

УДК 535.42

ЗОННАЯ СТРУКТУРА ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА С СИММЕТРИЕЙ РЕШЕТКИ КЛАТРАТА Si34

© 2008 П. Н. Дьяченко¹, Н. Д. Кундикова², Ю. В. Микляев², В.С. Павельев¹

¹Институт систем обработки изображений РАН

²Вузовско-академический отдел нелинейной оптики ИЭФ УрО РАН и ЮУрГУ, Челябинск

Исследована зонная структура фотонного кристалла с симметрией решетки клатрата Si₃₄, содержащего 34 узла в примитивной ячейке. Обнаружено, что решетка имеет большую изотропную запрещенную зону для широкого диапазона диэлектрической постоянной. Получена зависимость изотропности фотонных зон от диэлектрической постоянной.

Фотонные кристаллы

Фотонными кристаллами называют периодические структуры, состоящие из двух и более материалов с различными диэлектрическими постоянными, обладающие полной фотонной запрещенной зоной (ФЗЗ) [1]. При наличии полной ФЗЗ распространение света подавлено в любом направлении в спектральном диапазоне, совпадающем с запрещенной зоной. Получение трехмерных фотонных кристаллов макроскопических размеров, обладающих ФЗЗ в ближней инфракрасной и видимой областях спектра, позволяет наблюдать целый ряд ранее недоступных для наблюдения эффектов, среди которых наиболее значимым является возможность управления спонтанным излучением [2].

Решетка фотонных кристаллов имеет субмикронные размеры, поэтому для их изготовления требуется разработка новых методов. Кроме того, на данный момент наименьший показатель преломления материала решетки, которая может обладать полной ФЗЗ, равен $n = 1,9$ для симметрии алмазной решетки [3]. Это накладывает серьезные ограничения на выбор материала, поскольку, например, показатель преломления полимеров и стекол в видимой области обычно ниже этого значения. Одной из возможностей решения этой проблемы является использование трехмерных фотонных квазикристаллов и периодических структур с большим числом узлов («атомов») в примитивной ячейке. Можно ожидать, что большая изотропия позволит снизить порог существова-

ния ФЗЗ по показателю преломления. В микроволновом диапазоне было экспериментально обнаружено [4], что икосаэдрический фотонный квазикристалл, изготовленный методом стереолитографии, имеет большие стоп-зоны. В работе [4] были экспериментально измерены коэффициенты пропускания микроволнового излучения икосаэдрического фотонного квазикристалла, но теоретический анализ не был произведен. В работе [5] был теоретически исследован фотонный кристалл с симметрией решетки пирохлора, содержащий 4 «атома» в примитивной ячейке. Было показано, что такой фотонный кристалл имеет изотропные ФЗЗ, сравнимые по размеру с ФЗЗ алмазной решетки. Решетки с числом «атомов» в примитивной ячейке, большим четырех, до настоящего момента не исследовались.

Рассмотрим в качестве фотонного кристалла с большим числом узлов в примитивной ячейке, обладающем изотропией свойств, кристалл с симметрией решетки клатрата Si₃₄ [6,7]. Данная решетка относится к классу гранцентрированных кубических (ГЦК) и содержит 34 узла в примитивной ячейке (рис. 1). В Si₃₄ каждый «атом» связан с соседними четырьмя «атомами» искаженными тетраэдрическими связями. Как известно, решетка алмаза, имеющая тетраэдрические связи «атомов», позволяет получать самую большую ФЗЗ из всех фотонных кристаллов. Икосаэдрическая же структура не имеет тетраэдрических связей [4].

