

УДК 535.4+681.7

Ю. А. Паладян, В. В. Румянцев, С. А. Федоров, К. В. Гуменник
Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина»
283114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В НЕИДЕАЛЬНОМ 1D ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ

Yu. A. Paladyan, V. V. Rumyantsev, S. A. Fedorov, K. V. Gumennyk
Public institution «A. A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering»
283114, Donetsk, R. Luxembourg str., 72

NUMEROUS MODELING OF THE PROPAGATION FEATURES OF AN ELECTROMAGNETIC WAVE IN A NON IDEAL 1D PHOTON CRYSTAL

Ю. А. Паладян, В. В. Румянцев, С. А. Федоров, К. В. Гуменник
Державна установа «Донецький фізико-технічний інститут ім. О. О. Галкіна»
283114, м. Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПОШИРЕННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОЇ ХВИЛІ В НЕІДЕАЛЬНОМУ 1D ФОТОННОМУ КРИСТАЛІ

В работе выполнено математическое моделирование особенностей распространения электромагнитного возбуждения в неидеальном 1D фотонном кристалле, слои которого варьируются как по составу, так и по толщине. Исследуется зависимость показателя преломления и ширины нижней энергетической запрещенной зоны данной сверхрешетки от концентрации структурных дефектов.

Ключевые слова: энергетический спектр, неидеальный 1D фотонный кристалл, приближение виртуального кристалла.

Mathematical modeling of the propagation features of electromagnetic excitation in a non-ideal 1D photonic crystal, the layers of which vary both in composition and thickness, considered is performed in the work. The features of the dependence of the refractive index and the width of the lowest energy band gap of this superlattice on the concentration of structural defects is investigated.

Key words: energy spectrum, imperfect 1D photonic crystal, virtual crystal approximation.

У роботі виконано математичне моделювання особливостей поширення електромагнітного збудження в неідеальному 1D фотонному кристалі, шари якого варіюються як за складом, так і за товщиною. Досліджується залежність показника заломлення і ширини найнижчої енергетичної забороненої зони даної надрешітки від концентрації структурних дефектів.

Ключові слова: енергетичний спектр, неідеальний 1D фотонний кристал, наближення віртуального кристала.

Введение

В связи с появлением оптоэлектронных устройств, использующих различные приложения современной фотоники (от концентрации света в нанопотонных волноводах до квантовой обработки информации), в настоящее время особую актуальность приобретают исследования различных фотонных систем. В частности, достаточно интенсивно изучается распространение электромагнитных волн в тонких пленках и слоистых кристаллических средах (например, в сверхрешетках на основе кремния и жидкого кристалла [1-3]). Интерес к изучению этих объектов обусловлен, с одной стороны, потребностью твердотельной электроники в различных слоистых структурах с заданными свойствами, а с другой – достижениями технологий, позволяющих выращивать методом эпитаксии из молекулярных пучков такие пленки и периодические структуры с контролируемыми характеристиками.

Общая теория оптических волн в анизотропных кристаллах, в том числе составленных из макроскопических слоев, рассмотрена в [4]. В [3] выполнены расчеты запрещенных фотонных зон кристалла, составленного из чередующихся слоев кремния и жидкого кристалла. Логика дальнейшего развития теории слоистых структур требует рассмотрения более сложных систем – сверхрешеток с произвольным числом инородных (примесных) слоев. При этом значительный интерес представляет исследование зависимости энергетического спектра неидеальных сверхрешеток от концентрации соответствующих дефектов, позволяющее расширить возможности моделирования свойств указанных систем, создавать слоистые материалы с заданными характеристиками. Распространенным методом расчета квазичастичных состояний в неупорядоченных средах является приближение виртуального кристалла (ПВК) [5], [6], которое заключается в замене конфигурационно зависимых параметров гамильтониана задачи на конфигурационно усредненные их значения. Приближение ПВК позволяет выявлять трансформацию энергетического спектра и соответствующих оптических характеристик, обусловленную изменением концентрации дефектов в неидеальных структурах.

