Оглавление

Часть I

Программа курса

Введение. Определение и базовые понятия о микроструктурах с фотонной запрещенной зоной - фотонная зона Бриллюэна, закон дисперсии, фотонная зонная структура, фотонная запрещенная зона.

Модовая структура оптического поля внутри фотонных кристаллов - волновое уравнение и задача о модовой структуре поля, фазовая и групповая скорости, плотность фотонных состояний.

Аналогии фотонных кристаллов с твердым телом. Дефекты (вакансии и примеси) в фотонных кристаллах. Поверхностные (“таммовские”) состояния.

Базовые оптические и нелинейно-оптические эффекты в фотонных кристаллах и оптических сверхрешетках. Материалы для создания фотонных кристаллов.

1. Оптические эффекты в фотонных кристаллах

1.1. Методы описания зонной структуры фотонных кристаллов.

Методы расчета фотонной запрещенной зоны одномерных, двумерных и трехмерных фотонных кристаллов. Общая формулировка в рамках формализма функций Грина.

Расчет зонной структуры трехмерных фотонных кристаллов. Метод разложения по сферическим волнам, расчет закона дисперсии и пропускания трехмерного массива диэлектрических сфер. Классификация фотонных мод трехмерной ГЦК решетки. Задача о трехмерной дифракции в фотонных кристаллах.

Методы расчета фотонной запрещенной зоны двумерных фотонных кристаллов. Метод конечных разностей, метод разложения по плоским волнам. Классификация фотонных мод двумерной квадратной и гексагональной решеток.

Расчет зонной структуры одномерных фотонных кристаллов. Метод матриц распространения и рекуррентный метод. Формализм эффективной среды.

Расчет дефектных мод фотонных кристаллов. Микрорезонаторы. Нульмерные (точечные) и одномерные (линейчатые) дефекты в двумерных фотонных кристаллах с квадратной и гексагональной решетками. Поверхностные (“таммовские”) состояния.

Суперструктуры на основе фотонных кристаллов. Связанные микрорезонаторы. "Фотонные"молекулы.

1.2. Оптические и магнитооптические эффекты в фотонных кристаллов.

Подавление спонтанного излучения атомов внутри фотонных кристаллов. Управление спектром нулевых вакуумных флуктуаций. Лэмбовский сдвиг в фотонных кристаллах.

Сингулярности плотности фотонных состояний. Гигантская оптическая дисперсия и аномальная групповая скорость. Компрессия сверхкоротких лазерных импульсов в фотонных кристаллах.

Эффекты локализации электромагнитного поля и управление фотонной запрещенной зоной. Локализация света в фотонных кристаллах с дефектами.

Магнитофотонные кристаллы и микрорезонаторы. Усиление эффекта Фарадея и магнитооптического эффекта Керра в магнитофотонных кристаллах и микрорезонаторах.

Распространение света в квазипериодичных фотонных кристаллах. Квазикристаллы типа Фибоначчи. Компрессия и декомпрессия сверхкоротких лазерных импульсов в квазикристаллах. Биение мод и аномально малая групповая скорость.

2. Нелинейно-оптические явления в фотонных кристаллах и оптических сверхрешетках

2.1. Методы описания нелинейно-оптического отклика фотонных кристаллов и нелинейного распространения света в фотонных кристаллах

Решение неоднородного волнового уравнения в двумерных и трехмерных фотонных кристаллах методом функций Грина.

Расчет параметрических процессов в одномерных фотонных кристаллах рекуррентными методами и нелинейными матрицами распространения.

Автомодельные решения нелинейного волнового уравнения. Солитонное и волноводное распространение света в фотонных кристаллах с квадратичной и кубичной восприимчивостями.

2.2. Нелинейные фотонные кристаллы и оптические сверхрешетки

Понятие о нелинейных фотонных кристаллах. Двумерный фазовый синхронизм при генерации второй гармоники в нелинейных фотонных кристаллах. Двумерная нелинейная дифракция в нелинейных фотонных кристаллах.

Оптические сверхрешетки. Параметрическое взаимодействие волн, фазовый синхронизм при генерации второй гармоники, суммарной и разностной частоты в оптических сверхрешетках.

Нелинейные квазикристаллы и апериодические оптические сверхрешетки. Генерация второй и третьей гармоники в условиях фазового синхронизма в апериодических сверхрешетках и структурах типа Кантора и Фибоначчи.

2.3. Нелинейно-оптические и нелинейные магнитооптические эффекты в фотонных кристаллах

Эффекты на кубичной восприимчивости. Суперконтинуум и бистабильность в фотонных кристаллах.

Усиление трехфотонных параметрических процессов в фотонных кристаллах. Генерация суммарной частоты и второй гармоники в условиях фазового синхронизма на краю фотонной запрещенной зоны.

Особенности четырехфотонных параметрических процессов в фотонных кристаллах. Неколлинеарное четырехволновое смешение, усиление генерации третьей оптической гармоники.

Нелинейно-оптические эффекты в магнитофотонных кристаллах. Нелинейный магнитооптический эффект Керра при генерации второй и третьей оптических гармоник. Нелинейная магнитооптическая дифракция.

3. Дополнительные главы

3.1. Методы изготовления фотонных кристаллов различных размерностей.

Основные материалы для изготовления фотонных кристаллов.

Примеры одномерных фотонных кристаллов. Брэгговские зеркала, микрорезонаторы, одномерные волноводы.

Двумерные фотонные кристаллы. Дырчатые волокна, макропористый кремний с гексагональной и квадратной решеткой, макропористый оксид алюминия.

Трехмерные фотонные кристаллы. Опалы, инвертированные опалы, самоагрегирующийся латекс.

Магнитофотонные кристаллы.

3.2. Методы создания оптических сверхрешетках и нелинейных фотонных кристаллов.

Создание оптических сверхрешеток. Периодические и квазипериодические доменные структуры.

Методы создания нелинейных фотонных кристаллов.

3.3. Применения фотонных кристаллов.

Устройства оптоэлектроники на основе фотонных кристаллов. Оптические диоды и транзисторы. Дырчатые волокна. Микролазеры без инверсии населенности. Оптические переключатели и мультиплексоры. Магнитооптические модуляторы света.

3.4. Расширение фотонных кристаллов.

Электромагнитные кристаллы для ИК и СВЧ областей. Фононные кристаллы. Спиновые (магнитные) кристаллы. Плазмонные кристаллы.

Часть II

Введение

1. Определение и базовые понятия о микроструктурах с фотонной запрещенной зоной

1.1. Аналогии между кристаллами и фотонными кристаллами

Существует ряд аналогий при описании распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах и электронных свойств кристаллов. Приведем некоторые из них.

1. Состояние электрона внутри кристалла (закон движения) задается решением уравнения Шрёдингера, распространение света в фотонном кристалле подчиняется волновому уравнению, являющемуся следствием уравнений Максвелла:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla + U(\mathbf{r})\right)\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}), \qquad \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla \times \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}). \tag{1}$$

2. Состояние электрона описывается скалярной волновой функцией $\psi(\mathbf{r},t)$, состояние электромагнитной волны описывается векторными полями - напряженностью магнитной или электрической компонент, $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ или $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$.

3. Волновая функция электрона $\psi(\mathbf{r},t)$ может быть разложена в ряд по собственным состояниям $\psi_E(\mathbf{r})$, каждому из которых соответствует собственная энергия E. Напряженность электромагнитного поля $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ может быть представлена суперпозицией монохроматических компонент (мод) электромагнитного поля $\mathbf{H}_\omega(\mathbf{r})$, каждой из которой соответствует собственное значение - частота моды ω:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_E c_E\psi_E(\mathbf{r})e^{i\frac{E}{\hbar}t}, \qquad \mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \sum_\omega c_\omega \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r})e^{i\omega t}. \tag{2}$$

4. Атомный потенциал $U(\mathbf{r})$ и диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$, фигурирующие в уравнениях Шрёдингера и Максвелла, представляют собой периодические функции с периодами, равными любым векторам $\mathbf{R}$ решетки кристалла и фотонного кристалла, соответственно:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}+\mathbf{R}), \qquad \varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r}+\mathbf{R}). \tag{3}$$

5. Для волновой функции электрона и напряженности электромагнитного поля выполняется теорема Блоха

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \qquad \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{4}$$

с периодическими функциями $u_{\mathbf{k}}$ и $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}$.

6. Возможные значения волновых векторов $\mathbf{k}$ заполняют зону Бриллюэна кристаллической решетки или элементарной ячейки фотонного кристалла, задаваемую в пространстве обратных векторов.

7. Энергия электрона E, являющаяся собственным значением уравнения Шрёдингера, и собственное значение волнового уравнения (следствия уравнений Максвелла) - частота моды ω - связаны со значениями волновых векторов $\mathbf{k}$ блоховских функций (4) законом дисперсии $E(\mathbf{k})$ и $\omega(\mathbf{k})$.

8. Примесный атом, нарушающий трансляционную симметрию атомного потенциала, является дефектом кристалла и может создавать примесное электронное состояние, локализованное в окрестности дефекта. Изменения диэлектрической проницаемости в определенной области фотонного кристалла нарушают трансляционную симметрию $\varepsilon(\mathbf{r})$ и приводит к появлению разрешенной моды внутри фотонной запрещенной зоны, локализованной в ее пространственной окрестности.

1.2. Плотность мод электромагнитного поля

Одним из важных свойств фотонных кристаллов является возможность модификации плотности состояний электромагнитного поля (плотности мод) в заданном спектральном диапазоне. Эта особенность фотонных кристаллов может быть использована при управлении сечением спонтанного излучения возбужденных атомов или молекул, помещенных внутрь фотонных кристаллов. Рассмотрим кратко понятия, связанные с модами электромагнитного поля.

В вакууме, соотношение между (угловой) частотой электромагнитного поля ω и волновым числом $k \equiv |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$, где λ - длина волны и $\mathbf{k}$ - волновой вектор, называемое законом дисперсии электромагнитного поля, имеет простой вид:

$$\omega = ck, \tag{5}$$

где c - скорость света в вакууме. В однородном веществе, характеризующемся показателем преломления n, закон дисперсии имеет форму выражения (5) с заменой скорости света на $v = c/n$ и длины волны на $\lambda = \lambda/n$.

Введем понятия плотности мод электромагнитного поля. Рассмотрим электромагнитное излучение внутри куба с ребром длиной $L \gg \lambda$. Для компоненты поля, распространяющегося вдоль оси z, потребуем условия периодичности с периодом L, $E(z + nL) = E(z)$, где $n = 0, \pm 1...$, а также периодичных граничных условий, $E(z = 0) = E(z = L) = 0$. Периодическую функцию $E(z)$ разложим в ряд Фурье

$$E(z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} E_m e^{ik_m z}, \tag{6}$$

представляющий собой разложение по плоским волнам с волновыми числами k_m, принимающими дискретные значения

$$k_m = \frac{2\pi}{L} m, \;\; m = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{7}$$

Для определения значения амплитуды фурье-гармоник E_m, сделаем обратное преобразование Фурье:

$$\int_{L/2}^{L/2} dz e^{-ik_n z} E(z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} E_m \int_{L/2}^{L/2} dz e^{-ik_n z} e^{ik_m z}. \tag{8}$$

Интеграл в правой части уравнения (8) для целочисленного аргумента $k_m - k_n$ выразится через символ Кронекера:

$$f(k_m - k_n) \equiv \int_{L/2}^{L/2} dz e^{i(k_m - k_n)z} = L \mathrm{sinc}\left(\pi(m-n)\right) = L\delta_{mn}. \tag{9}$$

Функция $f(k_m - k_n)$ отлична от нуля только в точке $m = n$. Подставляя (9) в (8), получим:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} E_m \delta_{mn} \equiv E_n = \frac{1}{L} \int_{L/2}^{L/2} dz e^{-ik_n z} E(z). \tag{10}$$

Повторяя такое разложение для двух других компонент поля, E_x и E_y, полное поле в кубе квантования может быть представлено в виде трехмерного ряда Фурье

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{lmn} \mathbf{E}_{lmn} e^{i2\pi(lx+my+nz)/L}, \;\; l, m, n = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{11}$$

Введя волновой вектор $\mathbf{k}$ с компонентами

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\{l, m, n\}, \tag{12}$$

выражение (11) запишем в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{13}$$

где вектор напряженности электромагнитного поля моды с данным значением $\mathbf{k}$ задается в виде

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)=\frac{1}{V}\int_V\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}. \tag{14}$$

Зависимость $\mathbf{E}$ и $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}$ от времени t в выражениях (13,14) описывается стандартном для плоских волн множителем вида $\exp(-i\omega_k t)$, где частота каждой моды $\omega_k = ck$. Представление (13) произвольного поля $\mathbf{E}$ в виде бесконечной суммы плоских волн, называемых модами электромагнитного поля, позволяет задать пространственное распределение поля $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ множеством в общем случае комплексных чисел $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}$ - амплитуд мод. Из-за вещественности поля $\mathbf{E}$ амплитуды мод связаны соотношением $\mathbf{E}_{-\mathbf{k}}=\mathbf{E}^{\star}_{\mathbf{k}}$. Волновые векторы $\mathbf{k}$ образуют решетку в трехмерном k-пространстве волновых чисел. Условие дискретности значений волновых векторов (12) определяет расстояние между соседними модами в фазовом пространстве (k-пространстве), равное $2\pi/L$. Тогда объем фазового пространства волновых чисел, приходящийся на одну моду, равен $(2\pi)^3/V$.

При увеличении размера куба квантования моды электромагнитного поля в фазовом пространстве сгущаются и в пределе $L\to\infty$ ряд Фурье (13) переходит в интеграл Фурье:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathbf{E}(\mathbf{k},t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{k}, \tag{15}$$

с амплитудой моды с волновым вектором $\mathbf{k}$ в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{k},t)=\frac{1}{V}\int_{-\infty}^{\infty}\mathbf{E}(\mathbf{r},t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}. \tag{16}$$

Формальное правило перехода от суммирования к интегрированию, $\sum_m ...\to(L/2\pi)^3\int d\mathbf{k}$ может быть получено из выражений (6-9) и интегрального представления δ-функции,

$$\int_{-\infty}^{\infty}dze^{ikz}=\lim_{L\to\infty}L\mathrm{sinc}(kL/2)=2\pi\delta(k). \tag{17}$$

Число мод N электромагнитного поля, имеющие частоты, меньшие ω, в кубе квантования V определяется суммой (интегралом) вида

$$N(\omega)=2\times\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{k=0}^{k=\omega/c}d\mathbf{k}=\frac{\omega^3V}{3\pi^2c^3}, \tag{18}$$

где множитель “2” перед интегралом учитывает два возможных ортогональных состояния поляризации каждой моды. Выражение (18) можно получить из следующих простых соображений. Моды электромагнитного поля, занимающие диапазон частот от 0 до ω, в пространстве волновых векторов заполняют шар с центром в точке $k=0$ и радиусом $k=\omega/c$. Объем такого шара равен

$$W(\omega)=\frac{4}{3}\pi k^3=\frac{4\pi\omega^3}{3c^3}. \tag{19}$$

Поскольку объем фазового пространства волновых чисел, приходящийся на одну моду, равен $v=(2\pi)^3/V$, то полное число мод с частотами, меньшими ω, равно

$$N(\omega)=2\times\frac{W(\omega)}{v}=2\cdot\frac{4\pi\omega^3}{3c^3}\cdot\frac{V}{8\pi^3}=\frac{\omega^3V}{3\pi^2c^3}. \tag{20}$$

Плотность состояний $D(\omega)$ электромагнитного поля, определяемое как $D(\omega) = \partial N(\omega)/\partial\omega$, записывается в виде

$$D(\omega) = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} \tag{21}$$

и имеет смысл числа мод электромагнитного поля с частотами в спектральном диапазоне от ω до $\omega + d\omega$. Обратим внимание, что плотность состояний зависит от частоты как ω^2.

