

# Резонансные трехмерные фотонные кристаллы

© Е.Л. Ивченко, А.Н. Поддубный

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

(Поступила в Редакцию 24 мая 2005 г.)

Развита теория экситон-поляритонной зонной структуры резонансного трехмерного фотонного кристалла при произвольном диэлектрическом контрасте и произвольной эффективной массе экситона, который возбуждается в одном из композиционных материалов. Расчет проводился для периодического массива полупроводниковых шариков, помещенных в диэлектрическую матрицу. Показано, что положение нижних ветвей поляритонной дисперсии монотонно зависит от экситонной эффективной массы и определяется взаимодействием света с первыми несколькими состояниями механического экситона, размерно квантованного внутри каждого шарика. Рассмотрено влияние экситонных состояний на запрещенную зону фотонного кристалла в направлении [001], допускающее аналитическое описание в рамках двухволнового приближения.

Работа поддержана Министерством науки и образования РФ и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-02-16372).

PACS: 42.70.Qs, 71.35.-y

## 1. Введение

Фотонными кристаллами принято называть среды, у которых диэлектрическая проницаемость периодически меняется в пространстве с периодом, допускающим брэгговскую дифракцию света. Концепция фотонного кристалла была сформулирована Яблонвичем [1] и Джоном [2]. Теория фотонных кристаллов разрабатывалась в большом числе последующих работ, см. например [3–7]. Главная цель исследований — определение фотонной зонной структуры и анализ разрешенных и запрещенных минизон при различных направлениях волнового вектора в первой зоне Бриллюэна. Простейшей реализацией фотонного кристалла является структура, состоящая из двух материалов  $A$  и  $B$  с разными диэлектрическими постоянными  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$ : периодическая слоистая среда  $\dots A/B/A/B \dots$  в случае *одномерных* фотонных кристаллов и периодические массивы цилиндров или шариков из материала  $A$ , помещенные в диэлектрическую матрицу  $B$ , в *двумерных* и *трехмерных* фотонных кристаллах соответственно. Периодические структуры, в которых диэлектрическая проницаемость одного из двух композиционных материалов как функция частоты  $\omega$  имеет полюс на некоторой резонансной частоте, удобно выделить в особый класс резонансных фотонных кристаллов, в которых нормальными световыми волнами являются поляритоны. В [8,9] расчет дисперсии световых волн в фотонных кристаллах проводился 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 [10] дисперсия экситонных поляритонов в резонансном фотонном кристалле рассчитывалась с учетом только одного размерно-квантованного уровня механического экситона в шарике  $A$  и в пренебрежении различием между диэлектрической проницаемостью матрицы  $\varepsilon_B$  и фоновой диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_a$  в материале  $A$ . В настоящей ра-

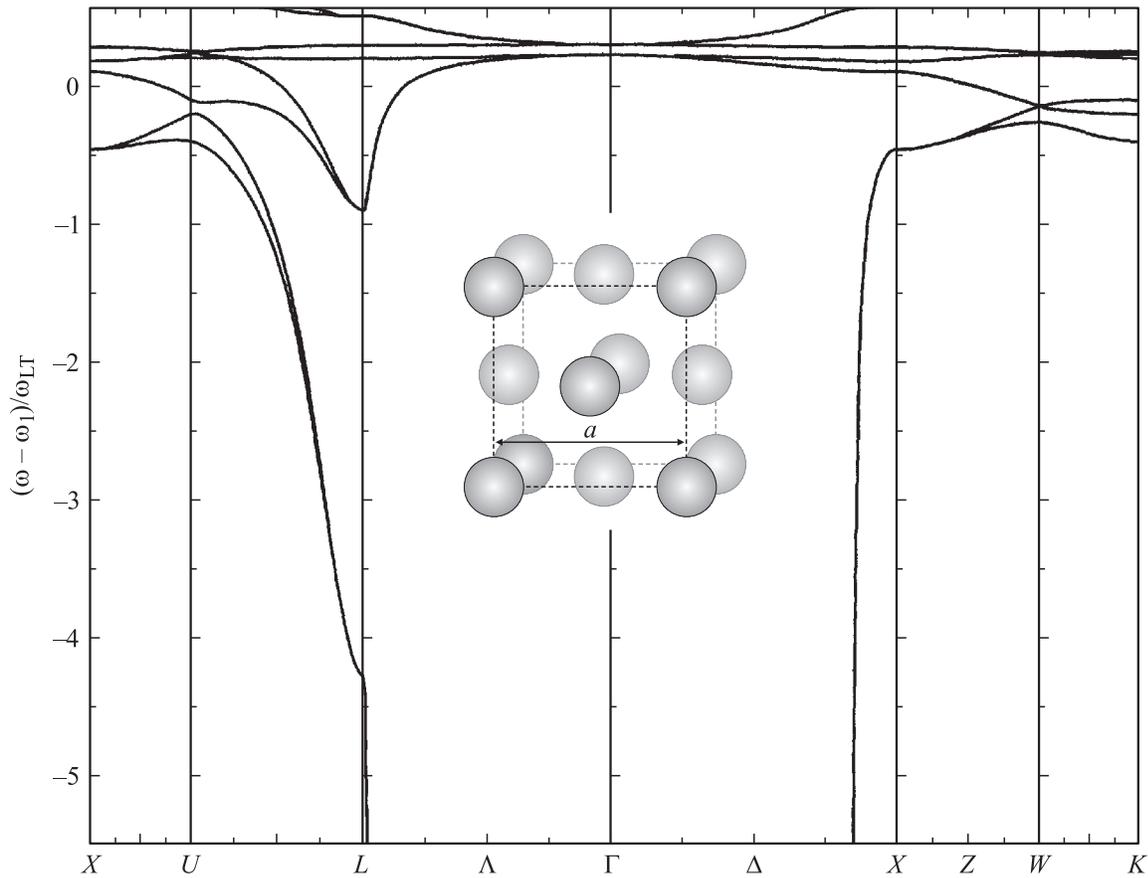
боте теоретически исследована дисперсия экситонных поляритонов в резонансном фотонном кристалле при учете всех возможных уровней размерного квантования экситона и при наличии диэлектрического контраста, т. е. при  $\varepsilon_a \neq \varepsilon_B$ .

