Дифракционный механизм зеркального отражения света от фотонных кристаллов

А.Н. Поддубный

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: poddubny@coherent.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 17 мая 2006 г.)

Теоретически исследуются спектры зеркального отражения и дифракции света, а также экситон-поляритонная зонная структура резонансного двумерного фотонного кристалла, образованного полупроводниковыми цилиндрами, помещенными в диэлектрическую матрицу. Показано, что зеркальное отражение света от фотонного кристалла может значительно возрасти за счет дифракции в фотонном кристалле и отражения от его внутренней границы с вакуумом.

Работа поддержана Министерством науки и образования РФ, РФФИ (грант № 05-02-16372) и Фондом некоммерческих программ „Династия“–МЦФФМ.

PACS: 71.35.-y, 71.36.+c, 42.70.Qs

1. Введение

Фотонные кристаллы, т. е. структуры в которых диэлектрическая проницаемость периодически изменяется в пространстве с периодом, допускающим брэгговскую дифракцию света, были выделены в отдельный класс материалов в работах [1,2] и активно изучаются в настоящее время. Простейшей реализацией фотонного кристалла является периодическая структура, состоящая из двух материалов A и B с различными диэлектрическими проницаемостями ε_A и ε_B. Особый интерес представляют резонансные фотонные кристаллы, в которых диэлектрическая проницаемость одного из композиционных материалов зависит от частоты и имеет полюс на некоторой резонансной частоте.

В зависимости от числа направлений, в которых периодична диэлектрическая проницаемость, выделяют одномерные, двумерные и трехмерные фотонные кристаллы. В работе [3] исследовались зонная структура и оптические спектры резонансного двумерного фотонного кристалла с учетом частотной зависимости диэлектрической проницаемости в рамках локальной материальной связи $\mathbf{D} = \varepsilon_A(\omega)\mathbf{E}$ между электрической индукцией и электрическим полем. В работе [4] изучены спектры отражения от одномерной решетки прямоугольных параллелепипедов с учетом экситонного резонанса. Спектры оптического отражения от резонансного трехмерного фотонного кристалла с учетом только одного уровня размерного квантования механического экситона в шарике A в пренебрежении диэлектрическим контрастом анализировались в работе [5].

Целью настоящей работы является исследование зеркального отражения и дифракции света для двумерного фотонного кристалла. Расчет производится с учетом пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости материала A и диэлектрического контраста, определяемого различием между ε_B и фоновой диэлектрической проницаемостью материала цилиндров. Также рассчитывается дисперсия экситонных поляритонов и результаты работы [6] обобщаются на случай двумерных фотонных кристаллов. В разделе 3 исследуются спектры оптического отражения в случае малых дифракционных эффектов. В разделе 4 рассматривается дифракция света на фотонном кристалле. Показано, что дифракционные эффекты могут приводить к значительному увеличению зеркального отражения света.

2. Постановка задачи и метод расчета

В данной работе рассчитываются оптические спектры для двумерного фотонного кристалла, схематически показанного на рис. 1, *a*. Фотонный кристалл образован цилиндрами радиуса R, параллельными оси z и расположенными в узлах двумерной квадратной решетки с постоянной решетки a. Цилиндры помещены в диэлектрическую матрицу из материала B. Так же как и в работе [6], в диэлектрической проницаемости материала цилиндров ε_A учитывается как временна́я, так и пространственная дисперсия; материал A характеризуется фоновой диэлектрической проницаемостью ε_a, резонансной частотой ω_0 и продольно-поперечным расщеплением ω_{LT} триплетного 1s-экситона. Для простоты рассматривается геометрия распространения экситонных поляритонов в плоскости xy, перпендикулярно осям цилиндров. Введем энергию возбуждения экситона на нижний уровень размерного квантования в цилиндрах A

$$\hbar\omega_{1,0} = \hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2MR^2}\varphi_{1,0}^2, \quad (1)$$

где $\varphi_{1,0} \approx 2.4$ — первый нуль функции Бесселя $J_0(\varphi)$.

