системы равен нулю. Тогда

$$\cos \bar{k}d = \cos k_{z1}d_1 \cos k_{z2}d_2 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_{z1}}{k_{z2}} + \frac{k_{z2}}{k_{z1}} \right) \sin k_{z1}d_1 \sin k_{z2}d_2, \tag{9}$$

где  $d=d_1+d_2$ . Это соотношение позволяет выяснить физический смысл блоховского волнового вектора: видно, что в фотонном кристалле зависимость от поперечной координаты определяется не волновыми числами слоев  $k_{z1}$  и  $k_{z2}$ , а величиной  $\bar{k}$ . Таким образом, блоховский вектор  $\bar{k}$  является усредненным по периоду структуры новым поперечным волновым числом.

Использованный выше метод можно значительно упростить, если ввести матрицы преобразования для каждого слоя. Обозначим  $\sigma(z) = du(z)/dz$  и из (4) получим

$$\sigma_1(z) = \frac{du(z)}{dz} = ik_{z1} \left( A_1 e^{ik_{z1}z} - A_2 e^{-ik_{z1}z} \right). \tag{10}$$

Для начала выразим произвольные постоянные  $A_1$  и  $A_2$  через значения полей при z=0:

$$u_1(0) = A_1 e^{ik_{z1} \cdot 0} + A_2 e^{-ik_{z1} \cdot 0} = A_1 + A_2$$
  

$$\sigma_1(0) = ik_{z1} \left( A_1 e^{ik_{z1} \cdot 0} - A_2 e^{-ik_{z1} \cdot 0} \right) = ik_{z1} (A_1 - A_2).$$
(11)

Подставим результат в соотношения (4) и (10):

$$u_{1}(z) = A_{1}e^{ik_{z1}z} + A_{2}e^{-ik_{z1}z} = A_{1}\cos k_{z1}z + iA_{1}\sin k_{z1}z + A_{2}\cos k_{z1}z - iA_{2}\sin k_{z1}z = \cos k_{z1}z(A_{1} + A_{2}) + (12)$$

$$+ i\sin k_{z1}z(A_{1} - A_{2}) = u_{1}(0)\cos k_{z1}z + \sigma_{1}(0)k_{z1}^{-1}\sin k_{z1}z;$$

$$\sigma_{1}(z) = ik_{z1} \left( A_{1} e^{ik_{z1}z} - A_{2} e^{-ik_{z1}z} \right) = ik_{z1} A_{1} \cos k_{z1}z - k_{z1} A_{1} \sin k_{z1}z - ik_{z1} A_{2} \cos k_{z1}z - k_{z1} A_{2} \sin k_{z1}z = ik_{z1} \cos k_{z1}z \left( A_{1} - A_{2} \right) - k_{z1} \sin k_{z1}z \left( A_{1} + A_{2} \right) = -u_{1}(0)k_{z1} \sin k_{z1}z + \sigma_{1}(0) \cos k_{z1}z.$$
(13)

Результат удобно переписать в матричном виде (если матрицы в правой части перемножить, то в первой строке получится результат, идентичный формуле (12), а во второй – формуле (13)):

Представим поля в начале координат через их значения в произвольной точке z распространения. Для этого необходимо найти обратную матрицу:

Матрица  $m_1(d_1)$  связывает поля в начале слоя с полями в конце этого же слоя и называется матрицей преобразования. Для второго слоя аналогичным образом получается  $m_2 = m_2(d_2)$ . Так как поля при  $z = d_1$  должны удовлетворять граничным условиям (6), то

$$\binom{u_1(0)}{\sigma_1(0)} = m_1 \binom{u_1(d_1)}{\sigma_1(d_1)},$$
 
$$\binom{u_2(d_1)}{\sigma_2(d_1)} = m_2 \binom{u_1(d_1+d_2)}{\sigma_1(d_1+d_2)},$$
 из граничных условий  $(6)$ : 
$$\binom{u_1(d_1)}{\sigma_1(d_1)} = \binom{u_2(d_1)}{\sigma_2(d_1)} \rightarrow$$
 
$$\binom{u(0)}{\sigma(0)} = m \binom{u(d)}{\sigma(d)}, m = m_1 m_2,$$
 (16)

m — матрица преобразования одного периода структуры. Ее составляющие равны:

$$\begin{split} m_{11} &= \cos k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 - \frac{k_{z2}}{k_{z1}} \sin k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2, \\ m_{12} &= -k_{z2}^{-1} \cos k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2 - k_{z1}^{-1} \sin k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2, \\ m_{21} &= k_{z1} \sin k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 + k_{z2} \cos k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2, \\ m_{22} &= \cos k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 - \frac{k_{z1}}{k_{z2}} \sin k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2. \end{split} \tag{17}$$

