

О простой модели фотонного или фононного кристалла

А. М. Косевич¹⁾

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, 61164 Харьков, Украина

Max Planck Institute for Complex Systems, Dresden, Germany

Поступила в редакцию 11 октября 2001 г.

После переработки 8 ноября 2001 г.

Предложена модель одномерной диэлектрической или упругой сверхрешетки (СР), позволяющая сравнительно просто описать спектр частот электромагнитных или акустических волн. Зонный частотный спектр сводится к сужающимся с ростом частоты минизонам. Указана схема получения локальных состояний вблизи дефекта в СР и описано простейшее из них. Обсуждены условия блоховских осцилляций волнового пакета в СР.

PACS: 43.20.+g, 62.65.+k, 63.20.Dj, 68.35.Ja

1. Фотонным кристаллом называют макроскопическую периодическую структуру, состоящую из двух чередующихся в пространстве диэлектриков, отличающихся диэлектрическими постоянными (скоростями электромагнитных волн) [1]. Аналогично, фононным кристаллом, или акустической сверхрешеткой (СР), называют периодическую структуру, состоящую из чередующихся упругих материалов, отличающихся упругими модулями и скоростями звука (общая теория акустики слоистых сред изложена в [2], а одна из последних публикаций по акустическим СР с полезной библиографией – в [3]). Большое число публикаций посвящено изучению частотного спектра СР. Естественно, в общем случае этот спектр необычайно сложен и включает систему как большого числа зон собственных частот, так и щелей, отвечающих запрещенным частотам собственных колебаний. Для качественной характеристики таких спектров и иллюстрации основных их количественных особенностей полезно использовать простые модели, “ухватывающие” эти особенности. В электронной теории кристаллов примером подобной модели может служить известная 1D модель Кронига-Пенни [4]. В настоящей работе предлагается модель СР, позволяющая дать аналитическое описание высокочастотной части ее спектра и указать возможную реализацию интересной акустической СР.

Рассмотрим СР в виде чередующихся плоскопараллельных слоев двух материалов, отличающихся либо упругими, либо диэлектрическими (в зависимости от интересующей нас реализации) характеристиками. Обозначим толщины слоев d_1 и d_2 ; тогда

период СР равен $d = d_1 + d_2$. Упругое или электромагнитное поле внутри каждого по предположению изотропного материала описывается волновым уравнением

$$\frac{\partial^2 u^\alpha}{\partial t^2} - c_\alpha^2 \frac{\partial^2 u^\alpha}{\partial x^2} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \quad (1)$$

где c_α – скорость волны в слое типа α . В диэлектрике скорость света $c_\alpha = c/\sqrt{\varepsilon_\alpha}$ (c – скорость света в вакууме), а в упругой среде $c_\alpha = \sqrt{\mu_\alpha/\rho_\alpha}$; ε_α , μ_α и ρ_α ($\alpha = 1, 2$) – диэлектрические постоянные²⁾, упругие модули и плотности масс, соответственно.

Рассмотрим волну, распространяющуюся вдоль оси X , перпендикулярной слоям. Тогда волны двух возможных поляризаций не будут взаимодействовать, и мы можем изучать скалярные поля $u^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1, 2$).

Стандартные граничные условия сформулируем применительно к акустической задаче. На границах слоев будем считать непрерывными смещения $u^{(\alpha)}$ и напряжения $\sigma^\alpha = \mu_\alpha(\partial u^{(\alpha)})/\partial x$. Как известно, в силу периодичности структуры с периодом d собственные колебания можно характеризовать квазиволновым числом k , считая, что поле в элементарной ячейке с номером n имеет вид

$$u_n(x) = u_0(x - nd)e^{iknd}. \quad (2)$$

Дисперсионные уравнения в такой задаче были получены Рытовым как в случае электромагнитного поля [5], так и в акустике [6]:

²⁾Поскольку мы будем интересоваться, в основном, узкими полосами частот, то частотную дисперсию ε можно не учитывать, отсылая ε к соответствующим частотам.

