

Плотность состояний одномерного разупорядоченного фотонного кристалла

© А.А. Грешнов*, М.А. Калитеевский^{*,**}, R.A. Abram^{**}, S. Brand^{**}, Г.Г. Зегря*

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

** Department of Physics, Durham University, DH1 3LE Durham, U.K.

E-mail: a_greshnov@hotmail.com

(Поступила в Редакцию 28 февраля 2007 г.)

Построена аналитическая теория плотности состояний в одномерных разупорядоченных фотонных кристаллах. Показано, что задача о плотности оптических мод может быть сведена в приближении малого диэлектрического контраста к решению обобщенного уравнения Фоккера–Планка на функцию распределения логарифмической производной электрического поля (фазы волны). Получены точный аналитический ответ и асимптотики плотности состояний в глубине запрещенной зоны фотонного кристалла и вблизи края запрещенной зоны. Результаты согласуются с эмпирическими выражениями, полученными ранее из численных экспериментов.

Работа поддержана РФФИ (грант № 05-02-16679), Федеральной программой поддержки ведущих научных школ и грантом Royal Society. А.А. Грешнов благодарит за поддержку Фонд „Династия“.

PACS: 42.70.Qs, 78.67.-n

1. Введение

Фотонные кристаллы, представляющие собой периодические структуры с модуляцией показателя преломления и периодом, сопоставимым с половиной длины волны света, обладают уникальными оптическими свойствами благодаря наличию запрещенных зон — диапазонов частот, в которых имеется экспоненциальное затухание волны в глубь кристалла. Структура реальных фотонных кристаллов обычно далека от строго периодической ввиду флуктуаций показателей преломления, размеров структурных единиц, их формы и расстояний между ними. Вследствие этого возможно возникновение разрешенных оптических мод внутри запрещенных зон идеального фотонного кристалла. Появление таких мод приводит к фактическому сужению запрещенных зон и может существенно сказаться на работе приборов, основанных на фотонных кристаллах. В частности, поскольку интенсивность спонтанного излучения пропорциональна плотности состояний, наличие беспорядка может приводить к ухудшению характеристик лазеров, содержащих одномерные фотонные кристаллы (брэгговские зеркала).

Влияние беспорядка на плотность оптических состояний одномерных фотонных кристаллов $\rho(\omega)$ было ранее исследовано с помощью численных расчетов в работе [1], где была получена эмпирическая формула для $\rho(\omega)$. В настоящей работе построена аналитическая теория плотности состояний в разупорядоченных одномерных фотонных кристаллах. Прежде всего мы показали, что для нахождения плотности состояний достаточно проанализировать, как меняется фаза

волны

$$\tilde{\Psi}(z) = 2 \operatorname{arccot} \left(\frac{D}{\pi} \frac{dE/dz}{E} \right) \quad (1)$$

от периода к периоду (здесь E — электрическое поле, D — период фотонного кристалла). Ключевым в нашем подходе является тот факт, что плотность состояний пропорциональна производной по частоте от среднего значения обратного периода изменения фазы $\tilde{\Psi}$ на 2π

$$\rho(\omega) \propto \frac{d}{d\omega} \langle \lambda^{-1} \rangle; \quad (2)$$

строгое определение $\langle \lambda^{-1} \rangle$ будет сформулировано далее. Формула (2) является обобщением соотношения $\rho(\omega) \propto dk/d\omega$, справедливого в случае идеальных фотонных кристаллов. Для вычисления $\langle \lambda^{-1} \rangle$ нами использовано статистическое описание (уравнение Фоккера–Планка), построенное на основе „уравнения движения“, описывающего изменение Ψ от периода к периоду.

В рамках такого подхода нами получено точное аналитическое решение (в квадратурах) для плотности состояний, а также асимптотики в глубине запрещенной зоне и в разрешенной зоне (вблизи края). Сравнение полученных выражений с результатами численных расчетов [1] показало, что плотность состояний в глубине запрещенной зоны может быть успешно аппроксимирована гауссовским законом. В то же время асимптотический вид плотности состояний в запрещенной зоне несколько отличается от простого гауссовского закона. Далее мы последовательно изложим основные этапы решения задачи и результаты расчетов.