Спектры оптического отражения и дифракция света рассчитываются для структуры, состоящей из N слоев цилиндров, лежащих в плоскости yz. Слои считаются бесконечными в направлении y. Слева структура ограничена материалом с диэлектрической проницаемостью ε_L, справа — полубесконечной средой из материала B. Левая граница фотонного кристалла расположена в плоскости $x = 0$, а центры цилиндров крайнего левого слоя — в плоскости $x = a/2$.

В рассматриваемой геометрии выделяются две независимые поляризации электромагнитной волны: TE и TM, при которых вдоль оси z направлены соответственно электрическое поле $\mathbf{E}$ и магнитное поле $\mathbf{H}$. В дальнейшем рассматривается только TE-поляризация. Для указания компонент векторов $\mathbf{v}$, лежащих в плоскости xy, будем использовать двухкомпонентное обозначение (v_x, v_y). В частности, волновой вектор $\mathbf{q}$ первичной волны, распространяющейся в среде L, обозначается (q_x, q_y). Далее рассматривается случай нормального падения, т. е. $q_y = 0$. Электрическое поле в области $x < 0$ может быть разложено в ряд по плоским волнам

$$E_z(\boldsymbol{\rho}) \propto e^{iq_x x} + \sum_{h=-\infty}^{\infty} r_h e^{-i\gamma_h x + ib_h y}, \qquad (2)$$

где $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$, $b_h = gh$, $g = 2\pi/a$ и $\gamma_h = \sqrt{(\omega/c)^2\varepsilon_L - b_h^2}$, $\gamma_0 \equiv q_x$, причем $\operatorname{Re}\gamma_h \geq 0$. Величина $R_0 = |r_0|^2$ определяет интенсивность зеркально отраженного света, величины $R_h = |r_h|^2$ с $h \neq 0$ определяют интенсивность света, дифрагированного в направлении вектора $(-\gamma_h, b_h)$. Распространяющимся в области $x < 0$ волнам отвечают значения h, при которых $\operatorname{Im}\gamma_h = 0$. В настоящей работе рассматривались случаи, когда среда L — вакуум $(\varepsilon_L = 1)$ или продолжение материала B $(\varepsilon_L = \varepsilon_B)$. Величины R_h и γ_h при этих значениях ε_L будем помечать дополнительными индексами V и B соответственно.

Для расчета зависимостей $R_h(\omega)$ использовался двумерный послойный метод Корринги–Кона–Ростокера (ККР, layer KKR method) [7]. Особенностью этого метода является то, что взаимодействие света с каждым слоем цилиндров описывается в базисе цилиндрических волн, а для описания распространения электромагнитного поля между соседними слоями цилиндров используется базис плоских волн. Для нахождения дисперсии экситонных поляритонов $\omega(\mathbf{k})$ использовался двумерный объемный метод ККР (bulk KKR method) [8].

Волновое уравнение для электрического поля в области $0 < x < Nd$ может быть записано в виде

$$\left[\Delta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_M\right] E_z(\boldsymbol{\rho}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 [\varepsilon_M - \varepsilon(\boldsymbol{\rho})] E_z(\boldsymbol{\rho}) - 4\pi\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 P_{\text{exc}}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3)$$

где введена средняя фоновая диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon_M = \varepsilon_B(1 - f) + \varepsilon_a f, \qquad f = \pi R^2/a^2.$$

Для экситонной поляризации использовалось материальное уравнение в виде

$$\left[-\hbar/(2M)\Delta + \omega_0 - \omega\right] P_{\text{exc}}(\boldsymbol{\rho}) = \varepsilon_a \omega_{LT} E_z(\boldsymbol{\rho})/(4\pi). \quad (4)$$

