



**СОБСТВЕННЫЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ВОЛНЫ
В АНИЗОТРОПНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ:
МЕТОД И ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА, СИММЕТРИЯ
ДИСПЕРСИОННОЙ ПОВЕРХНОСТИ
ДЛЯ ДВУМЕРНОГО КРИСТАЛЛА**

И.А. Хромова, Л.А. Мельников

Представлен полностью векторный метод плоских волн для расчета характеристик собственных электромагнитных волн в периодических диэлектрических средах с произвольной геометрией и размерностью, образованных как изотропными, так и анизотропными элементами. С его помощью исследуется влияние переориентации молекул анизотропного материала в фотонном кристалле на свойства симметрии дисперсионной поверхности. В статье показано, как форма неприводимой части зоны Бриллюэна двумерного фотонного кристалла зависит от ориентации молекул анизотропного материала в составе периодической структуры.

Введение

Фотонные кристаллы и устройства на их основе являются одними из самых популярных и изучаемых объектов в области оптики и фотоники, благодаря их необыкновенным свойствам, широкому спектру возможностей и относительной простоте реализации [1, 2].

Настоящая работа посвящена анизотропным фотонным кристаллам – искусственным периодическим диэлектрическим средам, компоненты которых изготовлены из анизотропного материала. Такой род фотонных кристаллов интересен с точки зрения дисперсионных свойств, а также возможности управления характеристиками устройств на их основе [3–7].

В работе представлен полностью векторный метод плоских волн для расчета периодических диэлектрических сред как изотропных, так и анизотропных, произвольной геометрии и размерности.

С помощью предлагаемого метода исследуется влияние переориентации молекул анизотропного материала в фотонном кристалле (что может происходить под внешним воздействием) на свойства симметрии его дисперсионной поверхности. Данный вопрос интересен как с феноменологической, так и с практической точек зрения. Последнее связано с тем, что при расчете положения запрещенных зон той или иной фотонно-кристаллической структуры используется контур внутри зоны

Бриллюэна, содержащий экстремумы дисперсионной поверхности, причем форма и расположение этого контура (границы неприводимой части зоны Бриллюэна) внутри зоны Бриллюэна сильно зависит от ориентации анизотропного материала в фотонном кристалле, что продемонстрировано в данной работе.

Показана также возможность управления положением и шириной запрещенных зон в анизотропных фотонных кристаллах и рассмотрены возможности применения анизотропных материалов в фотонно-кристаллических волноводах с поллой сердцевиной.

1. Метод плоских волн для анизотропных периодических сред

Для расчета фотонно-кристаллических структур традиционно существуют несколько групп методов: методы, в которых решаются непосредственно интегральные уравнения [8]; методы, представляющие решения в виде локализованных функций [9]; методы, связанные с разложением поля внутри структуры по плоским волнам [10–14].

Наиболее приемлемым при поиске локализованных мод (например, в структурах с дефектами) является метод локализованных функций. Однако при расчете дисперсии идеальной фотонно-кристаллической структуры как бесконечной среды он требует значительных временных затрат.

На фоне этого, метод разложения по плоским волнам является выгодным решением для расчета дисперсии бездефектных периодических сред. В частности он удобен для предварительного расчета запрещенных зон при моделировании сложных структур на базе периодических диэлектрических сред.

Анизотропность материалов, используемых при изготовлении фотонных кристаллов, осложняет расчеты, так как в дисперсионном уравнении появляется векторная величина диэлектрической проницаемости. При этом становятся неприменимыми скалярные приближения (см., например, [15, 16]), так как они дают довольно грубое приближение решений (это будет продемонстрировано ниже) и, кроме, того не позволяют рассчитывать структуры с негомеотропным заполнением анизотропными материалами.

В данной работе построен и применен метод плоских волн, позволяющий рассчитывать структуры с произвольной геометрией, размерностью и произвольными материалами (включая анизотропные и негомеотропные).

Рассмотрим бесконечную периодическую структуру, изготовленную в произвольном случае из изотропных и анизотропных материалов, например, из стекла с жидкокристаллическим заполнением. Как уже было упомянуто выше, анизотропия материала математически выражается тензором диэлектрической проницаемости, который в случае выбора декартовой системы координат с базисом, состоящим из векторов, сонаправленных с осями симметрии анизотропного материала, имеет вид

$$\hat{\epsilon}_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где величины $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ характеризуют диэлектрическую проницаемость вдоль каждой из осей.

При выборе другой декартовой системы координат, соответствующей, в частности, переориентации молекул анизотропного материала под внешним воздействием, диэлектрическую проницаемость можно выразить через изначальное значение $\hat{\epsilon}_0$ и соответствующую матрицу поворота $\mathbf{T}(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} – вектор координат,

$$\hat{\epsilon}_a(\mathbf{r}) = \mathbf{T}(\mathbf{r})\hat{\epsilon}_0(\mathbf{r})\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Для описания диэлектрических свойств подобных смешанных структур удобно ввести функцию профиля $f(\mathbf{r})$, дискретные значения которой выражают соответствие данной координаты тому или иному материалу,

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} f_0 = 0 & \text{для вмещающей среды,} \\ f_1 = 1 & \text{для материала 1,} \\ \dots & \\ f_i = i & \text{для материала } i, \\ \dots & \\ f_N = N & \text{для материала } N, \end{cases} \quad (3)$$

где N – число различных материалов, присутствующих в описываемой структуре.

В случае двухкомпонентного фотонного кристалла из стекла и воздуха (который впоследствии возможно заполнить анизотропным материалом) данная функция может быть определена следующим образом:

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} f_0 = 0 & \text{для воздушных элементов,} \\ f_1 = 1 & \text{для стеклянных элементов.} \end{cases} \quad (4)$$

Функция $f(\mathbf{r})$ полностью описывает геометрию периодической структуры, определяя положение анизотропных и изотропных материалов, а также материалов с различными характеристиками. Используя данную функцию и обозначая для дальнейшего удобства обратный тензор диэлектрической проницаемости как $\hat{\eta}(\mathbf{r}) = \hat{\epsilon}^{-1}(\mathbf{r})$, можно записать обратный тензор диэлектрической проницаемости в произвольной точке структуры в виде

$$\hat{\eta}(\mathbf{r}) = \hat{\eta}_0(\mathbf{r}) \frac{\prod_{j=1}^N (f(\mathbf{r}) - j)}{\prod_{j=1}^N (f_0 - j)} + \sum_{i=1}^{N-1} \hat{\eta}_i(\mathbf{r}) \frac{\prod_{j=0}^{i-1} (f(\mathbf{r}) - j) \prod_{j=i+1}^N (f(\mathbf{r}) - j)}{\prod_{j=0}^{i-1} (f_i - j) \prod_{j=i+1}^N (f_i - j)} + \hat{\eta}_N(\mathbf{r}) \frac{\prod_{j=0}^{N-1} (f(\mathbf{r}) - j)}{\prod_{j=0}^{N-1} (f_N - j)}, \quad (5)$$

В случае двухкомпонентного фотонного кристалла, состоящего из изотропного и анизотропного материалов, имеем

$$\hat{\eta}(\mathbf{r}) = \hat{\eta}_{glass}f(\mathbf{r}) + \hat{\eta}_a(\mathbf{r})(1 - f(\mathbf{r})), \quad (6)$$

где

$$\hat{\eta}_a(\mathbf{r}) = \hat{\epsilon}_a^{-1}(\mathbf{r})$$

обратный тензор диэлектрической проницаемости анизотропного материала вида (2),

$$\hat{\eta}_{glass} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\epsilon_{glass}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\epsilon_{glass}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\epsilon_{glass}} \end{pmatrix}$$

обратный тензор диэлектрической проницаемости изотропного материала (в данном случае стекла), обладающего скалярной диэлектрической проницаемостью ϵ_{glass} .

Используя выражение (5) или (6) для определения обратной диэлектрической проницаемости в каждой точке и обозначая длину волны в свободном пространстве как λ , можно записать уравнение Гельмгольца

$$\nabla \times (\hat{\eta}(\mathbf{r})\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})) = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (7)$$

описывающее поведение полей в рассматриваемой системе. В рассматриваемом методе решение уравнения представляется в виде суперпозиции плоских волн

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (8)$$

где \mathbf{G} – вектор обратной решетки фотонного кристалла, \mathbf{k} – вектор Блоха, $\mathbf{H}_{\mathbf{G}}$ – амплитуда разложения напряженности магнитного поля по плоским волнам.