## 2. Постановка задачи и метод расчета

В настоящей работе теория зонной структуры резонансных фотонных кристаллов строится на примере периодического массива шариков из материала  $A$ , упакованных в гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку и помещенных в матрицу из материала  $B$ . Рассматриваемая структура характеризуется семью параметрами:  $R$ ,  $a$ ,  $\varepsilon_B$ ,  $\varepsilon_a$ ,  $\omega_{LT}$ ,  $\omega_0$  и  $M$ . Здесь  $R$  — радиус шариков;  $a$  — постоянная ГЦК решетки (вставка на рис. 1);  $\varepsilon_B$  — диэлектрическая проницаемость матрицы;  $\omega_0$ ,  $\omega_{LT}$  и  $M$  — резонансная частота, продольно-поперечное расщепление и трансляционная эффективная масса триплетного  $1s$ -экситона, возбуждаемого в шариках  $A$  соответственно;  $\varepsilon_a$  — фоновая диэлектрическая проницаемость, учитывающая вклад в диэлектрический отклик всех остальных электронно-дырочных возбуждений. Таким образом, в диэлектрической проницаемости объемного материала  $A$

$$\varepsilon_A(\omega, \mathbf{q}) = \varepsilon_a + \frac{\varepsilon_a \omega_{LT}}{\omega_{\text{exc}}(\mathbf{q}) - \omega}, \quad \omega_{\text{exc}}(\mathbf{q}) = \omega_0 + \frac{\hbar \mathbf{q}^2}{2M} \quad (1)$$

учитывается как частотная, так и пространственная дисперсия, т. е. зависимость и от частоты света  $\omega$ , и от его волнового вектора  $\mathbf{q}$ . Радиус  $R$  выбирается так, чтобы, с одной стороны, шарики не перекрывались, т. е.  $R < a/\sqrt{8}$ , но, с другой стороны, чтобы их радиус превышал боровский радиус  $1s$ -экситона в материале  $A$  и экситон можно было рассматривать как точечную частицу массы  $M$ . Частотной зависимостью параметров  $\varepsilon_B$  и  $\varepsilon_a$  пренебрегается. Кроме того, мы считаем



**Рис. 1.** Экситон-поляритонная зонная структура резонансного фотонного кристалла, в котором ГЦК решетка из шариков  $A$  помещена в матрицу  $B$ . Расчет проводился в пренебрежении диэлектрическим контрастом и при значениях параметров, указанных в тексте. На вставке в центре рисунка схематически показана ГЦК решетка из шариков  $A$  радиуса  $R$  с постоянной решетки  $a$ .

материал  $A$  изотропным и учитываем в дальнейшем только  $1s$ -экситонные состояния, возбуждаемые в этом материале. Таким образом, задача сводится к решению системы двух векторных уравнений: волнового уравнения

$$\text{rot rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 [\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) + 4\pi\mathbf{P}_{\text{exc}}(\mathbf{r})] \quad (2)$$

и материального уравнения для вклада  $1s$ -экситона в диэлектрическую поляризацию

$$\left(-\frac{\hbar}{2M}\Delta + \omega_0 - \omega\right)\mathbf{P}_{\text{exc}}(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_a\omega_{LT}}{4\pi}\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_a$  внутри шариков и  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_B$  вне шариков,  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{P}_{\text{exc}}(\mathbf{r})$  — электрическое поле и экситонная поляризация на частоте  $\omega$ . На сферической поверхности, разделяющей материалы  $A$  и  $B$ , задаются стандартные граничные условия Максвелла: непрерывность тангенциальных составляющих электрического и магнитного полей, и граничное условие Пекара для экситонной поляризации: обращение в нуль вектора  $\mathbf{P}_{\text{exc}}(\mathbf{r})$  при  $|\mathbf{r} - \mathbf{a}| = R$ , где векторы трансляции  $\mathbf{a}$  определяют положение центров шариков  $A$ .

С учетом периодичности структуры решения уравнений (2) и (3) ищутся в форме блоховских функций, удовлетворяющих условию

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{k}$  — волновой вектор экситонного поляритона, заданный в первой зоне Бриллюэна, которая для ГЦК пространственной решетки имеет форму четырнадцатигранника с шестью квадратными гранями и восемью шестиугольными гранями.

В работе рассчитывалась дисперсионная зависимость  $\omega_{nk}$ , где  $n$  — номер экситон-поляритонной ветви. При численном расчете в качестве основного использовался фотонный аналог метода Корринги–Кона–Ростокера (ККР) [11–13], в котором (а) электрическое поле разлагается по сферическим волнам, точнее по векторным сферическим функциям, центрированным в точках  $\mathbf{r} = \mathbf{a}$  и (б) в результате независимого анализа рассеяния света на одиночном шаре и структурного фактора дисперсионное уравнение приводится к виду

$$|\delta_{j'j}\delta_{m'm}\delta_{\sigma'\sigma} - G_{j'm'\sigma',jm\sigma}(\mathbf{k}, \omega)R_{j\sigma}(\omega)| = 0. \quad (5)$$

Здесь  $R_{j\sigma}$  — коэффициенты рассеяния сферической волны на одном шарике  $A$ , которые зависят от полного углового момента  $j$  и индекса поляризации  $\sigma$ , различающего