В данной работе рассмотрена модель одномерной (1D) сверхрешетки (много-слойника), как макроскопически неоднородной системы с хаотически внедренными инородными (по отношению к идеальной сверхрешетке) слоями с переменным составом и толщиной. Полученный в рамках ПВК энергетический спектр неидеальной сверхрешетки с произвольным числом слоев в элементарной ячейке конкретизирован для случая кремний-жидкокристаллической системы (однородные слои Si и анизотропные слои нематического жидкого кристалла) – 1D структура с двумя элементами-слоями в элементарной ячейке. Рассмотрены особенности зависимости показателя преломления и ширины энергетической щели нижней запрещенной зоны исследуемой сверхрешетки от концентрации структурных дефектов.

Теоретическая модель

Оптические свойства среды определяют соответствующие материальные тензоры диэлектрической $\hat{\epsilon}(\vec{r})$ и магнитной $\hat{\mu}(\vec{r})$ проницаемости. При этом полагаем, что ось z направлена вдоль нормали к слоям. Таким образом, в случае периодической среды тензоры $\hat{\epsilon}(\vec{r})$ и $\hat{\mu}(\vec{r})$ удовлетворяют соотношениям:

$$\hat{\epsilon}(x, y, z) = \hat{\epsilon}(x, y, z + d), \quad \hat{\mu}(x, y, z) = \hat{\mu}(x, y, z + d). \quad (1)$$

где $d = \sum_{\alpha=1}^{\sigma} a_{\alpha}$ – период сверхрешетки, a_{α} – толщина α -го слоя в элементарной ячейке; σ – число слоев в элементарной ячейке. В координатном представлении материальные тензоры $\hat{\epsilon}$ и $\hat{\mu}$ кристаллической 1D сверхрешетки с произвольным числом σ слоев имеют следующий вид:

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

В (2) $\theta(z)$ – функция Хевисайда, $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ – номер ячейки кристалла.

Рассмотрим модель неидеальной 1D сверхрешетки как макроскопически неоднородной системы с вариацией слоев как по составу, так и по толщине. Исследование трансформации энергетического спектра и соответствующих оптических характеристик, обусловленной изменением концентрации дефектов в данной неидеальной структуре проведем в приближении ПВК [5], [6]. Конфигурационно зависимыми тензорами в этом случае являются тензоры $\hat{\epsilon}_{n\alpha}$, $\hat{\mu}_{n\alpha}$ и параметры решетки $a_{n\alpha}$ (толщины слоев). В модели указанной неидеальной сверхрешетки данные параметры представим, используя случайные величины $\eta_{C(T)n\alpha}^v$ ($\eta_{C(T)n\alpha}^v = 1$, если в узле $(n\alpha)$ кристаллической цепочки находится слой $v(\alpha)$ -го сорта (толщины), $\eta_{C(T)n\alpha}^v = 0$ – в ином случае):

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} = \sum_{v(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{\alpha}^{v(\alpha)} \\ \hat{\mu}_{\alpha}^{v(\alpha)} \end{pmatrix} \eta_{C,n\alpha}^{v(\alpha)} \quad \text{и} \quad a_{n\alpha} = \sum_{v(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{v(\alpha)} \eta_{T,n\alpha}^{v(\alpha)}, \quad (3)$$

где $s(\alpha)$ – число сортов слоев в α -й подрешетке, отличающихся друг от друга по составу; $r(\alpha)$ – число слоев в α -й подрешетке, отличающихся друг от друга по толщине. В рамках ПВК [5], [6] расчет энергетического спектра неидеальной сверхрешетки по аналогии с квазичастичным подходом осуществляется путем следующей замены: $\hat{\epsilon} \rightarrow \langle \hat{\epsilon} \rangle$, $\hat{\mu} \rightarrow \langle \hat{\mu} \rangle$, $a_{n\alpha} \rightarrow \langle a_{n\alpha} \rangle$ (угловые скобки обозначают процедуру конфигурационного усреднения). Таким образом, из (3), с учетом [7-10] следует, что:

$$\begin{pmatrix} \langle \hat{\epsilon}_{n\alpha} \rangle \\ \langle \hat{\mu}_{n\alpha} \rangle \end{pmatrix} = \sum_{v(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{\alpha}^{v(\alpha)} \\ \hat{\mu}_{\alpha}^{v(\alpha)} \end{pmatrix} C_{C,\alpha}^{v(\alpha)}, \quad \langle a_{n\alpha} \rangle = \sum_{v(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{v(\alpha)} C_{T\alpha}^{v(\alpha)} \quad (4)$$