¹⁾e-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua

$$\begin{aligned} \cos kd &= \cos k_1 d_1 \cos k_2 d_2 - \\ &- \frac{1}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_1 d_1 \sin k_2 d_2, \end{aligned} \quad (3)$$

где $k_1 = \omega/c_1$, $k_2 = \omega/c_2$ (ω – частота). Соотношение (3) определяет неявную зависимость частоты от квазиволнового числа. Оно позволяет легко описать спектр длинноволновых колебаний ($kd \ll 1$), для которых естественно получается звуковой спектр с усредненными модулями упругости $\langle \mu \rangle$ и плотностью $\langle \rho \rangle$. В работе [6] было показано, что

$$\langle \rho \rangle d = \rho_1 d_1 + \rho_2 d_2; \quad \frac{d}{\langle \mu \rangle} = \frac{d_1}{\mu_1} + \frac{d_2}{\mu_2}. \quad (4)$$

Любопытным является определение $\langle \mu \rangle$, в котором содержатся лишь соотношения d_α/μ_α . Исходя из последнего, можно рассмотреть предельный случай, который обычно не представляется интересным в случае динамики квантовой частицы. Рассмотрим предел $d_2 \rightarrow 0$ и $\mu_2 \rightarrow 0$ при $d_2/\mu_2 = P = \text{const}^3$). При этом $d_1 \rightarrow d$, $k_2 d_2 = \omega d_2/c_2 = \sqrt{\rho_2 d_2} \omega \sqrt{d_2/\mu_2} \rightarrow 0$, а потому (3) сводится к следующему уравнению:

$$\cos kd = \cos k_1 d - \frac{1}{2} P \left(\frac{\rho_2 \mu_1}{\rho_1 d} (k_1 d) \right) \sin k_1 d. \quad (5)$$

Полезно заметить, что закон дисперсии (5) соответствует упругой СР, состоящей из цепочки периодически повторяющихся элементов длины d с параметрами μ_1 и c_1 , на стыках которых выполняются следующие граничные условия: 1) непрерывность нормальных напряжений $[\sigma]^\pm = 0$, что эквивалентно $[\partial u/\partial x]^\pm = 0$; 2) наличие скачка смещений на мягкой прослойке, определяемого величиной напряжений на стыке:

$$[u]^\pm = M\sigma \equiv \mu_1 M \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad (6)$$

где $M = P(\rho_1/\rho_2)$. Набор подобных граничных условий при фиксированном M используется при описании капиллярных явлений в твердых телах [7] или плоских дефектов в кристаллах [8]. Если параметр M мал, то изучаемая система сводится к периодическому ряду упругих участков, слабо связанных между собой. Возможной реализацией подобной системы может служить, например, цепочка пьезоэлектрических участков, связанных между собой тонкими вакуумными прослойками. Тогда связь упругих колебаний в соседних участках осуществлялась бы электромагнитными колебаниями в вакуумных щелях.

³ Можно было бы рассмотреть более общий случай $d_2 \rightarrow 0$, $c_2 \rightarrow 0$ при $d_2/c_2 = \text{const}$, но при этом не возникает новых результатов.

Для иллюстрации распределения корней $\omega = \omega(k)$ уравнения (5) представим его в виде

$$\cos kd = \cos z - Qz \sin z, \quad (7)$$

где $z = k_1 d = \omega d/c_1$, $Q = P(\rho_2 \mu_1/2\rho_1 d)$, и рассмотрим графическое построение на рис.1. На рисунке изображен график правой стороны уравнения

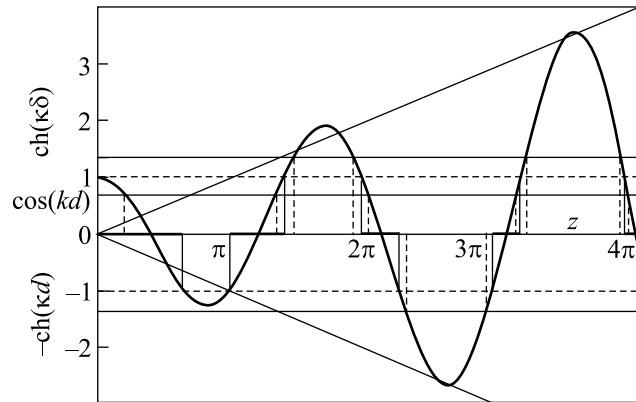


Рис.1. Графическое решение уравнения (7). Зоны собственных частот выделены жирными интервалами на оси z

(7); когда он пробегает значения между ± 1 , корни уравнения пробегает значения в интервалах, отмеченных на оси абсцисс.