Третье уравнение Максвелла $\text{div}\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$ в данной ситуации говорит о том, что вектор $\mathbf{H}_{\mathbf{G}}$ ортогонален вектору $\mathbf{e}_3 = (\mathbf{k} + \mathbf{G})/|\mathbf{k} + \mathbf{G}|$. Таким образом, специально выбранная система координат позволяет понизить число ненулевых компонент $\mathbf{H}_{\mathbf{G}}$ и тем самым понизить число решаемых уравнений. Вводя два ортогональных вектора \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , каждый из которых ортогонален вектору \mathbf{e}_3 и зависит от вектора обратной решетки \mathbf{G} таким образом, что $\mathbf{H}_{\mathbf{G}} = \mathbf{H}_{\mathbf{G}}^{(1)}\mathbf{e}_1 + \mathbf{H}_{\mathbf{G}}^{(2)}\mathbf{e}_2$, можно в рамках созданного базиса $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ привести уравнение Гельмгольца (7) к матричному уравнению относительно $\mathbf{H}_{\mathbf{G}}$

$$\sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{k} + \mathbf{G}| \cdot |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \mathbf{M} \begin{pmatrix} H_{\mathbf{G}'}^{(1)} \\ H_{\mathbf{G}'}^{(2)} \end{pmatrix} = - \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \begin{pmatrix} H_{\mathbf{G}}^{(1)} \\ H_{\mathbf{G}}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где \mathbf{M} – матрица, содержащая фурье-компоненты обратного тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\eta}_{\mathbf{G}}$. В самом общем случае имеем

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1^{\mathbf{G}'} \cdot [\mathbf{e}_2^{\mathbf{G}} \times (\hat{\eta}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \cdot \mathbf{e}_2^{\mathbf{G}'})] - \mathbf{e}_1^{\mathbf{G}} \cdot [\mathbf{e}_2^{\mathbf{G}} \times (\hat{\eta}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \cdot \mathbf{e}_1^{\mathbf{G}'})] \\ \mathbf{e}_2^{\mathbf{G}'} \cdot [\mathbf{e}_2^{\mathbf{G}} \times (\hat{\eta}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \cdot \mathbf{e}_2^{\mathbf{G}'})] - \mathbf{e}_2^{\mathbf{G}'} \cdot [\mathbf{e}_2^{\mathbf{G}} \times (\hat{\eta}_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \cdot \mathbf{e}_1^{\mathbf{G}'})] \end{pmatrix}. \quad (10)$$

В случае гомеотропного анизотропного материала, когда ориентация молекул, а соответственно, и локальные диэлектрические свойства не зависят от координат (в пределах участков структуры, заполненной анизотропным материалом), $\hat{\eta}_a(\mathbf{r}) = \hat{\eta}_a$, все фурье-преобразование производится над функцией профиля $f(\mathbf{r})$ (3), (4). Тогда для двухкомпонентного случая (4) общее выражение для фурье-компонент обратного тензора диэлектрической проницаемости, входящего в (10), можно записать в виде

$$\hat{\eta}_{\mathbf{G}} = f_{\mathbf{G}}(\hat{\eta}_{glass} - \hat{\eta}_a) + \delta(\mathbf{G})\hat{\eta}_a, \quad (11)$$

где $f_{\mathbf{G}}$ – фурье-компонента функции профиля $f(\mathbf{r})$. В таком представлении собственные значения матрицы M (10) рассчитываются несколько быстрее.

Решение задачи на собственные значения (9) для некоторой структуры дает набор собственных чисел (обратных значений длин волн) для каждого отдельного значения вектора Блоха \mathbf{k} . Значение вектора \mathbf{k} задается в пределах зоны Бриллюэна рассматриваемой фотонно-кристаллической решетки. В случае, когда для некоторого диапазона векторов \mathbf{k} не существует ни одного действительного собственного значения, то есть нет ни одного решения ни для каких частот при таком направлении распространения, говорят о наличии фотонной запрещенной зоны.

Применяя данный метод, можно довольно быстро рассчитывать положение запрещенных зон в диапазоне длин волн для фотонных кристаллов произвольной геометрии, размерности и диэлектрических свойств. В последствии возможно уточнение решений в уже известном диапазоне параметров с помощью методов более точных и требующих больших временных затрат.

Приведенные ниже результаты были получены с помощью описанного метода, реализованного в виде алгоритма на языке программирования ФОРТРАН.

2. Симметрия дисперсионной поверхности анизотропных фотонных кристаллов

Для нахождения запрещенных зон фотонного кристалла необходимо рассчитать частоты (длины волн), между которыми нет ни одного действительного решения задачи на собственные значения (9). Для простоты рассмотрим двумерный случай – диэлектрическую структуру, периодическую с точки зрения диэлектрических свойств в двух направлениях и постоянную в третьем. Такие структуры используются наиболее часто и являются важными объектами для оптики и фотоники. В них не существует абсолютных запрещенных зон, поскольку вектор Блоха становится двумерным, в то время как волновой вектор имеет три компоненты.

Дисперсионная поверхность двумерных фотонных кристаллов рассчитывается при фиксированном значении компоненты волнового вектора, отвечающей направлению, перпендикулярному плоскости периодичности структуры. Она демонстрирует зависимость частоты (длины волны) от компонент вектора Блоха, является сложной поверхностью, имеющей в случае существования запрещенных зон разрывы по оси частот (длин волн). Как известно, экстремумы дисперсионной кривой, соответствующие, в частности, границам запрещенных зон, принадлежат точкам и осям симметрий обратного пространства каждой конкретной фотонно-кристаллической структуры. В случае изотропных материалов симметрия определяется исключительно геометрией фотонно-кристаллической решетки.

На рис. 1 приведены различные листы дисперсионной поверхности (зависимости $K = (2\pi)/\lambda$, где λ – длина волны разрешенного состояния, от компонент вектора Блоха или поперечных компонент волнового вектора k_x, k_y), рассчитанные описанным ранее методом плоских волн для изотропной решетки кагоме [17] с периодом $p = 2$ мкм и толщиной стеклянных стенок, равной $\Delta = 300$ нм. Показатель преломления стекла $n = 1.52$. Воздушные пространства между стенками заполнены материалом с показателем преломления $n' = 1.4$. Для наглядности на рис. 1 шкалы значений $K = (2\pi)/\lambda$ различны для приведенных корней дисперсионного уравнения. Количество промежуточных уровней на всех контурных графиках, приведенных в этой статье, равно 15.

Ниже будем рассматривать только гексагональные решетки. Треугольник ГМК $\left\{ (0, 0), \left(0, \frac{2\pi}{p\sqrt{3}} \right), \left(\frac{2\pi}{p}, \frac{2\pi}{p\sqrt{3}} \right) \right\}$ соответствует границам неприводимой части зоны Бриллюэна, что означает возможность полной реконструкции последней путем действия на указанную неприводимую часть операторами симметрии группы D_6 , которой обладает гексагональная решетка кагоме. Ее границы содержат все экстремумы дисперсионной кривой, то есть для нахождения запрещенных зон, разграниченных экстремумами, достаточно решить уравнение (9) на границе неприводимой части зоны Бриллюэна.