магнитную и электрическую сферические гармоники, но не зависят от проекции углового момента  $m$ . Для рассеивателя в форме шара эти коэффициенты связывают падающее поле  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \propto \mathbf{J}_{jm\sigma}(\mathbf{r})$  с рассеянным полем  $\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) \propto \mathbf{H}_{jm\sigma}(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{J}_{jm\sigma}$ ,  $\mathbf{H}_{jm\sigma}$  — векторные сферические функции [13]. В работе [14] величины  $R_{j\sigma}(\omega)$  рассчитаны с учетом экситонного резонанса в шарике  $A$  и конечной эффективной массы экситона  $M$ . В отличие от матрицы рассеяния на одном шарике, которая содержит только диагональные компоненты  $R_{jm\sigma} \equiv R_{j\sigma}$ , у матрицы структурных коэффициентов  $G_{j'm'\sigma',jm\sigma}(\mathbf{k}, \omega)$  отличны от нуля как диагональные, так и недиагональные компоненты. Заметим, что от частоты  $\omega$  зависят обе матрицы, тогда как от волнового вектора поляритона  $\mathbf{k}$  зависит только структурная матрица  $\mathbf{G}$ . В то же время  $\mathbf{G}$  не зависит от экситонных параметров и совпадает с матрицей, рассмотренной в работах [11–13], в которых экситонные состояния не учитывались.

В разд. 4 при анализе отдельных вкладов в поляритонную дисперсию размерно-квантованных экситонных состояний воспользуемся методом функций Грина, а в разд. 5 — двухволновым приближением, допускающим аналитическое описание.

### 3. Поляритонная дисперсия при конечной массе экситона

Сначала мы сосредоточим внимание на сугубо экситонных эффектах и пренебрежем диэлектрическим контрастом, положив  $\varepsilon_a = \varepsilon_B$ . Тогда в отсутствие экситон-фотонного взаимодействия, т.е. при  $\omega_{LT} = 0$ , среда становится оптически однородной, и распространяющиеся в ней фотоны имеют линейную дисперсию  $\omega = cq/n_B$  с показателем преломления  $n_B = \sqrt{\varepsilon_B}$ . В схеме приведенных зон эта однозначная связь между частотой и волновым вектором света  $\mathbf{q}$  превращается в многозонную дисперсионную кривую

$$\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k} + \mathbf{b}|/n_B, \quad (6)$$

где  $\mathbf{b}$  — вектор обратной решетки, такой что вектор  $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{b}$  лежит в первой зоне Бриллюэна. При  $\omega_{LT} \neq 0$  происходит смешивание фотонных и экситонных состояний и образование гибридных поляритонных возбуждений со сложной многозонной дисперсией  $\omega_{nk}$ . При этом волна  $(n, \mathbf{k})$  является смесью двух или нескольких фотонных состояний (6) с одним и тем же  $\mathbf{k}$ , но различными значениями  $\mathbf{b}$ .

На рис. 1 представлена дисперсия экситонных поляритонов для ГЦК решетки, рассчитанная при следующих значениях параметров структуры:

$$\begin{aligned} \varepsilon_a = \varepsilon_B = 10, \quad R = a/4, \quad \hbar\omega_1 = 2 \text{ eV}, \\ \omega_{LT} = 5 \times 10^{-4} \omega_1, \\ P \equiv \left( \frac{\sqrt{3} \pi c}{\omega_1 n_B a} \right)^3 = 1.1, \quad M = 0.5 m_0, \end{aligned}$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона в вакууме и вместо затравочной частоты  $\omega_0$  введена резонансная

частота

$$\omega_1 = \omega_0 + \frac{\hbar}{2M} \left( \frac{\pi}{R} \right)^2 \quad (7)$$

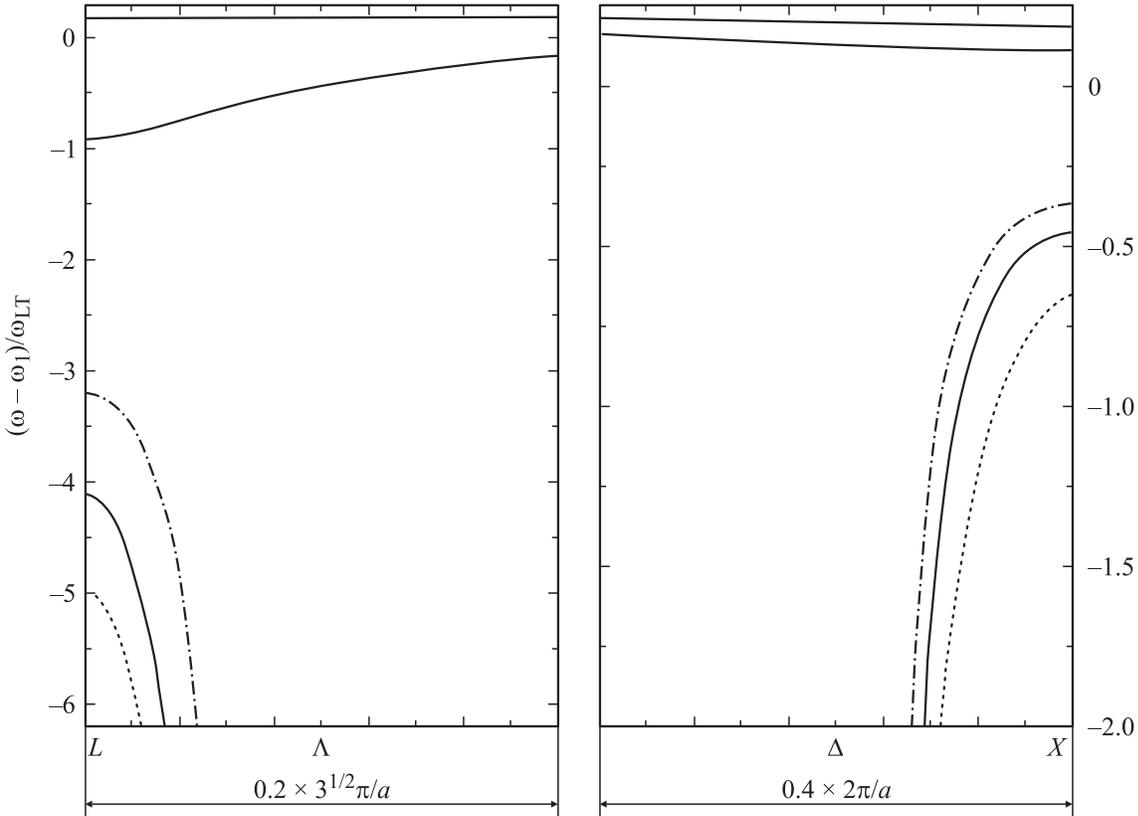
основного состояния экситона, размерно-квантованного в шаре радиуса  $R$ . Заметим, что настройке частоты (7) на брэгговский резонанс  $\omega_1 = ck_L/n_B$  в точке  $L$  зоны Бриллюэна с  $k_L = \sqrt{3}\pi/a$  или  $\omega_1 = ck_X/n_B$  в точке  $X$  с  $k_X = 2\pi/a$  отвечают значения  $P = 1$  и  $P = 3\sqrt{3}/8 \approx 0.65$  соответственно. При  $P = 1.1$  антипересечение горизонтальной прямой  $\omega = \omega_1$  (ветвь „голых“ экситонов) и прямой  $\omega = ck/n_B$  (ветвь „голых“ фотонов) происходит внутри зоны Бриллюэна при  $k$ , составляющем примерно 97% от  $k_L$  и 84% от  $k_X$ . Для полноты картины зависимость  $\omega(\mathbf{k})$  показана не только для высокосимметричных направлений  $\mathbf{k} \parallel [001]$  (точки  $\Delta$ ) и  $\mathbf{k} \parallel [111]$  (точки  $\Lambda$ ), но и на отрезках прямых  $X-W$ ,  $W-K$ ,  $X-U$  и  $U-L$ .

