

Распространение света в слоистых композитных материалах с переменной толщиной слоев

© В.В. Румянцев, С.А. Федоров

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины,
83114 Донецк, Украина
e-mail: rумыants@teor.fti.ac.donetsk.ua

(Поступило в Редакцию 13 февраля 2007 г.)

В рамках приближения виртуального кристалла исследовано распространение света в неидеальной кремний-жидкокристаллической сверхрешетке (одномерном кристалле с двумя элементами-слоями в элементарной ячейке). Исследованы особенности оптических характеристик показателя преломления, ширины нижней запрещенной зоны, обусловленные случайной вариацией слоев по толщине. Использование слоистых композитных материалов с переменной толщиной слоев существенно расширяет возможности моделирования и создания новых слоистых материалов.

PACS: 78.66.Sq

Введение

Исследованиям распространения электромагнитных волн в тонких пленках и идеальных слоистых кристаллических средах (в частности, в фотонных магнитных кристаллах [1,2] и композитных материалах на основе кремния и жидкого кристалла [3]) в настоящее время уделяется достаточно много внимания (см. также [4–7] и ссылки в этих работах). Общая теория оптических волн в периодических кристаллических средах, в том числе состоящих из макроскопических слоев, рассмотрена в [8]. Дальнейшее развитие теории слоистых структур требует рассмотрения более сложных систем — сверхрешеток с дефектными слоями (например, слоями переменного состава и толщины). В монографии [7] рассмотрены фотонно-кристаллические системы на основе жидких кристаллов, в том числе с включением последних в качестве дефектов, исследовано распространение электромагнитных волн в таких фотонных структурах (включая поверхностные волны и локализованные на дефектах структуры моды). В предыдущих работах авторов [9,10] рассмотрен случай неидеальных многослойников, примесные слои которых отличаются от соответствующих слоев идеальной сверхрешетки лишь составом. В то же время представляет интерес изучение неидеальной сверхрешетки, слои которой варьируются по толщине. Очевидно, что при хаотическом распределении примесных слоев их концентрация не является функцией координат и поляритонные характеристики приобретают зависимость от концентрации. Эти характеристики качественно отличаются от случая, рассмотренного ранее [9,10] для неидеальных сверхрешеток с переменным составом. Использование слоистых композитных материалов с переменной толщиной слоев существенно расширяет возможности моделирования и создания новых слоистых материалов. Эта проблема представляет интерес и с чисто теоретической точки зрения, поскольку подобные модельные системы ранее не исследовались.

Методика расчета поляритонных возбуждений для указанных систем имеет много общего с методами нахождения квазичастичных возбуждений (электронных, фотонных и пр.) в топологически неупорядоченных неидеальных кристаллах. Распространенным методом расчета квазичастичных состояний в неупорядоченных средах является приближение виртуального кристалла (ПВК), которое заключается в замене конфигурационно зависимых параметров гамильтониана задачи на их усредненные значения [11]. Поляритонные спектры и соответствующие оптические характеристики неидеальных сверхрешеток удобно исследовать, используя именно это приближение, поскольку ПВК позволяет выявлять особенности и трансформацию спектров элементарных возбуждений, обусловленную изменением концентрации дефектов в неидеальных кристаллах.

В данной работе рассмотрено распространение света в неидеальном немагнитном многослойнике с переменной толщиной слоев. Полученный в рамках ПВК поляритонный спектр неидеальной сверхрешетки с произвольным числом слоев в элементарной ячейке конкретизирован для случая кремний-жидкокристаллической системы — „одномерного кристалла“ с двумя элементами-слоями в элементарной ячейке. Исследованы особенности оптических характеристик (показателя преломления, ширины нижней запрещенной зоны), обусловленные случайной вариацией слоев по толщине. Использование слоистых композитных материалов с переменной толщиной слоев существенно расширяет возможности моделирования и создания новых слоистых материалов.