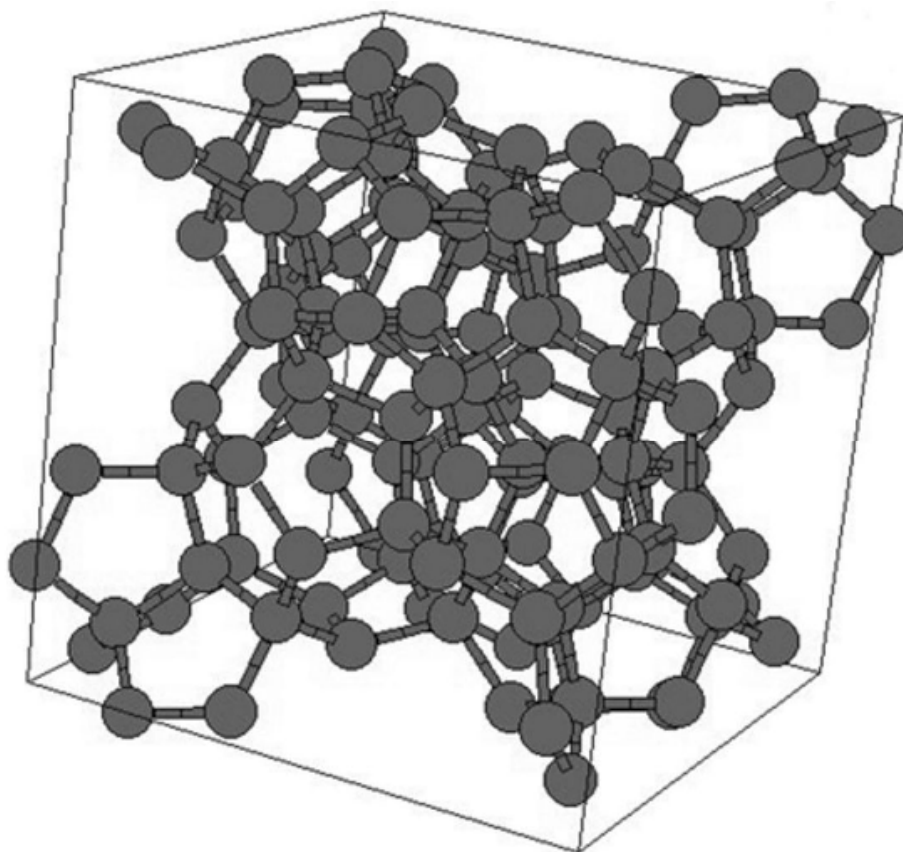


Рис. 1. Четыре примитивных ячейки решетки Si34

Кремниевые клатраты впервые были синтезированы в 1965 году [8]. В последние годы они стали объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, прежде всего с активным поиском новых полупроводниковых материалов. В решетке клатрата Si34 расположение атомов наиболее изотропно, то есть форма зоны Бриллюэна наиболее близка к сфере, что благоприятно для открытия полной ФЗЗ. Решетка клатрата Si34 получается при упаковке пентагонального додекаэдра и тетракисдекаэдра. Пентагональный додекаэдр - это правильный платонов полиэдр, то есть такое тело, в котором все вершины эквивалентны, а все грани однотипны. Он имеет несколько осей симметрии пятого порядка, поэтому, согласно законам кристаллографии, невозможно заполнение пространства только этими полиэдрами, необходима их комбинация с полиэдрами другого типа, которые содержат еще и шестиугольные грани. Тетракисдекаэдр имеет две шестиугольные грани. При этом, как уже отмечалось, каждый атом

связан с соседними четырьмя атомами, искаженными тетраэдрическими связями.

Все вышеизложенное дает основание полагать, что исследование решеток клатратов представляет большой интерес для создания на их основе фотонных кристаллов.

Цель настоящей работы - исследование возможности существования полной ФЗЗ в фотонных кристаллах с симметрией Si34.

При проведении исследований использовалась следующая модель. Диэлектрический материал полагался непоглощающим, немагнитным и изотропным, то есть показатель преломления среды $n = \sqrt{\epsilon}$, где ϵ - диэлектрическая проницаемость диэлектрика в оптическом диапазоне. Для нахождения собственных мод уравнений Максвелла с периодическими граничными условиями использовали метод разложения поля по плоским волнам [9]. Рассматривались три случая: 1) узлами решетки являются диэлектрические шары, окруженные воздухом; 2) узлами решетки являются сферические полости в диэлектрике; 3) соседние узлы решетки соединены диэлектрическими стержнями.

В результате проведенных расчетов оказалось, что фотонный кристалл на основе решетки Si34, состоящий из диэлектрических шаров в вакууме, не имеет больших запрещенных зон (порядка 5% при диэлектрической постоянной $\epsilon = 12$), а фотонный кристалл, состоящий из воздушных шаров в диэлектрике, не имеет запрещенных зон. Поэтому более подробно исследовался фотонный кристалл, состоящий из диэлектрических стержней в вакууме, которые соединяют соседние узлы решетки, образуя тем самым тетраэдрические связи.