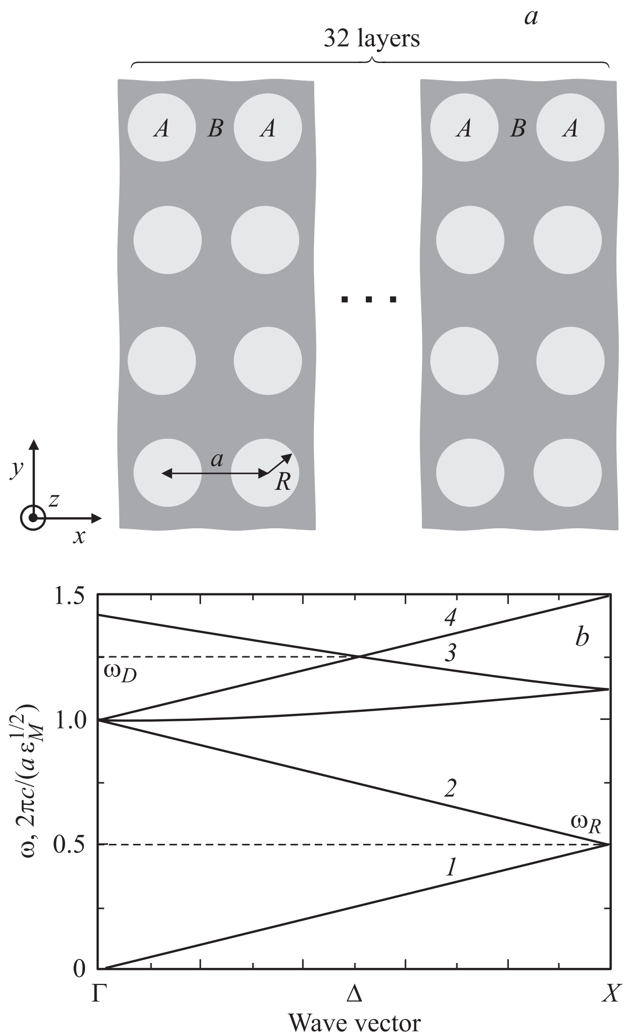

Рис. 1. *a*) Схематическое изображение рассматриваемой структуры, указаны постоянная квадратной решетки a и радиус цилиндров R. *b*) Дисперсия света в однородной среде в схеме приведенных зон двумерной квадратной решетки. Зонная структура показана в направлении $\Gamma{-}X$ зоны Бриллюэна.

Решениями уравнения (3) при нулевой правой части являются плоские волны, распространяющиеся в однородной среде с диэлектрической проницаемостью ε_M, а слагаемые в правой части приводят к дифракции этих волн. При нормальном падении света $k_y = k_z = 0$, и внутри структуры возбуждаются блоховские волны с волновым вектором $\mathbf{k}$ в направлении $\Gamma{-}X$ двумерной зоны Бриллюэна. На рис. 1, b представлена фотонная зонная структура в направлении $\Gamma{-}X$ в однородной среде с диэлектрической проницаемостью ε_M, т. е. при $\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_M$. Учет диэлектрического контраста $\varepsilon_a \neq \varepsilon_B$, а также экситонного вклада в диэлектрическую проницаемость приводит к образованию запрещенных зон (или стоп-зон). Резонансные свойства фотонного кристалла проявляются в том случае, если частота $\omega_{1,0}$ лежит вблизи частоты, при которой происходит пересечение ветвей дисперсионной кривой фотонов в однородной