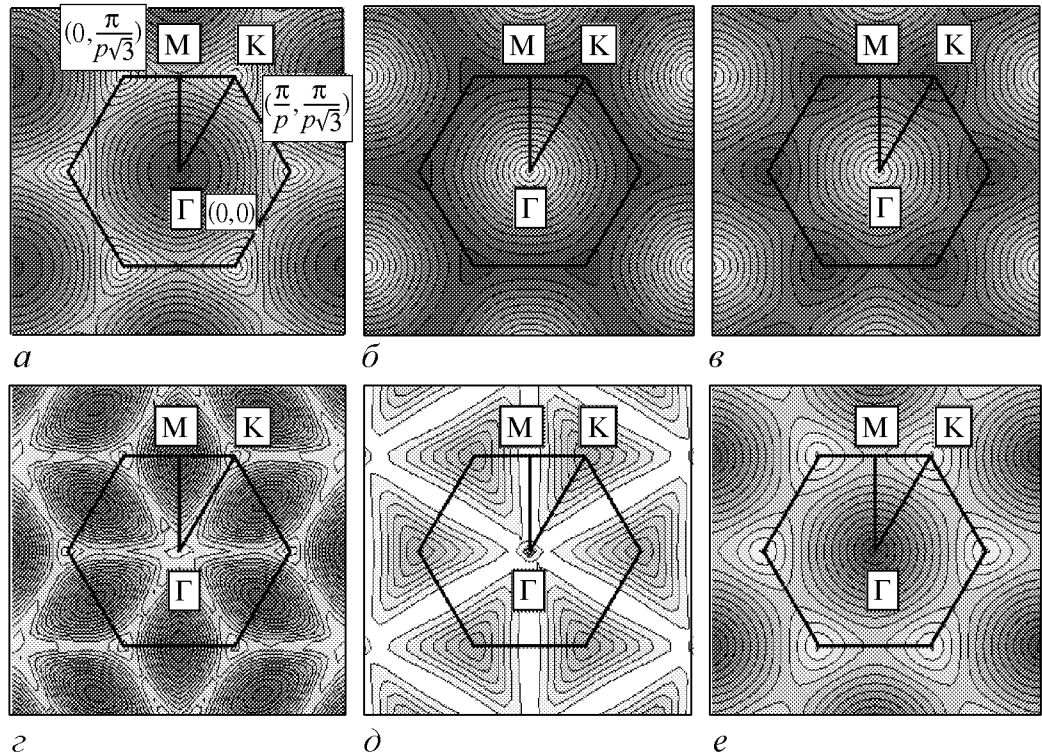


Рис. 1. Нормированные контурные графики различных корней дисперсионного уравнения (9) для решетки кагоме [17]. Черная сплошная линия обозначает зону Бриллюэна и ее неприводимую часть – треугольник ГМК. Минимумы волнового числа $K_{\min} = (2\pi)/\lambda_{\max}$ (обозначены темно-серым цветом) и максимумы $K_{\max} = (2\pi)/\lambda_{\min}$ (обозначены белым цветом) соответствуют значениям: а – $K_{\min} = 13.86$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.91$ рад/мкм; б – $K_{\min} = 13.91$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.02$ рад/мкм; в – $K_{\min} = 13.91$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.03$ рад/мкм; г – $K_{\min} = 14.01555$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.0210$ рад/мкм; д – $K_{\min} = 14.015$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.027$ рад/мкм; е – $K_{\min} = 14.02$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.18$ рад/мкм

В анизотропном случае такое приближение становится невозможным. Это нетрудно продемонстрировать, рассмотрев двумерный фотонный кристалл как трехмерную структуру из системы стеклянных трубок (рис. 2).

На рис. 3 показан один из элементов такого фотонного кристалла – стеклянная трубка с полой сердцевинкой, заполненная одноосным анизотропным материалом, и эквивалентная трехмерная зона Бриллюэна, высота которой может быть произвольной в виду нулевого периода по оси z [12]. В дальнейшем будем рассматривать одноосные анизотропные

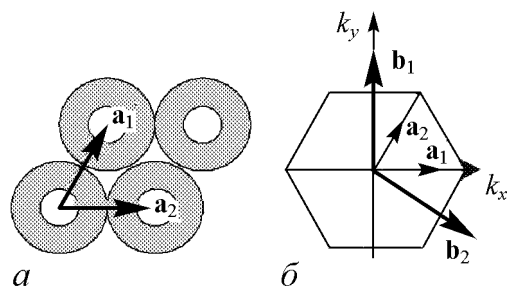


Рис. 2. *a* – схематичное изображение прямой решетки фотонно-кристаллической структуры, смоделированной стеклянными трубками, упакованными в виде правильной гексагональной решетки, здесь a_1, a_2 – векторы трансляции; *b* – b_1, b_2 – векторы обратной решетки и зона Бриллюэна

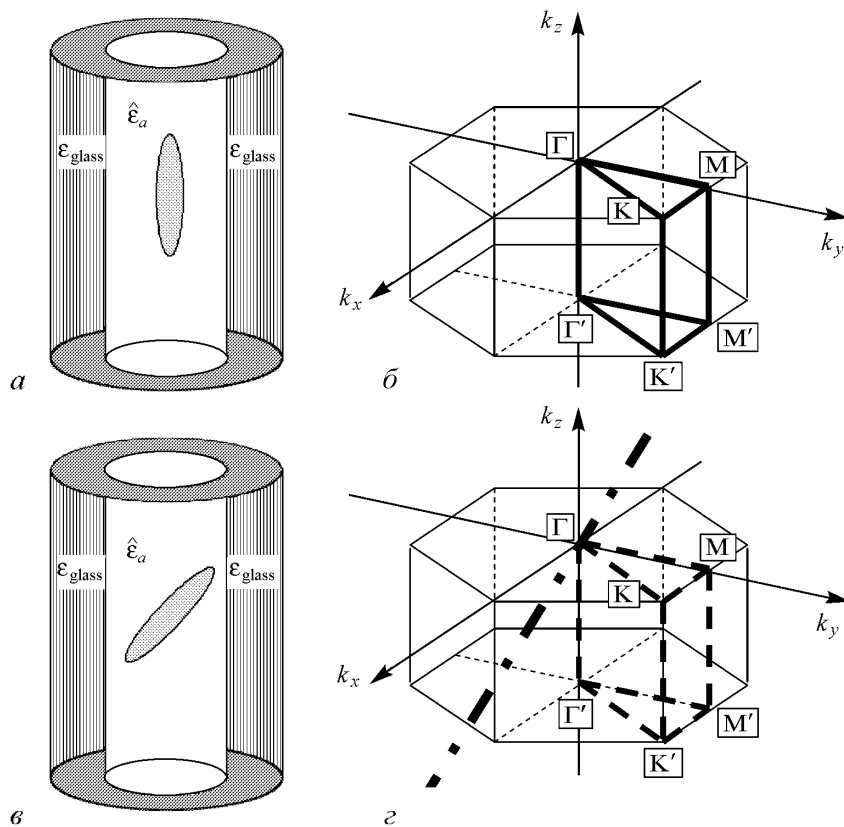


Рис. 3. Схема элемента двумерного ФК в виде стеклянной трубки и ориентация анизотропного материала относительно элемента фотонного кристалла при ориентации вдоль продольной оси фотонного кристалла (*a*) и произвольно (*б*). Эквивалентная трехмерная зона Бриллюэна для двумерного фотонного кристалла при ориентации молекул одноосного анизотропного материала вдоль продольной оси (*б*) и произвольно (*г*). Сплошной линией отмечена неприводимая часть зоны Бриллюэна, штрихованная линия обозначает некорректность данной зоны при произвольной ориентации анизотропного материала. Штрих-пунктирная линия обозначает направление директора одноосного анизотропного материала

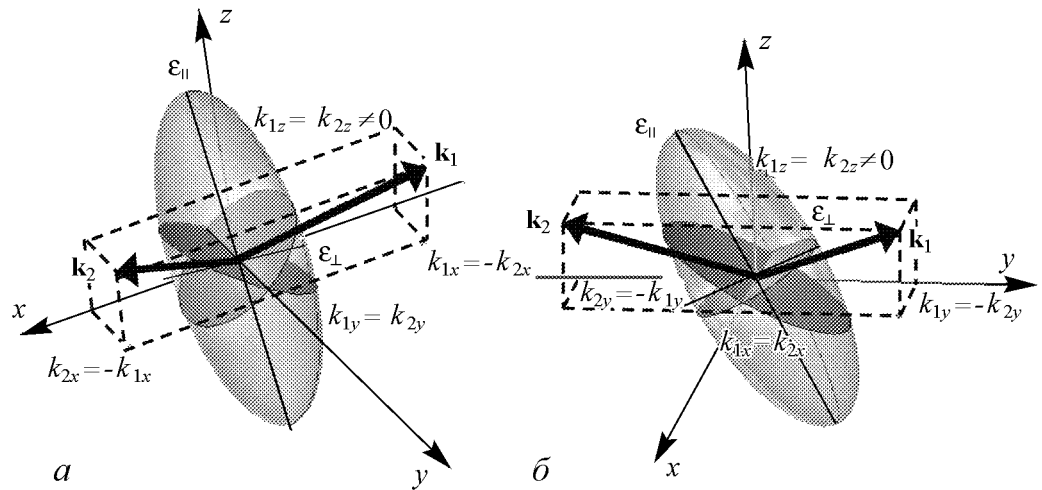


Рис. 4. Тензор диэлектрической проницаемости под углом 25° к оси z в плоскости (y, z) : a – одинаковые условия для волн с компонентами волновых чисел $k_{1z} = k_{2z} \neq 0$, $k_{1y} = k_{2y}$, $k_{1x} = -k_{2x}$; b – разные условия для волн с компонентами волновых чисел $k_{1z} = k_{2z}$, $k_{1x} = k_{2x}$, $k_{1y} = -k_{2y}$

материалы, к которым относится, например, жидкий кристалл, так как этот случай в достаточной степени раскрывает суть задачи. Подчеркнем, что декартова система координат выбрана так, что ось z перпендикулярна плоскости периодичности (x, y) фотонного кристалла, ось x сонаправлена с одним из векторов трансляции прямой решетки фотонного кристалла – в данном случае с вектором \mathbf{a}_1 (см. рис. 2), а ось y выбрана в плоскости периодичности фотонного кристалла так, чтобы образовать «правую» систему координат.