При этом усредненная величина периода решетки имеет вид:

$$\langle d_n \rangle = \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \sum_{v(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{v(\alpha)} C_{T\alpha}^{v(\alpha)} \equiv d \{ C_{T\alpha}^{v(\alpha)} \},$$

где $C_{C,\alpha}^{v(\alpha)}$, $C_{T\alpha}^{v(\alpha)}$ – концентрации примесных слоев $v(\alpha)$ -го сорта в α -й подрешетке при варьировании слоев соответственно по составу (индекс «С») и по толщине (индекс «Т»), $\sum_{v(\alpha)} C_{C(T)\alpha}^{v(\alpha)} = 1$.

Конфигурационное усреднение «восстанавливает» трансляционную симметрию в кристаллической системе, поэтому применительно к исследуемому случаю неидеальной сверхрешетки приобретенная трансляционная инвариантность 1D системы позволяет представить материальные тензоры в виде разложения в ряд Фурье

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

Из выражения (2) следует, что Фурье-амплитуды $\hat{\varepsilon}_l$, $\hat{\mu}_l$ и усредненные диэлектрическая $\langle \hat{\varepsilon}_{n\alpha} \rangle$ и магнитная $\langle \hat{\mu}_{n\alpha} \rangle$ проницаемости слоев (4) связаны соотношением:

$$\begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_l \\ \hat{\mu}_l \end{pmatrix} = -\frac{i}{2\pi l} \sum_{\alpha} \sum_{v(\alpha)} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\alpha}^{v(\alpha)} \\ \mu_{\alpha}^{v(\alpha)} \end{pmatrix} C_{C,\alpha}^{v(\alpha)} \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(i \frac{2\pi}{d\{C_{T\alpha}^{v(\alpha)}\}} l \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \{C_{T\alpha}^{v(\alpha)}\}\right) - \\ - \exp\left[i \frac{2\pi}{d\{C_{T\alpha}^{v(\alpha)}\}} l \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_j \{C_{T\alpha}^{v(\alpha)}\} - a_{\alpha} \{C_{T\alpha}^{v(\alpha)}\}\right)\right] \end{array} \right\} \quad (6)$$

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

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

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

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

Здесь $\vec{\rho} = (x, y)$, $\vec{\chi}$ – произвольный планарный (в плоскости XOY) волновой вектор, $\vec{K} = (0, 0, K)$ – блоховский вектор.

Причем:

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

Подстановка соотношения (8), с учетом (9), в систему уравнений (7) приводит к соотношению для Фурье-амплитуд $\vec{f}_{K,p}^{(E,H)}$ электромагнитного поля:

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

которое определяет нормальные моды электромагнитных волн, распространяющихся в соответствующей «периодической» среде.

Результаты и обсуждение

В дальнейшем для простоты и конкретизации ограничимся рассмотрением света вдоль нормали к слоям (вдоль оси z , $\vec{\chi} = 0$) в двухподрешеточной немагнитной кремний-жидкокристаллической (Si-ЖК) сверхрешетке, ($\hat{\mu} = \hat{I}$ – единичная матрица). Причем ЖК – слой жидкого кристалла нематической фазы – оптически одноосные: $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{\perp}(\delta_{ix}\delta_{jx} + \delta_{iy}\delta_{jy}) + \varepsilon_{\parallel}\delta_{iz}\delta_{jz}$. Таким образом, очевидно, что для рассматриваемой геометрии процесса ($\vec{K} \parallel z$) компоненты ε_{\parallel} тензора $\hat{\varepsilon}$ в конечных формулах не фигурируют. Кроме того, вслед за [4] полагаем, что K близки к значениям, определяемым условием Брэгга:

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

В этом случае основной вклад в системе уравнений (10) дают амплитуды $\vec{f}_{K,p}^{(E,H)}$ при $p = 0, -1$ (что соответствует резонансу между этими составляющими плоских волн). Для $\vec{f}^{(E)} = (f_x^{(E)}, f_y^{(E)}, 0)$ и $\vec{f}^{(H)} = (f_x^{(H)}, f_y^{(H)}, 0)$ уравнения (10) принимают вид:

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

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

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

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

В дальнейшем полагаем, что Si слои исследуемой сверхрешетки случайным образом заменяются на ЖК слои, а слои второй (ЖК) подрешетки варьируются по толщине. Обозначим концентрацию и диэлектрическую проницаемость основного вещества (матрицы) в первой и второй подрешетках соответственно, как $C_1^{(1)}, \varepsilon_1^{(1)} \equiv \varepsilon_1$ и $C_2^{(1)}, \varepsilon_2^{(1)} \equiv \varepsilon_{\perp}$, а примеси – $C_1^{(2)} \equiv C_C$, $\varepsilon_1^{(2)} = \varepsilon_2^{(1)} \equiv \varepsilon_{\perp}$ и $C_2^{(2)} \equiv C_T$, $\varepsilon_2^{(2)} = \varepsilon_2^{(1)} \equiv \varepsilon_{\perp}$. Для кремния $\varepsilon_1 = 11,7$, а в качестве нематического ЖК возьмем соединение, модельное с $\varepsilon_{\perp} = 5,5$ [7]). Причем $C_1^{(1)} + C_C = 1$, $C_1^{(1)} = 1 - C_C$, $C_2^{(1)} + C_T = 1$, $C_2^{(1)} = 1 - C_T$

Несложные преобразования (с учетом $|\varepsilon^{(-1)}| = |\varepsilon^{(1)}|$) позволяют получить следующие соотношения для показателя преломления $n \equiv cK / \omega$ исследуемой системы:

$$n_{\pm}^2(C_C, C_T) = \varepsilon^{(0)}(C_C, C_T) \pm |\varepsilon^{(1)}(C_C, C_T)| = \varepsilon^{(0)}(C_C, C_T) \left[1 \pm \frac{\Delta\omega_1(C_C, C_T)}{\omega} \right] \quad (14)$$

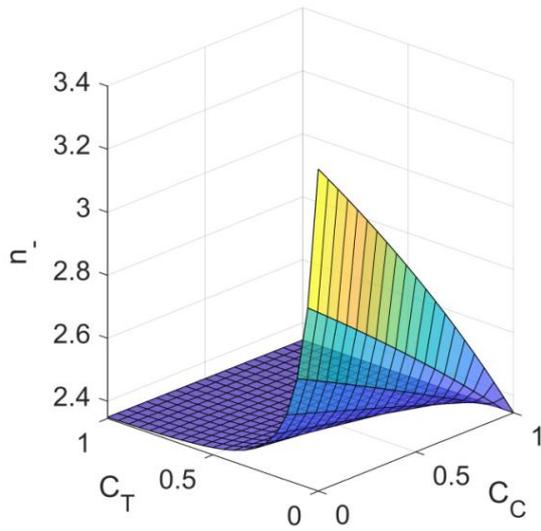
Здесь $\Delta\omega_1 = |\omega_+ - \omega_-|$ – ширина нижней запрещенной энергетической зоны. Из формулы (14) следует, что величина $\Delta\omega_1 / \omega = |\varepsilon^{(1)}(C_C, C_T)| / \varepsilon^{(0)}(C_C, C_T)$ определяется соответствующими коэффициентами Фурье-разложения (9), в данном случае $\varepsilon^{(0)}$, $|\varepsilon^{(1)}|$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(0)} &= \left\{ [(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_1)C_C + \varepsilon_1] a_1 + \varepsilon_{\perp} [a_2^{(1)} + (a_2^{(2)} - a_2^{(1)})C_T] \right\} / d(C_T), \\ |\varepsilon^{(1)}| &= \frac{1}{\pi} |\varepsilon_1 + (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_1)C_C - \varepsilon_{\perp}| \sin \frac{\pi a_1}{d(C_T)}. \end{aligned} \quad (15)$$