2. Динамическое описание распространения электромагнитных волн в одномерном неупорядоченном фотонном кристалле

Для простоты ограничимся рассмотрением нормального распространения линейно поляризованного света $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E(z) \cos(\omega t + \varphi_0) \mathbf{e}_x$ в одномерном фотонном кристалле, состоящем из последовательности слоев ширины $D/2$, где D — период фотонного кристалла (рис. 1). При этом коэффициенты преломления слоев A и B , образующих период фотонного кристалла, запишем в виде

$$n_{A,B}(s) = n_0(1 \pm \eta)(1 + \delta_n P(s)). \quad (3)$$

Величину $\eta = (n_A(s) - n_B(s))/(n_A(s) + n_B(s))$, не зависящую от номера периода s и описывающую модуляцию показателя преломления, будем называть диэлектрическим контрастом, а величину δ_n , описывающую флуктуации показателя преломления, — параметром беспорядка; среднее значение показателя преломления $\langle (n_A(s) + n_B(s))/2 \rangle = n_0$. Случайная величина $P(s)$ с нулевым средним $\langle P(s) \rangle = 0$ предполагается некоррелированной и обладающей единичной дисперсией $\langle P(s)P(s') \rangle = \delta_{ss'}$. Если помимо флуктуаций показателя преломления имеются также и флуктуации ширины слоев, их можно учесть аналогичным образом, однако мы не будем этого делать, чтобы избежать громоздкости. Распространение электромагнитной волны частоты ω вдоль оси структуры z описывается волновым уравнением

$$\frac{d^2 E}{dz^2} = -\frac{n^2(z)\omega^2}{c^2} E. \quad (4)$$

Здесь $n(z)$ — профиль показателя преломления вдоль оси структуры (рис. 1). Поскольку мы считаем показатель преломления постоянным внутри каждого из слоев, решение уравнения (4) имеет вид

$$\begin{cases} E(z_s + \xi) = E(z_s) \cos(k_A \xi) + E'(z_s) \sin(k_A \xi)/k_A \\ E'(z_s + \xi) = -E(z_s) k_A \sin(k_A \xi) + E'(z_s) \cos(k_A \xi) \end{cases} \quad (5)$$

для слоев типа A и

$$\begin{cases} E(z_s + D/2 + \xi) = E(z_s + D/2) \cos(k_B \xi) + E'(z_s + D/2) \sin(k_B \xi)/k_B \\ E'(z_s + D/2 + \xi) = -E(z_s + D/2) k_B \sin(k_B \xi) + E'(z_s + D/2) \cos(k_B \xi) \end{cases} \quad (6)$$

для слоев типа B . Здесь $z_s = sD$, s — номер периода, $0 \leq \xi \leq D/2$, $k_{A,B} = n_{A,B}(s)\omega/c$, а $E' = dE/dz$ — производная электрического поля. Используя уравнения (5) и (6), нетрудно получить матрицу переноса,

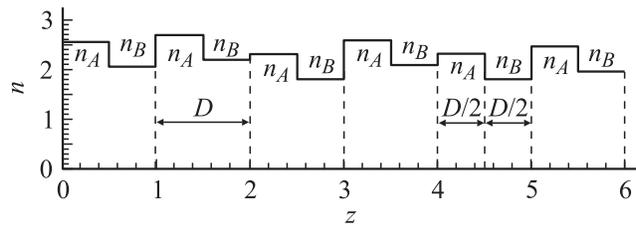


Рис. 1. Модель одномерного разупорядоченного фотонного кристалла.