#### Теорема Абелеса.

Чтобы найти связь между полями в различных точках среды, отстоящих друг от друга на целое число периодов, необходимо найти произведение матриц

$$\begin{pmatrix} u(0) \\ \sigma(0) \end{pmatrix} = m \cdot m \cdot \dots \cdot m \begin{pmatrix} u(Nd) \\ \sigma(Nd) \end{pmatrix}, \quad m_N = (m)^N,$$
 (18)

где  $m_N$  — матрица преобразования ограниченной среды, N — количество периодов (пар слоев).

По полученным значениям компонент (17) можно получить спектры пропускания и отражения излучения, падающего на фотонный кристалл по нормали [5]:

$$T = \left| \frac{2}{m_{11} + m_{12} + m_{21} + m_{22}} \right|,$$

$$R = \left| \frac{(m_{11} + m_{12}) - (m_{21} + m_{22})}{(m_{11} + m_{12}) + (m_{21} + m_{22})} \right|.$$
(19)

# Основные уравнения для электромагнитных волн в фотонном кристалле

Распространений электромагнитных волн описывается уравнениями Максвелла (в системе СГС):

$$\cot \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \qquad \cot \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \\
 \text{div } \vec{D} = 0 \qquad \text{div } \vec{B} = 0,$$
(20)

где  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$  — векторы напряженностей электрического и магнитного полей, а  $\vec{D}$  и  $\vec{B}$  — векторы электрической и магнитной индуктивностей. Связь между напряженностями полей и индукцией устанавливается с помощью материальных уравнений, описывающих среду:

$$\vec{E} = \varepsilon \vec{D} \qquad \vec{H} = \mu \vec{B}, \tag{21}$$

где  $\varepsilon$  и  $\mu$  — диэлектрическая и магнитная проницаемости для изотропных сред. В данном конкретном случае исследуются немагнитные оптические среды, поэтому  $\mu=1$  и  $\vec{H}=\vec{B}$ .

Рассмотрим плоскослоистую периодическую структуру, период которой составлен из двух материалов, различающихся толщинами слоев и диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ .

Таким образом, уравнения Максвелла для ТЕМ-волны могут быть представлены следующим образом (зависимость от времени выбрана в виде  $\vec{E} = \overrightarrow{E_0} \exp(-i\omega t)$  и  $\vec{H} = \overrightarrow{H_0} \exp(-i\omega t)$ , волна распространяется вдоль Oz,  $\vec{E}$  направлен вдоль Oy,  $\vec{H}$  – вдоль Ox):

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -\frac{i\omega}{c} H_x \tag{22}$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = \frac{i\omega}{c} E_y. \tag{23}$$

Обратимся к формулам (10)-(16), которые были выведены для функций u(z) и  $\sigma(z) = \partial u(z)/\partial z$ . Если взять  $u(z) = E_y(z)$ , тогда из (22)  $\sigma(z) = \partial u(z)/\partial z = -(i\omega/c) \cdot H_x$ , то уравнения (12) и (13) можно переписать в виде:

$$\vec{E}_{y1}(z) = \vec{E}_{y1}(0)\cos k_{z1}z - i\frac{\omega}{c}\vec{H}_{x1}(0)k_{z1}^{-1}\sin k_{z1}z$$

$$= \vec{E}_{y1}(0)\cos k_{z1}z - in_1^{-1}\vec{H}_{x1}(0)\sin k_{z1}z;$$
(24)

$$-i\frac{\omega}{c}\vec{H}_{x1}(z) = -\vec{E}_{y1}(0)k_{z1}\sin k_{z1}z - i\frac{\omega}{c}\vec{H}_{x1}(0)\cos k_{z1}z \to \vec{H}_{x1}(z) = -in_1\vec{E}_{y1}(0)\sin k_{z1}z + \vec{H}_{x1}(0)\cos k_{z1}z.$$
 (25)