1. Распространение электромагнитных волн в неоднородных структурах

Оптические свойства периодической среды определяются соответствующими материальными тензорами — диэлектрической $\hat{\epsilon}(\mathbf{r})$ и магнитной $\hat{\mu}(\mathbf{r})$ проницаемостями, которые в случае идеальных систем удовлетворяют

равенствам

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon}(x, y, z) &= \hat{\varepsilon}(x, y, z + d), \\ \hat{\mu}(x, y, z) &= \hat{\mu}(x, y, z + d). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $d = \sum_{\alpha=1}^{\sigma} a_{\alpha}$ — период сверхрешетки, σ — число слоев в элементарной ячейке, a_{α} — толщина соответствующих слоев одномерной цепочки элементов, лежащих вдоль оси z . В координатном представлении материальные тензоры $\hat{\varepsilon}$ и $\hat{\mu}$ кристаллической сверхрешетки с произвольным числом σ слоев выражаются в следующей форме:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}(z) \\ \hat{\mu}(z) \end{pmatrix} &= \sum_{n,\alpha} \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} \left\{ \theta \left[z - (n-1)d \right. \right. \\ &\left. \left. - \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} - a_{n\alpha} \right) \right] - \theta \left[z - (n-1)d - \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

В (2) $\theta(z)$ — функция Хевисайда; $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ — номер ячейки одномерного кристалла; индекс $\alpha = 1, 2, \dots, \sigma$ нумерует элементы ячейки.

В дальнейшем рассматривается неидеальная система, в которой разупорядочение связано лишь с вариацией толщины (а не состава) примесных слоев, следовательно $\hat{\varepsilon}_{n\alpha} \equiv \hat{\varepsilon}_{\alpha}$. Конфигурационно зависимые величины $a_{n\alpha}$ в нашей модели неидеальной сверхрешетки представлены через случайные величины $\eta_{n\alpha}^{\nu}$ ($\eta_{n\alpha}^{\nu} = 1$, если в узле $(n\alpha)$ кристаллической цепочки находится слой с толщиной $a_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$ сорта $\nu(\alpha)$; $\eta_{n\alpha}^{\nu} = 0$ — в ином случае):

$$a_{n\alpha} = \sum_{\nu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{\nu(\alpha)}, \quad (3)$$

где $r(\alpha)$ — число сортов элементов-слоев в α -й подрешетке одномерного кристалла.

Очевидно, что конфигурационно усредненные величины $\langle a_{n\alpha} \rangle \equiv a_{\alpha} \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}$ и $\langle d_n \rangle \equiv \sum_{\alpha} \langle a_{n\alpha} \rangle$ равны

$$\begin{aligned} \langle a_{n\alpha} \rangle &= \sum_{\nu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} C_{\alpha}^{\nu(\alpha)}, \\ \langle d_n \rangle \equiv d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \} &= \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \sum_{\nu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\nu(\alpha)} C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \end{aligned} \quad (4)$$

(угловые скобки обозначают процедуру конфигурационного усреднения). Так же, как и в предыдущем случае [9,10] (неидеальной сверхрешетки с переменным составом), задача нахождения поляритонных характеристик сводится к соответствующей задаче для „идеального“ многослойника с толщиной слоев $a_{\alpha} \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}$ и периодом $d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}$. Поэтому в приближении виртуального кристалла нахождение всех соответствующих величин (спектра, ширина энергетической щели

и т.д.) осуществляется путем замены: $a_{n\alpha} \longrightarrow a_{\alpha} \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}$, $d \longrightarrow d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}$. $C_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$ — концентрация слоев с толщиной $a_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$ $\nu(\alpha)$ -сорта в α -подрешетке, $\sum_{\nu(\alpha)} C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} = 1$.

Конфигурационное усреднение „восстанавливает“ трансляционную симметрию в кристаллической системе, поэтому применительно к исследуемому случаю неидеальной сверхрешетки приобретенная трансляционная инвариантность одномерной цепочки позволяет представить материальные тензоры в виде разложения в ряд Фурье

$$\begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}(z) \\ \hat{\mu}(z) \end{pmatrix} = \sum_l \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_l \\ \hat{\mu}_l \end{pmatrix} \exp \left(-il \frac{2\pi}{d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}} z \right). \quad (5)$$

Из выражения (2) следует, что фурье-амплитуды $\hat{\varepsilon}_l, \hat{\mu}_l$ и диэлектрическая $\hat{\varepsilon}_{n\alpha}$ и магнитная $\hat{\mu}_{n\alpha}$ проницаемости слоев с усредненными толщинами (4) связаны соотношением

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_l \\ \hat{\mu}_l \end{pmatrix} &= -\frac{i}{2\pi l} \sum_{\alpha} \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} \\ &\times \left\{ \exp \left(i \frac{2\pi}{d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}} l \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \} \right) \right. \\ &\left. - \exp \left[i \frac{2\pi}{d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}} l \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_j \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \} - a_{\alpha} \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