При ориентации одноосного анизотропного материала вдоль оси z любой вектор \mathbf{d} , принадлежащий прямой, соответствующей направлению директора анизотропного материала, имеет нулевую проекцию $\mathbf{d}_{(x,y)} = \mathbf{0}$ на плоскость периодичности фотонного кристалла. Данная ситуация соответствует изотропному случаю, так как симметрия, задаваемая тензором диэлектрической проницаемости, соответствует самой высокой группе симметрий и в пересечении с группой симметрии решетки дает последнюю как итоговую симметрию системы. То есть, зона Бриллюэна в такой ситуации обладает симметрией прямой решетки, что в случае гексагональной решетки отвечает группе D_6 .

При переориентации молекул (рис. 3, б) меняется характер и порядок симметрии дисперсионной поверхности, и в обратном пространстве появляется особое направление волновых векторов, соответствующее ориентации молекул анизотропного материала и не совпадающее более с осью k_z . Таким образом, неприводимая часть зоны Бриллюэна становится отличной от неприводимой части в изотропном случае.

Рассмотрим подробнее случай одноосного анизотропного материала с переориентацией молекул через вращение тензора его диэлектрической проницаемости, сопровождающееся появлением ненулевой проекции вектора \mathbf{d} в плоскости периодичности фотонного кристалла, параллельной какому-либо из векторов трансляции прямой решетки $\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2)$, $m, n \in \mathbb{N}$, где \mathbb{N} – множество целых чисел (см. рис. 2). Например, рассмотрим поворот вокруг оси x , соответствующей направлению вектора прямой решетки \mathbf{a}_1 . Такой поворот отвечает возникновению проекции $\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (-\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)$ и особого направления в обратном пространстве в виде прямой, лежащей в плоскости (k_z, k_y) и образующей в проекции на плоскость

равных компонент k_z ось группы симметрий $D_1 \cap D_6 = D_1$. Это означает, что в этом случае две волны, имеющие компоненты волнового вектора $k_{1z} = k_{2z}, k_{1y} = k_{2y}, k_{1x} = -k_{2x}$ (x – ось поворота молекул анизотропного материала), будут отвечать одинаковой частоте, то есть будут распространяться в одинаковых условиях (рис. 4, а). В общем случае распространения волн вне плоскости периодичности (то есть при ненулевой компоненте k_z), в силу принципиальной трехмерности данной системы, симметрия относительно оси x (и оси k_x в обратном пространстве) наблюдаться не будет. Это связано с тем, что для волн, имеющих компоненты волнового вектора $k_{1z} = k_{2z}, k_{1x} = k_{2x}, k_{1y} = -k_{2y}$, сечение произвольно ориентированного эллипсоида диэлектрической проницаемости анизотропного материала будет выглядеть неодинаково (рис. 4, б). Исключения составляют случаи распространения волн в плоскости периодичности двумерного фотонного кристалла и случаи ориентации тензора диэлектрической проницаемости анизотропного материала в одной из выбранных координатных плоскостей (в системе координат, связанной с геометрией фотонного кристалла).

На рис. 5 показано изменение симметрии одного из корней дисперсионного уравнения (9) для описанной выше решетки кагоме, воздушные пространства которой заполнены жидким кристаллом с показателями преломления $n_{||} = 1.7, n_{\perp} = 1.4$ при гомеотропном заполнении и ориентации молекул жидкого кристалла под различными углами к оси z в плоскости (x, z) , содержащей ось z и вектор прямой

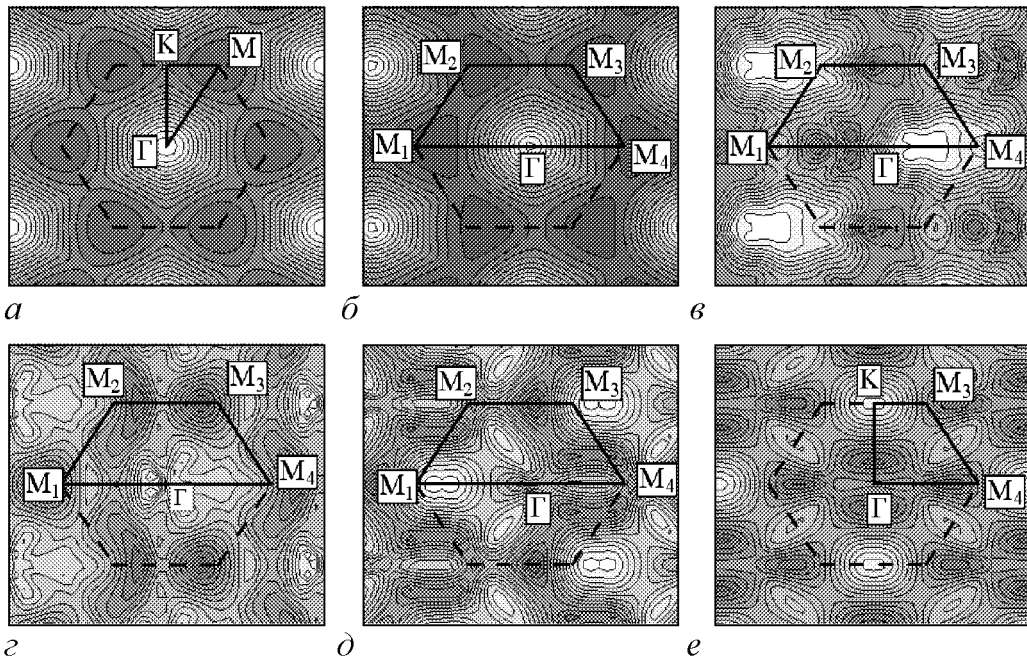


Рис. 5. Нормированные контурные графики корня дисперсионного уравнения рассматриваемого фотонного кристалла. Минимумы K_{\min} обозначены темно-серым цветом, максимумы K_{\max} обозначены белым цветом. Ориентация анизотропного материала в плоскости, содержащей ось z и вектор прямой решетки \mathbf{a}_1 , под различными углами α к оси z : а – 0° (идентично изотропному случаю), $K_{\min} = 14.40$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.51$ рад/мкм; б – 10° , $K_{\min} = 14.38$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.5$ рад/мкм; в – 30° , $K_{\min} = 14.22$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.3$ рад/мкм; г – 60° , $K_{\min} = 13.85$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.92$ рад/мкм; д – 70° , $K_{\min} = 13.72$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.78$ рад/мкм; е – 90° (вдоль \mathbf{a}_1 в плоскости периодичности) $K_{\min} = 13.6$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.69$ рад/мкм. Пунктирной линией обозначен контур зоны Бриллюэна, сплошной линией обозначена ее неприводимая часть

решетки фотонного кристалла \mathbf{a}_1 . Из изменения значений минимумов и максимумов волнового числа видно общее смещение дисперсионной поверхности в сторону более длинных волн, что объясняется изменением эффективного показателя преломления относительно плоскости периодичности фотонного кристалла и, соответственно, компонент вектора Блоха.