Проделав аналогичные действия как в формулах (14)-(16) можно прийти к результирующей матрице передачи:

$$\begin{split} m_{11} &= \cos k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 - \frac{n_2}{n_1} \sin k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2, \\ m_{12} &= -i n_2^{-1} \cos k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2 - i n_1^{-1} \sin k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2, \\ m_{21} &= -i n_1 \sin k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 - i n_2 \cos k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2, \\ m_{22} &= \cos k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 - \frac{n_1}{n_2} \sin k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2. \end{split} \tag{26}$$

**В работе используются:** источник света, вращающаяся платформа, кристаллы кварца, пипетка, ацетон, спектрометр, пакет симуляции COMSOL

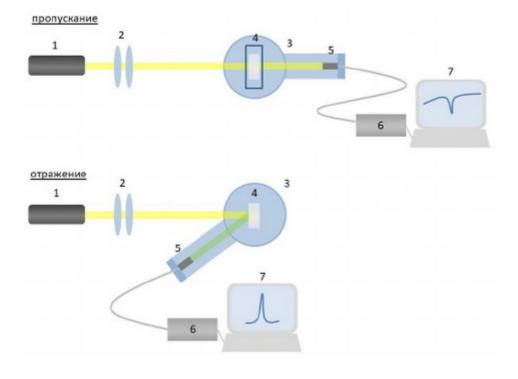


Рисунок 5. Схема эксперимента

#### Кристалл №1

Для измерения запрещённой зоны кристалла на отражение необходимо

- 1) Максимально близко придвинуть спектрометр к лучу, не закрывая сам луч, чтобы отметить начальный угол
- 2) Прокрутив платформу, найти положение наиболее отчётливого пика на спектре
- 3) Зафиксировать нулевой угол
- 4) Вращая платформу, варьировать угол падения
- 5) Вращая спектрометр, направить в него отражённый луч по наиболее отчётливому пику на спектре
- 6) Снять зависимость длины волны запрещённой зоны по пику амплитуды от угла падения
- 7) Построить эту зависимость в координатах  $\lambda$  vs  $\cos(\phi \phi_0)$
- 8) По углу наклона графика определить размер слоя
- 9) Экстраполировав график до нулевого угла, рассчитать длину волны запрещённой зоны для проверки в симуляции
- 10) Рассчитать радиус глобул и сравнить с другими кристаллами

Для удобства анализа, спектр был нормализован для каждого измерения, обрезан и усреднён скользящим окном размером 20нм, так как спектрометр обладает большим разрешением и сырые данные от него очень сильно флуктуируют. Пики запрещённой зоны отмечены вертикальными линиями. На графике так же представлены спектры смоченного в ацетоне кристалла: розовый и фиолетовый. Спектры смоченного кристалла более пологие, так как амплитуда отражённого луча относительно амплитуды падающего становится меньше при смачивании.



Рисунок 6. Первый фотонный кристалл

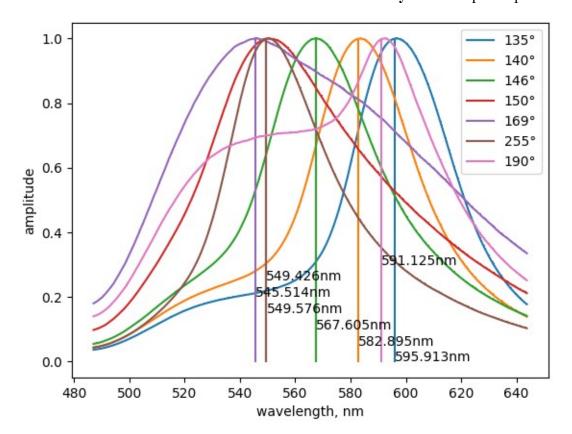


Рисунок 7. Спектр отражения первого фотонного кристалла

#### Кристалл №2

Для измерения запрещённой зоны кристалла на просвет необходимо

- 1) Расположить спектрометр за кристаллом на линии луча
- 2) Прокрутив платформу, найти положение наиболее отчётливой ямы на спектре
- 3) Зафиксировать нулевой угол
- 4) Вращая платформу, варьировать угол падения
- 5) Снять зависимость длины волны запрещённой зоны по центру ямы амплитуды от угла падения
- 6) Построить эту зависимость в координатах  $\lambda vs \cos(\phi \phi_0)$
- 7) По углу наклона графика определить размер слоя
- 8) Экстраполировав график до нулевого угла, рассчитать длину волны запрещённой зоны для проверки в симуляции
- 9) Рассчитать радиус глобул и сравнить с другими кристаллами

