بررسی و شبیه‌سازی بلورهای فوتونی سه بعدی اپال و اپال وارون دی اکسید سیلسیوم بهینه شده و سنتز پلی استایرن با کنترل مشخصه ترمودینامیکی

ساره امیدواری[۱]، آذردخت مظاهری[۱]، سید محمد حسین امین جواهری[۲]، سید محمد رضا موسوی[۲]، محمد مهدوی[۳]

[۱]مجتمع علوم کاربردی مالک اشتر، دانشکده فیزیک، اصفهان، شاهین شهر

[۲]مجتمع علوم کاربردی مالک اشتر، مرکز اپتوالکترونیک ، اصفهان، شاهین شهر

[۳]مجتمع علوم کاربردی مالک اشتر، دانشکده شیمی، اصفهان، شاهین شهر

چکیده – در این مقاله ساختارهای بلور فوتونی سه بعدی اپال و اپال وارون هوا در SiO_2 شبیه‌سازی شده‌اند و به منظور داشتن گاف نواری بسامدی پهن، بهینه سازی گردیده‌اند. سپس با توجه به شعاع بهینه کره‌های هوا، ویژگی ساختار بلور فوتونی اپال متشکل از کره‌های پلی استایرن در هوا شبیه‌سازی شده است. در انتها، با تهیه اپال به روش سل-ژل، ذرات هم‌اندازه و با شعاع بهینه‌شده‌ای بدست آمدند که تصویر SEM آن‌ها مشابه نتایج شبیه‌سازی به دست آمده است.

کلید واژه- اپال، اپال وارن، بلور فوتونی سه بعدی پلی استایرن، گاف نواری بلور فوتونی

Investigation and simulation of the optimized three-dimensional opal and inverse opal of SiO_2 photonic crystals and synthesis of Polystyrene by controlling the thermodynamic property

Mazaheri, Azardokht[1]; Omidvari, Sareh[1]; Amin Javaheri, Seyed mohammad hossein[2];

Mousavi, Seyed mohammad reza[1]; Mahdavi, Mohammad[3]

[1] Institute of Applied Sciences of Malek Ashtar, Department of Physics, Isfahan, Shahin Shahr

[2] Institute of Applied Sciences of Malek Ashtar, Optoelectronic Center, Isfahan, Shahin Shahr

[3] Institute of Applied Sciences of Malek Ashtar, Department of Chemistry, Isfahan, Shahin Shahr

Abstract- In this paper, three-dimensional photonic crystal structures of air inverse-opal and opal in the SiO_2 is simulated and structures are optimized in order to have a wide frequency band gap. Using the optimal radius of air spheres, characteristic of the opal photonic crystal made of polystyrene spheres in air is simulated. Finally we are produced opal by sol-gel method obtained particles with optimal radius and equal size that their SEM images are similar to the simulation results.

Keywords: Opal, Inverse-opal, Polystyrene three-dimentional photonic crystal, Photonic crystal band gap.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