Степень симметрии дисперсионной поверхности повышается до $D_2 \cap D_6 = D_2$ при ориентации молекул в плоскости периодичности фотонного кристалла $\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2)$, $m, n \in \mathbb{N}$ и $d_z = 0$, так как тогда возникает вторая ось симметрии вдоль направлений, перпендикулярных ориентации молекул анизотропного материала. Данный эффект продемонстрирован: на рис. 4, б, где показана взаимная ориентация эллипсоида диэлектрической проницаемости анизотропного материала и волнового вектора; рис. 5, е, где неприводимой частью зоны Бриллюэна становится трапеция $\Gamma\text{KM}_3\text{M}_4$; на рис. 6, где приведены несколько корней дисперсионного уравнения, рассчитанные для ориентации одноосного анизотропного материала вдоль оси x , то есть вдоль вектора трансляции прямой решетки \mathbf{a}_1 .

Другой случай переориентации одноосного анизотропного материала – вращение молекул в плоскости периодичности фотонного кристалла, то есть в плоскости, содержащей координатные оси x и y . Произвольная ориентация одноосного анизотропного материала, не совпадающая с ориентацией ни с одним из векторов прямой решетки $\forall (m, n) \in \mathbb{N} \rightarrow (\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2))$ и $d_z = 0$, разрушает симметрию типа D_i и превращает ее в циркулярную, а в рассматриваемом случае в $C_2 \cap D_6 = C_2$.

На рис. 7 показаны контурные графики одного из корней дисперсионного уравнения при различных углах между директором молекул одноосного анизотропного материала и осью x . В этом случае не наблюдается общего смещения дисперсионной поверхности по шкале длин волн, так как эффективный показатель преломления не меняется относительно плоскости периодичности двумерного фотонного кристалла, а следовательно и компонент вектора Блоха.

Причины изменения вида симметрии объясняются аналогичным образом, что и в предыдущих случаях. В силу того, что симметрия становится циклической, невозможно однозначно определить неприводимую часть зоны Бриллюэна. По этой же причине при такой ориентации одноосного анизотропного материала не существует направлений, содержащих все экстремумы дисперсионной поверхности. Например, на рис. 8 продемонстрирован отличный от приведенного на рис. 7 корень дисперсионного уравнения идентичной системы.

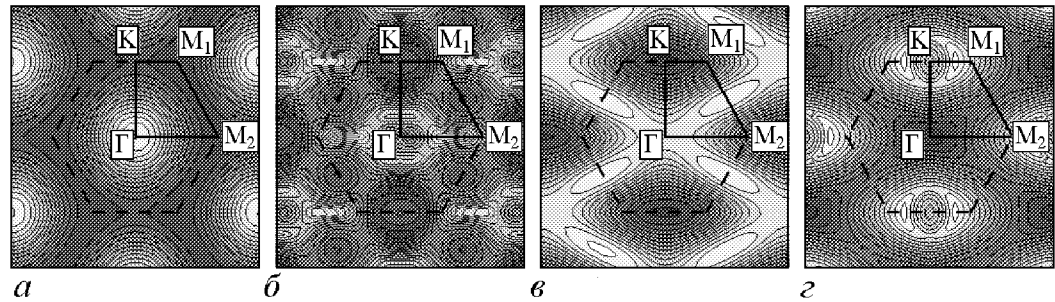


Рис. 6. Нормированные контурные графики корней дисперсионного уравнения рассматриваемого фотонного кристалла при ориентации анизотропного материала в плоскости периодичности структуры параллельно вектору прямой решетки \mathbf{a}_1 . Минимумы K_{\min} (темно-серый цвет) и максимумы K_{\max} (белый цвет) соответствуют: а – $K_{\min} = 13.198$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.218$ рад/мкм; б – $K_{\min} = 13.57$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.651$ рад/мкм; в – $K_{\min} = 13.228$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.236$ рад/мкм; г – $K_{\min} = 13.535$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.575$ рад/мкм. Пунктирной линией обозначен контур зоны Бриллюэна, сплошной линией обозначена ее неприводимая часть

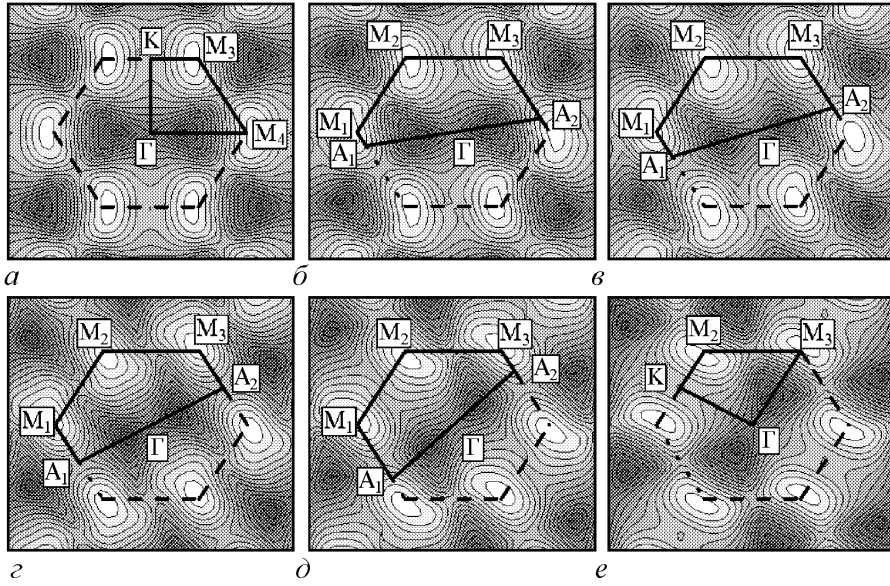


Рис. 7. Нормированные контурные графики корня дисперсионного уравнения рассматриваемого фотонного кристалла. Ориентация анизотропного материала в плоскости периодичности под различными углами α к вектору \mathbf{a}_1 : $a - 0^\circ$ (вдоль \mathbf{a}_1), $b - 10^\circ$, $c - 20^\circ$, $d - 45^\circ$, $e - 60^\circ$ (вдоль \mathbf{a}_2). Минимумы (темно-серый цвет) и максимумы (белый цвет) соответствуют значениям $K_{\min} = 13.63$ рад/мкм и $K_{\max} = 13.71$ рад/мкм. Пунктирной линией обозначен контур зоны Бриллюэна, сплошной линией обозначена ее неприводимая часть

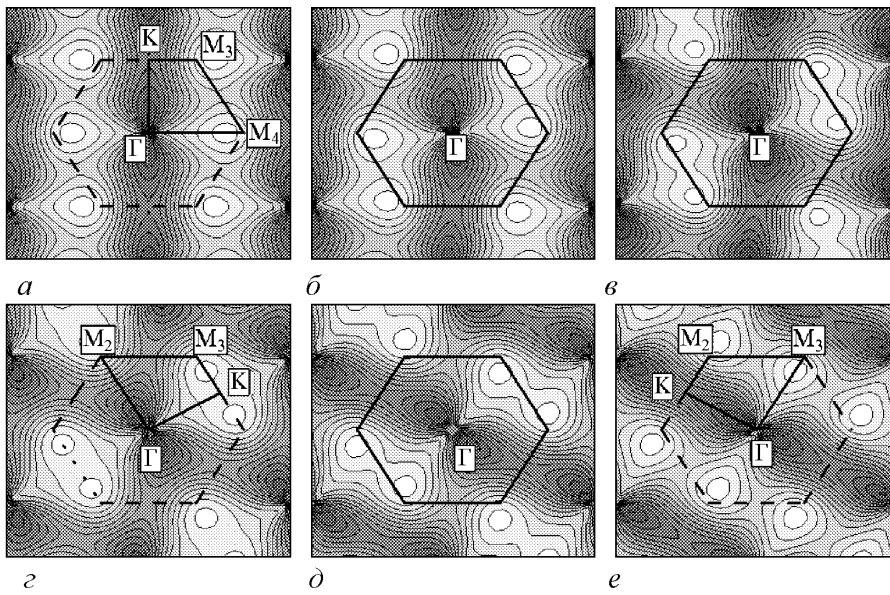


Рис. 8. Нормированные контурные графики корня дисперсионного уравнения рассматриваемого фотонного кристалла, отличного от приведенного на рис. 7. Ориентация анизотропного материала в плоскости периодичности под различными углами α к вектору \mathbf{a}_1 : $a - 0^\circ$ (вдоль \mathbf{a}_1), $b - 10^\circ$, $c - 20^\circ$, $d - 45^\circ$, $e - 60^\circ$ (вдоль \mathbf{a}_2). Минимумы (темно-серый цвет) и максимумы (белый цвет) соответствуют значениям $K_{\min} = 12.428$ рад/мкм и $K_{\max} = 12.446$ рад/мкм. Пунктирной линией обозначен контур зоны Бриллюэна, сплошной линией обозначена ее неприводимая часть

Очевидно, что расположение экстремумов двух корней сильно различается. В такой ситуации для нахождения границ запрещенных зон следует проводить расчет по всем точкам произвольно выбранной половины зоны Бриллюэна. На обоих рисунках показаны случаи ориентации одноосного анизотропного материала вдоль векторов трансляции прямой решетки фотонного кристалла, когда степень симметрии зоны Бриллюэна повышается до $D_2 \cap D_6 = D_2$ (ср. рис. 7, *a, z, e*, и рис. 8, *a, z, e*, соответствующие углам между направлением директора анизотропного материала и осью x , равным $\alpha = 0^\circ$ (вдоль \mathbf{a}_1), $\alpha = 30^\circ$ (вдоль $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$) и $\alpha = 60^\circ$ (вдоль \mathbf{a}_2)).

