

Трехмерный фотонный квазикристалл с полной запрещенной зоной

П. Н. Дьяченко¹⁾, Ю. В. Микляев, В. Е. Дмитриенко[†]

Южно-Уральский государственный университет, 454080 Челябинск, Россия

[†]Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова РАН, 119333 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 июня 2007 г.

На основе численного расчета найдена зонная структура трехмерных кубических аппроксимантов фотонного квазикристалла. Обнаружено, что аппроксиманты различных порядков имеют большие почти изотропные запрещенные зоны для широкого диапазона диэлектрической постоянной. Сделан вывод о наличии полной запрещенной зоны у трехмерного фотонного квазикристалла с шестимерной объемно-центрированной кубической решеткой.

PACS: 41.20.Jb, 42.70.Qs, 61.44.Br

Квазикристаллические структуры, обнаруженные в металлических сплавах в начале восьмидесятых, имеют точечные группы симметрии, несовместимые с периодичностью [1]. По сравнению с кристаллами они обладают более высокой вращательной симметрией, например икосаэдрической, декагональной и т.п. Это открытие в значительной мере изменило взгляды на роль аперидического упорядочения в физике конденсированного состояния [2] и стимулировало поиск физических свойств, характерных именно для аперидических структур. Наиболее сильно меняются электронные и фононные свойства, так как теорема Блоха неприменима. В результате структуры электронных зон и решеточные колебания квазикристаллов могут быть весьма экзотическими, и они остаются предметом обсуждения на протяжении многих лет, вплоть до последнего времени [3–5].

Аналогичные проблемы возникают и при рассмотрении взаимодействия фотонов с аперидическими диэлектрическими структурами. В них, как и в кристаллах, происходит брэгговская дифракция фотонов или, другими словами, возникновение *фотонных запрещенных зон* (ФЗЗ). В 1998 г. показано, что двумерные фотонные квазикристаллы могут обладать ФЗЗ [6], где распространение электромагнитного излучения определенной поляризации запрещено в любом направлении. Наличие полных ФЗЗ (для любого направления и любой поляризации излучения) у структур с периодически распределенным диэлектриком найдено Быковым в 1972 г. [7]. Позже, в работах Яблоновича [8] и Джона [9] данная идея получила развитие, а такие структуры стали называть фотонными кристаллами, хотя часто к фотон-

ным кристаллам относят и структуры с неполными ФЗЗ, например опалы [10]. Фотонные кристаллы могут иметь многочисленные практические применения [11, 12].

Возникновение полной ФЗЗ состоит в перекрытии брэгговских запрещенных зон (стоп-зон) во всех направлениях. При трехмерно-периодическом распределении диэлектрика различным направлениям соответствует различная периодичность и, соответственно, различная частота середины стоп-зон. Перекрытие стоп-зон можно обеспечить, с одной стороны, большим размером этих зон, то есть большей амплитудой соответствующих пространственных гармоник распределения диэлектрической проницаемости. Это достигается созданием решеток диэлектриков из материалов с высоким показателем преломления. В то же время, перекрытие стоп-зон легче обеспечить при более изотропной периодичности, то есть при форме зоны Бриллюэна, близкой к сферической [13]. Среди известных структур фотонных кристаллов наименьшим контрастом модуляции диэлектрической проницаемости, необходимым для возникновения запрещенной зоны, обладают решетки с симметрией алмаза.

Квазикристаллы имеют высокую вращательную симметрию, следовательно, их зонная структура может быть почти изотропной, и можно предположить, что такие структуры более предпочтительны для возникновения полных ФЗЗ. В работе [6] показано, что двумерные фотонные квазикристаллы с осью 8-го порядка имеют большие ФЗЗ для ТМ (магнитное поле в плоскости структуры) и ТЕ (электрическое поле в плоскости структуры) поляризаций. Кроме того, отмечено, что дефектные состояния в фотонных квазикристаллах более сложны и интерес-