На рис. 1 область частот отрезана сверху так, чтобы остались только несколько нижних ветвей дисперсионной кривой. В отрезанной области дисперсия представлена густой сетью поляритонных ветвей, которые получаются в результате антипересечения „голых“ фотонных ветвей (6) с плотным набором дискретных уровней размерного квантования экситона. Эта сеть имеет запутанный характер, сложный для изображения. Поэтому в настоящей работе поставлена цель проанализировать эволюцию нижних поляритонных ветвей с изменением параметров фотонного кристалла.

На рис. 2 сплошными кривыми показаны те же дисперсионные ветви, что и на предыдущем рисунке, но в увеличенном масштабе вблизи точек  $X$  и  $L$ . Для сравнения штрихпунктиром изображена нижняя ветвь дисперсионной кривой, рассчитанная при учете только основного экситонного уровня размерного квантования, для чего достаточно было при расчете уменьшить эффективную массу  $M$  до  $0.01m_0$  и понизить  $\omega_0$  так, чтобы частота  $\omega_1$  в (7) осталась неизменной. Штрихпунктирные кривые совпадают с результатом расчета дисперсии экситонных поляритонов методом, развитым в работе [10]. Штриховой кривой показан противоположный предельный случай очень тяжелых экситонов, когда  $M \rightarrow \infty$ . В этом случае связь между экситонной поляритонной и электрическим полем становится локальной

$$\mathbf{P}_{\text{exc}} = \chi \mathbf{E}, \quad \chi = \frac{\varepsilon_a}{4\pi} \frac{\omega_{LT}}{\omega_0 - \omega}.$$

Поэтому значения  $\mathbf{k}$ , отвечающие заданной частоте  $\omega$ , можно находить так же, как и для нерезонансного фотонного кристалла с диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon_B$  и  $\varepsilon_A = \varepsilon_a + 4\pi\chi$ . Расчет показывает, что штриховая кривая на рис. 2 практически не отличается от нижней ветви, получаемой по формуле (5) при  $M = 5m_0$ . Нижняя поляритонная ветвь формируется в результате „отталкивания“ фотонной ветви (6) с  $\mathbf{b} = 0$  в длинноволновую сторону из-за взаимодействия с экситонными уровнями размерного квантования. При  $M \rightarrow 0$ , но  $\omega_1 = \text{const}$ , на эту ветвь заметное влияние оказывает



**Рис. 2.** Дисперсия экситонных поляритонов в резонансном фотонном кристалле в спектральной области, примыкающей к резонансной частоте нижнего экситонного уровня  $\omega_1$ , и для волновых векторов  $\mathbf{k} \parallel [111]$  (точки  $\Lambda$ ) и  $\mathbf{k} \parallel [001]$  (точки  $\Delta$ ). Дисперсионные кривые рассчитывались при эффективной массе экситона  $M = 0.5m_0$  (сплошные кривые),  $M \rightarrow \infty$  (штриховые кривые) и  $M \rightarrow 0$  (штрихпунктирные кривые). Значения остальных параметров те же, что и при расчете рис. 1.

только нижний уровень (7). При  $M \rightarrow \infty$  остальные уровни оказывают на нее максимально возможное влияние, так как в этом пределе их резонансные частоты стремятся к одному и тому же значению  $\omega_0$ . Поэтому нижняя поляритонная ветвь, отвечающая конечной массе  $M$ , должна лежать всегда между штрихпунктирной и штриховыми кривыми в согласии с результатом расчета, представленного на рис. 2.