На рис. 2 приведена зонная структура фотонного кристалла при $\epsilon = 12$ и оптимальном факторе заполнения $f = 22\%$ (отношения объема диэлектрика к полному объему ячейки). На графиках частота указана в безразмерных единицах $\omega a / 2\pi c$, где ω - циклическая частота, a - размер примитивной ячейки, c -

скорость света в вакууме. По оси x отмечены точки высокой симметрии зоны Бриллюэна ГЦК решетки [10]. Полная ФЗЗ находится между 34-ой и 35-ой зонами и имеет размер $\Delta\omega / \omega_m = 15,6\%$ (при факторе заполнения $f = 22\%$). Под размером полной ФЗЗ $(i) - (i+1)$ понимается выражение $\frac{\Delta\omega}{\omega_m} = 2 \cdot \frac{\min(\omega_{i+1}) - \max(\omega_i)}{\min(\omega_{i+1}) + \max(\omega_i)} \cdot 100\%$, где $\min(\omega_{i+1})$ и $\max(\omega_i)$ - минимальная и максимальная частота для зон $(i+1)$ и (i) соответственно. Таким образом, фотонный кристалл с решеткой симметрии клатрата, содержащий более 4 «атомов» в примитивной ячейке, и обладает полной ФЗЗ. Данный кристалл содержит в своей решетке полиэдр, имеющий оси симметрии пятого порядка.

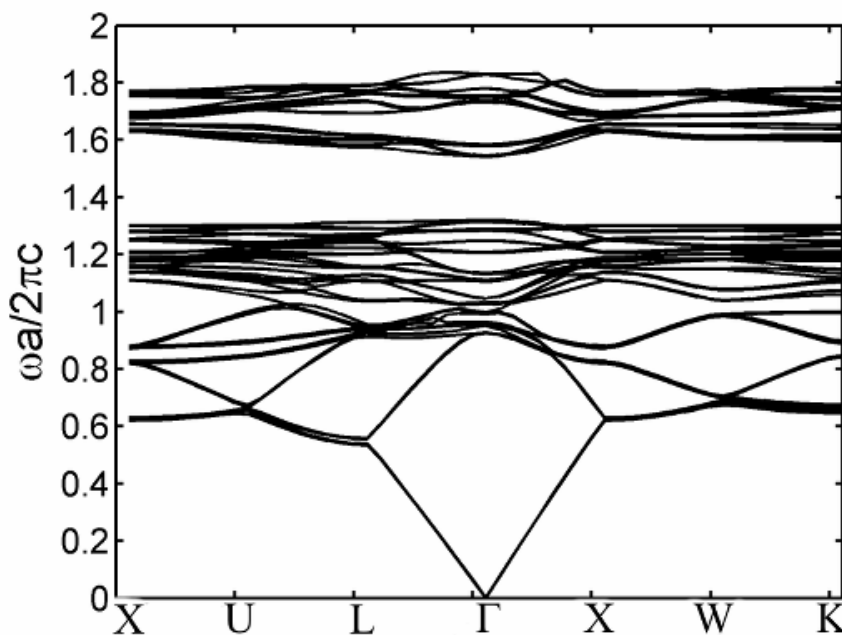


Рис. 2. Зонная структура Si34: диэлектрическая постоянная $\epsilon = 12$; фактор заполнения $f = 22\%$; размер запрещенной зоны $\Delta\omega_m / \omega = 15,6\%$

Для определения минимального значения диэлектрической постоянной ϵ_{th} , при котором появляется полная ФЗЗ, т.е. для определения порога возникновения полной ФЗЗ рассчитана зависимость ширины запрещенной зоны от диэлектрической проницаемости. Для расчета зависимости при каждом значении диэлектрической проницаемости ϵ

определялся фактор заполнения диэлектриком f , для которого полная ФЗЗ имеет минимальный размер. Полученные результаты приведены на рис. 3. Как видно из рис. 3, порог возникновения полной ФЗЗ по диэлектрической постоянной равен $\epsilon_{th} = 5$. Значение порога оказалось большим, чем у фотонного

кристалла с симметрией алмазной решетки, для которого порог $\epsilon_{th}=4,0$, но меньшим, чем у фотонного кристалла с симметрией инвертированного опала [11]. Это связано с тем, что ФЗЗ структуры с симметрией Si34 более

изотропная, то есть частота граничных зон (зон, ограничивающих ФЗЗ) слабо зависит от направления распространения электромагнитной волны.