В оставшемся нерассмотренном случае произвольной ориентации директора одноосного материала, когда вектор \mathbf{d} имеет ненулевую компоненту вдоль оси z и его проекция на плоскость периодичности фотонного кристалла не сонаправлена ни с одним из векторов трансляции прямой решетки двумерного фотонного кристалла $\forall (m, n) \in \mathbb{N} \rightarrow (\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2))$ и $d_z \neq 0$, невозможно выделить неприводимую часть зоны Бриллюэна в силу отсутствия симметрий внутри последней, кроме тривиальной симметрии $C_1 \cap D_6 = C_1$, что продемонстрировано на рис. 9.

Стоит отметить, что приведенные выше рассуждения справедливы для любой фотонно-кристаллической решетки (треугольной, квадратной и гексагональной), разница в результатах заключается лишь в том, что общая симметрия структуры задается пересечением группы симметрий, задаваемой тензором диэлектрической проницаемости, и группы симметрий соответствующей решетки.

Таким образом, можно подвести итог всех рассмотренных ситуаций для произвольного двумерного фотонного кристалла, обозначив группу симметрий его решетки как G_{PC} , в виде четырех случаев ориентации директора одноосного анизотропного материала относительно выбранной системы координат.

1. При такой ориентации произвольного вектора \mathbf{d} , лежащего на прямой, соответствующей направлению директора анизотропного материала, что он полностью принадлежит плоскости периодичности двумерного фотонного кристалла и сонаправлен с каким-либо вектором трансляции прямой решетки фотонного кристалла,

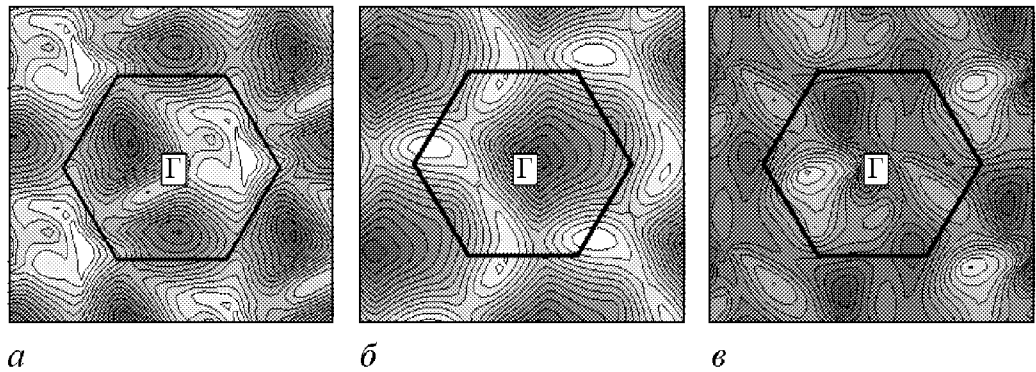


Рис. 9. Корни дисперсионного уравнения рассматриваемого фотонного кристалла. Ориентация анизотропного материала вне плоскости периодичности такая, что в проекции на плоскость периодичности направление директора не параллельно ни одному из векторов трансляции прямой решетки. Минимумы значений волнового числа K_{\min} обозначены темно-серым цветом, максимумы K_{\max} – белым цветом. Директор одноосного анизотропного материала направлен *a* – под углом $\alpha = 60^\circ$ к оси z и под углом $\alpha = 20^\circ$ к вектору \mathbf{a}_1 , $K_{\min} = 14.25$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.33$ рад/мкм; *б* – под углом $\alpha = 30^\circ$ к оси z и под углом $\alpha = 35^\circ$ к вектору \mathbf{a}_1 , $K_{\min} = 13.95$ рад/мкм, $K_{\max} = 14.52$ рад/мкм; *в* – под углом $\alpha = 45^\circ$ к оси z и под углом $\alpha = 20^\circ$ к вектору \mathbf{a}_1 , $K_{\min} = 13.81$ рад/мкм, $K_{\max} = 13.88$ рад/мкм. Сплошной линией обозначен контур зоны Бриллюэна

то есть $\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2)$, $m, n \in \mathbb{N}$ и $d_z = 0$, симметрия зоны Бриллюэна определяется группой симметрий $D_2 \cap G_{PC}$. Осями симметрии D_2 в данном случае служат ось, сонаправленная с вектором \mathbf{d} и ось, перпендикулярная ей.

2. При такой ориентации вектора \mathbf{d} , что он полностью принадлежит плоскости периодичности двумерного фотонного кристалла и не сонаправлен ни с одним из векторов трансляции прямой решетки фотонного кристалла, то есть $\forall (m, n) \in \mathbb{N} \neg (\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2))$ и $d_z = 0$, симметрия зоны Бриллюэна определяется группой симметрий $C_2 \cap G_{PC}$ с симметрией C_2 относительно центра Γ зоны Бриллюэна.

3. При такой ориентации произвольного вектора \mathbf{d} , что он не принадлежит плоскости периодичности двумерного фотонного кристалла и его проекция на данную плоскость сонаправлена с каким-либо вектором трансляции прямой решетки фотонного кристалла, то есть $\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2)$, $m, n \in \mathbb{N}$ и $d_z \neq 0$, симметрия зоны Бриллюэна определяется группой симметрий $D_1 \cap G_{PC}$. Осью симметрии D_1 в данном случае служит ось, сонаправленная с проекцией $\mathbf{d}(x, y)$.

4. При такой ориентации вектора \mathbf{d} , что он не принадлежит плоскости периодичности двумерного фотонного кристалла и не сонаправлен ни с одним из векторов трансляции прямой решетки фотонного кристалла, то есть $\forall (m, n) \in \mathbb{N} \neg (\mathbf{d}_{(x,y)} \parallel (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2))$ и $d_z \neq 0$, симметрия зоны Бриллюэна определяется тривиальной группой симметрий $C_1 \cap G_{PC} = C_1$. То есть данный случай не предполагает наличия неприводимой части зоны Бриллюэна.

В случаях, когда итоговая симметрия является циркулярной (симметрией типа C_i), в силу неоднозначности определения неприводимой части зоны Бриллюэна, расчет границ запрещенных зон должен производиться по всем точкам i -й части зоны. В случаях итоговых симметрий группы D_i расчет может быть произведен только по контуру соответствующей неприводимой части зоны Бриллюэна, так как они содержат все экстремальные значения дисперсионной поверхности.