В предположении гармонической зависимости напряженностей (\mathbf{E}, \mathbf{H}) электромагнитного поля от времени уравнения Максвелла приобретают вид

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \mu(z) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \hat{\varepsilon}(z) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (7)$$

Согласно теореме Флоке, поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$ для периодической среды представимы в форме

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_K^{(E)}(z) \\ \mathbf{f}_K^{(H)}(z) \end{bmatrix} \exp(-i\boldsymbol{\chi}\boldsymbol{\rho} - iKz). \quad (8)$$

Здесь $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$, $\boldsymbol{\chi}$ — произвольный планарный (в плоскости XOY) волновой вектор, $\mathbf{K} = (0, 0, K)$ — блоховский вектор, причем

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{f}_K^{(E)}(z) \\ \mathbf{f}_K^{(H)}(z) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{f}_K^{(E)}(z + d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}) \\ \mathbf{f}_K^{(H)}(z + d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}) \end{bmatrix} \\ &= \sum_p \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{K,p}^{(E)} \\ \mathbf{f}_{K,p}^{(H)} \end{pmatrix} \exp \left(-ip \frac{2\pi}{d \{ C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \}} z \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Подстановка соотношения (8) в систему уравнений (7) приводит к следующему соотношению для фурье-амплитуд $\mathbf{f}_{K,p}^{(E,H)}$ электромагнитного поля:

$$\left[\chi \left(K + p \frac{2\pi}{d\{C_\alpha^{v(a)}\}} \right) \mathbf{e}_z \right] \times \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{K,p}^{(E)} \\ \mathbf{f}_{K,p}^{(H)} \end{pmatrix} = \frac{\omega}{c} \begin{bmatrix} -\sum_l \hat{\varepsilon}_l \mathbf{f}_{K,p-1}^{(E)} \\ \sum_l \hat{\mu}_l \mathbf{f}_{K,p-1}^{(H)} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где \mathbf{e}_z — орт оси z . Система уравнений (10) определяет нормальные моды электромагнитных волн, распространяющихся в такой „периодической“ среде.

2. Зависимость поляритонного спектра от вариации толщины слоев неидеальной сверхрешетки

В дальнейшем для простоты ограничимся рассмотрением распространения света вдоль оси z ($\chi = 0$) в немагнитной сверхрешетке ($\hat{\mu} = \hat{I}$ — единичная матрица). Кроме того, вслед за [8] полагаем, что K близки к значениям, определяемым условием Брэгга

$$\left| K - \frac{2\pi}{d\{C_\alpha^{v(a)}\}} \right| \approx K \quad \text{и} \quad c^2 K^2 \approx \omega^2 \varepsilon_0. \quad (11)$$

В этом случае основными членами системы уравнения (10) являются $\mathbf{f}_{K,p}^{(E,H)}$ при $p = 0, -1$ (что соответствует резонансу между этими составляющими плоских волн). Для $\mathbf{f}^{(E)} = (f_x^{(E)}, f_y^{(E)}, 0)$ и $\mathbf{f}^{(H)} = (f_x^{(H)}, f_y^{(H)}, 0)$ уравнения (10) после исключения $\mathbf{f}^{(H)}$ принимают вид

$$\begin{bmatrix} K^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon^{(0)} & -\frac{\omega^2 \varepsilon^{(1)}}{c^2} \\ -\frac{\omega^2 \varepsilon^{(-1)}}{c^2} & \left(K - \frac{2\pi}{d\{C_\alpha^{v(a)}\}} \right)^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon^{(0)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} f_{x(y),K,0}^{(E)} \\ f_{x(y),K,-1}^{(E)} \end{pmatrix} = 0, \quad (12)$$

где $\varepsilon_{l=0} \equiv \varepsilon^{(0)}$, $\varepsilon_{l=\pm 1} \equiv \varepsilon^{(\pm 1)}$. Дисперсионные соотношения $\omega_\pm = \omega(K)$ определяются условием равенства нулю детерминанта системы уравнений (12):

$$\left(K^2 - \frac{\omega(K)^2}{c^2} \varepsilon^{(0)} \right) \left[\left(K - \frac{2\pi}{d\{C_\alpha^{v(a)}\}} \right)^2 - \frac{\omega(K)^2}{c^2} \varepsilon^{(0)} \right] - \left(\frac{\omega(K)^2}{c^2} |\varepsilon^{(1)}| \right)^2 = 0. \quad (13)$$

Корни $\omega_\pm = \omega(K)$ уравнения (13) определяют границы спектральной полосы: при частотах $\omega_-(K) < \omega < \omega_+(K)$ (запрещенная зона) корни комплексные, электромагнитные волны — затухающие (брэгговское отражение); частоты $\omega < \omega_-$, $\omega > \omega_+$ соответствуют распространяющимся волнам.