۱- مقدمه

بلورهای فوتونی، مواد اپتیکی مصنوعی هستند که امکان کنترل نور را فراهم می‌کنند. ساختار بلور فوتونی، آرایه منظم و متناوب از دو یا چند ماده با ضریب شکست متفاوت است به گونه‌ای که تغییرات در ضریب شکست می‌تواند در یک، دو یا سه بعد تکرار شود. همان‌گونه که مواد نیم‌رسانا با پتانسیل الکترونی متناوب سبب ایجاد نوار ممنوعه در انرژی الکترون‌ها می‌گردند، ساختارهای بلور فوتونی نیز سبب ایجاد نوارهای بسامدی و گاف نوار بسامدی می‌شوند. طول دوره تناوب این ساختارها را ثابت شبکه می‌نامند که با ثابت شبکه معمولی اتم‌ها قابل مقایسه است [۱،۲]. امروزه بلورهای فوتونی به‌دلیل توانمندی گسترده در سیستم‌های نوری نوین نقش مهمی را ایفا می‌کنند [۳-۵]. پاشندگی نور از بلور فوتونی (ساختار اپال) می‌تواند باعث ایجاد فلاش‌هایی با هر کدام از رنگ‌های رنگین کمان شود. منشا قوس و قزح در اپال‌ها ناشی از ریز ساختارهایی است که به‌طور منظم کنار هم قرار گرفته‌اند و باعث می‌شوند که نور از صفحات کره‌ها پاشیده شود و هم‌چنین اندازه قطر و فاصله کره‌ها، بر بسامد نور مشاهده شده تاثیر می‌گذارد. طول موج نور پاشیده شده از این ساختار، چند صد نانومتر است و در ناحیه طول موج‌های مریی قرار می‌گیرد. تولید اپال‌ها به آن دلیل حائز اهمیت است که مرحله‌ای برای تولید محصول اپال وارون (یک بلور فوتونی سه بعدی با گاف نواری کامل) است [۶]. ساختار اپال وارون به دلیل خواص اپتیکی آن به عنوان ابر منشور و ابر عدسی استفاده می‌شود و هم‌چنین در سلول‌های خورشیدی به منظور افزایش استخراج نور و افزایش بازدهی نور به کار می‌رود.

در این مقاله، با توجه به ضریب دی‌الکتریک متفاوت دو محیط و شعاع مختلف، به بررسی ساختار بلور فوتونی اپال و اپال وارون پرداخته می‌شود و پارامترهای وابسته به آن تحلیل و شبیه‌سازی می‌گردد.

۲- مبانی نظری

به‌منظور دست‌یابی به ساختار نواری، محیط‌های متناوب با ضریب دی‌الکتریک مختلف بررسی و به‌منظور به‌دست آوردن ساختار نواری در محیط‌های متناوب، روش‌های مختلفی ارائه شده است که متداول‌ترین آن روشی است که در آن میدان مغناطیسی با استفاده از تئوری بلاخ برحسب امواج تخت بسط داده شده و با بسط ثابت دی الکتریک در فضای شبکه وارون، معادله موج حاصل از معادلات ماکسول در فضای فرکانس (ω) و فضای بردار موج (k) به‌دست می‌آید. در نهایت معادله حاصل به روش‌های عددی حل شده و به این ترتیب وابستگی ω به k به‌دست می‌آید [۵].

این روش بر اساس بسط فوریه و تابع دی‌الکتریک است و با توجه به معادلات الکترومغناطیس ماکسول، معادله میدان مغناطیسی به صورت معادله (۱) به‌دست می‌آید [۴].

$$\nabla\times(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}\nabla\times H(\vec{r}))=(\frac{\omega}{c})^2 H(\vec{r}) \qquad (۱)$$

فرض می‌شود که محیط مادی، همگن و همسانگرد است و ثابت دی‌الکتریک مستقل از بسامد در نظر گرفته می‌شود. در نتیجه میدان مغناطیسی و ثابت دی‌الکتریک بر حسب امواج تخت مطابق معادله‌های (۲) خواهند شد.

$$H(\vec{r})=\sum_G H(\vec{G})\exp\{i(\vec{k}+\vec{G}).i\}$$
$$D(\vec{r})=\sum_G k(\vec{G})\exp(i\vec{G}.\vec{r}) \qquad (۲)$$

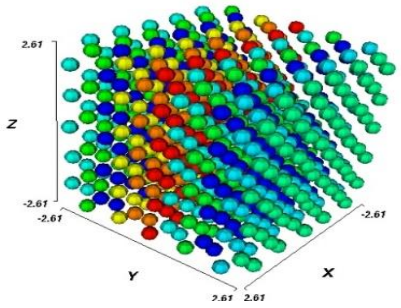
با مشخص کردن $k(\vec{G})$ و حل معادلات بالا برحسب Gهای مختلف، بسامد متناظر با هر بردار موج تعیین و بدین ترتیب ساختار نواری به دست می‌آید.