Многие работы, несмотря на принципиальную разницу между изотропными и анизотропными средами, используют в своих расчетах неизменную неприводимую часть зоны Бриллюэна [15, 16]. На рис. 10 приведено сравнение диаграммы за-

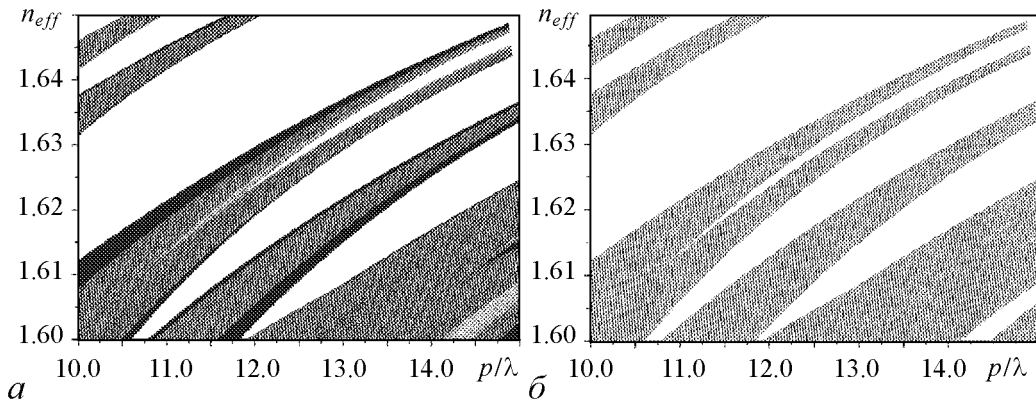


Рис. 10. Сравнение диаграмм запрещенных зон рассматриваемого фотонного кристалла с ориентацией анизотропного материала в плоскости периодичности под углом $\alpha = 45^\circ$ к вектору прямой решетки \mathbf{a}_1 , рассчитанных по всей зоне Бриллюэна (разрешенные зоны показаны черным цветом), по неприводимой части зоны Бриллюэна для изотропных сред (разрешенные зоны показаны темно-серым цветом) и рассчитанных по корректно выбранной части зоны Бриллюэна, то есть по всем точкам половины зоны Бриллюэна (показано светло-серым цветом); p/λ – отношение периода структуры к длине волны

прещенных зон, рассчитанных вдоль границы неприводимой части зоны Бриллюэна, выбранной, как рекомендуется в данной работе (рис. 10, *a*), и вдоль границ стандартно используемой для изотропных сред треугольной неприводимой части зоны Бриллюэна (рис. 10, *б*). Здесь черным цветом обозначены разрешенные зоны (области, где существует действительное решение дисперсионного уравнения), рассчитанные по всем точкам зоны Бриллюэна, темно- и светло-серыми цветами, соответственно, обозначены разрешенные зоны, рассчитанные вдоль контура ГМК и рассчитанные по всем точкам половины зоны Бриллюэна. Очевидно, что первый подход неверен и дает значительную ошибку в определении границ запрещенных зон, показанных на рисунке белым цветом.

3. Изменение ширины и положения фотонных запрещенных зон за счет внешнего воздействия в анизотропных фотонных кристаллах

С помощью данного метода, руководствуясь вышеизложенными соображениями в выборе контура неприводимой части зоны Бриллюэна для расчета границ запрещенных зон, были исследованы изменения дисперсионных диаграмм при переориентации анизотропных материалов в фотонных кристаллах [18, 19].

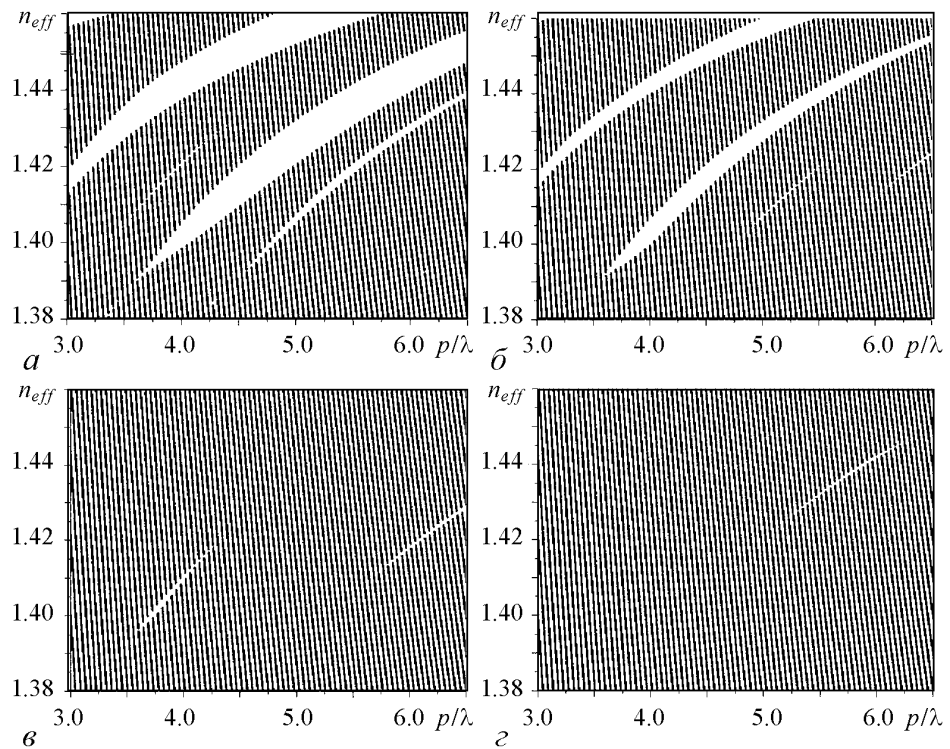


Рис. 11. Диаграммы запрещенных зон двумерного фотонного кристалла из стеклянной решетки кагоме, заполненного жидким кристаллом, при ориентации директора молекул жидкого кристалла под различными углами α к продольной оси двумерного фотонного кристалла: $a - 0^\circ$, $б - 5^\circ$, $в - 10^\circ$, $г - 15^\circ$. Поворот молекул происходит в плоскости, содержащей продольную ось и вектор прямой решетки \mathbf{a}_1 ; n_{eff} – эффективный показатель преломления; p/λ – отношение периода структуры к длине волны. Заштрихованные области соответствуют областям действительных решений, незакрашенные – запрещенным зонам

Для аналогии продолжим рассматривать гексагональную решетку кагоме из стеклянных стенок с показателем преломления $n = 1.52$, воздушные пространства в которой заполнены одноосным анизотропным материалом – жидким кристаллом – нематиком с показателями преломления $n_{\parallel} = 1.72$ и $n_{\perp} = 1.52$. Толщина стенок $\Delta = 300$ нм, период решетки $d = 2$ мкм.

На рис. 11 приведены диаграммы запрещенных зон для рассматриваемого анизотропного фотонного кристалла при продольной ориентации директора жидкого кристалла и его повороте в плоскости, содержащей продольную ось z и вектор прямой решетки \mathbf{a}_1 . Очевидно, что перестройкой ориентации жидкого кристалла внешним электрическим полем можно существенно повлиять на ширину и форму запрещенных зон.

На рис. 12 приведены диаграммы запрещенных зон при ориентации директора жидкого кристалла в плоскости периодичности рассматриваемой структуры. Также очевидна возможность управления свойствами анизотропного фотонного кристалла путем внешнего электрического воздействия, без изменения его геометрических и материальных свойств. В подтверждение правильности рассуждений о выборе неприводимой части зоны Бриллюэна стоит отметить, что, как и следовало ожидать, дисперсионные диаграммы для углов $\alpha = 0^\circ$ (рис.12, *a*) и $\alpha = 60^\circ$ (рис.12, *г*) абсолютно идентичны друг другу вследствие симметрии гексагональной решетки кагоме.