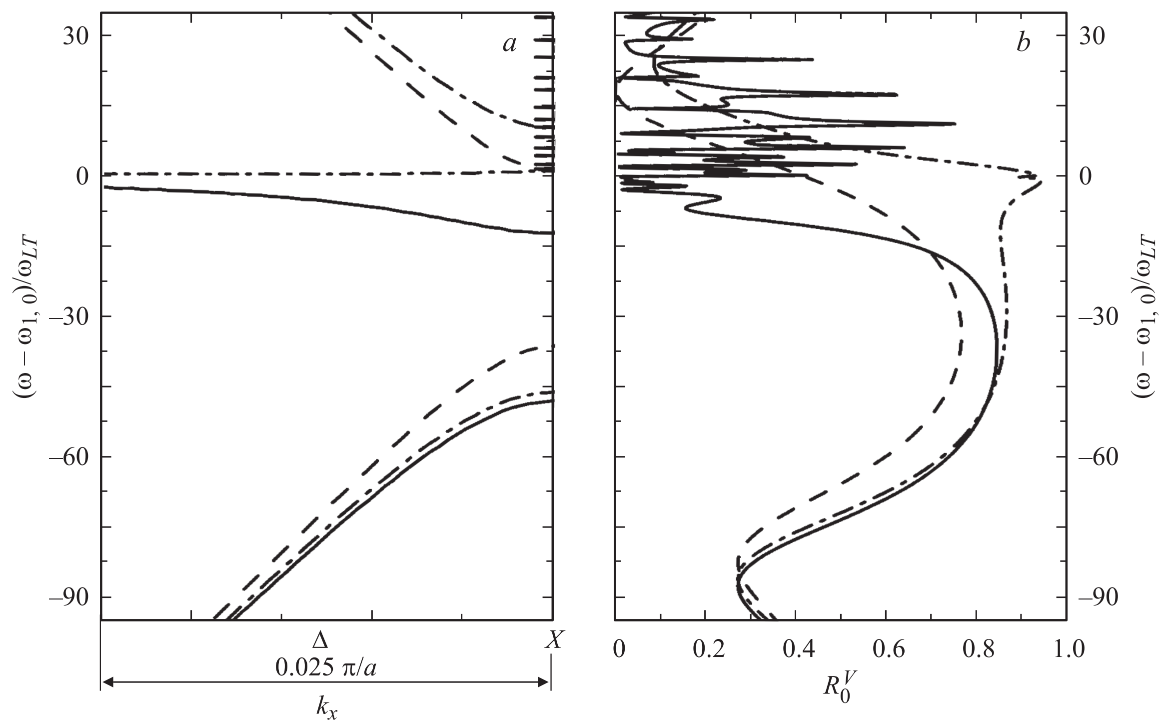

Рис. 2. Экситон-поляритонная зонная структура (*a*) и спектры оптического отражения света (*b*). Штриховые кривые соответствуют нерезонансному фотонному кристаллу с $\omega_{LT} = 0$, штрихпунктирные — расчет в пределе $M \to 0$, сплошные кривые и горизонтальные штрихи на части *a* — расчет при конечной массе экситона $M = 0.5m_0$, где m_0 — масса электрона в вакууме. Значения остальных параметров указаны в тексте.

среде. В разделе 3 рассмотрен случай, когда $\omega_{1,0}$ равняется частоте $\omega_R = \pi c/(a\sqrt{\varepsilon_M})$, а в разделе 4 — случай, когда $\omega_{1,0}$ равняется $\omega_D = 5\pi c/(2a\sqrt{\varepsilon_M})$ (положения частот ω_R и ω_D указаны на рис. 1, *b*).

3. Оптическое отражение от фотонного кристалла

На рис. 2 представлена зонная структура фотонного кристалла вблизи точки X и спектры оптического отражения $R_0^V(\omega)$. Для случая конечной эффективной массы экситона на рис. 2, *a* показаны две нижние ветви дисперсионной кривой и горизонтальными штрихами отмечены значения частот, при которых вышележащие ветви пересекают ось X. Расчет проводился при следующих параметрах: $\hbar\omega_{1,0} = 2\,\text{eV}$, $\hbar\omega_{LT} = 1\,\mu\text{eV}$, $R = 0.35a$, $\omega_R = \omega_{1,0}$, $\varepsilon_a = 11$, $\varepsilon_B = 10$, $N = 32$. В спектрах отражения учитывалось нерадиационное затухание экситона $\hbar\Gamma = 100\,\mu\text{eV}$, для чего достаточно заменить в уравнении (4) ω_0 на $\omega_0 - i\Gamma$. При изменении эффективной массы M менялась и резонансная частота ω_0 так, чтобы значение $\omega_{1,0}$ в (1) оставалось постоянным. Полученные дисперсионные кривые для экситонных поляритонов в двумерной квадратной решетке аналогичны рассчитанным для ГЦК-решетки [6]. Расчет показывает, что спектральное положение нижних ветвей поляритонной дисперсии монотонно зависит от эффективной массы и определяется взаимодействием света с несколькими первыми уровнями размерного квантования механического экситона.