¹⁾e-mail: dyachenko@dek-fiz.susu.ac.ru

ны с точки зрения возможности гибкой настройки параметров этого состояния. Там же указано на необходимость исследования трехмерных фотонных квазикристаллов. Первый двухмерный фотонный квазикристалл, обладающий двухмерной полной ФЗЗ, предложен в [14]. Экспериментально и теоретически в [14] показано, что такая структура имеет низкий порог ФЗЗ (минимальное значение диэлектрической постоянной материала решетки, при котором существует ФЗЗ). В работе [15] методом стереолитографии создан икосаэдрический трехмерный квазикристалл, который имеет большие стоп-зоны в некоторых направлениях для микроволнового диапазона. Для него были измерены коэффициенты пропускания микроволнового излучения, но теоретический анализ не был произведен. В недавних работах получены трехмерные фотонные квазикристаллы для инфракрасного [16] и видимого [17] диапазонов излучения, так что тема фотонных квазикристаллов приобретает все большую актуальность [18].

Фотонные квазикристаллы не имеют трансляционной симметрии, поэтому надежных методов расчета их оптических свойств пока не существует, и в любом случае они потребуют значительных вычислительных ресурсов. В частности, в этом случае затруднительно применить метод разложения по плоским волнам. Теоретический анализ двухмерных фотонных квазикристаллов был проведен в первой же работе [6], тогда как в трехмерном случае он не произведен до сих пор, несмотря на то, что такие структуры уже созданы экспериментально. Решением данной проблемы может стать исследование аппроксимантов фотонных квазикристаллов. В работе [19] показано, что почти изотропную ФЗЗ могут иметь двумерные аппроксиманты даже самых низких порядков, причем положение и размер ФЗЗ практически не зависят от порядка аппроксиманта. Авторами работы [20] показано, что аппроксиманты квазикристаллов высоких порядков имеют порог запрещенной зоны, равный порогу в квазикристаллах.

В настоящей работе рассматриваются два трехмерных аппроксиманта, $1/0$ и $1/1$, обладающих полной ФЗЗ. В работах [21, 22] показано, что реально существующая в кремнии и германии фаза $BC8$ и гипотетическая структура $BC32$ являются, соответственно, $1/0$ и $1/1$ аппроксимантами икосаэдрического квазикристалла с шестимерной объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой, так что координаты всех атомов могут быть получены проецированием шестимерной решетки. Аппроксимант $1/0$ содержит 8 атомов в примитивной ромбоэд-

рической ячейке ОЦК решетки, а $1/1$ аппроксимант – 32 атома, отсюда названия этих структур. Их примитивные ячейки содержат небольшое число атомов, что сильно уменьшает вычислительный объем задачи, так как позволяет удерживать сравнительно небольшое число плоских волн в решении. Подробное описание таких аппроксимантов можно найти в работах [21, 22]. Локальная атомная структура этих фаз похожа на структуру алмаза, а как раз для последней получен наиболее низкий порог образования полной ФЗЗ. Поэтому представляется разумным изучить фотонные аппроксиманты с похожей структурой. В нижеследующем рассмотрении не ставилась задача найти самые оптимальные распределения диэлектрика в аппроксимантах с точки зрения полной ФЗЗ, это потребовало бы нереального времени счета. Главное было показать, что полная ФЗЗ может существовать в технологически достижимых структурах, чтобы стимулировать их создание и дальнейшее изучение, экспериментальное и теоретическое.

Для каждого аппроксиманта исследовалось два типа узлов решетки: DR (dielectric rods) с диэлектрическими цилиндрами и AS (air spheres) с воздушными сферами. В первом типе структур диэлектрические цилиндры определенного радиуса соединяют положения соседних атомов в решетке. Такие структуры будут называться в дальнейшем $1/0DR$ и $1/1DR$. Второй тип представляет собой воздушные сферы, расположенные в диэлектрике, и соответствующие аппроксиманты будут обозначаться как $1/0AS$ и $1/1AS$. Для простоты будем рассматривать материал решетки как непоглощающий, немагнитный и изотропный. Чтобы найти собственные моды уравнений Максвелла с периодическими граничными условиями, использовался метод разложения поля по плоским волнам [23].