۳- طراحی و شبیه‌سازی

ساختار اپال وارون اکسید سلیسیوم، یک ساختار بلور فوتونی سه بعدی و متشکل از آرایه‌ای از کره‌های هوا در زمینه اکسید روی با ساختار مکعبی مرکز پر(FCC) است. در این پژوهش با توجه به ضریب دی‌الکتریک اکسید سلیسیوم در ناحیه مریی که ۱/۴۵۷-۱/۴۵۹ است، با استفاده از روش بسط موج تخت(PWE) شبیه‌سازی شد. شکل ۱ طراحی ساختار سه بعدی اپال وارون را نشان می‌دهد (شبیه سازی با استفاده از نرم افزار Rsoft صورت گرفته است). در این شبیه‌سازی اثر تغییر شعاع کره‌های هوا و اختلاف ضریب دی‌الکتریک بین ماده و محیط برای داشتن گاف نواری کامل در تمامی نواحی بسامدی بررسی شد.

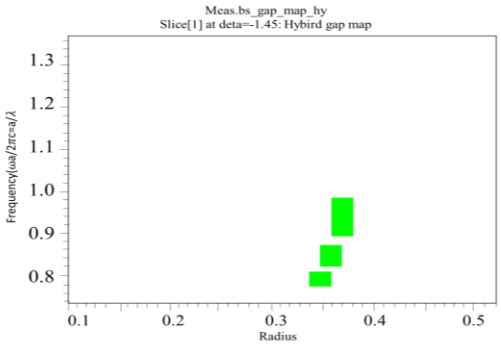
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]



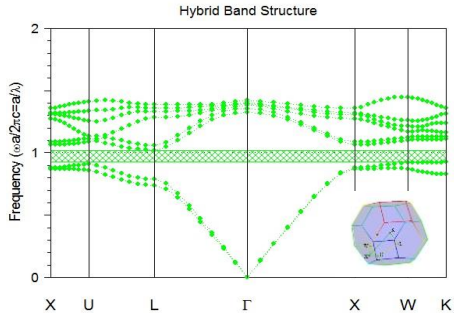
شکل۱: طراحی ساختار سه بعدی اپال وارون

شبیه‌سازی برای ساختار اپال وارون با ضریب دی الکتریک ۱/۴۵۹ برای زمینه و ضریب دی الکتریک ۱ برای کره‌های هوا برای شعاع‌های ۰/۳٤a تا ۰/۳۸a انجام شده است و نمودار گاف نواری آن در شکل ۲ رسم شده است. شکل ۳ یک گاف نواری باریک بین ۰/۹۲a/λ تا ۱/۰۳ a/λ را نشان می‌دهد (a دوره تناوب شبکه است). سپس برای بهینه نمودن ساختار، شبیه‌سازی برای شعاع‌های مختلف کره‌ها در ساختار اپال وارون انجام شد و مشاهده گردید که تنها برای کره‌های هوا با شعاع بین ۰/۳٤a تا ۰/۳۸a ساختار دارای گاف نواری است. بنابراین اساس طراحی و شبیه‌سازی را برای شعاع بهینه ۰/۳۸a قرار داده‌ایم. در نمودار شکل ۳ شعاع بهینه و اختلاف ضریب دی‌الکتریک ۱/۴۵۹ در نواحی بسامدی گاف نواری مشاهده می‌گردد.



شکل۲: گاف نواری به ازای شعاع‌های مختلف برحسب a. اختلاف ضریب دی الکتریک بین اپال‌های وارون و محیط پس زمینه در نمودار ۱/۴۵۹ است.