Интерференция световых волн, отраженных от внешней границы вакуум–фотонный кристалл, и волн, отраженных от цилиндров, приводит к тому, что спектральное положение максимума в спектрах $R_0(\omega)$ смещается от середины стоп-зоны к ее нижнему краю. Вдали от области экситонного резонанса $R_0(\omega)$ близок к коэффициенту отражения от полубесконечного материала B

$$R_{vb} = \left(\frac{\gamma_0^V - \gamma_0^B}{\gamma_0^V + \gamma_0^B}\right)^2 \approx 0.27.$$

В области $\omega > \omega_{1,0}$ в спектре, рассчитанном при $M = 0.5m_0$, присутствуют резкие максимумы на частотах, близких к собственным частотам экситонных поляритонов ω при $k_x = \pi/a$ (указаны штрихами на рис. 2, *a*).

Внутри фотонного кристалла, но вне цилиндров электромагнитное поле может быть разложено в ряд по плоским волнам $\propto e^{\pm i\gamma_h^B x + i b_h y}$. При использованных параметрах все величины γ_h^V и γ_h^B с $h \neq 0$ являются чисто мнимыми. Это означает, что влияние дифракционных эффектов мало, поскольку волны с $h \neq 0$ экспоненциально затухают между слоями цилиндров. Следовательно, неоднородность системы в направлении y проявляется слабо. В пределе $M \to 0$, что эквивалентно учету только