Для конкретизации результатов рассмотрим распространение электромагнитного излучения в несовершенной сверхрешетке, первый слой которой — кремний ($\varepsilon_1 = 11.7$), а второй — жидкокристаллический

($\varepsilon_2 = 5.5$). Последний считаем, как и в [9], одноосным — $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{xx} \delta_{xi} \delta_{jx} + \varepsilon_{yy} \delta_{yi} \delta_{jy} + \varepsilon_{zz} \delta_{zi} \delta_{jz}$, очевидно, что для $\mathbf{K} \parallel z$ zz -компоненты тензора $\hat{\varepsilon}$ в конечных формулах не фигурируют, а $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \equiv \varepsilon$. Концентрацию и толщину слоя основного вещества (матрицы) в первой и второй подрешетках обозначим соответственно $C_1^{(1)}, a_1^{(1)}$ и $C_2^{(1)}, a_2^{(1)}$, а примеси — $C_1^{(2)}, a_1^{(2)}$ и $C_2^{(2)}, a_2^{(2)}$. Несложные преобразования (с учетом $|\varepsilon^{(-1)}| = |\varepsilon^{(1)}|$) позволяют получить следующие соотношения для показателя преломления $n_\pm \equiv cK/\omega_\pm$ исследуемой системы

$$n_\pm^2(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) = \varepsilon^{(0)}(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) \pm |\varepsilon^{(1)}(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})| = \varepsilon^{(0)} \left[1 \pm \frac{\Delta\omega_1(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}{\omega} \right], \quad (13)$$

причем $(n_+^2 - n_-^2)/2\varepsilon^{(0)} = \Delta\omega_1/\omega$, $\Delta\omega_1 = |\omega_+ - \omega_-|$ — ширина нижней запрещенной зоны. Из формулы (13) следует, что величина $\Delta\omega_1$ определяется соответствующим коэффициентом фурье-разложения (6), в данном случае — $|\varepsilon^{(1)}|$

$$\varepsilon^{(0)} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 (a_2^{(1)}/a_1^{(1)}) f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}{1 + (a_2^{(1)}/a_1^{(1)}) f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}, \quad |\varepsilon^{(1)}| = \frac{|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}{\pi} \sin \frac{\pi}{1 + (a_2^{(1)}/a_1^{(1)}) f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}. \quad (14)$$

Функция $f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) = \frac{1 - C_2^{(2)}(1 - a_2^{(2)}/a_1^{(1)})}{1 - C_1^{(2)}(1 - a_1^{(2)}/a_1^{(1)})}$ зависит от концентраций примесных слоев и их относительной толщины. Как показано в [8,9], запрещенные зоны высшего порядка также определяются соответствующими фурье-коэффициентами диэлектрической проницаемости.

На рис. 1 приводится концентрационная зависимость показателя преломления $n_\pm \equiv cK/\omega_\pm$ исследуемой композитной сверхрешетки для различных значений отношений $a_1^{(2)}/a_1^{(1)}$, $a_2^{(2)}/a_2^{(1)}$ и $a_2^{(1)}/a_1^{(1)}$. Хорошо видно, что форма соответствующих поверхностей имеет монотонный характер, причем характер зависимости $n_\pm(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})$ определяется значением величины отношения $a_2^{(1)}/a_1^{(1)}$. Последний факт определяет характер поведения ширины нижней запрещенной зоны. На рис. 2 показана зависимость относительной ширины этой энергетической щели сверхрешетки с чередующимися слоями кремния и жидкого кристалла от концентрации примесных слоев $C_1^{(2)}, C_2^{(2)}$.