На рис.1 показана зонная структура аппроксиманта $1/0DR$ при значении диэлектрической постоянной $\epsilon = 12$ (соответствующей кремнию для ближнего инфракрасного диапазона длин волн) и найденном оптимальном факторе заполнения диэлектриком $f = 22.7\%$ (отношение объема диэлектрика в примитивной ячейке к объему самой ячейки, выраженное в процентах). Частота указана в безразмерных единицах $\omega a/2\pi c$, где ω – циклическая частота, a – размер кубической ячейки $1/0DR$, c – скорость света в вакууме. По горизонтали отмечены точки высокой симметрии зоны Бриллюэна ОЦК решетки (вставка на рис.1). Имеет место полная ФЗЗ размером $\Delta\omega/\omega_m = 17.6\%$ между 8 и 9 зонами, при факторе заполнения диэлектриком $f = 22.7\%$. При данном факторе заполнения диэлектриком отношение радиу-

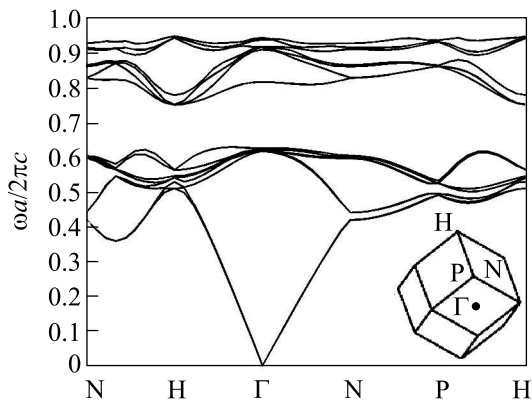


Рис.1. Зонная структура аппроксиманта 1/0DR. Фактор заполнения диэлектриком $f = 22.7\%$, а его диэлектрическая постоянная $\epsilon = 12$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m = 17.6\%$

са диэлектрических цилиндров к размеру примитивной ячейки $r/a = 0.09$. Под размером ФЗЗ $(i) - (i+1)$ понимается выражение

$$\Delta\omega/\omega_m = 2 \frac{\min(\omega_{i+1}) - \max(\omega_i)}{\min(\omega_{i+1}) + \max(\omega_i)} 100\%, \quad (1)$$

где $\min(\omega_{i+1})$ и $\max(\omega_i)$ – минимальная и максимальная частота для зон $(i+1)$ и (i) , соответственно. Размер ФЗЗ для 1/0AS получился равным $\Delta\omega/\omega_m = 11\%$ между 12 и 13 зонами при $\epsilon = 12$ и оптимальном факторе заполнения диэлектриком $f = 18.9\%$. Данный фактор заполнения диэлектриком получается при отношении радиуса воздушных шаров к размеру примитивной ячейки $r/a = 0.25$.

Перейдем к рассмотрению фотонных аппроксимантов квазикристаллов более высокого порядка. Структура 1/1AS при факторе заполнения диэлектриком $f \sim 22\%$ имеет несвязанную решетку диэлектрика, поэтому ее невозможно получить технически. Кроме того, 1/1AS не имеет полных ФЗЗ. Поэтому в дальнейшем ограничим рассмотрение структурой 1/1DR. Такие решетки проще получить экспериментально, что было продемонстрировано в работах [15, 16]. Зонная структура 1/1DR при $\epsilon = 12$ и оптимальном факторе заполнения диэлектриком $f = 23.8\%$ показана на рис.2. Так же, как и в случае с 1/0DR на рис.2, частота отмечена в безразмерных единицах, причем в обоих случаях a – размер кубической ячейки 1/0DR. Фактор заполнения диэлектриком $f = 23.8\%$ получается при $r/a = 0.095$. Размер полной ФЗЗ равен $\Delta\omega/\omega_m = 10.3\%$ и находится она между 32 и 33 зонами. Интересно, что оптимальный фактор заполнения почти одинаков в обоих аппроксимантах, тогда как размер полной ФЗЗ у 1/1DR оказался почти в два раза меньшим, чем