Заметим, что с ростом z разрешенные частоты локализируются в сужающихся интервалах вблизи значений $k_1 d = \pm m\pi$, где m – большое целое число⁴). При условии $m^2 Q \gg 1$ законы дисперсии в этих интервалах имеют вид

$$\omega = m\omega_0 + \frac{2\Omega}{m} \begin{cases} \sin^2(kd/2), & m = 2p + 1; \\ \cos^2(kd/2), & m = 2p, \end{cases} \quad (8)$$

где $\omega_0 = \pi c/d$, $\Omega = c/\pi Qd$. Легко сообразить, что (8) – это спектр размерного квантования фононов в слое толщиной d , уровни которого за счет малой “прозрачности” границ между слоями расщепились в минизоны. В работе [9], где в очередной раз было выведено дисперсионное соотношение (3), была сделана попытка проанализировать характер зонного спектра СР. Однако в предельном случае, близком к рассмотренному в настоящей публикации, их анализ неудовлетворителен, так как приводит к заключению, что ширины минизон не изменяются с ростом частоты.

Рассмотрим соотношение (8) с другой точки зрения: (8) – это спектр псевдоквантовой частицы, урав-

⁴ На сужение зон с ростом частоты обращалось внимание и ранее; в частности, это отмечено в [3].

нение Шредингера которой в модели сильной связи имеет вид (для $m = 2p + 1$)

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = m\omega_0 \psi_n - \frac{\Omega}{m} (2\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1}) \quad (9)$$

либо (для $m = 2p$)

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = m\omega_0 \psi_n + \frac{\Omega}{2m} (2\psi_n + \psi_{n+1} + \psi_{n-1}). \quad (9a)$$

Фактически, (9), (9a) – это уравнения для огибающей колебаний СР, взятой в дискретных точках (на стыках). И, как обычно, порядок производной по времени в подобных уравнениях понижается. Эти уравнения позволяют аналитически описать динамику пакета волн, отвечающих допустимым высоким частотам. Явный вид законов дисперсии (6) и простые уравнения (7), (8) позволяют легко описать прохождение волновых пакетов через изучаемую систему и предложить явные формулы для сравнения с возможными экспериментальными результатами.

Уравнения (9), (9a) позволяют также без труда учесть нелинейные эффекты в оптических СР, связанные с зависимостью коэффициента преломления (то есть скорости света c и параметра ω_0), или характеристики стыков Q от напряженности поля ψ_n , подобно тому, как это сделано в [10] при описании оптических солитонов в таких СР.

Частоты запрещенных полос отвечают экспоненциально падающим (растущим) с номером n смещениям типа $u_n \sim e^{\mp \kappa n d}$ (когда $k = i\kappa$), либо $u_n \sim (-1)^n e^{\mp \kappa n d}$ (когда $k = i\kappa + \pi$). Для решений первого типа зависимость параметра κ от частоты находится из соотношения

$$\text{ch} \kappa d = \cos z - Qz \sin z > 1, \quad (10)$$

а для второго типа – из соотношения

$$-\text{ch} \kappa d = \cos z - Qz \sin z < -1. \quad (10a)$$

Ясно, что подобные состояния имеют физический смысл только на полуоси x при условии, что выбирается исчезающее на бесконечности решение, отражающее некоторые граничные условия в начале координат. Решения первого типа соответствуют частотам в интервалах $(2p - 1)\pi < z < 2p\pi$, а второго типа – в интервалах $2p\pi < z < (2p + 1)\pi$ (см. рис.1). Необходимость в использовании экспоненциально убывающих решений возникает при описании смещений вблизи локального дефекта СР.

2. Допустим, что на одном из стыков (пусть его номер $n = 0$) граничные условия отличаются от описанных выше, точнее, в этих условиях параметр M

иной: $M^* \neq M$. Частота локального колебания существенно определяется разностью $M^* - M = \xi M$. Расчеты показывают, что граничное условие на дефекте приводит к соотношению

$$\text{sh} \kappa d = \xi Q z \sin z, \quad (11)$$

которое вместе с (10) или (10a) (в зависимости от знака ξ) дает частоту локального колебания. Локальные частоты определяются точками пересечения графиков правых частей (10), (10a) с графиком функции $f(z) = \sqrt{1 + \text{sh}^2 z} = [1 + (\xi Q z)^2 \sin^2 z]^{1/2}$, определяемой условием (11). Поскольку $\kappa > 0$, то решениям соответствуют частоты (значения z), определяемые уравнением (см. рис.2)

$$\cos z - Qz \sin z = \text{sign}\{\xi Q z \sin z\} \sqrt{1 + (\xi Q z)^2 \sin^2 z}. \quad (12)$$