Заключение

Проведенное в работе исследование показывает, что внедрением в изучаемую сверхрешетку определенных примесей можно добиться необходимого изменения ее энергетической структуры, значительных изменений оптических свойств, обусловленных перенормировкой поляритонного спектра кристаллических сверхрешеток в

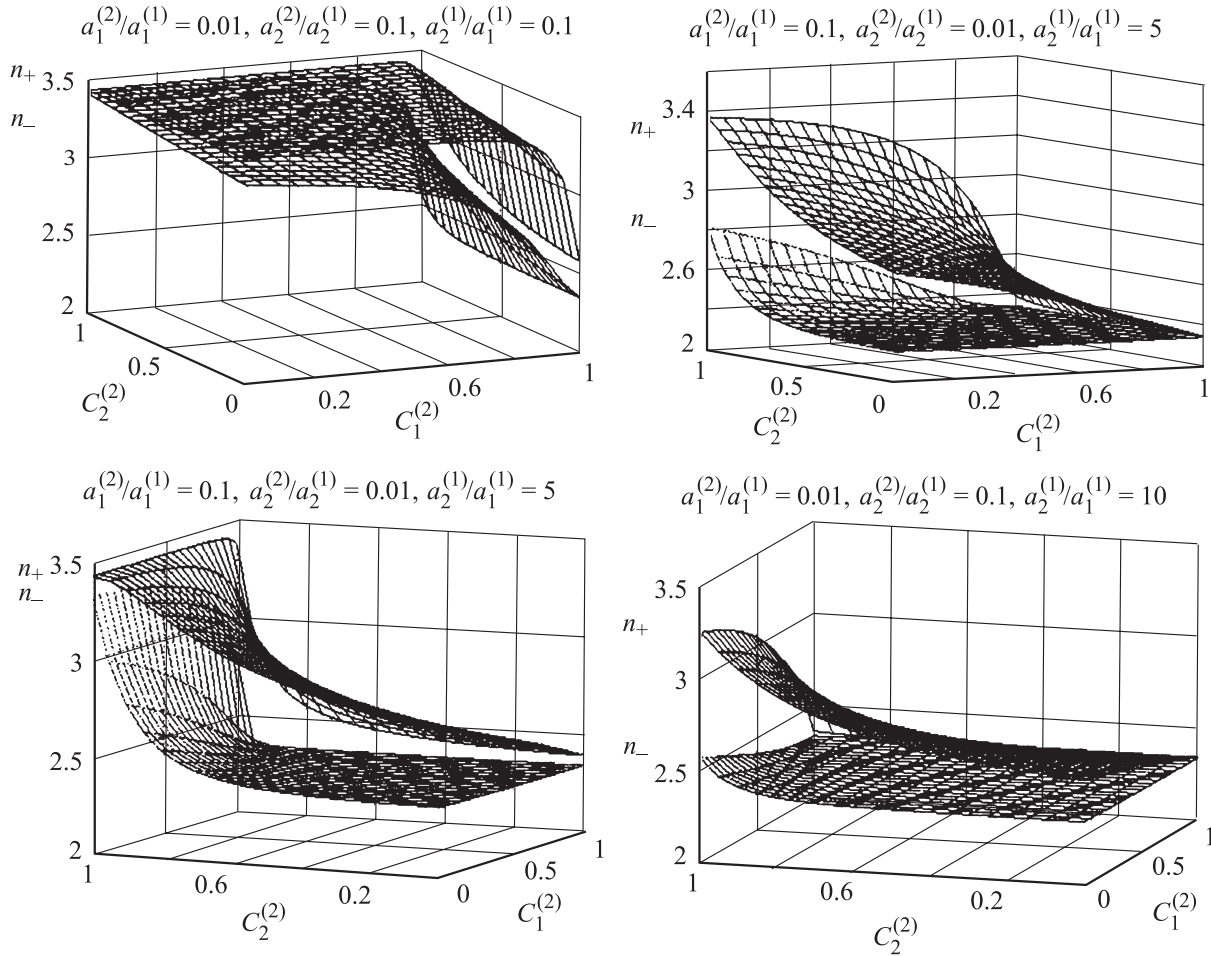


Рис. 1. Концентрационная зависимость показателя преломления $n_{\pm} \equiv cK/\omega_{\pm}$ исследуемой композитной сверхрешетки.