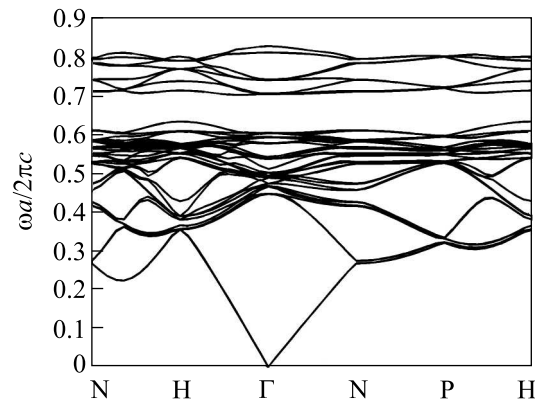


Рис.2. Зонная структура аппроксиманта 1/1DR. Диэлектрическая постоянная $\epsilon=12$, фактор заполнения диэлектриком $f = 23.8\%$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m = 10.3\%$

у 1/0DR. Это объясняется тем, что у 1/1DR фурье-гармоники пространственного распределения диэлектрической проницаемости имеют меньшую амплитуду, чем у 1/0DR, и необходима дальнейшая оптимизация структур.

Проанализируем теперь, каковы индексы рефлексов hkl , дающих полную ФЗЗ в 1/0DR. Из условия Брэгга для дифракции назад с учетом средней диэлектрической проницаемости имеем $K^2 = 4[1 + f(\epsilon - 1)](\omega/2\pi c)^2$, где $K^2 = h^2 + k^2 + l^2$. На рис.1 для центра зоны $\omega/2\pi c = 0.7$, откуда получаем $K^2 = 6.85$. Отсюда следует, что полная ФЗЗ образована, в основном, рефлексами типа 211 ($K^2 = 6$) и 220 ($K^2 = 8$). Однако в точке P (ось третьего порядка) запрещенная зона очень широкая, так что, наверное, дают вклад и рефлексы типа 222 ($K^2 = 12$). Чуть выше порога открытия полной ФЗЗ ($\epsilon = 6$, $f = 0.2966$) расчеты дают $\omega/2\pi c = 0.78$; следовательно, $K^2 = 6.04$, то есть получается, что ФЗЗ возникает за счет рефлексов 211 и 200, которые соответствуют в квазикристалле рефлексам, направленным вдоль осей второго порядка икосаэдра (таких рефлексов на сфере тридцать).

Посмотрим, что получается для 1/1DR, в которых условие Брэгга выглядит как $K^2 = 4[1 + f(\epsilon - 1)](\tau\omega/2\pi c)^2$, где $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ – золотое среднее. Если $\epsilon = 12$, $f = 0.2388$ и в середине зоны $\omega/2\pi c = 0.67$, то $K^2 = 17.05$. Теоретически, в этом аппроксиманте должны давать сильный вклад рефлексы 400 ($K^2 = 16$) и 321 ($K^2 = 14$), но, по-видимому, дают также вклад рефлексы 411 ($K^2 = 18$), которые не соответствуют никаким сильным рефлексам в квазикристаллах. При $\epsilon = 6$, $f = 0.3123$ и середина зоны 0.793 , так что $K^2 = 16.87$. В процентном отношении характерная величина K^2 меняется не столь сильно,

как в 1/0DR, при переходе от $\varepsilon = 6$ к $\varepsilon = 12$. Следует также отметить, что ФЗЗ у 1/1DR является более изотропной, чем у 1/0DR, вследствие того, что создающие ФЗЗ рефлексы имеют более близкие длины векторов обратной решетки. Данный факт является результатом того, что с повышением порядка аппроксиманта структура приближается к геометрии квазикристалла. Как можно заметить на рис.1,2, частотные диапазоны, в которых лежат ФЗЗ, перекрываются. В результате получается, что с увеличением порядка аппроксиманта сохраняется полная ФЗЗ, следовательно, ею будет обладать и соответствующий квазикристалл [19, 20].

На рис.3 представлена зависимость размера запрещенной зоны от диэлектрической постоянной.