1.3. Вероятность спонтанного излучения

В задаче о спонтанном излучении диполя с моментом $\mathbf{d}$, осциллирующего на частоте ω, энергия излучения за единицу времени определяется как

$$U = \frac{4\pi^2\omega^2}{3V}|\mathbf{d}|^2 D(\omega). \tag{22}$$

Вероятность P излучения фотона энергией $\hbar\omega$ в единицу времени (скорость излучения), $P = U/\hbar\omega$, примет вид

$$P = \frac{4|\mathbf{d}|^2\omega^3}{3\hbar c^3} \propto \omega D(\omega). \tag{23}$$

Аналогичное выражение можно получить, воспользовавшись выражением для интенсивности дипольного излучения заряда:

$$I = \frac{2}{3c^3}|\ddot{\mathbf{d}}|^2, \tag{24}$$

которое в случае диполя, осциллирующего на частоте ω, переходит в выражение для энергии излучения в единицу времени в виде:

$$U = \frac{4}{3}\frac{\omega^4}{c^3}|\mathbf{d}|^2, \tag{25}$$

легко приводящегося к выражению (22). Таким образом, спонтанное излучение атома или молекулы определяется не только свойствами излучателя (величиной дипольного момента), но и свойствами поля вокруг него, описываемыми плотностью состояний мод. Фотонные кристаллы являются структурами, изменяющими плотность состояний мод электромагнитного поля и оптические (излучательные) свойства находящихся в них атомов и молекул. Это свойство фотонных кристаллов определяет перспективы их использования при создании новых типов лазеров с предельно низким порогом генерации.

2. Закон дисперсии и зонная структура фотонных кристаллов

2.1. Закон дисперсии одномерных фотонных кристаллов

Под законом дисперсии электромагнитных волн принято понимать соотношение между частотой и волновым вектором электромагнитной волны. В вакууме закон дисперсии имеет вид (5) прямой $\omega = ck$, где c - скорость света. В анизотропных веществах или в структурах со сложным пространственным распределением диэлектрической проницаемости закон дисперсии $\omega(\mathbf{k})$ становится многомерной фигурой.

Рассмотрим задачу о законе дисперсии и зонной структуре одномерных фотонных кристаллов. Полагая фотонный кристалл линейной средой, запишем волновое уравнение для распространения электромагнитной волны $\mathbf{E}(z,t)$ вдоль направления периодичности фотонного кристалла в виде

$$\frac{4\pi^2}{\varepsilon(z)}\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}. \tag{26}$$

Поскольку диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(z)$ - периодическая функция с периодом фотонного кристалла a, $\varepsilon(z+a)=\varepsilon(z)$,

$$\varepsilon^{-1}(z)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\kappa_m \exp\left(i\frac{2\pi m}{a}z\right), \tag{27}$$

где амплитуды фурье-гармоник $\kappa_{-m}=\kappa_m^*$. По теореме Блоха, собственные решения волнового уравнения в периодическом потенциале (диэлектрической проницаемости) представимы в виде плоских волн,

$$E_k(z,t)=u_k(z)\exp\left(i(kz-\omega_k t)\right), \tag{28}$$

с амплитудой u_k, являющейся периодической функцией с периодом фотонного кристалла a,

$$u_k(z+a)=u_k(z). \tag{29}$$

Волновое число k нумерует моды $E_k(z,t)$, а частота моды поля ω_k является собственным значением волнового уравнения (26). Периодичность функции $E_k(z,t)$ позволяет разложить ее в ряд Фурье

$$E_k(z,t)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}E_m \exp\left(i\left(k+\frac{2\pi m}{a}\right)z-i\omega_k t\right). \tag{30}$$

Используя первые три члена ряда (27),

$$\varepsilon^{-1}(z)\approx\kappa_0+\kappa_1\exp\left(i\frac{2\pi}{a}z\right)+\kappa_{-1}\exp\left(-i\frac{2\pi}{a}z\right), \tag{31}$$

волновое уравнение (26) запишется в виде

$$\begin{aligned}\kappa_1\left(k+\frac{2(m-1)\pi}{a}\right)^2 E_{m-1}+\kappa_{-1}\left(k+\frac{2(m+1)\pi}{a}\right)^2 E_{m+1}\\ \approx\left(\frac{\omega_k^2}{c^2}-\kappa_0\left(k+\frac{2m\pi}{a}\right)^2\right)E_m.\end{aligned} \tag{32}$$

При $m=0$, выражение (32) запишется в виде:

$$E_0\approx\frac{c^2}{(\omega_k^2-\kappa_0 c^2k^2)}\left(\kappa_1\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2 E_{-1}+\kappa_{-1}\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2 E_1\right), \tag{33}$$

а при $m=-1$:

$$E_{-1}\approx\frac{c^2}{(\omega_k^2-\kappa_0 c^2(k-\frac{2\pi}{a})^2)}\left(\kappa_1\left(k-\frac{4\pi}{a}\right)^2 E_{-2}+\kappa_{-1}k^2E_0\right). \tag{34}$$

Выделенными являются частоты $\omega_k\approx\kappa_0^{1/2}ck$ и волновые числа $|k|\approx|k-2\pi/a|$, поскольку в их окрестности E_0 и E_{-1} сингулярно возрастают и являются определяющими в фурье-разложении (30). В этом случае, всеми остальными членами ряда можно пренебречь, и выражения (33) и (34) примут вид системы двух связанных уравнений для амплитуд E_0 и E_{-1}:

$$\begin{aligned}(\omega_k^2-\kappa_0c^2k^2)E_0-\kappa_1c^2\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2E_{-1}=0,\\ \kappa_{-1}c^2k^2E_0+\left(\omega_k^2-\kappa_0c^2\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2\right)E_{-1}=0.\end{aligned} \tag{35}$$

Существование решения системы (35) определяется характеристическим уравнением, получаемым из равенства нулю детерминанта

$$\begin{vmatrix} \omega_k^2 - \kappa_0 c^2 k^2 & -\kappa_1 c^2 \left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 \\ -\kappa_{-1} c^2 k^2 & \omega_k^2 - \kappa_0 c^2 \left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 \end{vmatrix}. \tag{36}$$

Решение характеристического уравнения дает определяет закон дисперсии в окрестности волновых чисел $|k| \approx |k - 2\pi/a|$ в виде:

$$\omega_\pm(k) = \frac{\pi c}{a}\sqrt{\kappa_0 \pm \kappa_1} \pm \frac{ac}{\pi\kappa_1}\left(\kappa_0^2 - \frac{\kappa_1^2}{2}\right)\left(k - \frac{\pi}{a}\right)^2. \tag{37}$$

При $|k| = \pi/a$, закон дисперсии имеет разрыв и в диапазоне частот

$$\frac{\pi c}{a}\sqrt{\kappa_0 - \kappa_1} < \omega < \frac{\pi c}{a}\sqrt{\kappa_0 + \kappa_1} \tag{38}$$

система (35) не имеет решений, т.е. мод электромагнитного поля с такими частотами не существует, что соответствует фотонной запрещенной зоне.

Таким образом, в одномерных фотонных кристаллах при значениях волновых чисел в окрестности $\pm\pi/2$, которые, как будет показано ниже, соответствуют границе первой фотонной зоны Бриллюэна, закон дисперсии электромагнитных волн существенно меняется по сравнению с законом дисперсии однородного вещества, а точно на границе зоны Бриллюэна испытывает разрыв, ширина которого определяется глубиной пространственной модуляции диэлектрической проницаемости в фотонном кристалле.

2.2. Зонная структура одномерных фотонных кристаллов

Продемонстрируем явление аномальной групповой скорости на краях фотонной запрещенной зоны. Групповая скорость $\mathbf{v}_g$ определяется из закона дисперсии как

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial\omega}{\partial\mathbf{k}}. \tag{39}$$

В случае одномерных фотонных кристаллов групповая скорость при $k \approx \pi/a$ задается в виде

$$v_{g\pm}(k) = \pm\frac{2ac}{\pi\kappa_1}\left(\kappa_0^2 - \frac{\kappa_1^2}{2}\right)\left(k - \frac{\pi}{a}\right), \tag{40}$$

где знаки $\pm$ соответствуют разным краям фотонной запрещенной зоны. При $k \to \pi/a$ групповая скорость $v_g \to 0$. Явление малой групповой скорости, достигаемой на краю фотонной запрещенной зоны, носит название аномальной групповой скорости. Поскольку групповая скорость определяет скорость распространения волнового пакета, то ее малость эквивалентна аномально большому времени взаимодействия моды электромагнитного поля с веществом (фотонным кристаллом). Обратим внимание, что на противоположных краях фотонной запрещенной зоны групповая скорость v_{g+} и v_{g-} имеет разные знаки.

Отметим, что найденный закон дисперсии (37) окрестности волновых чисел $|k| \approx \pi/a$ определен при учете лишь трех фурье-компонент разложения в ряд обратной диэлектрической проницаемости (31), что означает замену реального прямоугольного пространственного распределения $\varepsilon(z)$ на синусоидальный. Однако, этого достаточно для качественного описания появления запрещенной фотонной зоны, ее ширины, а также закона дисперсии на ее краю.

3. Фотонная зона Бриллюэна

Закон дисперсии (5) электромагнитной волны в однородной среде определяется для любых значений волновых векторов (волновых чисел). В фотонных кристаллах, обладающих периодической модуляцией диэлектрической проницаемости, волновые вектора, отличающиеся друг от друга на $2m\pi/a$, где m - любое целое число, рассматриваются как эквивалентные. В случае одномерных фотонных кристаллов с периодом модуляции диэлектрической проницаемости a волновые векторы задаются в интервале $[-\pi/a, \pi/a]$, называемой первой зоной Бриллюэна фотонного кристалла.

В двумерном фотонном кристалле с периодической модуляцией диэлектрической проницаемости в двух направлениях с периодами a_1 и a_2 (прямоугольная или квадратная решетка), элементарная (кристаллическая) ячейка образована двумя векторами $\mathbf{a}_1 = (a_1, 0)$ и $\mathbf{a}_2 = (0, a_2)$. Элементарные вектора обратной решетки задаются в виде

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a_1}, 0\right), \mathbf{b}_2 = \left(0, \frac{2\pi}{a_2}\right), \tag{41}$$

а первая зона Бриллюэна представляет собой множество точек в пространстве волновых векторов, построенном на базисе векторов $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$. Компоненты волновых векторов $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ внутри первой зоны Бриллюэна двумерного фотонного кристалла находятся в интервалах $k_x \in [-\pi/a_1, \pi/a_1]$ и $k_y \in [-\pi/a_2, \pi/a_2]$. Граница первой зоны Бриллюэна представляет собой прямоугольник со сторонами длиной $2\pi/a_1$ и $2\pi/a_2$. Первая зона Бриллюэна двумерного фотонного кристалла имеет три точки высокой симметрии - $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi/a_1, 0)$ и $M = (\pi/a_1, \pi/a_2)$. Множество волновых векторов, лежащих между точками Γ и M обозначается Σ, а между Γ и X - Δ.

В двумерном фотонной кристалле с гексагональной решеткой с периодом a, вектора элементарной решетки задаются в виде:

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}\right), \tag{42}$$

а вектора обратной решетки определяются как

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right), \mathbf{b}_2 = \left(0, \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right). \tag{43}$$

Граница первой зоны Бриллюэна такого фотонного кристалла представляет собой правильный шестиугольник со сторонами длиной $4\pi/3a$. Точками высокой симметрии являются $\Gamma = (0, 0)$, $K = (4\pi/3a, 0)$ и $M = (\pi/a, -\pi/\sqrt{3}a)$. Множество волновых векторов, лежащих между точками Γ и K обозначается как T, а между Γ и M - как Σ.

В трехмерном случае рассмотрим зоны Бриллюэна фотонных кристаллов, имеющих объемную кубическую и кубическую гранецентрированную решетки. В первом случае вектора элементарной решетки задаются в виде:

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0), \mathbf{a}_2 = (0, a, 0), \mathbf{a}_3 = (0, 0, a), \tag{44}$$

где a - период решетки. Вектора обратной решетки определяются как

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, 0, 0\right), \mathbf{b}_2 = \left(0, \frac{2\pi}{a}, 0,\right), \mathbf{b}_3 = \left(0, 0, \frac{2\pi}{a}\right). \tag{45}$$

Первая зона Бриллюэна фотонных кристаллов с объемной кубической решеткой представляет собой куб в пространстве волновых векторов с ребрами длиной $2\pi/a$. Классификация точек высокой симметрии в кубической решетке аналогична случаю двумерных фотонных кристаллов с квадратной решеткой, выделяются точки $\Gamma = (0, 0, 0)$, $X = (0, 0, \pi/a)$ и $M = (\pi/a, \pi/a, 0)$. Дополнительной точкой является точка $R = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$, в двумерном случае совпадавшая с M. Множество волновых векторов, лежащих в интервале между точками Γ и X обозначается как Δ, между X и R - как S, между R и M - как T, между Γ и R - как Λ, а между Γ и M - как Σ.

Вектора элементарной решетки трехмерных фотонных кристаллов с кубической гранецентрированной решеткой задаются в виде:

$$\mathbf{a}_1 = a/2\,(0,1,1)\,,\ \mathbf{a}_2 = a/2\,(1,0,1)\,,\ \mathbf{a}_3 = a/2\,(1,1,0)\,, \tag{46}$$

где a - период решетки. Вектора обратной решетки определяются как

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\,(-1,1,1)\,,\ \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\,(1,-1,1)\,,\ \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\,(1,1,-1)\,. \tag{47}$$

Первая зона Бриллюэна фотонных кристаллов с кубической гранецентрированной решеткой имеет вид тела, представленного на рисунке. Сечение плоскостями $(\pm1,0,0)$, $(0,\pm1,0)$ и $(0,0,\pm1)$ зоны Бриллюэна представляют собой квадраты, а плоскостями $(\pm1,\pm1,\pm1)$ - правильные шестиугольники. Классификация точек высокой симметрии для кристаллов с кубической гранецентрированной отличается от случая объемной кубической решетки, отражая более сложную форму зоны Бриллюэна, тем не менее, определение точек Γ и X, а также направлений Δ, Λ и Σ совпадает.

Часть III

Зонная структура фотонных кристаллов

1. Общая формулировка расчета зонной структуры фотонных кристаллов в рамках формализма функций Грина

Анализ оптических свойств фотонных кристаллов органически разбивается на три части. Первой является задача о собственных значениях волнового уравнения внутри фотонных кристаллов той или иной размерности. Решение этой задачи составляет зонная структура фотонных кристаллов, т.е. энергетический спектр мод с волновыми векторами внутри первой зоны Бриллюэна. Рассчитанная зонная структура, или модовый состав поля внутри фотонного кристалла позволяет сделать вывод о наличии запрещенной фотонной зоны для определенных направлений волнового вектора или о существовании полной запрещенной фотонной зоны. Второй задачей, базирующейся на зонной структуре фотонного кристалла, является задача о собственных функциях волнового уравнения. Найденные собственные функции определяют спектры коэффициентов отражения и пропускания фотонных кристаллов для фиксированного волнового вектора. Третий класс задач составляют задачи об оптическом отклике фотонных кристаллов и включающие в себя задачи о спонтанном и вынужденном излучении фотонных кристаллов, нелинейно-оптическом отклике фотонных кристаллов и т.д. Решение этих задач в явном или неявном виде основано на использовании формализма запаздывающих функций Грина.