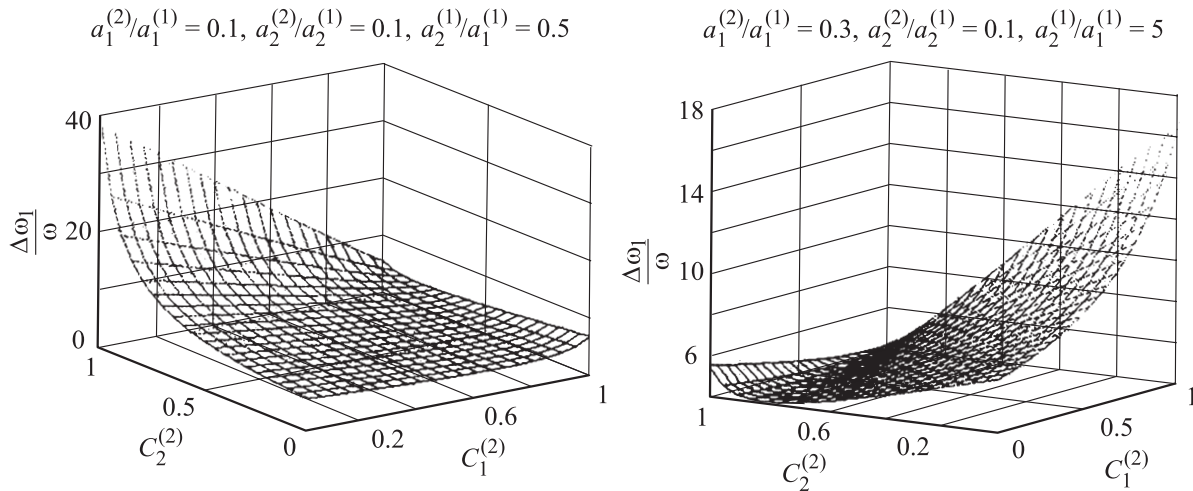


Рис. 2. Зависимость относительной ширины $\Delta\omega_1/\omega$ энергетической щели сверхрешетки с чередующимися слоями кремния и жидкого кристалла от концентрации $C_1^{(2)}$ и $C_2^{(2)}$ примесных слоев.

результате присутствия в них инородных слоев переменной толщины. Для исследования распространения электромагнитного возбуждения в неидеальной сверхрешет-

ке выбрана достаточно простая модель, использовано ПВК-приближение. Изучение особенностей поляритонного спектра (и определяемых им физических величин,

например, плотности состояния элементарных возбуждений и характеристик нормальных электромагнитных волн) более сложных объектов требует (в зависимости от поставленной задачи) привлечения и более сложных методов описания: метода когерентного потенциала (одно- или многоузельного) [12], метода усредненной T -матрицы и их модификаций.

Список литературы

- [1] *Figotin A., Vitebsky I.* // Phys. Rev. 2001. Vol. E63. P. 066 609.
- [2] *Lyubchanskii I.L., Dadoenkova N.N., Lyubchanskii M.L., Shapovalov E.A., Lakhtakia A., Rasing Th.* // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 85. N 24. P. 5932–5934.
- [3] *Толмачев В.А.* // Опт. и спектр. 2005. Т. 99. № 5. С. 797–801.
- [4] *Басс Ф.Г., Балгаков А.А., Тетервов А.П.* Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками: М.: Наука, 1989. 288 с.
- [5] *Покатилов Е.П., Фомин В.М., Берил С.И.* Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных системах и сверхрешетках. Кишинев: Штиинца, 1990. 278 с.
- [6] *Belotelov V.I., Kalish A.N., Kotov V.A., Sukhorukov A.P., Zvezdin A.K.* // Int. Conf. „Functional Materials“. Abstracts. Cremea, Partenit: NASU, 2005. P. 131.
- [7] *Шабанов В.Ф., Ветров С.Я., Шабанов А.В.* Оптика реальных фотонных кристаллов. Новосибирск: СО РАН, 2005. 240 с.
- [8] *Ярив А., Юх П.* Оптические волны в кристаллах. М.: Мир, 1987. 616 с.
- [9] *Пашкевич Ю.Г., Румянцев В.В., Федоров С.А.* // Жидкие кристаллы. 2006. Вып. 1–2. (15–16). С. 7–14.
- [10] *Румянцев В.В., Федоров С.А.* // Опт. и спектр. 2007. Т. 102. № 1. С. 75–79.
- [11] *Займан Дж.* Модели беспорядка. М.: Мир, 1982. 592 с.
- [12] *Лось В.Ф.* // ТМФ. 1987. Т. 73. № 1. С. 85–102.