связывающую электрическое поле и его производную в точках z_s и z_{s+1}

$$M^s = \begin{bmatrix} C_A C_B - \frac{n_A(s)}{n_B(s)} S_A S_B & \frac{1}{n_A(s)} C_A S_B + \frac{1}{n_B(s)} C_B S_A \\ -n_A(s) C_A S_B - n_B(s) C_B S_B & C_A C_B - \frac{n_B(s)}{n_A(s)} S_A S_B \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$C_A = \cos\left(\frac{n_A(s)D\omega}{2c}\right), \quad C_B = \cos\left(\frac{n_B(s)D\omega}{2c}\right), \quad (8)$$

$$S_A = \sin\left(\frac{n_A(s)D\omega}{2c}\right), \quad S_B = \sin\left(\frac{n_B(s)D\omega}{2c}\right), \quad (9)$$

$$\begin{pmatrix} E \\ \frac{c}{\omega} E' \end{pmatrix}_{s+1} = M^{(s)} \begin{pmatrix} E \\ \frac{c}{\omega} E' \end{pmatrix}_s. \quad (10)$$

Поскольку для нахождения плотности состояний нам не потребуется явного знания зависимости амплитуды волны от координаты, в дальнейшем ограничимся изучением логарифмической производной

$$\tilde{L}(z) = \frac{D}{\pi} \frac{E'}{E} = \cot\left(\frac{\tilde{\Psi}(z)}{2}\right), \quad (11)$$

а точнее, более удобной величины $\tilde{\Psi}$, которую будем называть фоной волны. Аналогичный метод (так называемый фазовый формализм) ранее использовался при изучении одномерных неупорядоченных электронных систем (уравнения Шредингера) [2]. Из уравнения (10) непосредственно следует разностное уравнение на функцию L

$$\tilde{L}(z_{s+1}) = \frac{M_{22}^{(s)} \tilde{L}(z_s) + \frac{D\omega}{\pi c} M_{21}^{(s)}}{M_{11}^{(s)} + \frac{\pi c}{D\omega} M_{12}^{(s)} \tilde{L}(z_s)}, \quad (12)$$

где M_{ij} — элементы матрицы (7). Уравнение (12) значительно упрощается в случае малого диэлектрического контраста $\eta \ll 1$ и флуктуаций показателя преломления $\delta_n \ll 1$. Поскольку в режиме больших флуктуаций, при $\delta_n \gg \eta$, произойдет полное исчезновение запрещенной зоны, будем рассматривать относительно малые флуктуации, когда

$$\delta_n = K\eta, \quad K \lesssim 1. \quad (13)$$

Кроме того, ограничимся излучением частот, не слишком далеких от середины первой запрещенной зоны

$$\omega_0 = \frac{\pi c}{n_0 D}, \quad (14)$$

так что

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{2G}{\pi} \eta \right), \quad G \lesssim 1. \quad (15)$$

Значения $|G| < 1$ соответствуют запрещенной зоне, $|G| > 1$ — разрешенным зонам. Используя перечисленные предположения, можно переписать уравнение (12) в виде

$$L(s+1) - L(s) = 2\eta \left[\left(G + \frac{\pi}{2} KP(s) \right) \times (L^2(s) + 1) + 2L(s) \right] + O(\eta^2), \quad (16)$$

где $L(s) = \tilde{L}(z_s)$, $P(s)$ — значение случайной величины P на промежутке (z_s, z_{s+1}) . Поскольку правая часть разностного уравнения (16) пропорциональна $\eta \ll 1$, изменение логарифмической производной за период мало, а решение уравнения (16) с точностью до членов порядка $O(\eta^2)$ совпадает с решением аналогичного дифференциального уравнения

$$\frac{dL}{ds} = 2\eta \left[\left(G + \frac{\pi}{2} KP(s) \right) (L^2(s) + 1) + 2L(s) \right]. \quad (17)$$