1.1. Метод разложения по плоским волнам для расчета закона дисперсии фотонных кристаллов

Электромагнитное поле внутри фотонного кристалла подчиняется уравнениям Максвелла в виде:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t}, \tag{48}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r},t)}{\partial t}, \tag{49}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r},t) = 0, \tag{50}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0, \tag{51}$$

где используются стандартные обозначения для векторов напряженности электрического поля $\mathbf{E}$, напряженности магнитного поля $\mathbf{H}$, электрического смещения $\mathbf{D}$ и магнитной индукции $\mathbf{B}$. В уравнениях (51) плотности токов j и связанных зарядов ρ пока исключены. Материальные уравнения запишутся в виде

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \mu\mathbf{H}(\mathbf{r},t),\ \mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{H}(\mathbf{r},t). \tag{52}$$

Магнитная проницаемость μ полагается пока постоянной внутри фотонного кристалла, а диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$ является периодической функцией

$$\varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = \varepsilon(\mathbf{r}), \tag{53}$$

период которой определяется элементарными векторами решетки фотонного кристалла $\mathbf{a}_i$, $i = 1, 2, 3$. Уравнения Максвелла (51) в совокупности с материальными уравнениями (52) могут быть переписаны в виде двух дифференциальных уравнений вида

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t)) = -\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2}, \tag{54}$$

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t)\right) = -\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{H}(\mathbf{r},t)}{\partial t^2}. \tag{55}$$

Уравнения (55) представляют собой волновые уравнения в среде для $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$. Ищем их решения в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{i\omega t},\;\; \mathbf{H}(\mathbf{r},t)=\mathbf{H}(\mathbf{r})e^{i\omega t}. \tag{56}$$

Частота ω является собственной частотой (значением), а $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ - собственными функциями волновых уравнений (55), соответственно. Введем дифференциальные операторы Λ_E и Λ_H по правилу

$$\Lambda_E\mathbf{E}(\mathbf{r})\equiv\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla\times\left(\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r})\right), \tag{57}$$

$$\Lambda_H\mathbf{H}(\mathbf{r})\equiv\nabla\times\left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)\right). \tag{58}$$

Вычисляя вторые производные по времени в выражениях (56), волновые уравнения (55) примут вид

$$\Lambda_E\mathbf{E}(\mathbf{r})=\frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{E}(\mathbf{r}), \tag{59}$$

$$\Lambda_H\mathbf{H}(\mathbf{r})=\frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{H}(\mathbf{r}). \tag{60}$$

Вследствие пространственной периодичности диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{r})$, по теореме Блоха решения уравнений (60) записываются в виде периодических функций вида

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})=\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\;\; \mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})=\mathbf{v}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{61}$$

характеризующихся волновым вектором $\mathbf{k}$ в первой зоне Бриллюэна и номером зоны n. Амплитуды электрической и магнитной компонент поля, $\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{v}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$, являются периодическими функциями с периодом в каждом из пространственных направлений $\mathbf{x}_i$, равным элементарному вектору решетки фотонного кристалла $\mathbf{a}_i$:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i)=\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}),\;\; \mathbf{v}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i)=\mathbf{v}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) \tag{62}$$

Введем элементарные вектора обратной решетки $\mathbf{b}_i$, $i=1,2,3$, фотонного кристалла, задаваемого по правилу:

$$\mathbf{a}_i\cdot\mathbf{b}_j=2\pi\delta_{ij}, \tag{63}$$

где δ_{ij} - символ Кронекера. Определим фазовое пространство, состоящее из множества векторов обратной решетки

$$\mathbf{G}=\sum_{j=1}^{3}l_j\mathbf{b}_j, \tag{64}$$

с произвольными целыми коэффициентами l_j. Периодичность диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{r})$ позволяет разложить обратную ей функцию в ряд Фурье по векторам обратной решетки,

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}=\sum_{\mathbf{G}}\kappa(\mathbf{G})e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \tag{65}$$

Если $\varepsilon(\mathbf{r})$ является действительной функцией, то фурье-коэффициенты $\kappa(\mathbf{G})$ связаны между собой как $\kappa(-\mathbf{G})=\kappa^*(\mathbf{G})$ и задаются обратным преобразованием Фурье:

$$\kappa(\mathbf{G})=\frac{1}{V}\int_V\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}, \tag{66}$$

где V - объем одного периода (ячейки) фотонного кристалла. Поскольку пространственные амплитуды электрической и магнитной компонент поля, $\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{v}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$, являются периодическими функциями, то аналогичное разложение в ряд Фурье может быть проведено и для величин $\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$. Выражения (61) в этом случае примут вид:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \tag{67}$$

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}. \tag{68}$$

Решение волновых уравнений (55), с учетом выражений (56) и (68), оказалось записано в виде бесконечной суммы плоских волн, характеризующихся частотой ω и множеством волновых векторов $\mathbf{k}+\mathbf{G}$. Такой метод решения волнового уравнения называется методом разложения по плоским волнам (plane-wave expansion method).

Используя разложения (65) и (68), волновые уравнения (60) могут быть переписаны в виде:

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}')(\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times \left((\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}')\right) = \frac{\omega^2_{\mathbf{k}n}}{c^2}\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}), \tag{69}$$

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}')(\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times \left((\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}')\right) = \frac{\omega^2_{\mathbf{k}n}}{c^2}\mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}). \tag{70}$$

Численное решение задачи о собственных значениях системы уравнений (70) при заданном наборе коэффициентов $\kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$, определяющим структуру фотонного кристалла, дает закон дисперсии $\omega^2_{\mathbf{k}n}(\mathbf{k})$, т.е. зонную структуру фотонного кристалла. Метод разложения по плоским волнам часто не является оптимальным в смысле численной процедуры и использования вычислительных мощностей. Для хорошей точности решения задачи о собственных значениях, в уравнениях (70) необходимо брать большое число членов в суммировании по $\mathbf{G}'$. Число этих членов N определяется малостью фурье-гармоники диэлектрической проницаемости $\kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$. В реальных задачах $N \sim 10^3$. При этом задача о собственных значениях сводится к диагонализации матрицы размерностью $3N$, определяемой правой частью (70), для каждого значения волнового вектора $\mathbf{k}$. В задачах о зонной структуре трехмерных фотонных кристаллов, состоящих из сфер, и двумерных кристаллов, состоящих из цилиндров, существенно лучшую точность дает метод разложения по сферическим волнам, поскольку такой базис является более естественным для кристаллов такой конфигурации. В этом базисе амплитуды фурье-компонент разложения диэлектрической проницаемости спадают с ростом $\mathbf{G}$ существенно быстрее.

1.2. Запаздывающие функции Грина для расчета оптического отклика фотонных кристаллов

2. Зонная структура трехмерных фотонных кристаллов

2.1. Зонная структура трехмерных фотонных кристаллов с простой кубической решеткой

Рассмотрим зонную структуру трехмерных фотонных кристаллов, состоящих из диэлектрических сфер, упакованных в простую кубическую решетку. Форма зоны Бриллюэна таких фотонных кристаллов была рассмотрена выше. Для расчета зонной структуры методом разложения по плоским волнам, необходимо вычислить фурье-коэффициенты разложения диэлектрической проницаемости. Пусть r_a - радиус сфер, а ε_a - их диэлектрическая проницаемость. Диэлектрическую проницаемость межсферного пространства обозначим ε_b. Зададим радиус-вектор $\mathbf{r}$ внутри одной элементарной ячейки фотонного кристалла с началом в центре сферы. Тогда пространственная зависимость диэлектрической проницаемости фотонного кристалла задается в виде

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \frac{1}{\varepsilon_b} + \left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) S(\mathbf{r}), \tag{71}$$

где

$$S(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{r}| \le r_a \\ 0, & |\mathbf{r}| > r_a \end{cases}. \tag{72}$$

Подставляя выражение (71) для $1/\varepsilon$ в выражение (66) для фурье-коэффициентов $\kappa(\mathbf{G})$, получим:

$$\kappa(\mathbf{G}) = \frac{1}{\varepsilon_b}\delta(\mathbf{G}) + \frac{1}{V_0}\left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right)\Gamma(\mathbf{G}), \tag{73}$$

где

$$\Gamma(\mathbf{G}) = \int_{V_0} S(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \tag{74}$$

Взятие интеграла $\Gamma(\mathbf{G})$ удобно делать в сферических координатах (r, θ, φ) с углом места $\theta = 0$ совпадающим с направлением вектора G. В этих координатах при $\mathbf{G} \neq 0$

$$\Gamma(\mathbf{G}) = 2\pi \int_0^{r_a} dr \int_0^{\pi} d\theta r^2 \sin\theta e^{-iGr\cos\theta} = \tag{75}$$

$$= \frac{4\pi}{G^3}\left(\sin Gr_a - Gr_a \cos Gr_a\right), \tag{76}$$

а при $\mathbf{G} = 0$

$$\Gamma(\mathbf{G}) = \frac{4\pi r_a^3}{3}. \tag{77}$$

Введем удельный объем, занимаемый сферой внутри элементарной ячейки фотонного кристалла:

$$f = \frac{4\pi r_a^3}{3V_0}. \tag{78}$$

Тогда выражения для фурье-коэффициентов разложения диэлектрической проницаемости примут вид:

$$\begin{aligned} \kappa(0) &= \frac{f}{\varepsilon_a} + \frac{f-1}{\varepsilon_b}, \\ \kappa(\mathbf{G}) &= 3f\left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right)\left(\frac{\sin Gr_a}{(Gr_a)^3} - \frac{\cos Gr_a}{(Gr_a)^2}\right). \end{aligned} \tag{79}$$

Зонная структура фотонного кристалла с кубической решеткой, рассчитанная при определенных соотношениях между ε_a и ε_b, а также при фиксированном удельном объеме (степени заполнения), представлена на рисунке. Обратим внимание на отсутствие полной фотонной запрещенной зоны, т.е. области частот, где нет состояний с любым разрешенным значением волнового вектора. Однако, зонная структура имеет три частичные запрещенные зоны для мод с волновыми векторами вдоль направления Δ зоны Бриллюэна. В области высоких частот, частичная запрещенная зона существует для волновых векторов вдоль направления Σ. Зонная структура имеет несколько пологих ветвей, например, нижние третьи и пятые зоны вдоль направлений Δ и Σ. "Пологость"

2.2. Зонная структура трехмерных фотонных кристаллов с кубической гранецентрированной решеткой. Опалы и инвертированные опалы

2.3. Зонная структура трехмерных фотонных кристаллов с кубической решеткой типа алмаза

3. Зонная структура двумерных фотонных кристаллов

3.1. Зонная структура двумерных фотонных кристаллов с квадратной решеткой

Рассмотрим зонную структуру двумерного фотонного кристалла, образованного диэлектрическими цилиндрами радиусом r_a, оси которых находятся в узлах квадратной решетки с периодом a. Обозначим диэлектрическую проницаемость цилиндров ε_a, а диэлектрическую проницаемость пространства между ними ε_b. Вектора обратной решетки $\mathbf{G}$ и радиус-векторы $\mathbf{r}$ заданы в плоскости, перпендикулярной цилиндрам. Диэлектрическая проницаемость задается в виде, аналогичном выражениям (71) и (72):

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \frac{1}{\varepsilon_b} + \left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) S_2(\mathbf{r}), \tag{80}$$

где

$$S_2(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{r}| \le r_a \\ 0, & |\mathbf{r}| > r_a \end{cases}. \tag{81}$$

Обратная диэлектрическая проницаемость $1/\varepsilon(\mathbf{r})$ раскладывается в ряд Фурье по векторам обратной решетки $\mathbf{G}$ с фурье-гармониками

$$\kappa(\mathbf{G}) = \frac{1}{\varepsilon_b}\delta(\mathbf{G}) + \frac{1}{\Sigma_0}\left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) \Gamma_2(\mathbf{G}), \tag{82}$$

где

$$\Gamma_2(\mathbf{G}) = \int_{\Sigma_0} S_2(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \tag{83}$$

Σ_0 в выражениях (82) и (83) - площадь, приходящаяся на один период фотонного кристалла в плоскости, перпендикулярной осям цилиндров, $\Sigma_0 = a^2$. В полярных координатах (r, φ) с азимутальным углом φ, отсчитываемым от направления вектора $\mathbf{G}$, интеграл $\Gamma_2(\mathbf{G})$ примет вид:

$$\Gamma_2(\mathbf{G}) = \int_0^{r_a} dr \int_0^{2\pi} d\varphi r e^{-iGr\cos\varphi}, \tag{84}$$

где $G = |\mathbf{G}|$. Используя свойство бесселевых функций $J_l(x)$ порядка l

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(x) e^{il\sin\xi} = e^{ix\sin\xi}, \tag{85}$$

получим, что

$$\Gamma_2(\mathbf{G}) = \int_0^{r_a} dr \int_0^{2\pi} d\varphi r \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(Gr) e^{il\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)} = \tag{86}$$

$$= 2\pi \int_0^{r_a} r J_0(Gr) dr = \frac{2\pi r_a}{G} J_1(G r_a), \tag{87}$$

где в последнем равенстве использовано свойство производной бесселевых функций: $(xJ_1(x))' = xJ_0(x)$. Введя удельную площадь, занимаемую цилиндром в плоскости, перпендикулярной его оси, $f = \frac{\pi r_a^2}{\Sigma_0} = \frac{\pi r_a^2}{a^2}$, получим окончательное выражение для амплитуд фурье-гармоник

$$\begin{aligned} &\kappa(\mathbf{G}) = 2f\left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) \frac{J_1(G r_a)}{G r_a}, \quad \mathbf{G} \neq 0 \\ &\kappa(0) = \frac{f}{\varepsilon_a} + \frac{f-1}{\varepsilon_b}. \end{aligned} \tag{88}$$

3.2. Зонная структура двумерных фотонных кристаллов с гексагональной решеткой

Часть IV

Распространение света в фотонных кристаллах

1. Спектр отражения и пропускания одномерных фотонных кристаллов

1.1. Метод матриц распространения для расчета отражения и пропускания света в одномерных фотонных кристаллах

Рассмотрим линейно-поляризованную плоскую волну $\mathbf{E}_0^+ \exp(i(\mathbf{k}_0^\omega \mathbf{r} - \omega t))$ с волновым вектором $\mathbf{k}_0^\omega$ и частотой ω, падающую под углом падения θ_0 на многослойную среду, состоящую из N слоев, характеризующихся толщиной d_j и, в общем случае, комплексной диэлектрической проницаемостью ε_j и коэффициентом преломления $n_j = \sqrt{}$, $j = 1...N$. Пусть ось z задает нормаль к слоям, а плоскость xz является плоскостью падения волны. Прошедшее и отраженное от многослойной структуры электромагнитное поле является результатом многолучевой интерференции в каждом из ее слоев. Однако, в силу линейности волнового уравнения, в каждом из слоев поле является суперпозицией двух волн, распространяющихся, соответственно, в положительном и отрицательном направлении оси z (далее называемыми прямой и обратной волнами):

$$\begin{array}{l} \mathbf{E}_j^\omega(z,t) = \\ \mathbf{E}_j^+ \exp[(+ik_{z,j}^\omega(z - z_{ij}) + (ik_x^\omega x - i\omega t)] + \\ \mathbf{E}_j^- \exp[(-ik_{z,j}^\omega(z - z_{ij}) + (ik_x^\omega x - i\omega t)]. \end{array} \tag{89}$$

Тангенциальная компонента волнового вектора $k_x^\omega = |\mathbf{k}_0^\omega| \sin\theta_0$ сохраняется постоянной внутри многослойной структуры, что является следствием трансляционной симметрии вдоль слоев, а нормальная компонента $k_{z,j}^\omega = |\mathbf{k}_j^\omega| \cos\theta_j$ определяется дисперсией j-го слоя. Амплитуды прямой и обратной волн $\mathbf{E}_j^+$ и $\mathbf{E}_j^-$ в уравнении (89) являются комплексными величинами вследствие многолучевой интерференции. Ограничиваясь рассмотрением стационарного случая, множителями $\exp(ik_x^\omega x - i\omega t)$ далее будем пренебрегать.