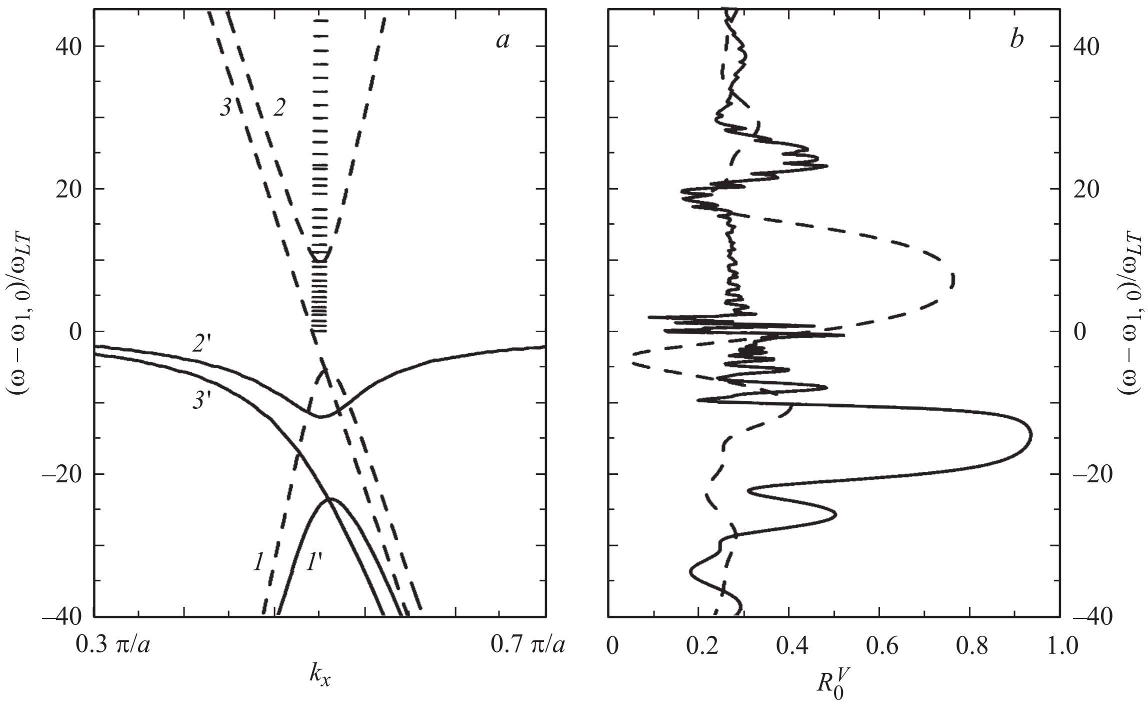

Рис. 3. Экситон-поляритонная зонная структура (a) и спектры оптического отражения света $R_0^V(\omega)$ (b). Штриховые кривые соответствуют нерезонансному фотонному кристаллу с $\omega_{LT}=0$, сплошные кривые и горизонтальные штрихи на части a — расчет при конечной массе экситона $M=0.5m_0$. Расчет выполнялся при $\omega_D=\omega_{1,0}$ и тех же значениях остальных параметров, что и для рис. 2.

одного уровня размерного квантования механического экситона в цилиндрах A [6], оптические свойства двумерного фотонного кристалла близки к оптическим свойствам резонансной квазибрэгговской структуры с квантовыми ямами [9]. Спектр отражения практически не зависит от поляризации падающей волны, поскольку для структуры, однородной в плоскости yz, при нормальном падении света TE- и TM-поляризации эквивалентны.

4. Дифракционный механизм зеркального отражения света

В этом разделе рассматриваются дифракция света на фотонном кристалле и влияние дифракционных эффектов на зеркальное отражение. В схеме расширенных зон ветвям дисперсионной кривой *3* и *4* на рис. 1, b соответствуют волновые векторы $\mathbf{Q}_3^{\pm 1}=(k_x-g,\pm g)$ и $\mathbf{Q}_4=(k_x+g,0)$. Ветви описываются уравнениями $\omega_{3,4}(k_x)=cQ_{3,4}(k_x)/\sqrt{\varepsilon_M}$ и пересекаются в точке с $\omega=\omega_D$ и $k_x=g/4$. Исследуется случай, когда частота экситонного резонанса $\omega_{1,0}$ равняется частоте ω_D. В этом случае брэгговская дифракция внутри кристалла происходит на векторы обратной решетки

$$\mathbf{b}_{\pm 1}=\mathbf{Q}_3^{\pm 1}-\mathbf{Q}_4=(-2g,\pm g).$$

На рис. 3 представлены зонная структура и спектры оптического отражения света $R_0^V(\omega)$. На рис. 3, a аналогично рис. 2, a горизонтальными штрихами указаны положения высокоэнергетических ветвей поляритонной дисперсии $\omega(g/4)$ при $M=0.5m_0$. Видно, что диэлектрический контраст и экситонный резонанс приводят к расщеплению спектра, показанного на рис. 1, b. Коэффициент отражения R_1^V максимален в середине запрещенных зон, а вдали от них стремится к значению R_{vb}. Падающая на систему волна не взаимодействует с решениями, соответствующими ветвям *3* и *3'* дисперсионной кривой. Анализ показывает, что этим ветвям отвечают нечетные относительно оси y блоховские решения, которые не возбуждаются при нормальном падении света на кристалл. Отметим, что, как и при расчете рис. 2, все величины γ_h^V с $h\neq 0$ являются чисто мнимыми, и наклонное распространение света в вакууме невозможно. Однако значения γ_0^B и $\gamma_{\pm 1}^B$ вещественны, что означает возможность проявления дифракционных эффектов внутри кристалла.