При этом необходимо помнить, что функция $L(s)$ имеет строгий физический смысл лишь при целых s , где она совпадает с $\tilde{L}(z_s)$. При прочих s эти две функции не совпадают, причем $\tilde{L}(z)$ является быстро меняющейся функцией, а $L(s)$ — медленно меняющейся. Наиболее наглядно различие между $\tilde{L}(z)$ и $L(s)$ проявляется в терминах фазы. Поскольку мы рассматриваем частоты, не слишком далекие от середины запрещенной зоны, $\tilde{\Psi}$ (определенная уравнением (1)) приобретает на период D набег фазы $2\pi + C\eta + O(\eta^2)$, в то время как набег модифицированной фазы $\Psi(s) = 2\text{arccot}(\Psi(s)/2)$ составляет $C\eta + O(\eta^2)$. Таким образом, в рассматриваемом нами пределе $\eta \ll 1$

$$\tilde{\Psi}(z_s) = \Psi(s) + 2\pi s, \quad (18)$$

где s — целое.

Переходя от $L(s)$ к $\Psi(s)$, получаем „уравнение движения“

$$\frac{d\Psi}{ds} = 4\eta \left(G + \frac{\pi}{2} KP(s) + \sin \Psi \right), \quad (19)$$

которое в более наглядных обозначениях имеет вид

$$\frac{d\Psi}{ds} = 2\pi \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} + 4 \frac{n_A - n_B}{n_A + n_B} \sin \Psi + 2\pi \delta_n P(s). \quad (20)$$

Три члена в правой части уравнений (19), (20) описывают изменение Ψ за счет отличия частоты от центра запрещенной зоны, модуляции показателя преломления и его флуктуаций соответственно. Ранее похожие нелинейные уравнения со „случайной силой“ использовались при описании теплового шума в джозефсоновских контактах [3].

3. Статистическое описание динамики изменения модифицированной фазы и расчет плотности состояний

Чтобы перейти к статистическому описанию динамики изменения фазы, воспользуемся следующей процедурой. Поскольку функция $P(s)$ остается постоянной внутри каждого из периодов фотонного кристалла, решение уравнения (19) может быть записано в следующем (неявном) виде:

$$\Psi(s) = \Phi(\Psi(s+1), P(s)), \quad (21)$$

где s — номер периода, а функция Φ связывает значения фазы Ψ на краях соседних периодов. Введем функцию распределения фазы $F(\Psi, s)$: ее изменение за один период при наличии флуктуаций показателя преломления, описываемых случайной величиной $P(s)$, равно

$$F(\Psi, s+1) = \int F(\Phi(\Psi, P), s) \frac{\partial \Phi}{\partial \Psi} f(P) dP, \quad (22)$$

где $f(P)$ — функция распределения случайной величины $P(s)$ (напомним, что флуктуации предполагаются некоррелированными, $\langle P(s)P(s') \rangle = \delta_{ss'}$). Пользуясь тем, что изменение Ψ за один период мало, а значит мало и приращение функции распределения, разложим выражения в левой и правой частях уравнения (22) в ряд Тейлора

$$F(\Psi, s) + \frac{\partial F}{\partial s} + \dots = \int \left[F(\Psi, s) + \frac{\partial F}{\partial \Psi} (\Phi - \Psi) + \frac{\partial^2 F}{\partial \Psi^2} \frac{(\Phi - \Psi)^2}{2} + \dots \right] \frac{\partial \Phi}{\partial \Psi} f(P) dP. \quad (23)$$

Второе и третье слагаемые в правой части уравнения (23) есть аналоги дрейфового и диффузионного членов, поэтому, используя стандартную процедуру вывода диффузионного уравнения [4], можно записать обобщенное уравнение Фоккера–Планка на функцию распределения $F(\Psi, s)$

$$\frac{\partial F}{\partial s} = 2\pi^2 \delta_n^2 \frac{\partial^2 F}{\partial \Psi^2} - 4\eta \frac{\partial}{\partial \Psi} [(G + \sin \Psi)F]. \quad (24)$$