Электрическая компонента электромагнитного поля на границе раздела i-го и j-го слоев ($i < j$) с координатой z_{ij} записывается в виде

$$\begin{array}{l} \mathbf{E}_j^\omega(z_{ij} + 0) = \mathbf{E}_j^+ + \mathbf{E}_j^- \\ \mathbf{E}_i^\omega(z_{ij} - 0) = \mathbf{E}_i^+ + \mathbf{E}_i^-, \end{array} \tag{90}$$

Соотношение между $\mathbf{E}_i^\omega$ и $\mathbf{E}_j^\omega$ определяется граничными условиями для тангенциальных компонент электрических и магнитных составляющих, которое может быть записано в виде следующего матричного уравнения:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_i^+ \\ \mathbf{E}_i^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/t_{ij} & r_{ij}/t_{ij} \\ r_{ij}/t_{ij} & 1/t_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_j^+ \\ \mathbf{E}_j^- \end{pmatrix}, \tag{91}$$

где t_{ij} и r_{ij} коэффициенты Френеля для отражения и прохождения поля, падающего из i-го слоя, через ij-ю границу раздела. Совокупность амплитуд $\mathbf{E}_j^+$ и $\mathbf{E}_j^-$ будем рассматривать как двухкомпонентный вектор

$$\mathbf{E}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_j^+ \\ \mathbf{E}_j^- \end{pmatrix}, \tag{92}$$

преобразование которого на ij-ой границе раздела задается матрицей $\mathbf{M}_{ij}$:

$$\mathbf{M}_{ij} = \begin{pmatrix} 1/t_{ij} & r_{ij}/t_{ij} \\ r_{ij}/t_{ij} & 1/t_{ij} \end{pmatrix}. \tag{93}$$

в виде тензорной свертки

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{M}_{ij} \cdot \mathbf{E}_j. \tag{94}$$

$\mathbf{M}_{ij}$ является матрицей преобразования для ij-той границы раздела.

Поля в точках z_j и $z_j + \zeta$ внутри j-го слоя связаны матрицей распространения $\mathbf{\Phi}_j(\zeta)$:

$$\mathbf{\Phi}_j(\zeta) = \begin{pmatrix} \exp(ik^{\omega}_{z,j}\zeta) & 0 \\ 0 & \exp(-ik^{\omega}_{z,j}\zeta) \end{pmatrix}, \tag{95}$$

в виде

$$\mathbf{E}_j(z_j + \zeta) = \mathbf{\Phi}_j(\zeta) \cdot \mathbf{E}_j(z_j) \tag{96}$$

Полная 2×2 матрица распространения через многослойную среду имеет вид:

$$\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}_{(N+1)0} = \mathbf{M}_{(N+1)N}\mathbf{\Phi}_N ... \mathbf{M}_{10}, \tag{97}$$

где $\mathbf{\Phi}_m = \mathbf{\Phi}_m(d_m)$. Таким образом, в предположении, что в слое последнем слое (заднем полупространстве) $N+1$ бегущая назад волна отсутствует, а на границу раздела $0-1$ падает единичная волна, можно связать поля в первом и последнем слоях:

$$\begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix}. \tag{98}$$

Коэффициент отражения от многослойной среды R задается как

$$R = -T^{21}/T^{22}, \tag{99}$$

где T^{21}, T^{22} - соответствующие матричные элементы $\mathbf{T}$. Коэффициент пропускания многослойной среды T запишется в виде

$$T = \frac{T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21}}{T_{22}}. \tag{100}$$

Если амплитуда падающей волны полагается равной единице, то двухкомпонентный вектор поля перед многослойной средой $\mathbf{E}^{\omega}_0 = (1, R)$, а пространственное распределение поля внутри структуры задается следующим выражением:

$$\begin{gathered} \mathbf{E}^{\omega}_j(z) = \mathbf{T}_j(z)\mathbf{E}^{\omega}_0 = \\ \begin{pmatrix} \exp(ik^{\omega}_{z,j}z) & 0 \\ 0 & \exp(-ik^{\omega}_{z,j}z) \end{pmatrix}. \\ \mathbf{M}_{j(j-1)}\mathbf{\Phi}_{(j-1)} ... \mathbf{M}_{10} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix}. \end{gathered} \tag{101}$$

Метод матриц распространения применим для любых многослойных структур. В случае одномерных фотонных кристаллов, где толщины d_j и диэлектрические проницаемости ε_j слоев изменяются периодически, выражения для коэффициента пропускания (1.1) и коэффициента отражения (1.1) имеют аналитическое выражение. Дисперсионное соотношение для волны с квазиволновым числом q, распространяющейся внутри одномерного фотонного кристалла, состоящего из чередующихся слоев толщиной d_1 и d_2 и коэффициентами преломления n_1 и n_2, имеет вид [3]:

$$\cos(qd) = \cos(k_1 d_1)\cos(k_2 d_2) - \frac{1}{2}\left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1}\right)\sin(k_1 d_1)\sin(k_2 d_2). \tag{102}$$

"Парциальные" волновые числа $k_{1(2)} = \sqrt{\varepsilon_{1(2)}\dfrac{\omega}{c} - k_x}$ характеризуют распространение электромагнитной волны частотой ω в каждом из слоев, k_x - проекция волнового вектора на плоскость слоев, сохраняющаяся при прохождении волны через границы раздела слоев, $d = d_1 + d_2$ - период фотонного кристалла. Обозначим френелевские коэффициенты пропускания и отражения от границы раздела слоев как t_1 и r_1. Коэффициенты пропускания и отражения света от фотонного кристалла из N слоев, когда вне его диэлектрическая постоянная принята равной ε_1, имеют вид:

$$t_N = \cos(Nqd) - H\frac{\sin(Nqd)}{\sin(qd)}, \;\; r_N = \frac{r_1}{t_1}\frac{\sin(Nqd)}{\sin(qd)}t_N, \tag{103}$$

где

$$H = \frac{1}{2t_1}\left(\left(t_1^2 - r_1^2 - 1\right)\cos(qd) + i\left(t_1^2 - r_1^2 + 1\right)\sin(qd)\right). \tag{104}$$

Если диэлектрическая проницаемость вне фотонного кристалла не равна ε_1, то в выражении (103) необходимо учесть коэффициенты пропускания (отражения) света реальными передней и задней диэлектрическими границами конечной периодической структуры, $t_I(r_I)$ и $t_{II}(r_{II})$. В этом случае, пропускание фотонного кристалла запишется в виде:

$$T_N = \left|\frac{t_N \cdot t_I \cdot t_{II}}{\Delta_N}\right|^2, \tag{105}$$

где знаменатель

$$\Delta_N = 1 + (r_I - r_{II})r_N + r_I r_{II}\left(t_N^2 - r_N^2\right). \tag{106}$$

Численный расчет спектра коэффициента пропускания света $T_N(\omega)$ показывает, что при падении света на фотонный кристалл в спектре имеется полоса частот, в которой пропускание отсутствует даже в случае пренебрежимо малых потерь (действительных n_1 и n_2). Вне провала наблюдаются осцилляции, обусловленные интерференцией света на внешних границах фотонного кристалла. Положение и ширина провала в спектре пропускания обусловлено запрещенной зоной в одномерном законе дисперсии электромагнитных волн, соответствующей комплексным значениям квазиволнового вектора q в уравнении (102).

1.2. Метод эффективной среды для описания отражения и пропускания света конечными одномерными фотонными кристаллами

Рассмотрим одномерный фотонный кристалл, состоящий из N периодов чередующихся слоев с толщинами a и b, соответственно, с направлением периодичности вдоль оси z. Период фотонного кристалла имеет длину $\Lambda = a + b$, а полная толщина фотонного кристалла $L = N\Lambda$. В приближении плоских волн и отсутствия поглощения, уравнение Гельмгольца для эволюции напряженности электромагнитного поля Φ_ω на частоте ω запишется в виде:

$$\frac{d^2\Phi_\omega}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_\omega(z)\Phi_\omega = 0, \tag{107}$$

где $\varepsilon_\omega(z)$ - действительная диэлектрическая проницаемость фотонного кристалла. Обозначим коэффициенты отражения и пропускания как r_ω и t_ω. Граничные условия для уравнения (107) на передней ($z = 0$) и задней ($z = L$) поверхностях запишутся в виде:

$$\begin{gathered} 1 + r_\omega = \Phi_\omega(0), \;\; t_\omega = \Phi_\omega(L), \\ i\frac{\omega}{c}(1 - r_\omega) = \frac{d\Phi_\omega(0)}{dz}, \;\; i\frac{\omega}{c}t_\omega = \frac{d\Phi_\omega(L)}{dz}. \end{gathered} \tag{108}$$

Будем считать, что Φ_ω, r_ω и t_ω безразмерны и заданы в единицах напряженности падающего электромагнитного поля, $\Phi_\omega(z) = E_\omega(z)/E^I_\omega$, $r_\omega = E^r_\omega/E^I_\omega$, и $t_\omega = (E^t_\omega/E^I_\omega)e^{i(\omega/c)L}$. коэффициенты отражения и пропускания r_ω и t_ω, а также пространственное распределение электромагнитного поля внутри фотонного кристалла могут быть найдены методом матриц распространения. Одномерный фотонный кристалл необходимо рассматривать как открытый резонатор, поскольку электромагнитное поле никогда не запирается в нем, проникая в фотонный кристалл и выходя из него, поскольку коэффициент отражения никогда не достигает единицы, а коэффициент пропускания - нуля. Это означает, что для конечного фотонного кристалла, решение волнового уравнения не дает истинные собственные значения в смысле полного базиса разложения электромагнитного поля в ящике квантования размером L, а значит, и понятие плотности фотонных мод для конечного фотонного кристалла, в общем случае, не корректно. В конечных фотонных кристаллах возможно ввести лишь эффективную плотность фотонных мод в виде:

$$\rho_\omega \equiv \frac{1}{2Lc}\int_0^L \left[\varepsilon_\omega(z)|\Phi_\omega(z)|^2 + \frac{c^2}{\omega^2}\left|\frac{d\Phi_\omega(z)}{dz}\right|^2\right] dz, \tag{109}$$

имеющего смысл усредненной по размеру фотонного кристалла плотности энергии электромагнитной волны, нормированной на плотность энергии падающей волны и выраженной в единицах $1/c$. Используя граничные условия (108), выражение (109) может быть записано в виде

$$\rho_\omega = \frac{1}{Lc}\int_0^L \varepsilon_\omega(z)|\Phi_\omega(z)|^2 dz - \frac{1}{L\omega}\mathrm{Im}(r_\omega). \tag{110}$$

Далее, можно ввести понятие эффективного закона дисперсии $k_{eff}(\omega)$. Действительная часть эффективного закона дисперсии, $k_r(\omega)$, находится как решение дифференциального уравнения вида

$$\frac{dk_r(\omega)}{d\omega} = \rho_\omega \tag{111}$$

с начальным условием $k_r(\omega) = 0$. Мнимая часть эффективного закона дисперсии, $k_i(\omega)$, может быть найдена из соотношения Крамерса-Кронига, связанного с принципом причинности:

$$k_i(\omega) = -\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\Omega k_r(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega, \tag{112}$$

считая, что для отрицательно-определенной области частот $k_r(-\omega) = -k_r(\omega)$. Таким образом, эффективный закон дисперсии конечного одномерного фотонного кристалла запишется в виде

$$k_{eff}(\omega) = k_r(\omega) + ik_i(\omega). \tag{113}$$

Найденному значению эффективного волнового числа k_{eff} можно сопоставить эффективный показатель преломления n_{eff}, определяемый из выражения

$$k_{eff}(\omega) = \frac{\omega}{c}n_{eff} = \frac{\omega}{c}\left(n_r(\omega) + in_i(\omega)\right). \tag{114}$$

Зависимость $n_r(\omega)$ в окрестности фотонной запрещенной зоны характерна для аномальной дисперсии, $dn_r(\omega)/d\omega < 0$ для частот внутри фотонной запрещенной зоны. Значение n_i осциллирует вблизи нуля для частот вне фотонной запрещенной зоны и резонансно возрастает при перестройки частоты в запрещенную зону.

2. Дифракция света в двумерных фотонных кристаллах

2.1. Расчет отражения и пропускания двумерных фотонных кристаллов методом разложения по плоским волнам

Рассмотрим плоскую электромагнитную волну с волновым вектором $\mathbf{k}_i$, падающую из среды 1 под углом падения θ на фотонный кристалл, занимающий слой 2, в плоскости, перпендикулярную осям цилиндров, составляющих двумерный кристалл. Введем систему координат с осью z, совпадающей с направлениями цилиндров, и плоскостью xz, задающей плоскость падения. В выбранной системе координат волновой вектор падающего излучения имеет координаты $\mathbf{k}_i = (k_x, k_{1y}, 0) = (k_1 \sin\theta, k_1 \cos\theta, 0)$ с волновым числом $k_1 = \sqrt{\varepsilon_1}\omega/c$. В силу периодичности фотонного кристалла вдоль направления x, отраженное и прошедшее через фотонный кристалл электромагнитное поле является суперпозицией плоских волн, называемых брэгговскими волнами, имеющих волновые вектора $\mathbf{k}_r^{(n)}$ и $\mathbf{k}_t^{(n)}$ $(n = 0, \pm1, \pm2...)$, соответственно, лежащие в плоскости xy. Брэгговские волны с $\mathbf{k}_r^{(0)}$ и $\mathbf{k}_t^{(0)}$ определяют зеркальное отражение и прямое пропускание, с волны с $\mathbf{k}_r^{(\pm1)}$, $\mathbf{k}_t^{(\pm1)}$ и т.д. характеризуют дифрагированные отраженные (прошедшие) волны порядка ±1.... Тангенциальные компоненты волновых векторов брэгговских волн порядка n задаются в виде

$$k_{r,x}^{(n)} = k_{t,x}^{(n)} = k_x^{(n)} = k_x + G_n, \tag{115}$$

где

$$G_n = 2\pi n/a, \;\; n = \pm1, \pm2... \tag{116}$$

являются векторами обратной решетки фотонного кристалла с периодом a. Выражение (115) является, по сути дела, утверждением о сохранении тангенциальной компоненты волнового вектора, что следует из трансляционной симметрии рассматриваемой системы в плоскости xz с дополнительным учетом периодичности вдоль направления x. Нормальные компоненты волновых векторов брэгговских волн порядка n находятся из условия сохранения волновых чисел k_1 и $k_3 = \sqrt{\varepsilon_3}\omega/c$. Для отраженных волн выражения для $k_{r,y}^{(n)}$ имеет вид

$$k_{r,y}^{(n)} = \begin{cases} -\sqrt{k_1^2 - (k_x^{(n)})^2}, & k_1 \geq |k_x^{(n)}| \\ -i\sqrt{(k_x^{(n)})^2 - k_1^2}, & k_1 < |k_x^{(n)}| \end{cases}. \tag{117}$$

Аналогично, для нормальные компоненты волновых векторов прошедших брэгговских задаются в виде

$$k_{t,y}^{(n)} = \begin{cases} \sqrt{k_3^2 - (k_x^{(n)})^2}, & k_3 \geq |k_x^{(n)}| \\ -i\sqrt{(k_x^{(n)})^2 - k_3^2}, & k_1 < |k_x^{(n)}| \end{cases}. \tag{118}$$

В дальнейшем, достаточно рассмотреть случаи двух характерных поляризаций падающей электромагнитной волны, $E \| z$ и $E \perp z$. Случай произвольной поляризации будет представлять собой их линейную суперпозицию.