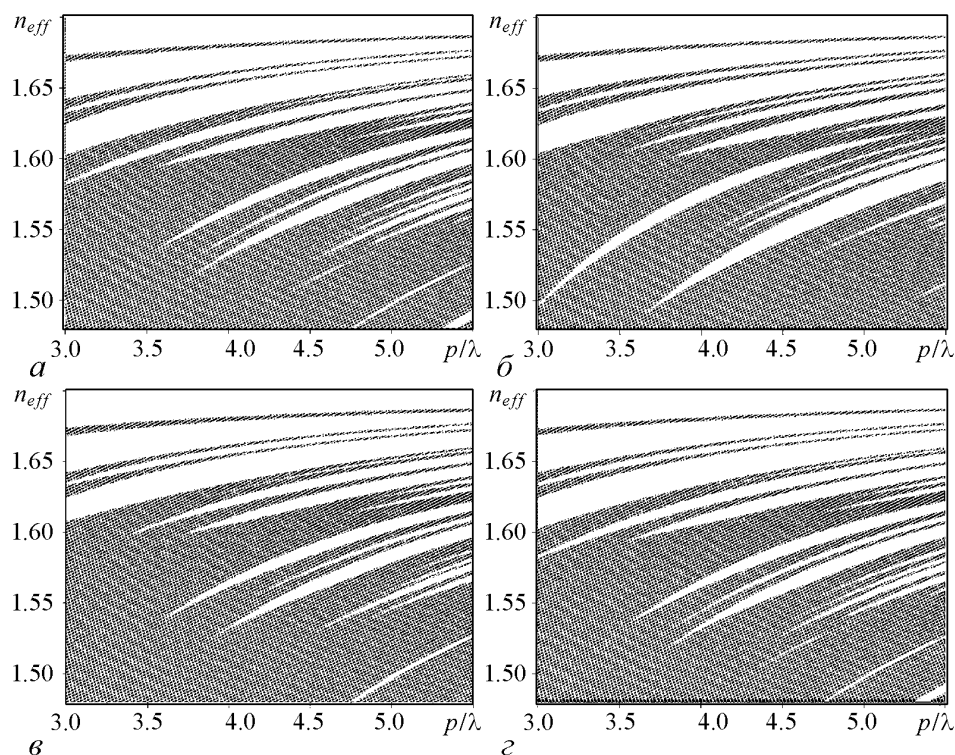


Рис. 12. Диаграммы запрещенных зон двумерного фотонного кристалла из стеклянной решетки кагоме, заполненного жидким кристаллом, при ориентации директора молекул жидкого кристалла под различными углами α к вектору трансляции \mathbf{a}_1 двумерного фотонного кристалла: *a* – 0° , *б* – 10° , *в* – 30° , *г* – 60° . Поворот молекул происходит в плоскости периодичности фотонного кристалла. n_{eff} – эффективный показатель преломления, p/λ – отношение периода структуры к длине волны. Заштрихованные области соответствуют областям действительных решений, незакрашенные – запрещенным зонам

Заклучение

В работе представлен векторный метод плоских волн для расчета бесконечных периодических структур с произвольной геометрией и диэлектрическими свойствами, включая случай анизотропных материалов, описываемых произвольно ориентированным тензором диэлектрической проницаемости.

Метод можно использовать не только для расчета идеальных фотонных кристаллов, но и (в совокупности с другими методами) для расчета более сложных объектов, таких как фотонно-кристаллические структуры с дефектами и волноводы [11].

На примере использования жидких кристаллов показано влияние ориентации анизотропного материала на симметрию дисперсионной поверхности внутри зоны Бриллюэна в анизотропных фотонных кристаллах и даны рекомендации по правильному выбору области зоны Бриллюэна, точки которой следует учитывать при расчете запрещенных зон анизотропного фотонного кристалла.

Выделено четыре случая ориентации директора одноосного анизотропного материала в двумерном фотонном кристалле с симметрией решетки группы G_{PC} , соответствующие разным симметриям зоны Бриллюэна. В случаях циркулярной итоговой симметрии (симметрии типа C_i), в силу неоднозначности определения неприводимой части зоны Бриллюэна, расчет границ запрещенных зон должен производиться по всем точкам i -й части зоны. В случаях итоговых симметрий группы D_i расчет может быть произведен только по контуру соответствующей неприводимой части зоны Бриллюэна, так как он содержит все экстремальные значения дисперсионной поверхности.

Руководствуясь приведенной выше классификацией и используя для расчетов соответствующую неприводимую часть зоны Бриллюэна, можно значительно сократить время, затрачиваемое на расчет запрещенных зон анизотропных фотонных кристаллов. В целях предотвращения ошибок в расчетах запрещенных зон следует использовать неприводимую часть зоны Бриллюэна, соответствующую симметрии дисперсионной поверхности при конкретной ориентации молекул анизотропного материала, что показано на примере, приведенном в данной работе.

Работа И.А. Хромовой поддержана ФНП «Династия».

Библиографический список

1. Joannopoulos J.D., Villeneuve P.R. and Fan S. Photonic crystals: putting a new twist on light // Nature. 1997. Vol. 386. P. 143.
2. Ho K.M., Chan C.T., and Soukoulis C.M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures // Phys. Rev. Lett. 1990. Vol. 65. P. 3152.
3. Larsen T.T. Optical devices based on liquid crystal photonic bandgap fibers // Optics Express. 2003. Vol. 11, № 20. P. 2589.
4. Alkeskjold T.T. All-optical modulation in dye-doped nematic liquid crystal photonic bandgap fibers // Optics Express. 2004. Vol. 12, № 24. P. 5857.
5. Du F., Lu Y.-Q., and Wu S.-T. Electrically tunable liquid-crystal photonic crystal fiber // Applied Physics Letters. 2004. Vol. 85, № 12. P. 2181.

6. *Kotynski R. et al.* Modeling of polarization behaviour of LC filled photonic crystal fibers // Proceedings Symposium IEEE/LEOS Benelux Chapter, 315-319, Dec. 2004, Ghent, Belgium.
7. *Scolari L.* Continuously tunable devices based on electrical control of dual-frequency liquid crystal filled photonic bandgap fibers // *Optics Express*. 2005. Vol. 13, № 19. P. 7483.
8. *Seydou F. et al.* Numerical computation of the Green's function for two-dimensional finite-size photonic crystals of infinite length // *Optics Express*. 2006. Vol. 14, № 23. P. 11362.
9. *Busch K. et al.* The Wannier function approach to photonic crystal circuits // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. № 15. P. 1233.
10. *Johnson S.G., Joannopoulos J.D.* Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis // *Optics Express*. 2001. Vol. 8, № 3. P. 173.
11. *Guo Sh., Albin S.* Simple plane wave implementation for photonic crystal calculations // *Optics Express*. 2003. Vol. 11, № 2. P. 167.
12. *Lokke M. et al.* Group-theoretical description of the triangular air-silica photonic crystal out-of-plane propagation // *Optics Express*. 2004. Vol. 12, № 25.
13. *Melnikov L., Khromova I., Sherbakov A., Nikishin N.* Soft-glass hollow core photonic crystal fibers // *Proc. SPIE*. 2005. 5950. P. 243.
14. *Hsue Y.-Ch., Yang T.-J.* A novel view of plane wave expansion method in photonic crystals // <http://arxiv.org/abs/physics/0307150v1>.
15. *Kotynski R.* Photonic crystal fibers with material anisotropy // *Optical and Quantum Electronics*. 2005. № 37. P. 253.
16. *Sun J., Chan C.C.* Effect of liquid crystal alignment on bandgap formation in photonic bandgap fibers // *Optics Letters*. 2007. Vol. 32, № 14. P. 1989.
17. *Couny F., Benabid F. and Light P.S.* Large-pitch kagome-structured hollow-core photonic crystal fiber // *Optics Letters*. 2006. Vol. 31, № 24. P. 3574.
18. *Khromova I.A., Melnikov L.A.* Liquid crystal infiltrated photonic bandgap fibers: dispersion and mode characteristics calculation // *Technical Digest of Conference «LOYS-2006»*, 2006 ThS7-03, 99;
19. *Khromova I.A., Melnikov L.A.* Dispersion Properties of photonic crystals and photonic band gap fibers with anisotropic elements // *Proceedings of 13th Student Seminar on Microwave Applications of Novel Physical Phenomena*, 38-40, 2006.

*Саратовский государственный
университет им. Н.Г. Чернышевского*

Поступила в редакцию 27.12.2007

**THE EIGENWAVES OF THE ANISOTROPIC PHOTONIC CRYSTALS:
THE CALCULATION METHOD AND ITS FEATURES, THE SYMMETRY
OF THE DISPERSION SURFACE OF THE 2D CRYSTAL**

I.A. Khromova, L.A. Melnikov

Fully vectorial plane wave method is presented aimed the calculation of the electromagnetic eigenwaves in periodical dielectric media having arbitrary geometry and dimension with both isotropic and anisotropic elements. Using this method the effect of the reorientation of molecules of anisotropic material in photonic crystal on the dispersion surface is investigated.



Хромова Ирина Анатольевна – родилась в Саратове в 1983 году. Окончила факультет нелинейных процессов Саратовского государственного университета в 2005 году. В настоящее время является аспирантом кафедры лазерной и компьютерной физики СГУ и Отделения Электрической и электронной инженерии Общественного университета Наварры. Является автором 34 опубликованных работ. Область научных интересов: электромагнетизм, фотоника, нелинейная оптика, волоконная оптика, метаматериалы.
E-mail:KhromovaIA@yandex.ru