Второй кристалл обладал значительно меньшей амплитудой отражения (на спектре не было видно отчётливого пика), поэтому его запрещённая зона определялась по спектру пропускания. Размер амплитудной ямы тоже был еле заметен, поэтому кристалл было решено смочить ацетоном, что приравнивает коэффициенты преломления и уменьшает рассеяние внутри кристалла. В результате провалы на спектре стали чуть более заметными, но при этом всё равно очень слабыми, особенно на краях спектра фонарика, удобнее всего было их искать в динамике, когда небольшие повороты кристалла сдвигали запрещённую зону.



Рисунок 8. Второй фотонный кристалл

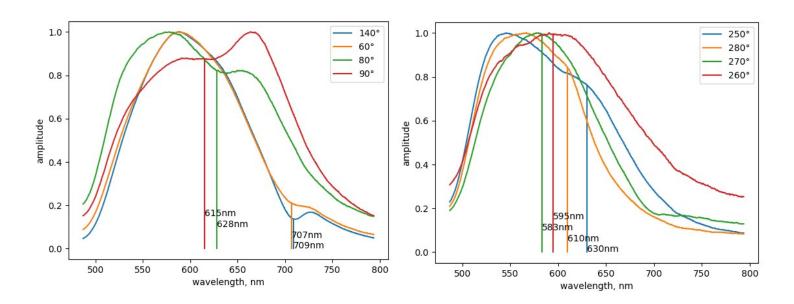


Рисунок 9. Спектры пропускания второго фотонного кристалла

### Кристалл №3

Третий кристалл аналогично второму не обладал достаточной амплитудой отражения и пропускания, поэтому его было так же решено смочить ацетоном. Ацетон быстро высыхает, что даёт дополнительную погрешность для определяемой длины волны запрещённой зоны

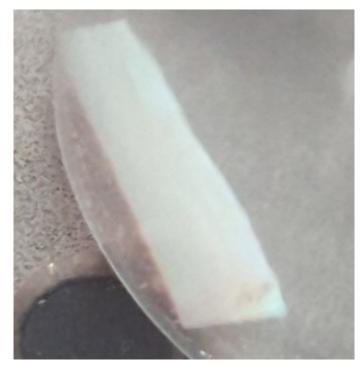


Рисунок 10. Третий фотонный кристалл

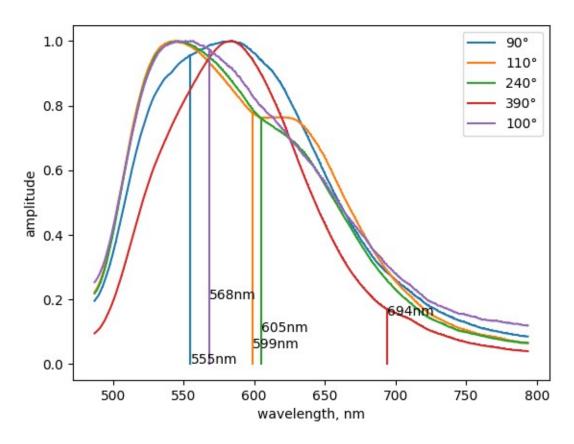


Рисунок 11. Спектр пропускания третьего фотонного кристалла

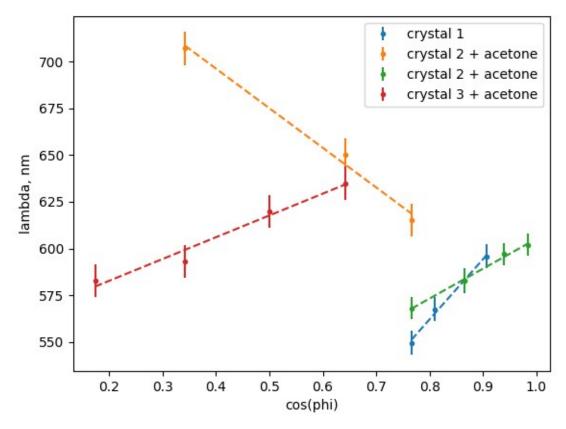


Рисунок 12. Зависимость длины волны запрещённой зоны кристаллов от косинуса угла падения