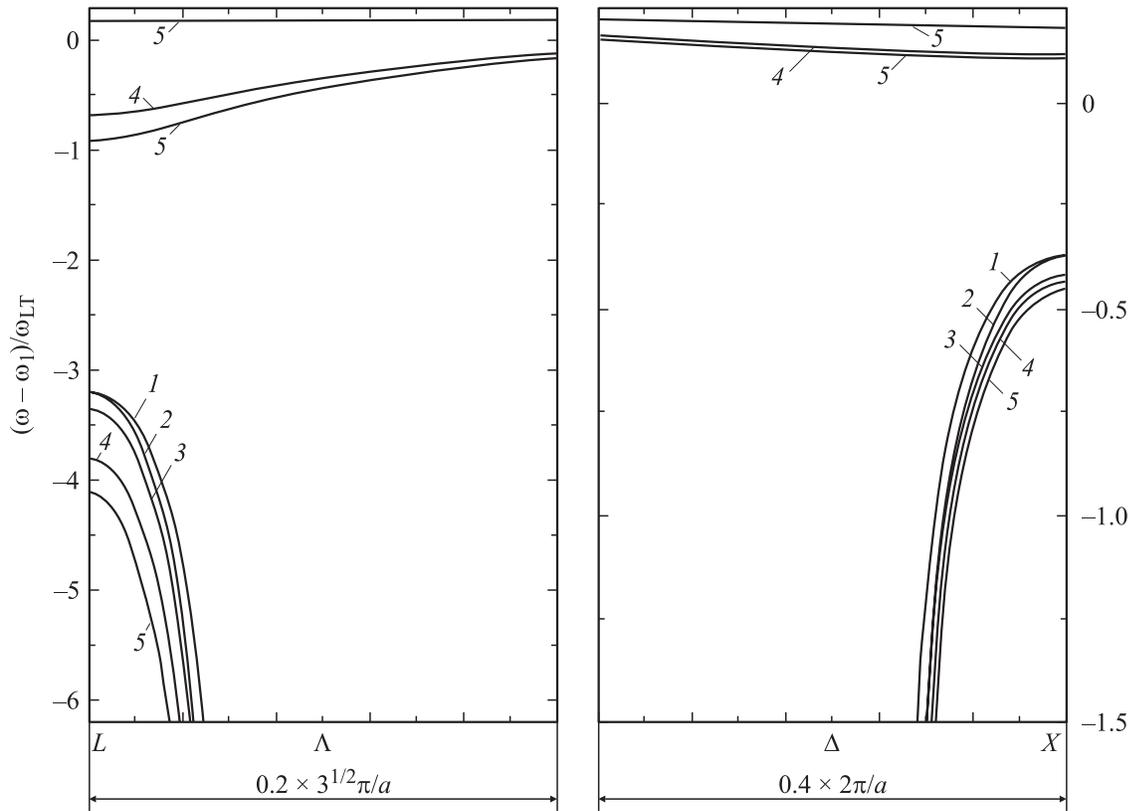
#### 4. Анализ вкладов в поляритонную дисперсию отдельных уровней размерного квантования экситона

Введем обозначения  $\omega_X(M)$  для частоты в точке  $X$  на нижней поляритонной ветви при эффективной массе  $M$  экситона в материале  $A$ ,  $\omega_X(0)$  и  $\omega_X(\infty)$  для значений этой частоты при  $M \rightarrow 0$  и  $M \rightarrow \infty$  и, наконец,  $\bar{\omega}_X$  для среднего арифметического  $[\omega_X(0) + \omega_X(\infty)]/2$ . Из рис. 2 видно, что разность  $\omega_1 - \bar{\omega}_X$  заметно превышает разность  $\omega_X(0) - \omega_X(\infty)$ . Это означает, что основной вклад в положение частоты  $\omega_X(M)$  должно вносить экситон-фотонное смешивание с основным уровнем (7). В данном разделе подробнее проанализируем влияние основного и возбужденных уровней размерного кванто-

вания экситона на нижнюю поляритонную ветвь. С этой целью, следуя [14] и используя метод функции Грина, разложим решение уравнения (3) с произвольной функцией  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  в ряд

$$\mathbf{P}_{\text{exc}}(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_a}{4\pi} \sum_{\nu} \frac{\omega_{LT}}{\omega_{\nu} - \omega} \sum_{\mathbf{a}} \Phi_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \times \int_{|\mathbf{r}' - \mathbf{a}| < R} \Phi_{\nu}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{a}) \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (8)$$

по собственным состояниям механического экситона в шаре с бесконечно высокими барьерами. Здесь индекс  $\nu = (n_r, l, m)$ , характеризующий состояния экситона, включает соответственно радиальное квантовое число, угловой момент и его проекцию на ось  $z$ ,  $\omega_{\nu}$  — резонансная частота экситона в состоянии  $\nu$ . Заметим, что нормированные на единицу функции  $\Phi_{\nu}(\mathbf{r})$  удовлетворяют уравнению (2) с  $\omega = \omega_{\nu}$ , но без неоднородного члена, т.е. с  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \equiv 0$ , для шара с центром в точке  $\mathbf{r} = 0$ . Частоты  $\omega_{\nu}$  удобно представить в виде  $\omega_0 + (\hbar/2MR^2)x_{n_r, l}^2$ , где  $x_{n_r, l}$  — безразмерные числа. Приведем эти числа для нескольких нижних энергетических уровней [15]:  $\pi$  ( $1s$ ), 4.493 ( $1p$ ), 5.764 ( $1d$ ),  $2\pi$  ( $2s$ ), 6.988 ( $1f$ ), где в скобках указаны значение  $n_r$ ,