Поскольку непосредственно необходимая для вычисления плотности состояний величина — это не сама функция распределения $F(\Psi, t)$, а средний период изменения модифицированной фазы Ψ на 2π , воспользуемся сопряженным уравнением Фоккера–Планка [4], дающим среднее число периодов $M(\Psi)$, необходимых для достижения фиксированных значений $\Psi_{L,R}$ при заданной начальной фазе Ψ

$$2\pi^2 \delta_n^2 \frac{\partial^2 M}{\partial \Psi^2} + 4\eta (G + \sin \Psi) \frac{\partial M}{\partial \Psi} = -1, \quad (25)$$

$$M(\Psi_L = -\infty) = M(\Psi_R = 2\pi) = 0. \quad (26)$$

Решение уравнения (25) с граничными условиями вида (26) зависит от разности $\Psi_R - \Psi$, но не от начальной фазы Ψ , поэтому положим начальное значение $\Psi = 0$. Решение уравнения (25) при $\Psi = 0$ имеет вид

$$M_0 = \frac{1}{2\pi^2\delta_n^2} \int_{-\infty}^0 dx \exp\left(-\frac{2\eta(Gx - \cos x)}{\pi^2\delta_n^2}\right) \times \left[C - \int_{-\infty}^x dx' \exp\left(\frac{2\eta(Gx' - \cos x')}{\pi^2\delta_n^2}\right) \right],$$

$$C = \frac{\int_{-\infty}^{2\pi} dx \exp\left(-\frac{2\eta(Gx - \cos x)}{\pi^2\delta_n^2}\right) \int_{-\infty}^x dx' \exp\left(\frac{2\eta(Gx' - \cos x')}{\pi^2\delta_n^2}\right)}{\int_{-\infty}^{2\pi} dx \exp\left(-\frac{2\eta(Gx - \cos x)}{\pi^2\delta_n^2}\right)}. \quad (27)$$

Используя выражение (27) для величины M_0 и осцилляционную теорему, отождествляющую число нулей электрического поля E с номером решения волнового уравнения (4), получим вид плотности состояний. Нулевые значения электрического поля означают $\tilde{L}(z) = \infty$, т.е. $\tilde{\Psi}(z) = 2\pi n$, где n — целое. Пусть $\langle N \rangle$ — среднее число нулей на отрезке длины l , тогда плотность состояний

$$\rho(\omega) = \frac{1}{l} \frac{d(\langle N \rangle - N_0)}{d\omega} = \frac{1}{D} \frac{d}{d\omega} \frac{1}{M_0} = \frac{\pi}{2D\eta} \frac{d}{dG} \frac{1}{M_0}, \quad (28)$$

где константа $N_0 = l/D$ введена для перехода от $\tilde{\Psi}(z)$ к модифицированной фазе $\Psi(s)$. Таким образом, уравнение (28) совместно с (27) дает точный ответ для плотности состояний в пределе малого диэлектрического контраста $\eta = (n_A - n_B)/(n_A + n_B) \ll 1$. Дальнейшие расчеты можно провести в двух предельных случаях малых и больших G , что соответствует состояниям глубоко в запрещенной и разрешенной зонах соответственно. Наиболее интересен случай запрещенной зоны $G < 1$. В этом случае асимптотическое выражение для M_0 имеет вид

$$M_0 = \frac{\pi \exp\left(\frac{4\eta}{\pi^2\delta_n^2} [\sqrt{1 - G^2} + |G| \arcsin |G| - (\pi/2)|G|]\right)}{2\eta\sqrt{1 - G^2} \left(1 + \exp\left(-\frac{4\eta|G|}{\pi\delta_n^2}\right)\right)},$$

$$G = \frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega/2}, \quad \Delta\omega = \frac{4\eta}{\pi}\omega_0 = \frac{4(n_A - n_B)c}{n_0(n_A + n_B)D}. \quad (29)$$