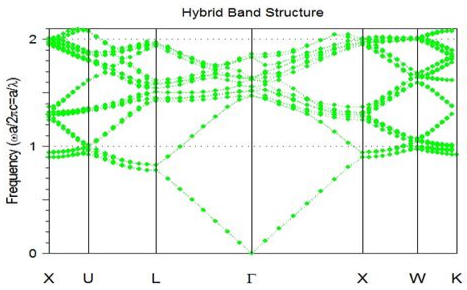
نمودار شعاع بهینه با اختلاف ضریب دی الکتریک ۱/۴۵۹رسم شد همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود در تمام نواحی بسامدی گاف نواری داریم.



شکل۳: نمودار گاف نواری اپال وارون را برای شعاع بهینه و اختلاف ضریب دی الکتریک ۱/۴۵۹ بین کره‌های اپال و محیط پس زمینه نشان می‌دهد.

۴- طراحی و شبیه‌سازی ساختار اپال

اپال‌ها دارای ساختار متناوب از کره‌های پلی استایرن (PS) به صورت شبکه FCC هستند. کره‌های PS در ناحیه مریی دارای ضریب شکست ۱/۳۷-۱/۵۲ هستند که در هوا واقع شده‌اند و شعاع بهینه آن‌ها، مطابق آنچه در بخش قبل به‌دست‌آمد، ۰/۳۸ است.



شکل۴: نمودار گاف نواری اپال برای شعاع بهینه

مشاهده می‌گردد برخلاف اپال وارون که گاف نواری کامل دارد این ساختار گاف نواری کامل نشان نمی‌دهد.

۵- سنتز پلی استایرن

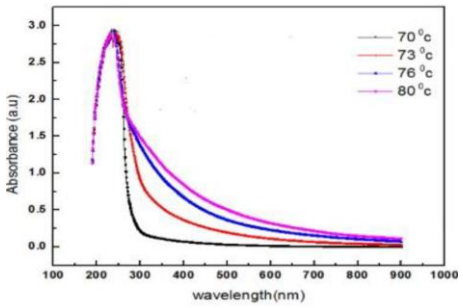
روش ساخت: پلی استایرن (Ps) با استفاده از پلیمریزاسیون رشد زنجیره‌ای رادیکال آزاد، ساخته می‌شود. کره‌های Ps دارای اندازه‌های یکنواخت هستند و با استفاده از پلیمریزاسیون مونومر (Ps) در آب تهیه می‌شوند. از آن‌جا که مونومر استایرن در آب قابل حل نیست، باید آن را به‌وسیله فرآیندی به نام پلیمریزاسیون امولسیونی، پلیمرایز کرد. در اینجا امولسیون به معنای سوسپانسیون قطرات روغن در آب است [۷و۸]. برای شروع پلیمریزاسیون به یک آغازگر نیاز است، دی بنزوئیل پراکساید به‌عنوان یک آغازگر مولکولی است که می‌تواند جزئی از واکنش را تشکیل دهد. آب

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]

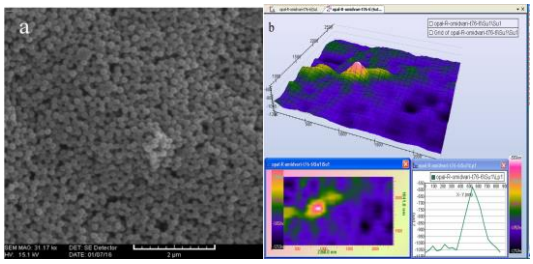
دوباریونیزه، مونومر و دی بنزوئیل پراکساید به صورت محلول در آمده و مخلوط در مدت ۹۰ دقیقه با دماهای ۸۰ و ۹۰ درجه سنتز می‌شود. بعد از اتمام زمان سنتز، ساختارهای اپال تشکیل می‌گردد.

نمودار جذب UV، برای دماهای مختلف در شکل ۵ رسم شده است.



شکل۵: جذب UV برای دماهای مختلف

تصویر SEM و STM حاصل از ساختار سنتز شده به ترتیب در شکل‌های a-۶ و b-۶ قابل مشاهده است. آشکار است که اندازه کره‌ها با توجه به دمای سنتز تغییر می‌کند.