Рассмотрим подробнее случай поляризации электрической компоненты вдоль осей цилиндров, $E \| z$. Поле в среде 1 является суперпозицией падающей волны и отраженных брэгговских волн:

$$E_{1z}(\mathbf{r}) = E_0 e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n e^{i\mathbf{k}_r^{(n)} \cdot \mathbf{r}}, \tag{119}$$

где E_0 - амплитуда падающей волны, R_n - амплитуда отраженной брэгговской волны порядка n, а $\mathbf{r}$ - двумерный радиус-вектор в плоскости, перпендикулярной осям цилиндров фотонного кристалла. Поле в среде 3 является суперпозицией прошедших брэгговских волн:

$$E_{3z}(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n e^{i\mathbf{k}_t^{(n)}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{L})}, \tag{120}$$

где T_n - амплитуда прошедшей брэгговской волны порядка n, $\mathbf{L} = (0, L)$, а L - толщина фотонного кристалла. Амплитуды полей R_n и T_n находятся из решения волнового уравнения для волны, распространяющейся в фотонном кристалле (среда 2), которое записывается в виде:

$$\Lambda_E E_{2z}(\mathbf{r}) \equiv \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\omega^2}{c^2} \right\} E_{2z}(\mathbf{r}) = 0, \tag{121}$$

где ω - частота волны. Для решения волнового уравнения (121) введем функцию $f_E(x, y)$ специального вида:

$$f_E(x,y) \equiv \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ yT_n + (L-y)\left(\delta_{n0}E_0 + R_n\right) \right\} e^{ik_x^{(n)}x}, \tag{122}$$

где δ_{n0} - символ Кронекера. Функция $f_E(x, y)$ сконструирована таким образом, чтобы на границах фотонного кристалла задавать поля E_{1z} и E_{3z}:

$$f_E(x,0) = E_{1z}(x,0), \;\; f_E(x,L) = E_{3z}(x,L). \tag{123}$$

Наконец, введя разностную функцию

$$\psi_E(x,y) = E_{2z}(x,y) - f_E(x,y), \tag{124}$$

удовлетворяющую нулевым граничным условиям

$$\psi_E(x,0) = \psi_E(x,L) = 0, \tag{125}$$

волновое уравнение (121) запишется в виде

$$\Lambda_E \psi_E(x,y) = -\Lambda_E f_E(x,y). \tag{126}$$

Разложим функции $\psi_E(x, y)$ и $1/\varepsilon(x, y)$ в ряд Фурье:

$$\psi_E(x,y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} e^{ik_x^{(n)}x} \sin\frac{m\pi}{L}y, \tag{127}$$

и

$$\frac{1}{\varepsilon(x,y)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \kappa_{nm} e^{i\left(G_n x + \frac{m\pi}{L}y\right)}. \tag{128}$$

Подставим в выражение (122) для $f_E(x, y)$ формальные разложения в ряд Фурье

$$\frac{y}{L} = \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m} \sin\frac{m\pi}{L}y, \quad 1 = \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1-(-1)^m}{m} \sin\frac{m\pi}{L}y \tag{129}$$

С учетом выражений (127) и (128), волновое уравнение (126) для фиксированных чисел n и m примет вид:

$$\begin{aligned} &\frac{\omega^2}{c^2} A_{nm} + \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \sum_{m'=1}^{\infty} \left\{ \left(k_x^{(n')}\right)^2 + \left(\frac{m'\pi}{L}\right)^2 \right\} \left(\kappa_{n-n',m+m'} - \kappa_{n-n',|m-m'|}\right) A_{n'm'} = \\ &= -\frac{2\omega^2}{\pi c^2} \frac{(-1)^{m-1}T_n + R_n + \delta_{n0}E_0}{m} + \\ &+ \frac{2}{\pi} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \left(k_x^{(n')}\right)^2 \sum_{m'=1}^{\infty} \left(\kappa_{n-n',|m-m'|} - \kappa_{n-n',m+m'}\right) \frac{(-1)^{m'-1}T_{n'} + R_{n'} + \delta_{n'0}E_0}{m'}. \end{aligned} \tag{130}$$

Дополнительными уравнениями для нахождения коэффициентов A_{nm}, R_n и T_n являются граничные условия непрерывности тангенциальной (x) компоненты магнитного поля, принимающие вид

$$\pi \sum_{m=1}^{\infty} m A_{nm} = \left(iLk_{r,y}^{(n)} + 1\right) R_n - T_n + \delta_{n0} E_0 (iLk_{1,y} + 1) \tag{131}$$

для плоскости $y = 0$ и

$$\pi \sum_{m=1}^{\infty} m(-1)^m A_{nm} = R_n + \left(iLk_{t,y}^{(n)} - 1\right) T_n + \delta_{n0} E_0 \tag{132}$$

для плоскости $y = L$. Система уравнений для p-поляризованного излучения может быть получена аналогично.

2.2. Случай двумерных фотонных кристаллов с квадратной решеткой

Решение системы уравнений () для конкретного фотонного кристалла определяется фурье-амплитудами κ_{nm} разложения (128) обратной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x, y)$. Получим выражения для κ_{nm} в случае двумерного фотонного кристалла с квадратной решеткой. Аналогичные выражения для бесконечного кристалла были получены в ... . Однако, в задаче об отражении и пропускании фотонного кристалла, важным фактором является его ограниченность, которая приводит к модификации выражений для κ_{nm}. Обратная диэлектрическая проницаемость двумерного фотонного кристалла, состоящего из N слоев и занимающего интервал $0 \le y \le L$ записывается в виде:

$$\frac{1}{\varepsilon(x, y)} = \frac{1}{\varepsilon_b} + \left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) \sum_{j=1}^{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{j'=0}^{N-1} S(\mathbf{r} - \mathbf{u}_j(l, l')). \tag{133}$$

Функция $S(\mathbf{r})$ задается аналогично выражению (81)

$$S(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{r}| \le r_a \\ 0, & |\mathbf{r}| > r_a \end{cases}, \tag{134}$$

а двумерные вектора $\mathbf{u}_j(l, l')$ целочисленных аргументов l и l' задаются в виде:

$$\mathbf{u}_1(l, l') = (al, al' + r_a + d), \tag{135}$$

$$\mathbf{u}_2(l, l') = (al, -al' - r_a - d). \tag{136}$$

Здесь и далее для простоты вычислений будем полагать, что толщина фотонного кристалла L и расстояние от поверхностей до осей цилиндров первого (последнего) ряда d соразмерны периоду фотонного кристалла:

$$r_a + d = \frac{a}{2}, \quad L = Na. \tag{137}$$

Фурье-амплитуды κ_{nm} разложения (128) определяются в виде двойных интегралов

$$\kappa_{nm} = \frac{1}{2aL} \int_0^a dx \int_{-L}^{L} dy \frac{1}{\varepsilon(x, y)} e^{-i\left(G_n x + \frac{m\pi}{L} y\right)}. \tag{138}$$

Симметричные пределы интегрирования по y подразумевают, что для удобства вычисления фотонный кристалл был периодически продолжен на интервал $-L \le y \le 0$, что не меняет выражения для κ_{nm} в интервале $0 \leq y \leq L$. Окончательные выражения для κ_{nm} имеют вид:

$$\kappa_{nm} = \begin{cases} \dfrac{f}{\varepsilon_a} + \dfrac{1-f}{\varepsilon_b}, & n = 0, m = 0 \\ 2f\left(\dfrac{1}{\varepsilon_a} - \dfrac{1}{\varepsilon_b}\right)\dfrac{J_1(G_{nm}r_a)}{G_{nm}r_a}, & n \neq 0, m = 0 \\ 2f\left(\dfrac{1}{\varepsilon_a} - \dfrac{1}{\varepsilon_b}\right)(-1)^j\dfrac{J_1(G_{nm}r_a)}{G_{nm}r_a}, & m = 2jN \\ 0 \end{cases} \tag{139}$$

2.3. Случай двумерных фотонных кристаллов с гексагональной решеткой

3. Дифракция света в трехмерных фотонных кристаллов

3.1. Отражение и пропускание света в синтетических опалах вдоль направления роста и одномерная дифракция на плоскостях (111)

Ростовая поверхность трехмерного фотонного кристалла синтетического опала образована гексагональными плотноупакованными слоями сферических частиц аморфного диоксида кремния (a-SiO_2), которые далее будем называть ростовыми слоями. Взаимное расположение шаров a-SiO_2 в нескольких слоях, расположенных друг над другом, соответствует плотной упаковке ГЦК решетки опала. Таким образом, в терминах ГЦК решетки, ростовые слои опала соответствуют плоскости (111), а направление роста ζ - направлению [111]. Спектры пропускания света, распространяющегося по нормали к поверхности пластинки, т.е. вдоль направления ζ, соответствуют направлению Λ фотонной зоны Бриллюэна ГЦК решетки опалов, из точки Γ в точку L. При таком геометрии падения света на ростовую поверхность кристалла возникает дифракция на системе атомных плоскостей (111) опала, которой соответствует вектор обратной решетки $\mathbf{G}_{111}$, направленный вдоль Λ. Если d - межплоскостное расстояние в направлении [111], то $|\mathbf{G}_{111}| = 2\pi/d$. Аналогично случаю рассеяния рентгеновских лучей на системе атомных плоскостей обычных кристаллов, условие брэгговского рассеяния света на системе атомных плоскостей (111) фотонного кристалла определяется выражением

$$|\mathbf{G}_{111}|^2 = -2\mathbf{k}\cdot\mathbf{G}_{111}, \tag{140}$$

где $\mathbf{k}$ - квазиволновой вектор электромагнитной волны в фотонном кристалле. При выполнении условия (140) свет когерентно отражается от всего набора плоскостей (111), а спектр пропускания имеет характерную полосу, соответствующую фотонной запрещенной зоне в направлении Λ. Спектральное положение минимума коэффициента пропускания, λ_{PBG}, определяется как

$$\lambda_{PBG} = 2dn_{eff}\cos\theta, \tag{141}$$

где n_{eff} - эффективный показатель преломления, а θ - угол падения излучения на образец опала. Межплоскостное расстояние определяется радиусом R шаров a-SiO_2 и при условии плотной упаковки шаров $d = d_{[111]} = R\sqrt{8/3} \approx 1.63R$. Для описания поведения спектра пропускания и отражения опалов в зеркальном направлении при распространении света вблизи направления роста применима модель одномерного фотонного кристалла. Эффективная диэлектрическая проницаемость опала в направлении роста отражает периодичность его структуры и задается в виде:

$$\varepsilon_{eff}(\zeta) = \varepsilon_a S(\zeta) + \varepsilon_b(1 - S(\zeta)). \tag{142}$$

ε_a и ε_b обозначают диэлектрические проницаемости шаров и пор между ними, соответственно. Функция $S(\zeta)$ определяет, какая часть площади в плоскости $z = \zeta$, занята шарами a-SiO_2. Используя выражения для пропускания одномерного фотонного кристалла (105), можно получить модельный спектр пропускания опала вдоль направления [111]. При расчетах, в выражениях (103,104,105) плотноупакованный слой шаров опала заменяется диэлектрическим слоем шириной b и коэффициентами отражения и пропускания r_1 и t_1, соответственно.

В случае наклонного падения монохроматического света с длиной волны λ на систему ростовых плоскостей (111) дифракционная картина представляет собой единственное интенсивное пятно в зеркальном направлении. Наибольшая интенсивность зеркального рефлекса достигается при условии, что длина волны падающего излучения удовлетворяет условию Брэгга (141), $\lambda = \lambda_{PBG}$. При наклонном падении белого света на ростовую плоскость (111) наблюдается окрашенный рефлекс в направлении зеркального отражения. Максимальное дифракционное рассеяние наблюдается в направлении, отвечающему углу зеркального отражения, для длины волны $\lambda = \lambda_{PBG}$, удовлетворяющему условию Брэгга (141). Спектрально-угловое уширение дифракционного рефлекса обусловлено флуктуациями нормали к системам плоскостей (111) относительно макроскопической оси роста образца.

Отметим, что в реальном эксперименте, поскольку поверхность образца совпадает с ростовой плоскостью (111) опала, помимо брэгговской дифракции, обусловленной взаимодействием света с периодическими компонентами диэлектрической проницаемости, наблюдается также зеркальное отражение, обусловленное взаимодействием с однородным (пространственно усредненным) диэлектрическим фоном. Диаграмма упругого рассеяния $\mathbf{k} \longrightarrow \mathbf{k}'$, обусловленная вектором обратной решетки $\mathbf{G}_{111}$, направленного перпендикулярно поверхности образца, показывает, что направления брэгговской дифракции на плоскостях (111) и зеркального отражения от поверхности образца совпадают. Чтобы подавить зеркальную компоненту, вырожденную по углу с дифракционным максимумом, необходимо заполнять пространство пор в опале иммерсирующей жидкостью.

3.2. Общая формулировка задачи дифракции света в трехмерных фотонных кристаллах

Брэгговская дифракция электромагнитных волн в трехмерных фотонных кристаллах аналогична дифракции рентгеновских лучей и имеет вид упругого рассеяния света на периодической трехмерной решетке. При упругом рассеянии, электромагнитная волна с волновым вектором $\mathbf{k}$ рассеивается в направлении, задаваемом волновым вектором $\mathbf{k}'$:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}, \tag{143}$$

где $\mathbf{G}$ - вектор обратной решетки. Упругость рассеяния подразумевает, что $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$. В борновском приближении, интенсивность упругого рассеяния электромагнитной волны выражается в виде:

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = CS(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|\kappa_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2, \tag{144}$$

где коэффициент C учитывает прохождение волны через поверхности фотонного кристалла, $\kappa_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$ - фурье-амплитуда диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{r})$ фотонного кристалла,

$$\kappa_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} d\mathbf{r} \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-\mathbf{i}\mathbf{G}} \cdot \mathbf{r}. \tag{145}$$

Фактор рассеяния $S(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ определяется пространственной структурой фотонного кристалла:

$$S(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \left| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot \mathbf{r}_j} \right|^2 = \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})}, \tag{146}$$

где $\mathbf{r}_j$ - радиус-вектора шаров a-SiO$_2$. В случае идеальной трехмерной решетки с базисными векторами $\mathbf{a}_i$ ($i = 1, 2, 3$) суммирование в выражении (146) для фактора рассеяния $S(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ берется по узлам решетки $\mathbf{r}_j = \sum_i \mathbf{a}_i l_i$, где l_i - целые числа. Это означает, что главные максимумы интенсивности дифрагированного излучения в выражении (144) возникают направлениях, удовлетворяющих уравнению (143) и должны иметь вид дифракционных пятен, зависящих от длины волны. Наглядно, за дифракцию ответственна система атомных плоскостей фотонного кристалла, перпендикулярных вектору обратной решетки $\mathbf{G}$, определяемым условием (143), который выражается через элементарные (базисные) вектора обратной решетки $\mathbf{G}_i$ как $\mathbf{G} = \sum_i \mathbf{G}_i m_i$, где m_i - целочисленные индексы.