Проанализируем дифракцию света на фотонном кристалле качественно. При нормальном падении на кристалл электромагнитной волны в область $x>0$ проходит волна с волновым вектором $\mathbf{q}_0=(\sqrt{\varepsilon_M}\omega/c,0)$. Введем $\mathbf{q}'=-\mathbf{q}_0$ — волновой вектор зеркально отраженной волны при $0<x<Nd$. Для удобства изложения далее будем рассматривать рассеяние на частоте $\omega=\omega_D$, при которой $q_0=5g/4$. Разность волновых векторов падающего и отраженного света $\mathbf{q}'_0-\mathbf{q}_0=(-5g/2,0)$ не равна вектору двумерной обратной решетки; следовательно, не выполняется брэгговское условие. При этом, как следует

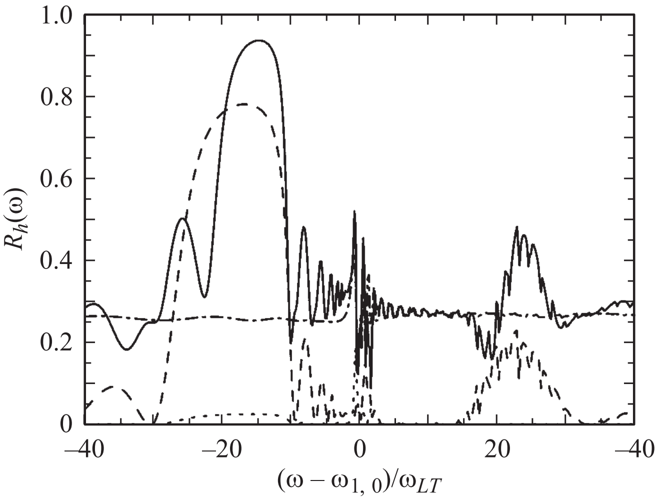

Рис. 4. Спектры отражения и дифракции света от резонансного фотонного кристалла. Сплошная, штриховая и пунктирная кривые — зависимости $R_0^V(\omega)$, $R_1^B(\omega)$ и $R_0^B(\omega)$ соответственно. Штрихпунктирная кривая — расчет $R_0^V(\omega)$ в пренебрежении зависимостью поля внутри структуры от координаты y. Значения параметров те же, что и при расчете рис. 3.

из рис. 2, *b*, в спектре отраженного света $R_0^V(\omega)$ наблюдается дифракционный максимум. Значение коэффициента отражения в вакуум существенно превосходит значение коэффициента отражения в материал B, показанного пунктирной кривой на рис. 4. Далее предлагается объяснение этого эффекта.

На частоте ω_D возможна брэгговская дифракция падающей на структуру волны, и волновые векторы дифрагированных волн равняются $\mathbf{q}_{\pm1}=\mathbf{q}_0\pm\mathbf{b}_{\pm1}$. При использованных в расчете параметрах эти волны распространяются под углом примерно 53° к оси x. В случае $\varepsilon_L=\varepsilon_B$, поскольку ε_M близка к ε_B, дифрагированные волны почти не преломляются при пересечении плоскости $x=0$ и их волновые векторы вне кристалла равняются $(-\gamma_1^B,\pm g)$. Таким образом, в зависимости $R_1^B(\omega)=R_{-1}^B(\omega)$ наблюдается дифракционный максимум, что подтверждается результатами численного расчета (штриховая кривая на рис. 4). При отражении в вакуум ($\varepsilon_L=1$) распространение дифрагированных волн вне кристалла невозможно; следовательно происходит их полное внутреннее отражение на его границе. Волновые векторы отраженных волн $\mathbf{q}_{\pm1}^R$ равняются $(-\gamma_1^M+2g,\pm g)$. Поскольку выполняется равенство $\mathbf{q}_{\pm1}^R+\mathbf{b}_{\mp}=\mathbf{q}_0'$, отраженные волны дифрагируют повторно и образуется результирующая волна с волновым вектором $\mathbf{q}_0'=-\mathbf{q}_0$. Эта волна распространяется в направлении, противоположном оси x, и не преломляется на границе кристалла. Следовательно, в случае $\varepsilon_L=1$ вместо дифракции света происходит зеркальное отражение, что подтверждается близостью положений максимумов зависимостей $R_0^V(\omega)$ и $R_1^B(\omega)$.