Из графиков были исключены точки при больших углах, так как пики (или ямы) интенсивности в них еле заметны. Для второго кристалла были проведены два замера от разных нулевых углов. По графику наклона для второго и третьего кристаллов видно, что размеры глобул в них примерно одинаковые. На графике так же можно сравнить первый и второй кристаллы. Так как угол наклона графика для первого кристалла значительно больше, а пропитка второго кристалла несильно меняет его эффективный коэффициент преломления (на 5%), можно сделать вывод, что размер глобул у первого кристалла существенно больше (примерно в два раза). Этим и объясняется более чёткий характер наблюдаемого явления.

$$n_{air} = 1$$
  $n_{quartz} = 1.46$   $n_{acetone} = 1.43$   $n_{quartz-air} = 1.35$   $n_{quartz-acetone} = 1.43$ 

№ кристалла	d , нм	r,нм	δr,%	Δ r ,нм	$\lambda_{_0}$ ,нм
1	119	70	30	20	626
2	74	45	20	10	780
2	54	33	20	7	605
3	41	25	20	5	675

#### Проверка симуляцией

Для проверки результатов была проведена симуляция с расчётом длины волны запрещённой зоны при нулевом угле падения. Симуляция проходила на 80х30 глобулах с электромагнитными волнами, испускаемыми из левой стенки и замером амплитуды отражённой волны относительно испущенной на той же стенке. Остальные стенки поглощают электромагнитные волны. Пространство между глобулами было заполнено в одном случае воздухом для симуляции первого кристалла, в другом случае заполнено ацетоном для симуляции смоченного второго кристалла. Получившиеся в результате симуляции длины волн запрещённой зоны при нулевом угле примерно совпадают с предсказанными из эксперимента.

Размеры глобул были пересчитаны на двумерную конфигурацию, чтобы расстояние между слоями в кристалле сохранялось.

Симуляция лучше всего проходит на тонком слое, так как увеличение количества слоёв увеличивает вклад диагональных симметричных плоскостей, отражающих под углом. При этом результат симуляции крайне чувствителен к конфигурации и обладает большой относительной погрешностью.

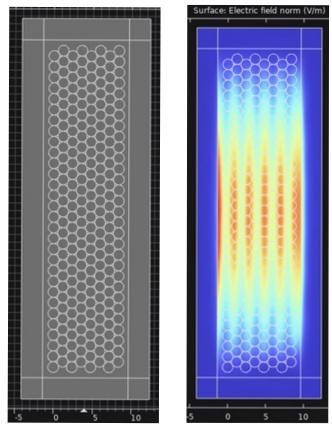


Рисунок 13. Схема симуляции

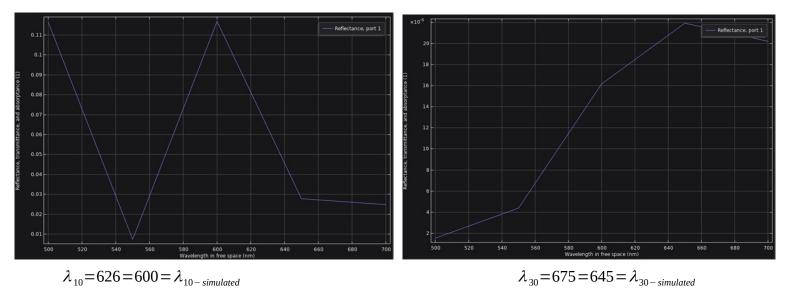


Рисунок 14. Спектры отражения для первого и для третьего кристаллов

**Вывод:** у второго и третьего кристаллов одинаковый размер по порядку 50 нм, первый наиболее интенсивный, размер порядка - 100 нм, пропитка водой результатов не дала, так как образцы оказались тяжело смачиваемыми, ацетон быстро высыхал, что добавило большую относительную погрешность, 2D симуляция не противоречила эксперименту