В реальных фотонных кристаллов опалов ростовые слои (111) плотно упакованы и диоксидные шары хорошо упорядочены. Однако, вдоль оси роста ζ образца ростовые слои упорядочены не полностью, что обусловлено процессом роста опалов на основе самоорганизации. Для учета одномерного беспорядка вдоль оси ζ, структурный фактор $S(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = S(\Delta\mathbf{k})$ представим в виде произведения регулярного внутрислоевого и нерегулярного межслоевого факторов:

$$S(\Delta\mathbf{k}) = S_{\|}(\Delta\mathbf{k}) S_{\perp}(\Delta\mathbf{k}, p), \tag{147}$$

где p - феноменологический фактор корреляции слоев, описывающий степень беспорядка пространственного расположения слоев шаров вдоль оси роста. Внутрислоевой структурный фактор $S_{\|}$ описывает дифракцию света на двумерной решетке диоксидных шаров, упакованных в гексагональный ростовой слой.

3.3. Дифракция света в опалах на двумерной решетке ростовых слоев

Структурный фактор $S_{\|}$ определяется базисными векторами $\mathbf{a_1}$ и $\mathbf{a_2}$ двумерной гексагональной решетке диоксидных шаров. Выражение для $S_{\|}$ находится из выражения (146) суммированием по узлам плоской гексагональной решетки:

$$S_{\|}(\Delta\mathbf{k}) = \prod_{i=1,2} S_{\|,i}(\Delta\mathbf{k}) = \prod_{i=1,2} \frac{1}{N_i} \frac{\sin^2(N_i \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i/2)}{\sin^2(\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i/2)}, \tag{148}$$

где N_i - число шаров вдоль направления вектора $\mathbf{a_i}$. В пределе $N_i \to \infty$ функция $S_{\|,i}(\Delta\mathbf{k})$ принимает вид:

$$\lim_{N_i \to \infty} \frac{1}{N_i} \frac{\sin^2(N_i \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i/2)}{\sin^2(\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i/2)} = 2\pi \sum_{m_i} \delta(\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i - 2\pi m_i), \tag{149}$$

где m_1 и m_2 - целые числа. Дельта-функции в выражении (149) определяют частотно-угловые условия появления максимумов интенсивности дифракции света. Значение вектора рассеяния $\mathbf{K}$, при котором появляется такой рефлекс брэгговской дифракции, определяется условием

$$\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi m_i. \tag{150}$$

Для нахождения картины дифракции на двумерном слое введем декартову ортонормированную систему координат, связанную с падающем лучом и определяемую ортами $\mathbf{e_x}$, $\mathbf{e_y}$ и $\mathbf{e_z}$ такими, что $\mathbf{e_z} \parallel \mathbf{k}$, а плоскость xz совпадает с плоскостью ростового слоя. Волновой вектор $\mathbf{k}'$ дифрагированной (рассеянной) волны в трехмерном пространстве будет задаваться азимутальным φ и полярным θ углами:

$$\mathbf{k}' = \sqrt{\varepsilon_{eff}} \frac{\omega}{c} \left((\mathbf{e}_x \cos\varphi + \mathbf{e}_y \sin\varphi) \cos\theta + \mathbf{e}_z \sin\theta \right). \tag{151}$$

Эффективная диэлектрическая проницаемость ε_{eff} определяется выражением (142). Для ростовой плоскости, проходящей через центры шаров, площадь, занятая шарами a-SiO_2, равна 0.74. При этом азимутальный и полярный углы для падающего пучка соответствуют значениям $\varphi = \theta = 0$. В системе координат $\mathbf{e_x}$, $\mathbf{e_y}$, $\mathbf{e_z}$, условие (150) появления дифракционных максимумов примет вид системы уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} (\cos\varphi\sin\theta)\, a_{1x} + (\cos\theta - 1)\, a_{1z} = m_1\lambda/\left(a\sqrt{\varepsilon_{eff}}\right) \\ (\cos\varphi\sin\theta)\, a_{2x} + (\cos\theta - 1)\, a_{2z} = m_2\lambda/\left(a\sqrt{\varepsilon_{eff}}\right) \end{array} \right. , \tag{152}$$

где $\lambda = 2\pi c/\omega$ - длина волны света в вакууме и $a = 2R$ - расстояние между узлами в плотноупакованном ростовом слое шаров с радиусом R. Двухмерная гексагональная решетка ростового слоя соответствует точечной группе симметрии $6m$ и имеет ось симметрии шестого порядка. Это означает, что условия дифракции для падающего светового пучка, распространяющегося вдоль ростового слоя, должны повторяться при вращении плоскости (111) вокруг направления роста [111] с периодом $\pi/3$. Таким образом, для выяснения общей картины дифракции достаточно рассмотреть дифракционные условия, возникающие при распространении света вдоль оси цепочек шаров и вдоль биссектрисы между двумя осями таких цепочек, а также проанализировать, как меняются картины дифракции при изменении направления распространения светового пучка между этими двумя определенными выше направлениями. В терминах ГЦК решетки, направление, соответствующее падению света вдоль цепочек сферических частиц a-SiO_2, является направлением типа $[\bar{2}11]$, а направление вдоль биссектрисы между двумя ближайшими цепочками тождественно направлению типа $[\bar{1}10]$.

3.4. Дифракция света на двумерной решетке ростовых слоев при распространении вдоль направления $[\bar{2}11]$

В случае распространения света вдоль направления $[\bar{2}11]$, т.е. вдоль цепочек шаров, базисные вектора $\mathbf{a_1}$ и $\mathbf{a_2}$ двумерной гексагональной решетки ростовой поверхности в системе координат $\mathbf{e_x}$, $\mathbf{e_y}$, $\mathbf{e_z}$ имеют следующие компоненты :

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_x,\ \ \mathbf{a}_2 = -\left(a/2\right)\mathbf{e}_x + \left(a\sqrt{3}/2\right)\mathbf{e}_z. \tag{153}$$

Система уравнений (152) для условий появления дифракционных максимумов принимает следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos\varphi\sin\theta = m_1\lambda/\left(a\sqrt{\varepsilon_{eff}}\right) \\ \sqrt{3}/2\,(\cos\theta - 1) = (m_1/2 + m_2)\lambda/\left(a\sqrt{\varepsilon_{eff}}\right) \end{array} \right. . \tag{154}$$

Система уравнений (154) имеет решение при $\varphi = \pi/2$ и определяет пространственное направление рефлекса, соответствующего порядку дифракции (0,-1), т.е. при $m_1 = 0$ и $m_2 = -1$. Это решение единственное в интервале длин волн $0 < \lambda < a\sqrt{3\varepsilon_{eff}}$, для которых зависимость $\lambda(\theta)$, определяющая вид дифракционной картины, имеет вид:

$$\lambda(\theta) = a/2\sqrt{3\varepsilon_{eff}}\,(1 - \cos\theta)\,. \tag{155}$$

Таким образом, при освещении опала вдоль направления $[\bar{2}11]$ монохроматическим светом с длиной волны $\lambda < \lambda_{max}^{\bar{2}11} = a\sqrt{3\varepsilon_{eff}}$ дифракционная картина должна иметь вид пары пятен, находящихся в плоскости zy и расположенных симметрично относительно падающего луча. Угловое положение рефлексов определяется выражением (155): с уменьшением длины волны λ уменьшается угол θ, под которым дифрагирует падающий луч. При $\lambda = \lambda_{max}^{\bar{2}11}$ дифракционная картина вырождается в единственное пятно обратного отражения. При длинах волн $\lambda > \lambda_{max}^{\bar{2}11}$ уравнения (154) и (155) не имеют действительных решений относительно длин волн λ. Это значит, что свет с такой длиной волны не дифрагирует на двухмерной решетке с указанными параметрами.

В общем случае, для длин волн $\lambda < \lambda_{max}^{\bar{2}11}$ возможны решения системы уравнений (154) с другими индексами m_1 и m_2, соответствующими следующим порядками дифракции, например, $(\bar{1}, 0)$, $(0, \bar{2})$, $(1, \bar{1})$ и т.д. Однако, их наблюдение существенно зависит от величины a. При значениях $a \simeq 250$ nm, соответствующих положению фотонной запрещенной зоны в видимом диапазоне, следующие порядки дифракции соответствуют длинам волн в УФ диапазоне, где из-за сильного рассеяния наблюдение дифракции невозможно.

3.5. Дифракция света на двумерной решетке ростовых слоев при распространении вдоль направления $[\bar{1}10]$

Падение белого света вдоль биссектрисы между двумя цепочками шаров двумерной решетки ростового слоя соответствует кристаллографическому направлению $[\bar{1}10]$, волновой вектор $\mathbf{k}$ падающего излучения параллелен направлению $\Gamma \longrightarrow K$ в зоне Бриллюэна. Базисные вектора $\mathbf{a_1}$ и $\mathbf{a_2}$ двумерной решетки имеют следующие компоненты:

$$\mathbf{a}_1 = \left(a\sqrt{3}/2\right) \mathbf{e}_x + (a/2)\, \mathbf{e}_z,\ \mathbf{a}_2 = -\left(a\sqrt{3}/2\right) \mathbf{e}_x + (a/2)\, \mathbf{e}_z. \tag{156}$$

Система уравнений (152) для наблюдения дифракционных максимумов принимает следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sqrt{3}/2\,(\cos\varphi \sin\theta) + 1/2\,(\cos\theta - 1) = m_1\lambda/\left(a\sqrt{\varepsilon_{eff}}\right) \\ -\sqrt{3}/2\,(\cos\varphi \sin\theta) + 1/2\,(\cos\theta - 1) = m_2\lambda/\left(a\sqrt{\varepsilon_{eff}}\right) \end{array} \right. . \tag{157}$$

Система уравнений (157) имеет решения одновременно для двух низших порядков дифракции, (0,-1) и (-1,0). При освещении образца монохроматическим светом с длинами волн лазерного излучения $\lambda < \lambda_{max}^{\bar{1}10} = 3a\sqrt{\varepsilon_{eff}}/2$, дифракционная картина представляет собой четыре пятна и симметрична относительно плоскостей zx и zy. Излучение с меньшими длинами волн дифрагирует под большим углом $|\varphi|$ и меньшим углом $|\theta|$. С увеличением длины волны λ, дифрагированные лучи стремятся к центру дифракционной картины, при этом угол $|\varphi|$ уменьшается, а угол $|\theta|$ - увеличивается. При длине волны $\lambda = \lambda_{max}^{\bar{1}10}$ дифракционная картина вырождается в два рефлекса, лежащих на оси x, им соответствуют азимутальные углы $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$. Для длин волн $\lambda > \lambda_{max}^{\bar{1}10}$ система уравнений (157) не имеет решений, и свет с этими длинами волн не дифрагирует. При освещении образца белым светом дифракционная картина представляет собой две дуги, симметрична относительно плоскости zy.

3.6. Трехмерная дифракция света в синтетических опалах при распространении вдоль поверхности (111)*. Роль двойниковой структуры решетки синтетических опалов*

В двух предыдущих параграфах были установлены условия появления дифракционных рефлексов при распространении света вдоль характерных направлений плоскости (111). Вид дифракционной картины определяется периодичной упаковкой шаров в одиночном двумерном ростовом слое (111). Однако в действительности происходит дифракция света на трехмерной системе совокупности ростовых слоев, что определенным образом изменяет вид наблюдаемой дифракционной картины. Например, гексагональная упаковка шаров в ростовой слое приводит к симметрии 6 порядка, поэтому дифракционная картина должна повторяться при повороте вокруг оси [111] через каждые $\pi/3$. Однако трехмерная ГЦК решетка при вращении вокруг оси [111] переходит сама в себя в два раза реже - через каждые $2\pi/3$, а значит и реальная дифракционная картина должны быть симметрична

Рассмотрим случай распространения света вдоль направления $[\bar{2}11]$. Согласно выражению (154), дифракционная картина должна иметь вид пары пятен, находящихся в плоскости zy и расположенных симметрично относительно падающего луча. Наглядно, появление дифракционного рефлекса обусловлено упругим рассеянием света от плоскости $(\bar{1}11)$. Условие брэгговской дифракции при этом запишется в виде $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\bar{1}11}$, а плоскость рассеяния включает в себя волновой вектор падающего излучения $\mathbf{k}$ и вектор обратной решетки $\mathbf{G}_{\bar{1}11}$, перпендикулярный плоскости $(\bar{1}11)$.

