

УДК 535.42

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА С СИММЕТРИЕЙ РЕШЕТКИ КЛАТРАТА Si34

© 2008 П. Н. Дьяченко<sup>1</sup>, Н. Д. Кундикова<sup>2</sup>, Ю. В. Микляев<sup>2</sup>, В.С. Павельев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт систем обработки изображений РАН

<sup>2</sup>Вузовско-академический отдел нелинейной оптики ИЭФ УрО РАН и ЮУрГУ, Челябинск

Исследована зонная структура фотонного кристалла с симметрией решетки клатрата Si<sub>34</sub>, 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 Si<sub>34</sub> [6,7]. Данная решетка относится к классу гранцентрированных кубических (ГЦК) и содержит 34 узла в примитивной ячейке (рис. 1). В Si<sub>34</sub> 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].

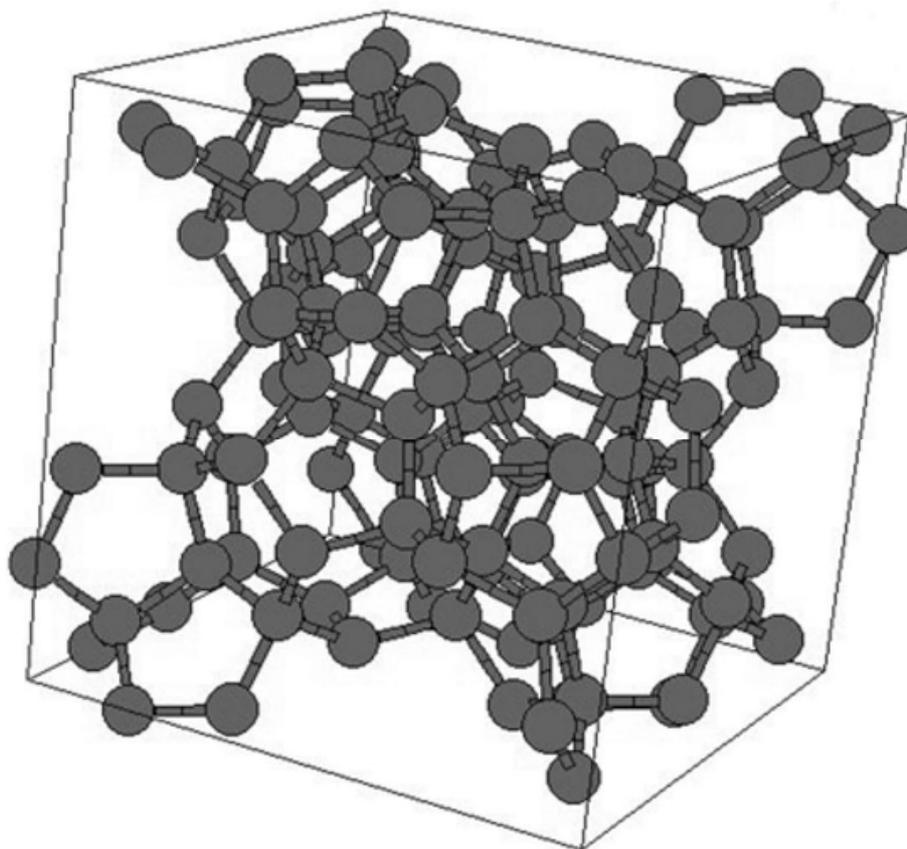


Рис. 1. Четыре примитивных ячейки решетки Si34

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 Si<sub>34</sub> расположение атомов наиболее изотропно, то есть форма зоны Бриллюэна наиболее близка к сфере, что благоприятно для открытия полной ФЗЗ. Решетка клатрата Si<sub>34</sub> 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 Si<sub>34</sub>.

При проведении исследований использовалась следующая модель. Диэлектрический материал полагался непоглощающим, немагнитным и изотропным, то есть показатель преломления среды  $n = \sqrt{\epsilon}$ , где  $\epsilon$  - 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  $\omega$  - 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.

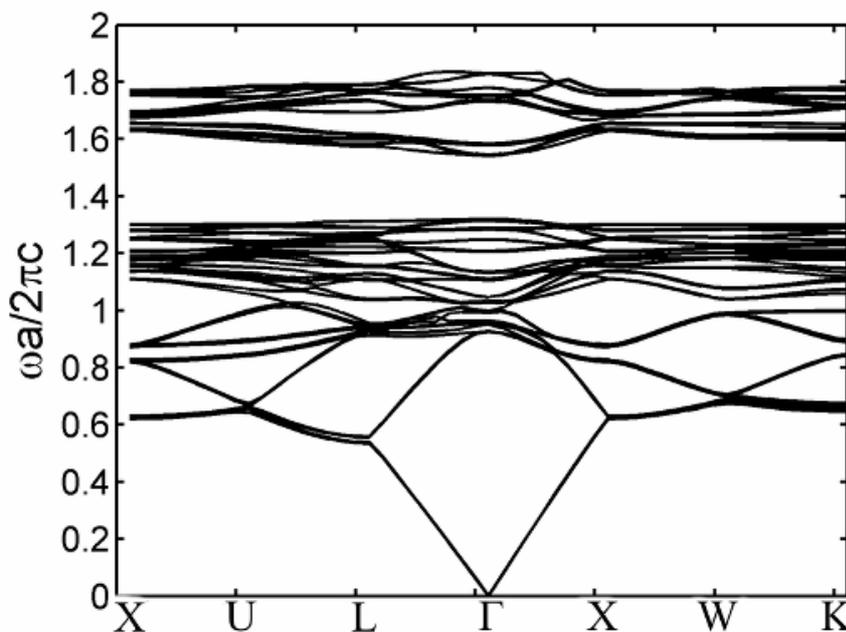


Рис. 2. Зонная структура Si34: диэлектрическая постоянная  $\epsilon = 12$ ; фактор заполнения  $f = 22\%$ ; размер запрещенной зоны  $\Delta\omega_m / \omega = 15,6\%$