Частоты локальных колебаний, отвечающих разным знакам ξ , расположены в чередующихся интервалах между $z = 2p\pi$ и $z = (2p + 1)\pi$ ($p = 0, 1, 2, \dots$):

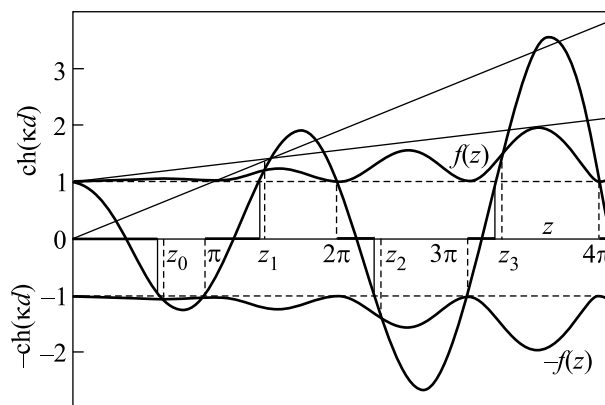


Рис.2. Графическое нахождение серии корней уравнения (12): корни z_0, z_2, \dots и z_1, z_3, \dots отвечают двум типам колебаний

$\omega = \omega_s, s = 1, 2, 3, \dots$. Соответствующие им решения можно представить в стандартной форме $u_n(x, t) = w_n(x) \exp\{-i\omega t\}$, где $w_n(x)$ – нечетная функция ($w_{-n}(-x) = w_n(x)$) следующего вида (смотри рис.3):

$$\begin{aligned} w_0^{(s)}(x) &= a_0 \cos(k_1^{(s)} x - \theta_s), \quad 0 < x < d; \\ w_n^{(s)}(x) &= a_1 \cos(k_1^{(s)} x - \theta_s) e^{-\kappa n d}, \quad nd < x < (n+1)d, \\ & n \geq 1; \end{aligned} \quad (13)$$

где θ_s – постоянная фаза, отвечающая собственной частоте ω_s . Функция $w_1(\xi)$ гармонически зависит от аргумента и легко может быть найдена.

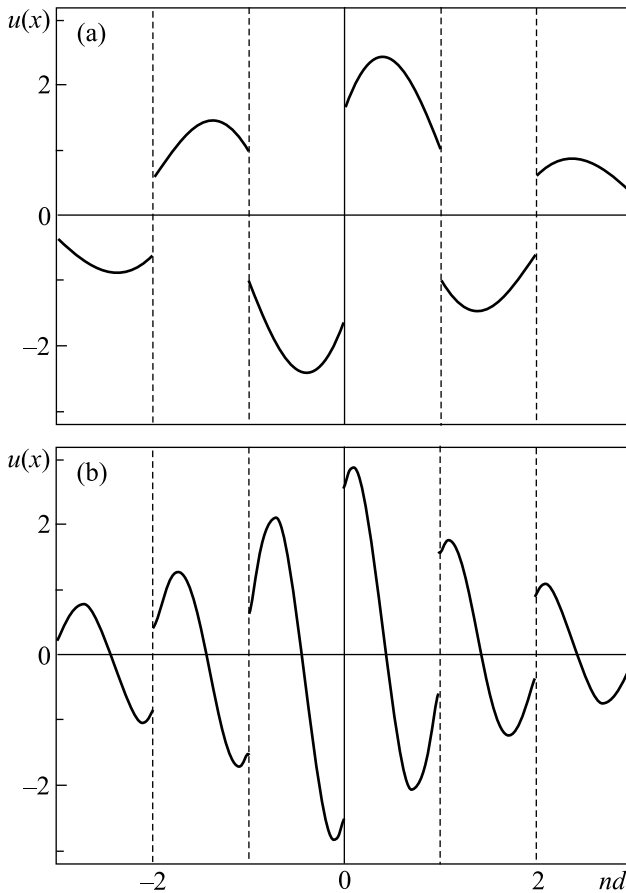


Рис.3. Координатная зависимость смещений СР вблизи дефекта для двух типов колебаний, согласованных с корнями на рис.2: а) отвечает корням z_0, z_2, \dots (антифазные колебания элементарных ячеек); б) отвечает корням z_1, z_3, \dots (синфазные колебания)