4. Магнитооптические эффекты в магнитных фотонных кристаллах

Часть V

Оптический отклик фотонных кристаллов

1. Общая формулировка расчета оптического отклика фотонных кристаллов

1.1. Неоднородное волновое уравнение и его решение

Задача об отклике вещества на внешнее электромагнитное поле формулируется в рамках уравнений Максвелла в среде с наведенной внешним полем вектором поляризации $\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t)$, не входящей в диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$. В этом случае уравнения Максвелла для электромагнитного поля внутри среды (фотонного кристалла) записываются в виде:

$$\begin{aligned}
&\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}(\mathbf{r},t)}{\partial t},\\
&\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r},t)+\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t)\right),\\
&\nabla\cdot\left(\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r},t)+\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t)\right) = 0,\\
&\nabla\cdot\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = 0,
\end{aligned} \tag{158}$$

где магнитная проницаемость μ полагается равной единице, а диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$ является периодической функцией

$$\varepsilon(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i) = \varepsilon(\mathbf{r}), \tag{159}$$

период которой определяется элементарными векторами решетки фотонного кристалла $\mathbf{a}_i$, $i=1,2,3$. Введем векторную функцию

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r},t) \equiv \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \tag{160}$$

и дифференциальный оператор W, действующий на $\mathbf{Q}$ как

$$W\mathbf{Q}(\mathbf{r},t) \equiv \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}}\nabla\times\left(\nabla\times\frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}}\mathbf{Q}(\mathbf{r},t)\right). \tag{161}$$

Оператор W выбран исходя из требования его эрмитовости. В этом случае его собственные функции ортогональны и образуют полное множество. Исключая из уравнений Максвелла (158) напряженность магнитного поля $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$, получим неоднородное волновое уравнение для $\mathbf{Q}(\mathbf{r},t)$ с правой частью, зависящей от $\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t)$:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}+W\right)\mathbf{Q}(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{c^2\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t). \tag{162}$$

Решение уравнения (162) находится, используя тензорную функцию Грина $\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)$, являющуюся решением неоднородного волнового уравнения с точечным источником:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}+W\right)\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t-t') = -\mathbf{I}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t'), \tag{163}$$

при условии

$$\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = 0, \quad t<0, \tag{164}$$

выражающем принцип причинности. Решение уравнения (162) запишется в следующем виде:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r},t) = \int_V d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{\infty}dt'\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t-t')\frac{1}{c^2\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r}')}}\frac{\partial^2}{\partial t'^2}\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r}',t'), \tag{165}$$

где V - объем фотонного кристалла. Оставляя в стороне вывод общего выражения для функций Грина, выпишем лишь результат свертки (165). Для этого введем собственные функции оператора W, соответствующие поперечным плоским волнам. Определим векторные функции $\mathbf{Q}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$ как решения дифференциального уравнения вида

$$W\mathbf{Q}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^{(T)2}_{\mathbf{k}n}}{c^2}\mathbf{Q}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}). \tag{166}$$

$\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}$ - собственные значения оператора W и являются частотами соответствующих волн $\mathbf{Q}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$. Выражение (165) может быть записано в виде:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r},t) = -\frac{\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t)}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}} + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}n}\mathbf{Q}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})\int_V d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} dt'\frac{\mathbf{Q}^{(T)\star}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}')\cdot\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r}',t')}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r}')}}\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}\sin\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}(t-t'). \tag{167}$$

Окончательно, электромагнитное поле в точке $(\mathbf{r},t)$ записывается в виде:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r},t)}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}n}\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})\int_V d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} dt'\mathbf{E}^{(T)\star}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}')\cdot\mathbf{P}_{ext}(\mathbf{r}',t')\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}\sin\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}(t-t'). \tag{168}$$

1.2. Запаздывающие функции Грина фотонных кристаллов

1.3. Частный случай: решение неоднородного волнового уравнения для двумерных фотонных кристаллов

2. Спонтанное излучение фотонных кристаллов

2.1. Спонтанное излучение диполя внутри фотонного кристалла

Рассмотрим излучение точечного диполя с моментом $\mathbf{d}$, находящимся внутри фотонного кристалла в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}_0$ и осциллирующим на частоте ω. Вектор поляризации $\mathbf{P}_{ext} \equiv \mathbf{P}_d(\mathbf{r},t)$ задается в виде

$$\mathbf{P}_d(\mathbf{r},t) = \mathbf{d}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)e^{-i\omega t+\delta t}, \tag{169}$$

где множитель $e^{\delta t}$ обеспечивает адиабатическое включение поляризации. Подставляя выражение для поляризации (169) в выражение (168), получим поле $\mathbf{E}_d$, излученное диполем:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_d(\mathbf{r},t) + \frac{\mathbf{P}_d(\mathbf{r},t)}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \frac{e^{-i\omega t}}{2V}\sum_{\mathbf{k}n}\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})\left(\mathbf{E}^{(T)\star}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}_0)\cdot\mathbf{d}\right)\times \\ \times\left(\frac{1}{\omega+\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}+i\delta} - \frac{1}{\omega-\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}+i\delta}\right).\end{aligned} \tag{170}$$

Для вычисления плотности энергии излучения диполя, найдем выражение для вектора Пойтинга $\mathbf{S}$, определяющего поток энергии:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t) = \left[(\mathbf{E}(\mathbf{r},t)+\mathbf{E}^{\star}(\mathbf{r},t))\times(\mathbf{H}(\mathbf{r},t)+\mathbf{H}^{\star}(\mathbf{r},t))\right]. \tag{171}$$

Поскольку электрическая, $\mathbf{E}_d$, и магнитная, $\mathbf{H}_d$, компоненты излучения диполя зависят от времени как $e^{-i\omega t}$, то перейдем к усредненному по периоду значению вектора Пойтинга:

$$\overline{\mathbf{S}(\mathbf{r},t)} = \overline{[(\mathbf{E}_d(\mathbf{r},t)+\mathbf{E_d}^{\star}(\mathbf{r},t))\times(\mathbf{H_d}(\mathbf{r},t)+\mathbf{H_d}^{\star}(\mathbf{r},t))]}. \tag{172}$$

Усреднение по времени приводит к следующему выражению для вектора Пойтинга:

$$\overline{\mathbf{S}(\mathbf{r},t)} = \left[\mathbf{E}_d(\mathbf{r},t) \times \mathbf{H_d}^{\star}(\mathbf{r},t)\right] + \left[\mathbf{E_d}^{\star}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{H_d}(\mathbf{r},t)\right]. \tag{173}$$

Вычислим дивергенцию вектора Пойтинга:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \overline{\mathbf{S}(\mathbf{r},t)} = (\mathbf{H_d}^{\star} \cdot [\nabla \times \mathbf{E}_d]) - (\mathbf{E}_d \cdot [\nabla \times \mathbf{H}_d^{\star}]) + \\ + (\mathbf{H_d} \cdot [\nabla \times \mathbf{E}_d^{\star}]) - (\mathbf{E}_d^{\star} \cdot [\nabla \times \mathbf{H}_d]). \end{aligned} \tag{174}$$

Используя второе уравнение Максвелла из системы (158), получим:

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{S}(\mathbf{r},t)} = i\omega\left(\mathbf{E}_d^{\star} \cdot \mathbf{P}_d - \mathbf{E}_d \cdot \mathbf{P}_d^{\star}\right). \tag{175}$$

Знаменатель в выражении (170) может быть преобразован, используя равенство

$$\frac{1}{\omega - \omega_0 \pm i\gamma} = \frac{\Pi}{\omega - \omega_0} \mp \pi i \delta(\omega - \omega_0), \tag{176}$$

где Π - главное значение в смысле Коши. Используя выражения для $\mathbf{P}_d$ и $\mathbf{E}_d$, а также выражения (169),(170) и (176), получим:

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{S}(\mathbf{r},t)} = \frac{\pi\omega^2}{V}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\sum_{\mathbf{k}n}\left|\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)\star}(\mathbf{r}_0)\right|^2 \delta\left(\omega - \omega_{\mathbf{k}n}^{(T)}\right). \tag{177}$$

2.2. Плотность энергии дипольного излучения фотонных кристаллов

Для нахождения энергии излучения диполя введем поверхность S_1, внутри которой находится осциллирующий диполь. Энергия излучения U за единицу времени через поверхность S_1 задается поверхностным интегралом

$$U = \int_{S_1} \overline{S_n(\mathbf{r},t)}\, dS, \tag{178}$$

где dS - элемент поверхности S_1 и S_n - нормальная к поверхности S_1 компонента вектора Пойтинга. Используя теорему Гаусса, перейдем от поверхностного интеграла по поверхности S_1 к объемному интегралу по объему V_1, ограниченному поверхностью S_1:

$$\int_{S_1} \overline{S_n(\mathbf{r},t)}\, dS = \int_{V_1} \nabla \cdot \overline{\mathbf{S}(\mathbf{r},t)}\, d\mathbf{r}. \tag{179}$$

Тогда выражение (178) для энергии дипольного излучения примет вид:

$$U = \frac{\pi\omega^2}{V}\sum_{\mathbf{k}n}\left|\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)\star}(\mathbf{r}_0)\right|^2 \delta\left(\omega - \omega_{\mathbf{k}n}^{(T)}\right). \tag{180}$$

Для демонстрации прямой связи между энергией дипольного излучения и плотностью оптических мод $D(\omega)$ внутри фотонного кристалла, заменим суммирование по волновым векторам $\mathbf{k}$ и квантовым числам n на интегрирование по частоте ω. Тогда используя выражение (180), получим для оценки U:

$$U \simeq \frac{\pi\omega^2}{V}\overline{\left|\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)\star}(\mathbf{r}_0)\right|^2}\int_0^{\infty} D(\omega')\delta\left(\omega - \omega'\right) d\omega' = \frac{\pi\omega^2}{V}\overline{\left|\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)\star}(\mathbf{r}_0)\right|^2} D(\omega). \tag{181}$$

Выражение (181) похоже на выражение (22). Энергия излучения диполя пропорциональна плотности мод в соответствующем частотном диапазоне. Аномально низкая плотность мод, достигаемая в фотонной запрещенной зоне, приводит к существенному уменьшению сечения излучения.

3. Вынужденное излучение фотонных кристаллов

3.1. Вынужденное излучение атомов внутри фотонного кристалла

Задача о вынужденном излучении фотонных кристаллов формулируется как вычисление плотности энергии вынужденного излучения атомов в возбужденном состоянии, распределенных внутри фотонного кристалла. При этом полагается, что такие примесные атомы не изменяют модовый состав электромагнитного поля внутри фотонных кристаллов. Обозначим объемную плотность примесных атомов как $\rho(\mathbf{r})$, а их поляризуемость, отражающую меру реакции на внешнее электромагнитное поле, как α. Тогда величина $\alpha\rho(bfr)$ характеризует восприимчивость атомов примеси. Условие невозмущенности фотонной структуры примесями эквивалентно условию $\alpha\rho(\mathbf{r}) \ll \varepsilon(\mathbf{r})$. Будем считать, что внешнее электромагнитное поле $\mathbf{E}_{ext}(\mathbf{r})$ совпадает с одной из собственных функций $\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}$ фотонного кристалла, т.е. распространение внешней электромагнитной волны разрешено внутри фотонного кристалла. Линейная поляризация атомов примеси, возбужденная в точке $(\mathbf{r}, t)$ модой электромагнитного поля $\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}$:

$$\mathbf{P}_{st}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \alpha\rho(\mathbf{r})\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}(\mathbf{r})e^{(-i\omega+\delta)t}. \tag{182}$$

Малая константа диссипации δ введена для выполнения условия адиабатичности включения (наведения) поляризации. Подставляя выражение (182) для поляризации в выражение (168) для решения неоднородного волнового уравнения, получим выражение для электромагнитного поля, индуцированного поляризацией $\mathbf{P}_{st}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \frac{\alpha e^{(-i\omega+\delta)t}}{2V} \sum_{\mathbf{k}'n'} \omega_{\mathbf{k}'n'}^{(T)} \mathbf{E}_{\mathbf{k}'n'}^{(T)}(\mathbf{r}) \int_V d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \mathbf{E}_{\mathbf{k}'n'}^{(T)\star}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}(\mathbf{r}') \times \\ \times \left(\frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}'n'}^{(T)} + i\delta} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}'n'}^{(T)} + i\delta} \right).\end{aligned} \tag{183}$$

Интегрирование в выражении (183) проводится по объему фотонного кристалла V. Для вычисления интеграла в выражении (183) необходимо задать тип решетки фотонного кристалла и пространственное распределение плотности атомов примеси. Рассмотрим случай фотонного кристалла с простой кубической решеткой с периодом a. Объем фотонного кристалла тогда задается в виде $V = a^3 N_x N_y N_z$, где N_j - целые числа, определяющие размер фотонного кристалла в каждом из пространственных направлений. Будем считать, что вдоль направлений x и y примесь занимает весь фотонный кристалл, а в направлении z - только длину $l = an_z$, где n_z - целое число. Будем также считать, что пространственная периодичность плотности примеси $\rho(\mathbf{r})$ такая же, что и у диэлектрической проницаемости фотонного кристалла $\varepsilon(\mathbf{r})$. Используя выражение (61) для представления собственных функций волнового уравнения в фотонном кристалле в виде плоских волн и выражение (62) для амплитуд этих волн, интеграл в выражении (183) запишется в виде:

$$\begin{aligned}&\int_V d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \mathbf{E}_{\mathbf{k}'n'}^{(T)\star}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}(\mathbf{r}') = \\ &= \sum_{j_1=0}^{N_x-1} \sum_{j_2=0}^{N_y-1} \sum_{j_3=0}^{n_z-1} \int_{V_0} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \mathbf{u}_{\mathbf{k}'n'}^{(T)\star}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}n}^{(T)}(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}'+a\mathbf{j})},\end{aligned} \tag{184}$$

где $\mathbf{j} = (j_1, j_2, j_3)$ и $V_0 = a^3$ - объем элементарной ячейки фотонного кристалла. Периодичные граничные условия для функций $\mathbf{E}_{\mathbf{k}'n'}^{(T)}$ и $\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}$ приводят к тому, что $ak_x j_1$, $ak_y j_2$, $ak'_x j_1$ и $ak'_y j_2$ кратны 2π.

Тогда суммирование из выражения (184) записывается в виде:

$$\sum_{j_1=0}^{N_x-1}\sum_{j_2=0}^{N_y-1}\sum_{j_3=0}^{n_z-1} e^{ia(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{j}} = N_x N_y \delta_{k_x k'_x}\delta_{k_y k'_y}\frac{1-e^{ian_z\Delta k_z}}{1-e^{ia\Delta k_z}}$$
$$= N_x N_y \delta_{k_x k'_x}\delta_{k_y k'_y} e^{ia(n_z-1)\Delta k_z/2}\cdot\frac{\sin\left(an_z\Delta k_z/2\right)}{\sin\left(a\Delta k_z/2\right)}, \tag{185}$$

где $\Delta k_z = k_z - k'_z$. Выражение (185) основывается на том, что суммирование по j_1 и j_2 тождественно равно нулю всегда, кроме случая $k_x = k'_x$ и $k_y = k'_y$. Введем эффективную плотность атомов примеси $F_1(\mathbf{k}, n)$, нормированную на интенсивность (плотность мощности) моды $\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}$ в следующем виде:

$$F_1(\mathbf{k}, n) = \frac{1}{V_0}\int_{V_0}\rho(\mathbf{r})\left|\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})\right|^2 d\mathbf{r}. \tag{186}$$

Сделаем несколько упрощающих предположений. Во-первых, основные вклады в выражение (183) определяются теми модами поля, частота которых $\omega^{(T)}_{\mathbf{k}'n'}$ близки к $\omega = \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}$, т.е. при условии $n' = n$. Во-вторых, при больших n_z выражение (185) резонансно возрастает при $\Delta k_z \to 0$, что является следствием предела

$$\lim_{\Delta k_z\to 0}\frac{\sin\left(an_z\Delta k_z/2\right)}{\sin\left(a\Delta k_z/2\right)} = n_z. \tag{187}$$

Таким образом, основные вклады в выражение (183) будут при $k'_z \approx k_z$, $k_x = k'_x$ и $k_y = k'_y$. В рамках этих допущений, выражение (183) запишется в следующем виде:

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{\alpha\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}N_x N_y V_0 F_1(\mathbf{k}, n)}{2V}\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})e^{(-i\omega+\delta)t}\times$$
$$\times\sum_{k'_z}\left(\frac{1}{\omega+\omega^{(T)}_{\mathbf{k}'n}+i\delta} - \frac{1}{\omega-\omega^{(T)}_{\mathbf{k}'n}+i\delta}\right)\times$$
$$\times e^{ia(n_z-1)\Delta k_z/2}\cdot\frac{\sin\left(an_z\Delta k_z/2\right)}{\sin\left(a\Delta k_z/2\right)}. \tag{188}$$

Для замены суммирования по k'_z на интегрирование по частоте, введем групповую скорость моды $\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}$ в направлении z как

$$v_g(\mathbf{k}, n) = \frac{\partial\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}}{\partial k_z}. \tag{189}$$

Полагая $\Delta k_z = 0$ и беря во внимание предел (187), выражение (188) может быть переписано в виде

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, t) \simeq -\frac{\alpha\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}N_x N_y n_z V_0 F_1(\mathbf{k}, n)}{2V}\mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})e^{(-i\omega+\delta)t}\times$$
$$\times\frac{aN_z}{2\pi}\int\frac{d\omega^{(T)}_{\mathbf{k}'n}}{v_g(\mathbf{k}', n)}\left(\frac{\Pi}{\omega-\omega^{(T)}_{\mathbf{k}'n}} - \pi i\delta\left(\omega-\omega^{(T)}_{\mathbf{k}'n}\right)\right). \tag{190}$$