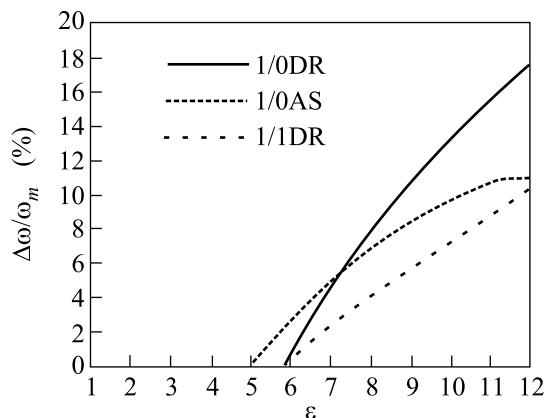


Рис.3. Зависимость размера полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m$ от диэлектрической постоянной ε

Для каждого значения диэлектрической постоянной определялся оптимальный фактор заполнения диэлектриком, при котором полная ФЗЗ имеет максимальный размер. Порог возникновения ФЗЗ по диэлектрической постоянной получился равным $\varepsilon_{th} = 5$, $\varepsilon_{th} = 5.8$, $\varepsilon_{th} = 5.8$ для 1/0AS, 1/0DR, 1/1DR, соответственно. Порог ФЗЗ 1/0DR и 1/1DR получился практически одинаковым, следовательно при дальнейшем увеличении порядка аппроксимантов мы получим такое же значение порога или немного меньшее [20]. В принципе, возможно конструирование аппроксимантов с другими наборами сильных рефлексов, которые будут иметь более низкие пороги образования полной ФЗЗ.

Итак, на основе численного моделирования получена зонная структура трехмерных аппроксимантов фотонных квазикристаллов. Найдено, что такие структуры имеют большие изотропные запрещенные

зоны для широкого диапазона величины диэлектрической постоянной материала решетки. Сделан вывод о наличии полной ФЗЗ у трехмерного фотонного квазикристалла с шестимерной ОЦК решеткой.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований # 07-02-96025-р-урал-а и # 05-02-16763.

1. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias et al., Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
2. E. Maciá, Rep. Prog. Phys. **69**, 397 (2006).
3. M. Quilichini and T. Janssen, Rev. Mod. Phys. **69**, 277 (1997).
4. Yu. Kh. Vekilov, E. I. Isaev, and S. F. Arslanov, Phys. Rev. B **62**, 14040 (2000).
5. M. Krajci and J. Hafner, Phys. Rev. B **75**, 024116 (2007).
6. Y. S. Chan, C. T. Chan, and Z. Y. Liu, Phys. Rev. Lett. **80**, 956 (1998).
7. В. П. Быков, ЖЭТФ **62**, 505 (1972).
8. Y. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
9. S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
10. В. Н. Богомолов, Д. А. Курдюков, А. В. Прокофьев и др., Письма в ЖЭТФ **63**, 496 (1996).
11. S. J. Johnson and J. D. Joannopoulos, *Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice*, Kluwer Academic Publishers, London, 2003.
12. А. М. Желтиков, УФН **174**, 73 (2004).
13. J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, Princeton University Press, Singapore, 1999.
14. M. E. Zoorob, M. D. B. Charlton, G. J. Parker et al., Nature **404**, 740 (2000).
15. W. Man, M. Megens, P. J. Steinhardt et al., Nature **436**, 993 (2005).
16. A. Lidermann, L. Cademartiri, M. Hermatschweiler et al., Nature Mater. **5**, 942 (2006).
17. J. Xu, R. Ma, X. Wang et al., Opt. Express **15**, 4287 (2007).
18. M. Peach, Materials Today **9**, n 7-8, 44 (2006).
19. K. Wang, S. David, A. Chelnokov et al., J. Mod. Opt. **50**, 2095 (2003).
20. P. N. Dyachenko and Yu. V. Miklyaev, Proc. of SPIE **6182**, 61822I (2006).
21. V. E. Dmitrienko and M. Kleman, Philos. Mag. Lett. **79**, 359 (1999).
22. V. E. Dmitrienko, M. Kleman, and F. Mauri, Phys. Rev. B **60**, 9383 (1999).
23. S. G. Johnson and J. D. Joannopoulos, Opt. Express **8**, 173 (2001).