При этом локальные колебания, для которых $(2p-1)\pi < z < 2p\pi$ (точки z_2 и z_4 на рис.2), описываются монотонно убывающей с ростом номера элементарной ячейки функцией, а колебания с частотами $2p\pi < z < (2p+1)\pi$ (точки z_1 и z_3 на рис.2) описываются функцией, пропорциональной $(-1)^n e^{-\kappa nd}$. Существенно, что локальное колебание может возникнуть при любом знаке возмущения ξ .

Локальное колебание с четной собственной функцией при любом знаке ξ не может возникнуть на дефекте, локализованном на одной границе. Допустим, это стык с $n = 0$; на нем $[u]_{\pm}^+ = 0$ и $\sigma_0 = 0$, а потому возбуждение в виде стоячей волны с четной зависимостью от координаты x не чувствительно к величине параметра Q на стыке $n = 0$ и не отличается от колебания свободной границы СР, проходящей по этому стыку. Свободная граница СР соответствует разрезу по стыку $n = 0$, что эквивалентно условию

$\sigma_0 = 0$, получающемуся в нашей модели при $\xi = \infty$ ($M^* = \infty$). Как следует из (13), при этом возможны только однородные колебания ($\kappa = 0$) при частотах $\omega = (c/d)\pi m$, $m = 0, 1, 2, \dots$. Следовательно, локализованной волны у свободного конца СР не существует. Значит, невозможны колебания четного типа, если дефект сосредоточен на одном стыке. Подобные локализованные возбуждения возникают при изменении (возмущении) параметра M по крайней мере у двух соседних стыков. Как и в случае нечетного решения, области возникновения таких локальных колебаний с однофазным и противофазным смещением соседних элементарных ячеек чередуются в зависимости от знака ξ с периодом $\Delta z = \pi$.

3. Интересно обсудить возможность возникновения и экспериментального наблюдения блоховских осцилляций волнового пакета в рассматриваемой СР. Блоховские осцилляции оптического импульса в другой ситуации описаны и экспериментально обнаружены [11, 12]. Поэтому такое обсуждение не лишено основания.

Допустим, что физические характеристики составляющих СР элементов слабо зависят от номера n , например, $c = c_0 + \Delta c = c_0 \{1 + \delta c/c_0\}$, где Δc – малое изменение скорости волны при переходе от одного элемента к следующему (в экспериментах [10, 11] подобная неоднородность создавалась градиентом температуры, от которой зависит коэффициент преломления диэлектрика). Тогда параметр ω_0 в выражении (8) и уравнениях (9), (9а) следует заменить:

$$m\omega_0 = \Omega_n \equiv \Omega_0 + \eta nd, \quad (14)$$

где η – малый градиент основной частоты. В результате в случае $m = 2p + 1$ (случай $m = 2p$ анализируется аналогично) возникает уравнение Шредингера в однородном поле:

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \Omega_0 \psi_n + \eta nd \psi_n + \frac{\Omega}{2m} (2\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1}), \quad (15)$$

а выражение (8) превращается в функцию Гамильтона рассматриваемой частицы как функцию n и k . Уравнение (15), как и (9), фактически определяет огибающую колебаний на основной частоте.

Введем оператор номера узла, который в однозонной модели⁵⁾ имеет вид $n = i/d \cdot \partial/\partial k$. Тогда уравне-

⁵⁾ Каждому m соответствует своя одна полоса частот. Вопрос о роли межзонных переходов в теории блоховских осцилляций обсуждался в литературе [13]. В нашей модели типа “сильной связи” участвует только одна частота. Возникновение межзонных взаимодействий в похожей модели нелинейной оптической СР учитывается при анализе устойчивости целевых самолокализованных колебаний (солитонов) [10].