Несмотря на то что векторы падающего и отраженного света параллельны оси x, неодномерность задачи является существенной. Штрихпунктирная кривая на рис. 4 показывает результаты расчета спектра $R_0^V(\omega)$ в пренебрежении зависимостью поля внутри кристалла от координаты y. Для этого в разложении поля по плоским волнам между слоями цилиндров учитывались только волны с волновыми векторами $(\pm\gamma_0^B,0)$. Видно, что дифракционный максимум в спектре отсутствует.

Таким образом, дано качественное объяснение увеличению коэффициента зеркального отражения света при отражении в вакуум по сравнению с отражением в материал B. Выполнен численный расчет спектров отражения и дифракции в пределе $M\to0$ методом плоских волн с учетом векторов обратной решетки $(\pm g,0)$ и $\mathbf{b}_{\pm1}$. Результаты расчета зависимостей $R_0^V(\omega)$ и $R_1^B(\omega)$ методом ККР описаны с удовлетворительной точностью, однако для описания зависимости $R_1^B(\omega)$ необходимо учитывать дополнительные плоские волны. Это связано с тем, что, поскольку $|\varepsilon_M-\varepsilon_B|\ll\varepsilon_B,\varepsilon_M$, коэффициент отражения дифрагированных волн с $\mathbf{b}_{\pm1}$ на границе структуры мал и вклад в коэффициент зеркального отражения от этих волн становится сравнимым с вкладом от остальных плоских волн.

При промежуточных значениях ε_L, таких что $\varepsilon_L<\varepsilon_B$, но $\operatorname{Im}\gamma_1^L=0$, дифракционные максимумы присутствуют как в спектрах $R_1(\omega)$, так и в спектрах $R_0(\omega)$, т.е. наблюдаются и дифракция, и зеркальное отражение. Величина $R_0(\omega)$ возрастает с увеличением разности ε_B и ε_L.

5. Заключение

В настоящей работе исследованы зонная структура и спектры отражения и дифракции света для двумерного резонансного фотонного кристалла, состоящего из цилиндров A, расположенных в узлах квадратной решетки и помещенных в матрицу B. Расчет выполнен с учетом как временно́й, так и пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости ε_A и диэлектрического контраста $\varepsilon_a\neq\varepsilon_B$. Результаты работы [6] обобщены на случай двумерного фотонного кристалла. При $\omega_{1,0}=\omega_R$ спектры отражения качественно близки к спектрам отражения от одномерных фотонных кристаллов — резонансных квазибрэгговских структур с квантовыми ямами.

При $\omega_{1,0}=\omega_D$ дифракционные эффекты являются существенными. Показано, что дифракция света внутри фотонного кристалла и отражение от его внутренней границы могут приводить к значительному увеличению коэффициента зеркального отражения света. Этот механизм эффективен при большом различии диэлектрических проницаемостей ε_L и ε_B.

Автор благодарен Е.Л. Ивченко за постановку и полезное обсуждение задачи.

Список литературы

[1] E. Yablonovitch. Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
[2] S. John. Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
[3] K.C. Huang, E. Lidorikis, X. Jiang, J.D. Joannopoulos, K.A. Nelson, P. Bienstman, S. Fan. Phys. Rev. B **69**, 195 111 (2004).
[4] L. Pilozzi, A. D'Andrea, H. Fenniche. Phys. Rev. B **64**, 235 319 (2001).
[5] E.L. Ivchenko, Y. Fu, M. Willander. ФТТ **42**, 1707 (2000).
[6] Е.Л. Ивченко, А.Н. Поддубный. ФТТ **48**, 540 (2006).
[7] Kazuo Ohtaka, Tsuyoshi Ueta, Katsuki Amemiya. Phys. Rev. B **57**, 2550 (1997).
[8] K.M. Leung, Y. Qiu. Phys. Rev. B **48**, 7767 (1993).
[9] Е.Л. Ивченко, В.П. Кочерешко, А.В. Платонов, Д.Р. Яковлев, А. Вааг, В. Оссау, Г. Ландвер. ФТТ **39**, 2072 (1997).