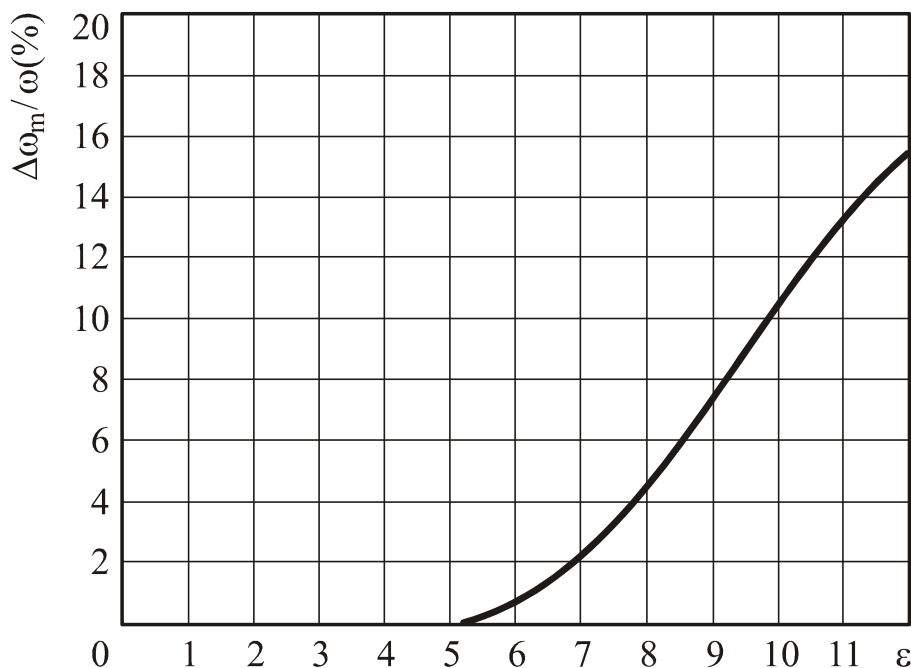


Рис. 3. Зависимость размера запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m$ от диэлектрической постоянной ϵ

Проведено исследование изотропности запрещенной зоны. Параметр изотропности F фотонной зоны (i) определялся следующим образом [12]:

$$F = 2 \cdot \frac{\max(\omega_i) - \min(\omega_i)}{\max(\omega_i) + \min(\omega_i)}$$

Полученная зависимость параметра изотропности F для зон 34 («нижняя» зона) и 35 («верхняя» зона) от диэлектрической постоянной ϵ при факторе заполнения $f=27\%$ представлена на рис. 4. Из рис. 4 видно, что параметр F монотонно уменьшается при увеличении диэлектрической постоянной. Это обусловлено тем, что локализация электромагнитного поля усиливается с увеличением диэлектрической постоянной. Из ранее известных структур фотонных кристаллов наиболее изотропной ФЗЗ обладал фотонный кристалл с симметрией гранецентрированной кубической решетки, состоящей из воздушных шаров в диэлектрике.

При $f=27\%$ и $\epsilon=12$ такая решетка имеет $F=0,08$ для «нижней» зоны и $F=0,066$ для «верхней» зоны. При тех же условиях фотонный кристалл с решеткой с симметрией Si34 имеет параметр изотропности $F=0,022$ для «нижней» зоны и $F=0,056$ для «верхней» зоны. Таким образом, ФЗЗ решетки клатрата Si34 является самой изотропной из когда-либо ранее исследованных решеток.