ние (15) в k -представлении примет вид, согласованный с упомянутым гамильтонианом:

$$i \frac{\partial \psi(q)}{\partial t} = \Omega_0 \psi(q) + i\eta \frac{\partial \psi(q)}{\partial q} + \frac{2\Omega}{m} \sin^2(q/2) \cdot \psi(q), \quad (16)$$

где обозначено $q = kd$. Частица, подчиняющаяся уравнениям (15) или (16), испытывает так называемую динамическую локализацию [14], проявляющуюся в своеобразных осцилляциях с частотой, которую можно определить из следующих соображений. В уравнении (16) для стационарных состояний время и волновое число входят в виде комбинации $q + \eta t$. Так как в нашем случае стационарная собственная функция есть периодическая функция q с периодом 2π , то ей отвечает эквидистантный спектр частот с характерной частотой

$$\omega_B = \eta = m\Delta\omega_0 = m\omega_0 \frac{\Delta c}{c} = m(\pi c/d) \frac{\Delta c}{c}. \quad (17)$$

Это и есть частота блоховских осцилляций волнового пакета в СР.

Анализ эволюции волнового пакета, испытывающего блоховские осцилляции, изложен, например, в обзорах [15, 16]. Характер блоховских осцилляций существенно зависит от ширины пакета. Пакет с очень узким k -спектром Фурье (с хорошо определенным k) ведет себя как частица, функция Гамильтона которой совпадает с (8) при наличии (14). Центр тяжести пакета совершает колебания с частотой ω_B и амплитудой $A = \Omega d/m\eta$. Если начальный пакет ($t = 0$) очень узкий в x -пространстве (например, локализован на одном узле $n = 0$), то его динамика иная: с ростом времени возбуждение распространяется в обе стороны от $n = 0$, однако, достигнув удаления A , останавливается и “откатывается” обратно, собираясь в первоначальный импульс в момент времени $t = 2\pi/\omega_B$, то есть через период блоховских осцилляций.

Представляется, что оценка блоховской частоты $\omega_B \sim m(c/d)(\Delta c/c)$ и амплитуды $A \sim d(m^2 Q \Delta c/c)^{-1}$ вполне допускает возможность их наблюдения в акустических СР.

Автор благодарен Владимиру Альшицу, Андреасу Майеру и Элю Ганопольскому за полезные обсуждения, Марине Мамалуй и Владимиру Гришаеву – за помощь в вычислениях и подготовку рисунков, Институту Макса Планка Физики Сложных Систем в г. Дрезден – за гостеприимство и прекрасные условия работы. Работа частично поддержана грантом INTAS-1999 # 167.

1. J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Win, *Photonic crystals*, Princeton UP, 1995.
2. Л. М. Бреховских, *Волны в слоистых средах*, М.: Наука, 1973.
3. Pi-Gang Luan and Zhen Ye, *Phys. Rev.* **E63**, 66611 (2001).
4. R. de L. Kronig and W. G. Penni, *Proc. Roy. Soc.* **A130**, 499 (1931).
5. С. М. Рытов, *ЖЭТФ* **29**, 605 (1955).
6. С. М. Рытов, *Акуст. ж.* **2**, 71 (1956).
7. А. Ф. Андреев, Ю. А. Косевич, *ЖЭТФ* **81**, 1435 (1981).
8. L. J. Pyrak-Nolte, J. Xu, and G. M. Haley, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3650 (1992); А. М. Косевич, А. В. Тутов, *ФНТ* **19**, 1273 (1993) [*Low Temp. Phys.* **19**, 905 (1993)]; А. М. Косевич and А. V. Tutov, *Phys. Lett.* **A213**, 265 (1996).
9. A. Figotin and V. Gorenstveig, *Phys. Rev.* **B52**, 180 (1998).
10. A. A. Sukhorukov and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 083901 (2001).
11. N. Petsch, P. Dannberg, W. Elflein et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4752 (1999).
12. R. Morandotti, U. Perschel, J. S. Aitchison et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4756 (1999).
13. M. Gluck, A. R. Kolovski, and H. J. Korsch, *Phys. Lett.* **A249**, 483 (1998); *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1534 (1999).
14. D. H. Dunlap and V. M. Kenkre, *Phys. Lett.* **A127**, 438 (1988).
15. А. М. Косевич, *ФНТ* **27**, 699 (2001) [*Low Temp. Phys.* **27**, 513 (2001)].
16. M. Gluck, A. R. Kolovski, and H. J. Korsch, *Phys. Lett.* **A249**, 483 (1998); *Phys. Rep.*, in press (2001).