شکل۶: a) تصویر SEM از ساختار کره‌های اپال سنتز شده در دمای ۸۰ درجه سانتی‌گراد (اندازه ذرات ۲۰۰nm)، b) تصویر STM حاصل از نمونه سنتز شده دردمای ۹۰ درجه سانتی‌گراد (اندازه ذرات در حدود ۳۵۰nm)

۶- بحث و نتیجه‌گیری

بلورهای فوتونی مانند مواد دی‌الکتریک دارای گاف نواری هستند. با استفاده از گاف نواری بسامدی، می‌توان نور را در این نوع ادوات کنترل نمود. یکی از عوامل موثر در میزان پهنای گاف نواری، اختلاف ضریب دی‌الکتریک‌های محیط‌های مختلف است و هرچه میزان این اختلاف بیش‌تر باشد پهنای گاف نواری نیز افزایش می‌یابد. مواد اپال دارای ضریب دی‌الکتریک کم‌تر از ۲ هستند، از این رو به‌دلیل اختلاف کم میان ضریب دی‌الکتریک کره‌های اپال و محیط هوا، مشاهده گاف نواری کامل در تمامی نواحی بسامدی ممکن نیست. پس از محاسبات و بهینه‌سازی به روش بسط موج تخت، شعاع ۰/۳۸a برای اپال‌های وارون و اختلاف ضریب دی‌الکتریک ۱/۴۵۹ میان اپال و محیط به‌منظور ایجاد ساختار بلورفوتونی سه بعدی با گاف نواری کامل به دست آمد. برای داشتن ضریب دی‌الکتریک مورد نظر، از ترکیب SiO_2 که دارای ضریب دی‌الکتریک بزرگ‌تری نسبت به کره‌های اپال است برای دست‌یابی به گاف نواری کامل استفاده شد. داده‌های تجربی حاصل از ساخت اپال با داده‌های شبیه‌سازی کاملا سازگاری دارند. با توجه به نتایج به‌دست آمده با افزایش دما، شاهد افزایش اندازه ذرات هستیم و از طرفی نیز با افزایش دما، جابه‌جایی قرمز حاصل شد. در نتیجه می‌توان جابه جایی قرمز را به‌عنوان معیاری برای سنجش اندازه ذرات به‌کار گرفت.

مراجع

[1] H. Zhang, Photonic band gap of three dimensional magnetized photonic crystal with Voigt configuration, The European Physical Journal D, 67(8): p. 1-13. 2013.
[2] B. Holland, C. Blanford, A. Stein, Synthesis of macroporous minerals with highly ordered three-dimensional arrays of spheroidal voids, Science 281(5376): p. 538-540 , 1998.
[3] B. Rezaei, Optimization of Q-factor in direct-coupled cavity-waveguide photonic crystal structures, Optic-International Journal for Light and Electron Optics, 124(24): p. 7056-7061, 2013.
[4] W. Wei, Designing of High Performance Photonic Crystal Filter with two channels, in Industrial Electronics (ISIE), International Symposium on IEEE, 2012.
[5] H. Shen, S. Banerjee,D. Klotzkin, Wavelength Division Multiplexer Based on Photonic Crystal Filters Integrated into Silicon-on-Insulator Waveguides, in Information Photonics, Optical Society of America, 2005.
[6] V. Rybin, I.Shishkin, Band structure of photonic crystal fabricated by two-photon polymerization, journal Crystal vol. 5 (2015) 61-73.
[7] J. Joannopoulos, Photonic crystals: molding the flow of light: Princeton university press, 2011.
[8] A. Stein, R. Schroden, Colloidal crystal templating Of three-dimensionally ordered Macroporous solids: materials for photonics and beyond. Current Opinion, in Solid State and Materials Science, 5(6): p. 553-564. 2001.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]