Окончательно, выражение моды поля, на которой происходит вынужденное излучение, принимает вид:

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, t) \simeq \beta_{\mathbf{k}n} l\ \mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n} e^{(-i\omega+\delta)t}, \tag{191}$$

где удельный фактор усиления электромагнитного поля

$$\beta_{\mathbf{k}n} = \frac{i\alpha\omega^{(T)}_{\mathbf{k}n}F_1(\mathbf{k}, n)}{2v_g(\mathbf{k}, n)}. \tag{192}$$

Выражение (191) получено в первом порядке теории возмущения. Наведенная поляризация $\mathbf{P}_{st}^{(1)}(\mathbf{r},t)$ определяется только амплитудой внешней волны $\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}$. Однако, в самосогласованном случае необходимо учесть волну поляризации $\mathbf{P}_{st}^{(2)}(\mathbf{r},t)$, наведенную полем $\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r},t)$:

$$\mathbf{P}_{st}^{(2)}(\mathbf{r},t) = \alpha\rho(\mathbf{r})\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r},t), \tag{193}$$

и т.д. Вынужденная волна $\mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r},t)$, индуцированная поляризацией $\mathbf{P}_{st}^{(2)}(\mathbf{r},t)$, может быть найдена аналогично волне $\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r},t)$ и записывается в виде, похожем на выражение (191):

$$\mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{r},t) \simeq \frac{1}{2}\beta_{\mathbf{k}n}^{2} l^{2}\ \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)} e^{(-i\omega+\delta)t}, \tag{194}$$

где множитель $1/2$ отражает факт линейной зависимости индуцирующего поля $\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r},t)$ от оптического пути l. По аналогии, в выражении для каждого следующего члена $\mathbf{E}^{(j)}(\mathbf{r},t)$ будет появляться множитель $1/j!$. Полное самосогласованное вынужденное поле задается рядом

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \sum_{j=0}^{\infty}\mathbf{E}^{(j)}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{j!}\beta_{\mathbf{k}n}^{j} l^{j}\ \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}(\mathbf{r}) e^{\ -i\omega_{\mathbf{k}n}^{(T)}+\delta\ \ t} = \\ = \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}(\mathbf{r}) e^{\ \beta_{\mathbf{k}n} l -\ \ i\omega_{\mathbf{k}n}^{(T)}+\delta\ \ t}\ .\end{aligned} \tag{195}$$

Усиление электромагнитной волны при прохождении через фотонный кристалл определяется действительной частью фактора усиления $\beta_{\mathbf{k}n}$:

$$\mathrm{Re}\,[\beta_{\mathbf{k}n}] = -\frac{\mathrm{Im}\,[\alpha]\,\omega_{\mathbf{k}n}^{(T)} F_1(\mathbf{k},n)}{2v_g(\mathbf{k},n)}. \tag{196}$$

Видно, что усиление вынужденного излучения напрямую определяется групповой скоростью распространения света в фотонном кристалле. При аномально низкой групповой скорости, достигаемой, например, на краю фотонной запрещенной зоны, вынужденное излучение может резонансно усиливаться, что является следствием большого времени взаимодействия электромагнитной волны и вещества в случае малой групповой скорости. Отметим, что усиление вынужденного излучение достигается только при условии $\mathrm{Im}\,[\alpha] < 0$, что означает наличие инверсной населенности для атомов примеси. В случае $\mathrm{Im}\,[\alpha] > 0$, полученные выражения описывают процесс вынужденного поглощения света.

4. Параметрические нелинейно-оптические процессы в фотонных кристаллах

4.1. Общее решение задачи о сложении частот в фотонных кристаллах

Рассмотрим фотонный кристалл, обладающий квадратичной восприимчивостью $\hat{\chi}^{(2)}(\mathbf{r})$ с пространственной периодичностью такой же, что и диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$. Аналогично задаче о вынужденном излучении рассмотрим фотонный кристалл с простой кубической решеткой с периодом a и объемом $V = a^3 N_x N_y N_z$. Будем считать, что в направлении z квадратичная восприимчивость отлична от нуля на длине $l = an_z$, где n_z - целое число. Полагаем, что внешняя бигармоническая накачка представляется суммой двух собственных мод фотонного кристалла $\mathbf{E}_{\mathbf{k}_1 n_1}^{(T)}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}_{\mathbf{k}_2 n_2}^{(T)}(\mathbf{r})$ с частотами $\omega_{\mathbf{k}_1 n_1}^{(T)}$ и $\omega_{\mathbf{k}_2 n_2}^{(T)}$. Нелинейная поляризация $\mathbf{P}_{NL}(\mathbf{r},t)$, индуцированная полями $\mathbf{E}_{\mathbf{k}_1 n_1}^{(T)}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}_{\mathbf{k}_2 n_2}^{(T)}(\mathbf{r})$, задается в виде

$$\mathbf{P}_{NL}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{2}A^2\hat{\chi}^{(2)}(\mathbf{r}) : \mathbf{E}_{\mathbf{k}_1 n_1}^{(T)}(\mathbf{r})\mathbf{E}_{\mathbf{k}_2 n_2}^{(T)}(\mathbf{r}) e^{(-i\omega_{\mathbf{k}_1 n_1}^{(T)} - i\omega_{\mathbf{k}_2 n_2}^{(T)} + \delta)t}. \tag{197}$$

В выражении (197) A- амплитуда каждой из волн накачки, понимаемой одинаковой, а фактор 1/2 указывает на положительную частотную компоненту нелинейной поляризации. Введем эффективную квадратичную восприимчивость, нормированную на моды полей накачки:

$$F_2(\mathbf{k}n, \mathbf{k}_1 n_1, \mathbf{k}_2 n_2) = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \mathbf{E}^{(T)\star}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\chi}^{(2)}(\mathbf{r}) : \mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1}(\mathbf{r}) \mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \tag{198}$$

Аналогично выражениям (183) и (184) для вынужденного излучения, поле на суммарной частоте $\mathbf{E}_{NL}$, индуцированное квадратичной поляризацией $\mathbf{P}_{NL}$, запишется в виде:

$$\begin{gathered} \mathbf{E}_{NL}(\mathbf{r}, t) = \frac{A^2 V_0 e^{(-i\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1} - i\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2} + \delta)t}}{4V} \sum_{\mathbf{k}n} \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n} \mathbf{E}^{(T)}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) \times \\ \sum_{j_1=0}^{N_x-1} \sum_{j_2=0}^{N_y-1} \sum_{j_3=0}^{n_z-1} e^{ia(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k})\cdot\mathbf{j}} \; F_2(\mathbf{k}n, \mathbf{k}_1 n_1, \mathbf{k}_2 n_2) \times \\ \times \left(\frac{1}{\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n} + i\delta} - \frac{1}{\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2} - \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n} + i\delta} \right). \end{gathered} \tag{199}$$

Суммирование по всем возможным векторам решетки внутри фотонного кристалла $\mathbf{j}$ может быть записано в следующем виде:

$$\begin{gathered} \sum_{j_1=0}^{N_x-1} \sum_{j_2=0}^{N_y-1} \sum_{j_3=0}^{n_z-1} e^{ia(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k})\cdot\mathbf{j}} = N_x N_y \overline{\delta}_{k_x, k_{1x}+k_{2x}} \overline{\delta}_{k_y, k_{1y}+k_{2y}} \\ e^{ia(n_z-1)\Delta k_z/2} \cdot \frac{\sin(a n_z \Delta k_z/2)}{\sin(a \Delta k_z/2)}, \end{gathered} \tag{200}$$

где $\Delta k_z = k_{1z} + k_{2z} - k_z$ - расстройка волновых векторов в направлении распространения z и

$$\overline{\delta}_{kk'} = \begin{cases} 1, & k' = k + 2\pi j/a \\ 0. \end{cases} \tag{201}$$

Если расстройка волновых векторов Δk_z близка к длине любого из векторов обратной решетки, то предел

$$\lim_{\Delta k_z \longrightarrow \frac{2\pi j}{a}} \frac{\sin(a n_z \Delta k_z/2)}{\sin(a \Delta k_z/2)} = n_z \tag{202}$$

возрастает. Тогда выражение (200) резонансно усиливается при выполнении векторного равенства

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{G}, \tag{203}$$

где $\mathbf{G}$ - произвольный вектор обратной решетки фотонного кристалла. Условие (203) выражает закон сохранения импульса при генерации излучения суммарной частоты или условие фазового синхронизма в фотонном кристалле. Заменим частотные множители в выражении (199):

$$\begin{gathered} \left(\frac{1}{\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n} + i\delta} - \frac{1}{\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2} - \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n} + i\delta} \right) \approx \\ \approx 2\pi i \delta \left(\omega^{(T)}_{\mathbf{k}_1 n_1} + \omega^{(T)}_{\mathbf{k}_2 n_2} - \omega^{(T)}_{\mathbf{k}n} \right). \end{gathered} \tag{204}$$

Для упрощения выражения (199) предположим, что только одна мода излучения суммарной частоты удовлетворяет условию фазового синхронизма:

$$\begin{aligned} k_x &= k_{1x} + k_{2x} + \frac{2\pi p}{a}, \\ k_y &= k_{1y} + k_{2y} + \frac{2\pi q}{a}, \\ k_z &\approx k_{1z} + k_{2z} + \frac{2\pi j}{a}, \end{aligned} \tag{205}$$

где p и q - целые числа. Заменяя суммирование по $\mathbf{k}$ и n в выражении (199) на интегрирование по частоте, получим:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{NL}(\mathbf{r},t) \approx \frac{iaA^2\omega_{\mathbf{k}n}^{(T)}F_2(\mathbf{k}n,\mathbf{k}_1n_1,\mathbf{k}_2n_2)}{4v_g(\mathbf{k},n)}\times \\ \times\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}e^{-i\omega_{\mathbf{k}n}^{(T)}t}e^{ia(n_z-1)\Delta k_z/2}\cdot\frac{\sin\left(an_z\Delta k_z/2\right)}{\sin\left(a\Delta k_z/2\right)},\end{aligned} \tag{206}$$

где v_g - групповая скорость в направлении z. Интенсивность света на суммарной частоте записывается в виде:

$$\begin{aligned}|\mathbf{E}_{NL}(\mathbf{r},t)|^2 \approx \frac{a^2A^4\omega_{\mathbf{k}n}^{(T)2}\left|F_2(\mathbf{k}n,\mathbf{k}_1n_1,\mathbf{k}_2n_2)\right|^2}{16v_g^2(\mathbf{k},n)}\times \\ \times\left|\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}^{(T)}\right|^2\frac{\sin^2\left(an_z\Delta k_z/2\right)}{\sin^2\left(a\Delta k_z/2\right)}.\end{aligned} \tag{207}$$

Из выражения (207) видно, что условиями усиления генерации суммарной частоты являются: (1) условие фазового синхронизма, (2) условие аномально малой групповой скорости и (3) ненулевое значение фактора F_2. Условия (1) и (2) выполняются на краю фотонной запрещенной зоны, где и возможно наблюдение явления синхронной генерации суммарной частоты. Условие (3) определяется кристаллографической симметрией материала, составляющего фотонный кристалл и определяющего набор ненулевых компонент тензора $\hat{\chi}^{(2)}$, а также симметрией структуры самого фотонного кристалла, определяющей симметрию собственных функций (мод) фотонного кристалла. Отметим, что выражения, аналогичные выражению (207), могут быть получены для любых параметрических процессов, например, четырехволновых, таких как генерация оптической третьей гармоники. Необходимым условием для использование представленного формализма является лишь приближение заданной накачки.

4.2. Метод эффективной среды при описании генерации оптических гармоник в фотонных кристаллах

Для конечных одномерных фотонных кристаллов, описание генерации оптических гармоник может быть проведено в рамках метода эффективной среды. Рассмотрение проведем в приближении медленно меняющихся во времени амплитуд, требующего, чтобы временная эволюция волнового пакета происходит существенно медленнее периода электромагнитной волны. Введем новые переменные $\Omega = \omega/\omega_0$, $\xi = z/\lambda_0$ и $\tau = ct/\lambda_0$, в которых пространственная переменная z нормирована в единицах центральной длины волны пакета λ_0, а частота - в единицах центральной частоты $\omega_0 = 2\pi/\lambda_0$. Связанные уравнения для излучений накачки и второй гармоники в новых переменных примут вид:

$$\begin{aligned}\varepsilon_\Omega\frac{\partial}{\partial\tau}E_\Omega(\xi,\tau) = \frac{i}{4\pi\Omega}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}E_\Omega - \frac{\partial}{\partial\xi}E_\Omega + i\pi(\varepsilon_\Omega-1)\Omega E_\Omega + i8\pi^2\Omega\chi^{(2)}E_{2\Omega}E_\Omega^\star, \\ \varepsilon_{2\Omega}\frac{\partial}{\partial\tau}E_{2\Omega}(\xi,\tau) = \frac{i}{4\pi2\Omega}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}E_{2\Omega} - \frac{\partial}{\partial\xi}E_{2\Omega} + i\pi(\varepsilon_{2\Omega}-1)2\Omega E_{2\Omega} + i8\pi^2 2\Omega\chi^{(2)}E_\Omega^2.\end{aligned} \tag{208}$$

В рамках метода эффективной среды система связанных уравнений (208) для конечного фотонного кристалла длиной L заменяется на систему связанных уравнений, описывающих нелинейное взаимодействие в однородном материале длиной L с эффективным законом дисперсии в виде (114). Для частного случая взаимодействия двух монохроматических волн с частотами ω и 2ω, настроенные на пики пропускания, где мнимая часть эффективного показателя преломления равна нулю, связанные уравнения запишутся в виде:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz}A_\omega = i\frac{\omega}{n_r(\omega)c}d_{eff}A_{2\omega}A_\omega^\star e^{i\Delta k_{eff}z}, \\ \frac{d}{dz}A_{2\omega} = i\frac{\omega}{n_r(2\omega)c}d_{eff}A_\omega^2 e^{-i\Delta k_{eff}z},\end{aligned} \tag{209}$$

где эффективная фазовая расстройка $\Delta k_{eff} = k_r(2\omega) - 2k_r(\omega)$ находится из выражений для действительной части эффективного закона дисперсии, а эффективная длина нелинейного взаимодействия

$$d_{eff} = \frac{1}{L}\int_0^L d^{(2)}(z)|\Phi_\omega(z)|^2|\Phi_{2\omega}(z)|dz. \tag{210}$$

Список литературы

[1] J. Joannopoulos, R. Meade, and J. Winn, *Photonic Crystals*, Prinston University Press, 1995.

[2] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer, 2001.

[3] A. Yariv, P.Yeh, *Optical Waves in Crystals*, Wiley, New York, 1984.

[4] А.В. Голенищев-Кутузов, В.А. Голенищев-Кутузов, Р.И. Калимуллин, УФН **170**, 697 (2000).

[5] *Photonic Band Structures*, Topical Issue of J. Mod. Opt. **41**, 171-404 (1994).

[6] *Development and Applications of Materials Exhibiting Photonic Band Gaps*, Topical Issue of J. Opt. Soc. Am. B **10**, 279-413 (1993).

[7] *Nonlinear Optics of Photonic Crystals*, Topical Issue of J. Opt. Soc. Am. B **19**, 2079-2356 (2003).