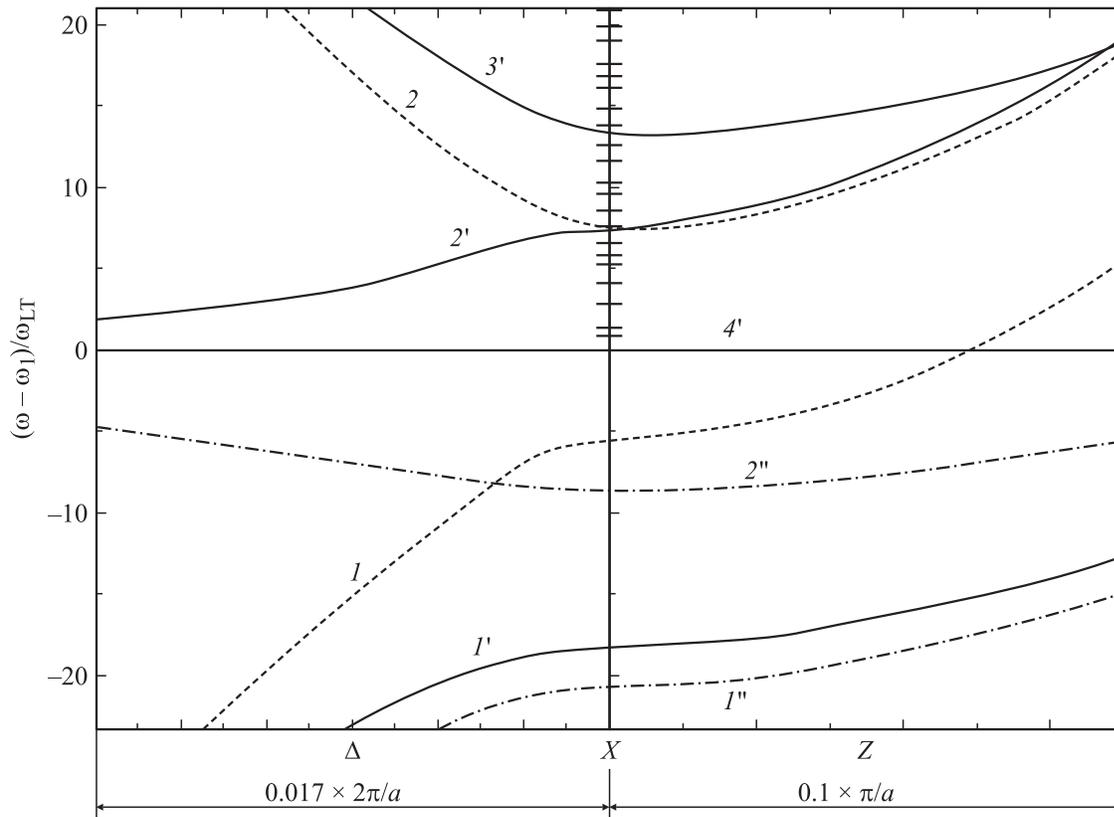
**Рис. 3.** Зависимость спектра экситонных поляритонов от числа экситонных уровней, учитываемых при расчете дисперсионной кривой методом функции Грина. Кривые 1–4 — расчет при учете соответственно одного, двух, трех и четырех нижних уровней; кривая 5 — точный расчет с учетом всех уровней размерного квантования механического экситона. Значения параметров те же, что и при расчете рис. 1.

и стандартный символ орбитального момента:  $s$  для  $l = 0$ ,  $p$  для  $l = 1$  и т.д. Подчеркнем, что символы в скобках обозначают размерно-квантованное состояние экситона как целого в отличие от внутреннего  $1s$ -состояния, которое здесь только и учитывается. Подставляя разложение (8) в волновое уравнение (2) и оставляя в сумме по  $\nu$  один любой член или конечное число членов, можно изучать влияние этих членов на формирование поляритонной дисперсии. Результаты анализа показаны на рис. 3. Видно, что (а) главную роль в положении частоты  $\omega_X(M)$  играет основной экситонный уровень  $1s$ , (б) на частоту поляритона в точках  $X$  и  $L$  уровень  $1p$  не влияет и (в) учета дополнительных уровней  $1d$  и  $2s$  достаточно для точки  $X$ , тогда как в точке  $L$  сумма по  $\nu$  сходится медленнее. Очевидно, это различие связано с выбором при расчете значения  $P = 1.1$ , при котором эффект антипересечения вблизи точки  $L$  значительно сильнее, чем в точке  $X$ .

## 5. Поляритоны в фотонном кристалле с диэлектрическим контрастом

Штриховые кривые 1 и 2 на рис. 4 изображают дисперсию световых волн в окрестности точки  $X$  зоны Бриллюэна в нерезонансном фотонном кристалле, т. е. в

отсутствие экситонных резонансов. В самой точке  $X$  этим волнам отвечает симметрия  $X_5$  и  $X_{5'}$ . Сплошными кривыми 1', 2' и 3' показаны дисперсионные ветви, рассчитанные при учете экситон-фотонного взаимодействия с одним экситонным уровнем  $1s$ , резонансная частота которого выбрана так, чтобы лежать посередине между частотами „голых“ фотонов  $X_5$  и  $X_{5'}$ . Дополнительная ветвь 4' представляет продольные экситонные состояния, которые практически не обладают дисперсией и в дальнейшем не обсуждаются. Наконец, штрихпунктирные кривые 1'', 2'' иллюстрируют дисперсию экситонных поляритонов с учетом всех экситонных уровней. Для расчета выбран фотонный кристалл с не очень большим контрастом ( $\epsilon_B = 12$ ,  $\epsilon_a = 13$ ), таким чтобы ширина нижней запрещенной зоны в направлении  $\mathbf{k} \parallel [001]$ , или расщепление между состояниями  $X_5$  и  $X_{5'}$ , была сопоставима с матричным элементом экситон-фотонного взаимодействия. Из рис. 4 следует, что учет экситонных состояний  $1s$ , оптически активных в поляризации  $\mathbf{E} \perp z$ , порождает вместо двух ветвей (1, 2) три ветви (1', 2' и 3'). Добавление вкладов остальных, возбужденных, экситонных уровней приводит в области частот  $\omega < \omega_0$  к преобразованию ветви 1' в ветвь 1'' и появлению еще одной ветви 2'', а в области  $\omega > \omega_0$  формируется густая сеть поляритонных ветвей, которая не показана, чтобы



**Рис. 4.** Фотонная зонная структура при наличии диэлектрического контраста:  $\epsilon_a = 12$ ,  $\epsilon_B = 13$ . Штриховые кривые — расчет для фотонного кристалла без экситона; сплошные кривые — расчет при учете только одного нижнего экситонного уровня; штрихпунктирные кривые и горизонтальные штрихи на  $X$  оси — расчет с учетом всех размерно-квантованных состояний механического экситона. Обозначения кривых — см. текст.

не усложнять рисунок. Вместо этого горизонтальными отрезками, пересекающими вертикаль  $X$ , отмечены частоты экситонных поляритонов при  $\omega > \omega_0$  только в точке  $X$ .