Чтобы сравнить полученный ответ с предложенной ранее гауссовской формулой работы [1], оценим с экспоненциальной точностью отношение плотности состояний в середине запрещенной зоны и на краю

$$\frac{\rho(\omega_0)}{\rho(\omega_0 + \Delta\omega/2)} \sim \frac{M_0(G = 1)}{M_0(G = 0)} \sim \exp\left(\frac{4\eta}{\pi^2\delta_n^2}\right). \quad (30)$$

С другой стороны, мы можем предположить гауссовский характер спада плотности состояний в глубь

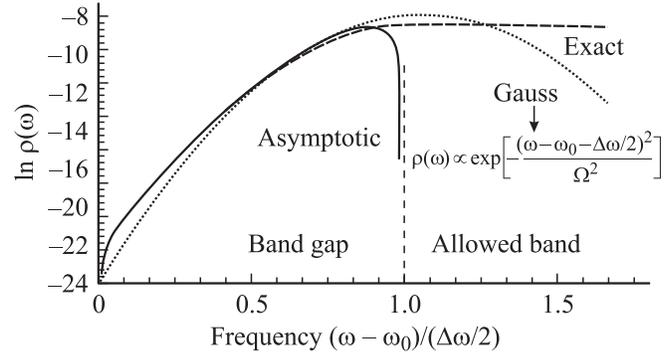


Рис. 2. Плотность состояний одномерного разупорядоченного фотонного кристалла, рассчитанная при $\eta = \delta_n = 0.025$.

запрещенной зоны с некоторым параметром Ω и затем найти Ω из сравнения с формулой (30)

$$\frac{\rho(\omega_0)}{\rho(\omega_0 + \Delta\omega/2)} \sim \exp\left(-\frac{(\Delta\omega)^2}{4\Omega^2}\right) = \exp\left(-\frac{4\eta\omega_0^2}{\pi^2\Omega^2}\right) = \exp\left(\frac{4\eta}{\pi^2\delta_n^2}\right), \quad (31)$$

откуда

$$\frac{\Omega}{\omega_0} = \delta_n \sqrt{\eta}. \quad (32)$$

Полученная оценка находится в хорошем согласии с данными работы [1]. На рис. 2 в логарифмическом масштабе показаны точная плотность состояний, рассчитанная по формуле (27), и гауссовская аппроксимация. Как видно из рис. 2, асимптотическая формула (29) отлично работает всюду внутри запрещенной зоны помимо узкой области вблизи края. При этом гауссовская формула также является неплохим приближением, однако ее асимптотическое поведение не совпадает с точным ответом. Кроме того, заметим, что формула (27) работает не только внутри запрещенной зоны, но и в разрешенной зоне, что может быть проверено непосредственным разложением (27) при $|G| > 1$. Заметим, что правильный (медленно убывающий) характер кривой плотности состояний в области частот $\omega > \omega_0 + \Delta\omega/2$ виден и на рис. 2.

4. Заключение

Построена аналитическая теория плотности состояний в одномерных разупорядоченных фотонных кристаллах. Показано, что задача о плотности состояний может быть сведена к стохастическому уравнению, описывающему изменение фазы волны от периода к периоду при наличии флуктуаций показателя преломления. В пределе малого диэлектрического контраста получено точное решение и асимптотики для плотности состояний в запрещенной зоне и вблизи края запрещенной зоны. Показано, что зависимость плотности состояний от частоты

в запрещенной зоне может быть приближенно описана гауссовским законом. Полученные выражения согласуются с результатами независимых численных расчетов и формулами для идеального фотонного кристалла.

Список литературы

- [1] M.A. Kaliteevski, D.M. Beggs, S. Brand, R.A. Abram, V.V. Nikolaev. *Phys. Rev. E* **73**, 056 616 (2006).
- [2] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. Наука, М. (1982). §6.
- [3] Ю.М. Иванченко, Д.А. Зильберман. Письма в ЖЭТФ **8**, 189 (1968); A.C. Biswas, S.S. Jha. *Phys. Rev. B* **2**, 2543 (1970).
- [4] М.А. Леонтович. Введение в термодинамику. Статистическая физика. Наука, М. (1983). Гл. 6.