Известно, что групповая скорость распространения электромагнитных волн может обращаться в ноль на границе ФЗЗ. Физическое значение этого явления заключается в том, что на границе ФЗЗ рассеянные волны образуют стоячую волну, и за счет этого возможна генерация когерентного излучения [13]. В обычных фотонных кристаллах это реализуется только в некоторых направлениях, т. к. положение границы ФЗЗ зависит от направления распространения электромагнитного излучения. Для получения когерентного излучения, вне зависимости от направления распространения электромагнит-

ного излучения, необходимо использовать фотонные кристаллы с изотропной ФЗЗ. Изотропность фотонных зон также можно использовать для получения всенаправленной негативной рефракции. Это явление было исследовано для двумерных фотонных кристаллов [14] и квазикристаллов [15].

Таким образом, впервые обнаружена полная ФЗЗ в фотонном кристалле симметрией решетки клатрата, порог запрещенной

зоны по диэлектрической постоянной равен $\epsilon_{th}=5,0$. Обнаруженная полная ФЗЗ является самой изотропной из всех известных.

Факторы изотропности оказались равными $F=0,022$ для «нижней» зоны и $F=0,056$ для «верхней» зоны при факторе заполнения $f=27\%$ и $\epsilon=12$.

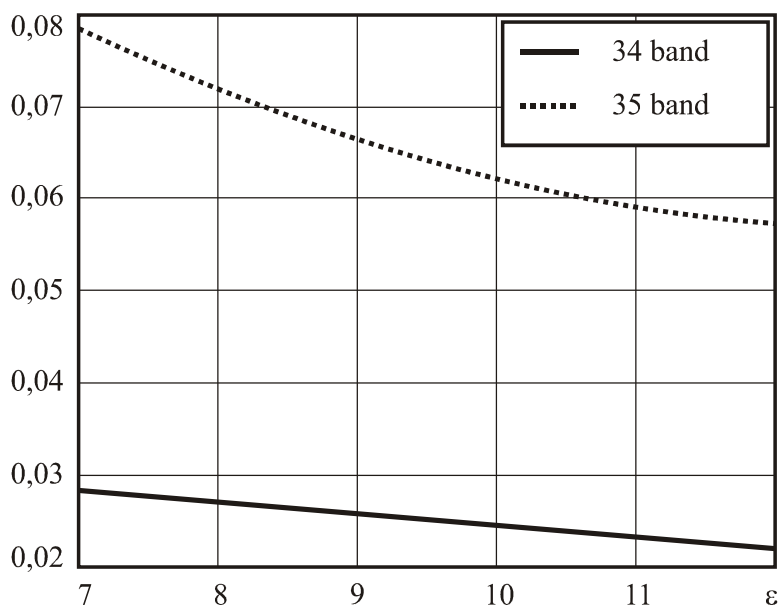


Рис. 4. Зависимость параметра изотропности F для зон 34 (сплошная линия) и 35 (пунктирная линия) от диэлектрической постоянной ϵ . Фактор заполнения $f=27\%$.

Библиографический список

1. Joannopoulos J.D., Meade R.D., Winn J.N., Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. Princeton University Press, Singapore, 1999.
2. Быков В.П. // ЖЭТФ. – 1972. – Т. 62. – С. 505.
3. Sharp D.N., Turberfield A.J., Denning R.G. // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68. – P. 205102.
4. Man W., Megens M., Steinhardt P.J., Chaikin P.M. // Nature. – 2005. – V. 436. – P. 993.
5. Garcia-Adeva A.J. // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 073107.
6. Adams G.B., O'Keeffe M., Demkov A.A., Sankey O.F., Huang Y.M. // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 49. – P. 8048.
7. Blase X. // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67. – P. 035211.
8. Kasper J.S., Hagenmuller P. // C. Cros. Science. – 1965. – V. 150. – P. 1713.
9. Johnson S. G., Joannopoulos J.D. // Optics Express. – 2001. – V. 8. – P. 173.
10. Chutinan A., Noda S. // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 57. – P. 2006.
11. Bush K., John S. // Phys. Rev. E. – 1998. – V. 58. – P. 3896.
12. Takeda H., Takashima T., Yoshino K. // J. Phys.: Condens. Matter 2004. – V. 16. – P. 6317
13. Meier M., Mekis A., Dodabalapur A., Timko A., Slusher R.E., Joannopoulos J.D. // Appl. Phys. Lett. – 1999. – V. 74. – P. 7.
14. Gajic R., Meisels R., Kuchar F., Hingerl K. // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 165310.
15. Feng Z., Zhang X., Wang Y., Li Z.Y., Cheng B., Zhang D.Z. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 94. – P. 247402.