Далее предложено простое двухволновое описание поляритонного спектра, применимое при слабом диэлектрическом контрасте и позволяющее понять природу ветвей, отмеченных на рис. 4 цифрами с одним и двумя штрихами. Ранее это приближение использовалось при анализе дисперсии фотонов в нерезонансном фотонном кристалле [16].

Блоховское решение (4) представляет собой разложение по пространственным гармоникам с волновыми векторами  $\mathbf{k} + \mathbf{b}$ . Для волновых векторов  $\mathbf{k} \parallel [001]$ , лежащих вблизи точки  $X$ , оставляем в этом разложении два слагаемых с  $\mathbf{k}_1 = (0, 0, k_1)$ ,  $\mathbf{k}_2 = (0, 0, k_2)$  и  $k_1 - k_2 = 4\pi/a$ . В точке  $X$  имеем  $k_1 = -k_2 = 2\pi/a$ . Таким образом, электрическое поле записывается приближенно как

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_1 e^{ik_1 z} + \mathbf{E}_2 e^{ik_2 z}. \quad (9)$$

Для двукратно вырожденных поляритонных состояний симметрии  $\Delta_5$ , совместимых с представлениями  $X_5$  и  $X_{5'}$ , амплитуды  $\mathbf{E}_1$  и  $\mathbf{E}_2$  параллельны друг другу и перпендикулярны оси  $z \parallel [001]$ . Подставляя (8) и (9) в волновое

уравнение (2), умножая его почленно на  $\exp(-ik_j z)$  и интегрируя по элементарной ячейке ГЦК решетки, имеющей объем  $v_0 = a^3/4$ , получим

$$[(k_1/k_0)^2 - \bar{\epsilon}] \mathbf{E}_1 = \epsilon' \mathbf{E}_2 + \sum_{j=1,2} \mathbf{E}_j \sum_{\nu} I_{\nu}^{(1)*} I_{\nu}^{(j)} T_{\nu},$$

$$[(k_2/k_0)^2 - \bar{\epsilon}] \mathbf{E}_2 = \epsilon' \mathbf{E}_1 + \sum_{j=1,2} \mathbf{E}_j \sum_{\nu} I_{\nu}^{(2)*} I_{\nu}^{(j)} T_{\nu}. \quad (10)$$

Здесь введены обозначения:  $k_0 = \omega/c$ ,

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} \epsilon(\mathbf{r}) d^3 r, \quad \epsilon' = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} e^{4\pi i z/a} \epsilon(\mathbf{r}) d^3 r,$$

$$I_{\nu}^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{v_0}} \int_{v_0} e^{ik_j z} \Phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) d^3 r, \quad T_{\nu} = \frac{\epsilon_a \omega_{LT}}{\omega_{\nu} - \omega} \quad (11)$$

и предполагается, что начало отсчета декартовой системы координат выбрано в центре одного из шаров  $A$ .

В пренебрежении экситон-фотонным взаимодействием и диэлектрическим контрастом правые части уравнений (10) равны нулю,  $\bar{\epsilon} = \epsilon_B$ , и мы приходим к двум ветвям дисперсионной зависимости (6) для „голых“

фотонов. В точке  $X$  эти ветви смыкаются. При наличии диэлектрического контраста, когда  $\varepsilon' \neq 0$ , происходит расщепление четырехкратно вырожденного состояния в точке  $X$  на двукратно вырожденные состояния  $X_{5'}(E_1 = E_2)$  и  $X_5(E_1 = -E_2)$  с частотами

$$\omega(X_5) = \frac{ck_X}{\sqrt{\bar{\varepsilon} - \varepsilon'}}, \quad \omega(X_{5'}) = \frac{ck_X}{\sqrt{\bar{\varepsilon} + \varepsilon'}} \quad (12)$$

и расщеплением  $\omega(X_5) - \omega(X_{5'}) \approx (\varepsilon'/\bar{\varepsilon})(ck_X/\bar{n})$ , где  $k_X = 2\pi/a$ ,  $\bar{n} = \sqrt{\bar{\varepsilon}}$ . Приближенные формулы (12) с высокой точностью воспроизводят результат точного расчета, представленного на рис. 4 штриховыми кривыми.

В отсутствие диэлектрического контраста при учете только одного экситонного уровня  $1s$  и в пренебрежении различием между вещественными интегралами  $I_{1s}^{(1)}$  и  $I_{1s}^{(2)}$  система уравнений (10) приводится к виду

$$\begin{aligned} [(k_1/k_0)^2 - \varepsilon_B] \mathbf{E}_1 &= [(k_2/k_0)^2 - \varepsilon_B] \mathbf{E}_2 \\ &= T_{1s} I_{1s}^2 (\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2), \end{aligned} \quad (13)$$

где  $I_{1s}$  — интеграл в (11), рассчитанный при волновом векторе  $k_X$ . При условии близости частот  $\omega_1$  и  $\omega_X \equiv ck_X/n_B$  приходим к трем двукратно вырожденным состояниям: одному симметрии  $X_5$  с частотой  $\omega_X$  и двум симметрии  $X_{5'}$  с частотами

$$\omega = \frac{\omega_1 + \omega_X}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega_1 - \omega_X}{2}\right)^2 + \delta^2}, \quad (14)$$

где  $\delta = \sqrt{\omega_1 \omega_{LT} I_{1s}^2}$ . При точном совпадении частот  $\omega_1$  и  $\omega_X$  в спектре поляритонов в направлении  $\mathbf{k} \parallel [001]$  формируется запрещенная зона с центром в точке  $\omega_1$  и шириной  $2\delta$ . По мере расстройки  $\omega_X$  относительно  $\omega_1$  края запрещенной зоны сдвигаются согласно (13), а в центре формируется разрешенная зона аналогично тому, как это происходит в резонансной брэгговской структуре с квантовыми ямами ([17] и ссылки там).