Для определения минимального значения диэлектрической постоянной  $\epsilon_{th}$ , 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  $\epsilon$

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.

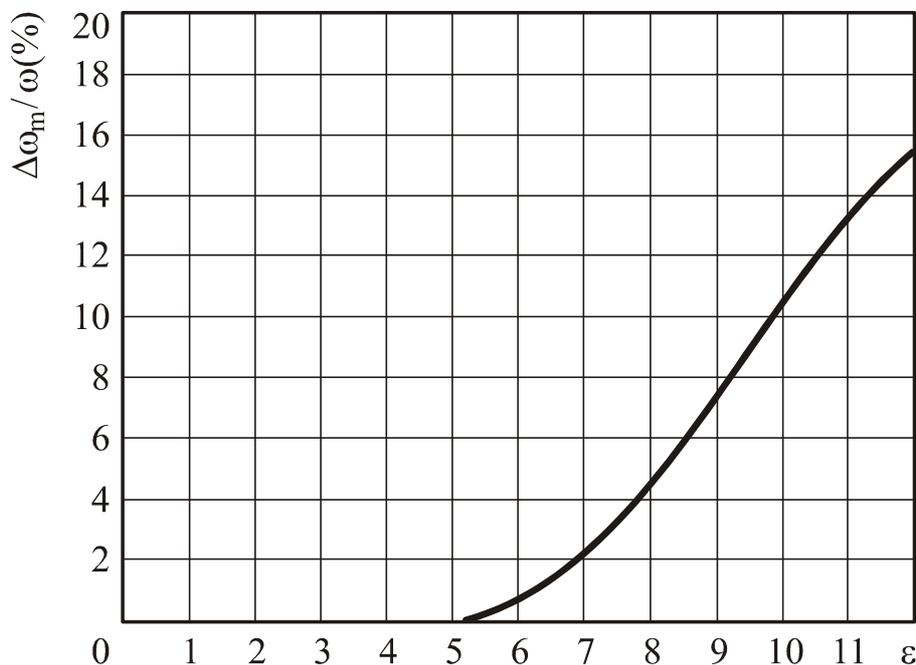


Рис. 3. Зависимость размера запрещенной зоны  $\Delta\omega/\omega_m$  от диэлектрической постоянной  $\epsilon$

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  $\epsilon$  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  $\epsilon=12$ .

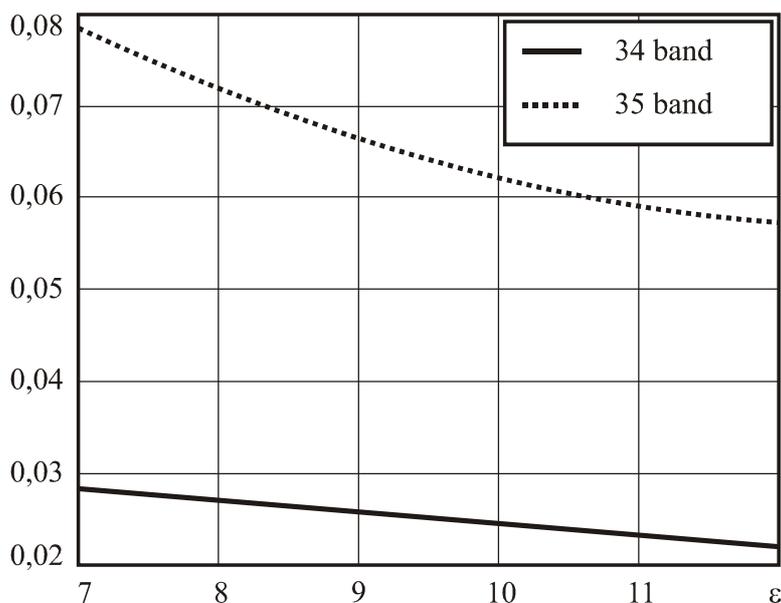


Рис. 4. Зависимость параметра изотропности  $F$  для зон 34 (сплошная линия) и 35 (пунктирная линия) от диэлектрической постоянной  $\epsilon$ . Фактор заполнения  $f=27\%$ .

### 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. Dyachenko<sup>1</sup>, N.D.Kundikova<sup>2</sup>, Yu.V. Miklyayev<sup>2</sup>, V.S. Pavelyev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Image Processing Systems Institute of the RAS, 443001, Samara, Russia

<sup>2</sup>College-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](mailto: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](mailto: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](mailto: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](mailto: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](mailto: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](mailto:pavelyev@smr.ru). Area of scientific interests: photon crystals, nonlinear optics.