References

1. Joannopoulos J.D., Meade R.D., Winn J.N., Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. Princeton University Press, Singapore, 1999.
2. Bykov V.P. // "GETF". – 1972. – Т. 62. – С. 505.
3. Sharp D.N., Turberfield A.J., Denning R.G. // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68. – P. 205102.
4. Man W., Megens M., Steinhardt P.J., Chaikin P.M. // Nature. – 2005. – V. 436. – P. 993.
5. Garcia-Adeva A.J. // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 073107.
6. Adams G.B., O'Keeffe M., Demkov A.A., Sankey O.F., Huang Y.M. // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 49. – P. 8048.
7. Blase X. // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67. – P. 035211.
8. Kasper J.S., Hagenmuller P. // C. Cros. Science. – 1965. – V. 150. – P. 1713.
9. Johnson S. G., Joannopoulos J.D. // Optics Express. – 2001. – V. 8. – P. 173.
10. Chutinan A., Noda S. // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 57. – P. 2006.
11. Bush K., John S. // Phys. Rev. E. – 1998. – V. 58. – P. 3896.
12. Takeda H., Takashima T., Yoshino K. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2004. – V. 16. – P. 6317
13. Meier M., Mekis A., Dodabalapur A., Timko A., Slusher R.E., Joannopoulos J.D. // Appl. Phys. Lett. – 1999. – V. 74. – P. 7.
14. Gajic R., Meisels R., Kuchar F., Hingerl K. // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 165310.
15. Feng Z., Zhang X., Wang Y., Li Z.Y., Cheng B., Zhang D.Z. // Phys. Rev. Lett., 2005. – V. 94. – P. 247402.

BAND STRUCTURE OF A PHOTONIC CRYSTAL WITH THE CLATHRATE SI-34 CRYSTAL LATTICE

© 2008 P.N. Dyachenko¹, N.D.Kundikova², Yu.V. Miklyayev², V.S. Pavelyev¹

¹Image Processing Systems Institute of the RAS, 443001, Samara, Russia

²College-academic Non-linear Optics department, Experimental Physics Institute, the Ural Branch of the RAS and South-Ural State University, 454080, Chelyabinsk, Russia

The band structure of a photonic crystal with the clathrate Si-34 lattice comprising 34 lattice sites in the unit cell is studied. The lattice is found to have a large isotropic band gap for a wide range of permittivity. The relationship between the photonic band isotropy and the permittivity is deduced.

Photon crystals

Сведения об авторах

Дьяченко Павел Николаевич, Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия, стажер-исследователь, e-mail: dyachenko@ssau.ru. Область научных интересов: нелинейная оптика

Кундикова Наталия Дмитриевна, Декан физического факультета Южно-Уральского государственного университета. Область научных интересов: нелинейная оптика.

Микляев Юрий Владимирович, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия, доцент, e-mail: miklyaev@mail.ru. Область научных интересов:

Павельев Владимир Сергеевич, Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия, главный научный сотрудник, e-mail: pavelyev@smr.ru. Область научных интересов: фотонные кристаллы, нелинейная оптика

Dyachenko Pavel Nikolaevich, Establishment of the Russian Academy of Sciences Institute of systems of processing of images of the Russian Academy of Sciences, Samara, Russia, the trainee-researcher, e-mail: dyachenko@ssau.ru. Area of scientific interests: nonlinear optics.

Kundikova Nataliya Dmitrievna, the Ural Branch of the RAS and South-Ural State University, 454080, Chelyabinsk, Russia. Physical faculty, the dean. Area of scientific interests: nonlinear optics.

Miklyayev Yurii Vladimirovich the Ural Branch of the RAS and South-Ural State University, 454080, Chelyabinsk, Russia, The senior lecturer, e-mail: miklyaev@mail.ru. Area of scientific interests: nonlinear optics.

Pavelyev Vladimir Sergeevich, Establishment of the Russian Academy of Sciences Institute of systems of processing of images of the Russian Academy of Sciences, Samara, Russia, the main scientific employee, e-mail: pavelyev@smr.ru. Area of scientific interests: photon crystals, nonlinear optics.