Для приближенного описания сплошных кривых на рис. 4 нужно оставить в суммах по  $\nu$  в (10) вклад основного состояния размерно-квантованного экситона. В этом приближении смешивание фотонных и экситонных состояний симметрии  $X_{5'}$  приводит к их взаимному отталкиванию и образованию гибридных поляритонных волн с частотами

$$\omega = \frac{\omega_1 + \omega(X_{5'})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\omega_1 - \omega(X_{5'})}{2}\right]^2 + \delta^2}. \quad (15)$$

Формула (14) является частным случаем этой более общей формулы. Поскольку  $1s$ -экситон не взаимодействует со световой волной симметрии  $X_5$ , в рассматриваемом приближении частота состояния  $X_5$  не меняется. Этим объясняется близость частот поляритона  $X_5$ , рассчитанного без учета экситона и с учетом только уровня  $1s$

(точки пересечения кривых  $2$  и  $2'$  с вертикалью  $X$  на рис. 4). Учет возбужденных экситонных состояний в (10) смещает частоту нижнего поляритонного состояния  $X_{5'}$  вниз (кривая  $1''$ ), однако их влияние мало по сравнению с экситоном  $1s$ . В то же время в формировании поляритона  $X_5$  (кривая  $2''$ ) главную роль играет смешивание фотона  $X_5$  с экситоном  $1p$  и  $m = 0$ . Расчет показывает, что ветвь  $2''$  удовлетворительно описывается двухволновой моделью (10), в которой учтено только одно экситонное состояние ( $1p, m = 0$ ).

## 6. Заключение

Построена теория зонной структуры резонансных трехмерных фотонных кристаллов, образованных из двух материалов  $A$  (шарики) и  $B$  (диэлектрическая матрица), при произвольной величине эффективной массы экситона и произвольном диэлектрическом контрасте, т.е. различии между диэлектрической проницаемостью матрицы  $\varepsilon_B$  и фоновой диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_a$  материала  $A$ .

Нижняя поляритонная ветвь при конечной эффективной массе экситона  $M$  лежит между ветвями, рассчитанными в двух предельных случаях: при отсутствии пространственной дисперсии, т.е. при  $M \rightarrow \infty$ , и учете только одного экситонного уровня, т.е. при  $M \rightarrow 0$ , но так, чтобы резонансная частота основного состояния экситона  $\omega_1$  оставалась постоянной. Для описания поляритонных ветвей в спектральной области  $\omega < \omega_1$  достаточно учесть взаимодействие света с несколькими нижними состояниями механического экситона.

Для резонансного фотонного кристалла с диэлектрическим контрастом проанализировано, как меняется запрещенная зона ГЦК решетки в направлении  $[001]$  при выборе резонансной частоты экситона  $\omega_1$  посередине запрещенной зоны аналогичного фотонного кристалла, но без учета экситона. При малом диэлектрическом контрасте, таком что  $|\varepsilon_B - \varepsilon_a| \ll \varepsilon_B$ , применимо двухволновое приближение, которое позволяет с удовлетворительной точностью аналитически описать результаты численного расчета. Основной вклад в положение нижней границы запрещенной зоны на прямой  $\Gamma$ - $X$  зоны Бриллюэна вносят экситонные состояния  $1s$ , взаимодействующие со световой волной симметрии  $X_{5'}$ . Положение верхней границы главным образом определяется смешиванием экситона ( $1p, m = 0$ ) с фотоном симметрии  $X_5$ .

Заметим, что развитая теория применима при  $M \rightarrow \infty$  для рассмотрения фотонных кристаллов с красителем, периодически распределенным в пространстве и характеризующимся резонансной частотой оптических переходов ([18] и ссылки там). Теория может быть также обобщена для расчета дисперсии экситонных поляритонов в резонансных двумерных фотонных кристаллах, например, в периодической системе цилиндров  $A$ , помещенных в матрицу  $B$ .

Авторы благодарны В.А. Кособукину за полезное обсуждение работы.

## Список литературы

- [1] E. Yablonovitch. Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
- [2] S. John. Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
- [3] K.M. Ho, C.T. Chan, C.M. Soukoulis. Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990).
- [4] R.D. Meade, A.M. Rappe, K.D. Brommer, J.D. Joannopoulos, O.L. Alerhand. Phys. Rev. B **48**, 8434 (1993).
- [5] R.M. Hornreich, S. Shtrikman, C. Sommers. Phys. Rev. B **49**, 10914 (1994).
- [6] J.E. Sipe. Phys. Rev. E **62**, 5672 (2000).
- [7] K. Busch. C.R. Physique **3**, 53 (2002).
- [8] O. Toader, S. John. Phys. Rev. E **70**, 46605 (2004).
- [9] K.C. Huang, E. Lidorikis, X. Jiang, J.D. Joannopoulos, K.A. Nelson, P. Bienstman, S. Fan. Phys. Rev. B **69**, 195111 (2004).
- [10] E.L. Ivchenko, Y. Fu, M. Willander. ФТТ **42**, 1707 (2000).
- [11] A. Moroz. Phys. Rev. B **51**, 2068 (1995).
- [12] A. Moroz. Phys. Rev. B **66**, 115109 (2002).
- [13] X. Wang, X.-G. Zhang, Q. Yu, B.N. Harmon. Phys. Rev. B **47**, 4161 (1993).
- [14] H. Ajiki, T. Tsuji, K. Kawano, K. Cho. Phys. Rev. B **66**, 245322 (2002).
- [15] З. Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том. 1. Мир, М. (1974). 341 с.
- [16] S. Satpathy, Ze Zhang, M.R. Salehpour. Phys. Rev. Lett. **64**, 1239 (1990).
- [17] E.L. Ivchenko, M.M. Voronov, M.V. Erementschouk, L.I. Deych, A.A. Lisyansky. Phys. Rev. B **70**, 195106 (2004).
- [18] N. Eradat, A.Y. Sivachenko, M.E. Raikh, Z.V. Vardeny, A.A. Zakhidov, R.H. Baughman. Appl. Phys. Lett. **80**, 3491 (2002).