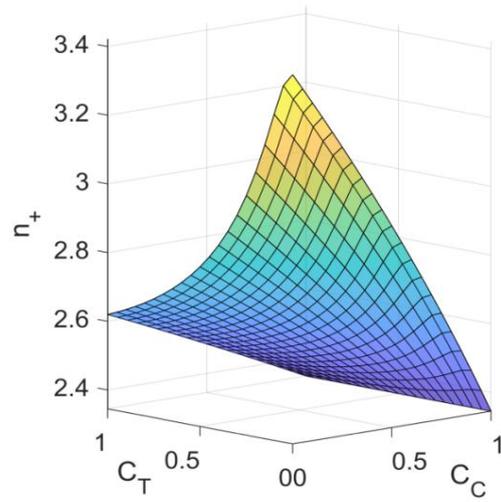
Зависимость показателя преломления n_{\pm} от концентрации C_C, C_T примесных слоев в исследуемой 1D сверхрешетке приведена на рис. 1. Отметим, что форма поверхностей, иллюстрирующих концентрационную зависимость $n_{\pm}(C_C, C_T)$, существенно зависит от соотношения величин относительной ширины основного и примесного ЖК слоев. В частности, если толщина $a_2^{(1)} / a_1$ основного слоя больше аналогичной величины $a_2^{(2)} / a_1$ примесного, то вид поверхностей – более пологий, отражающий монотонный характер зависимости $n_{\pm}(C_C, C_T)$. В обратном случае соответствующая зависимость – немонотонна.

Период $d(C_T)$ виртуальной решетки, зависящий от концентрации примесных слоев, имеет вид: $d(C_T) = a_1 + a_2^{(1)} + (a_2^{(2)} - a_2^{(1)})C_T$.

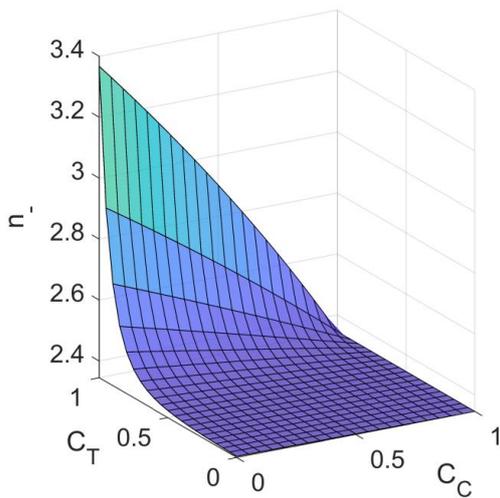
Относительная ширина $\Delta\omega_1 / \omega$ нижней запрещенной энергетической зоны исследуемого неидеального многослойника представлена на рис. 2 в зависимости от концентрации C_C, C_T структурных дефектов. Форма данной зависимости, как и в предыдущем случае, определяется соотношением величин $a_2^{(1)} / a_1$ и $a_2^{(2)} / a_1$. Но для $\frac{\Delta\omega_1}{\omega}(C_C, C_T)$ важен фактор различия этих величин – чем больше разница в толщине основного и примесного слоев ЖК подрешетки, тем более немонотонными становятся поверхности, вплоть до присутствия пиков максимума при соответствующих значениях C_T (для различных концентрации C_C примесных слоев в Si-подрешетке). Причем при большой разнице величин $a_2^{(1)} / a_1$ и $a_2^{(2)} / a_1$ в ЖК подрешетке пик максимума тем острее, чем меньше C_C в Si подрешетке.



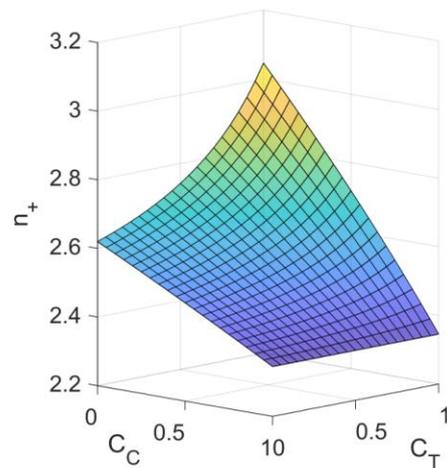
а)



б)



в)



г)

Рисунок 1 – Зависимость показателя преломления $n_{\pm}(C_C, C_T)$ от концентрации примесных слоев в исследуемой 1D сверхрешетке: а) $a_2^{(1)}/a_1 = 0.03$, $a_2^{(2)}/a_1 = 7$; б) $a_2^{(1)}/a_1 = 0.02$; $a_2^{(2)}/a_1 = 8$; в) $a_2^{(1)}/a_1 = 7$, $a_2^{(2)}/a_1 = 0.03$; г) $a_2^{(1)}/a_1 = 8$; $a_2^{(2)}/a_1 = 2$

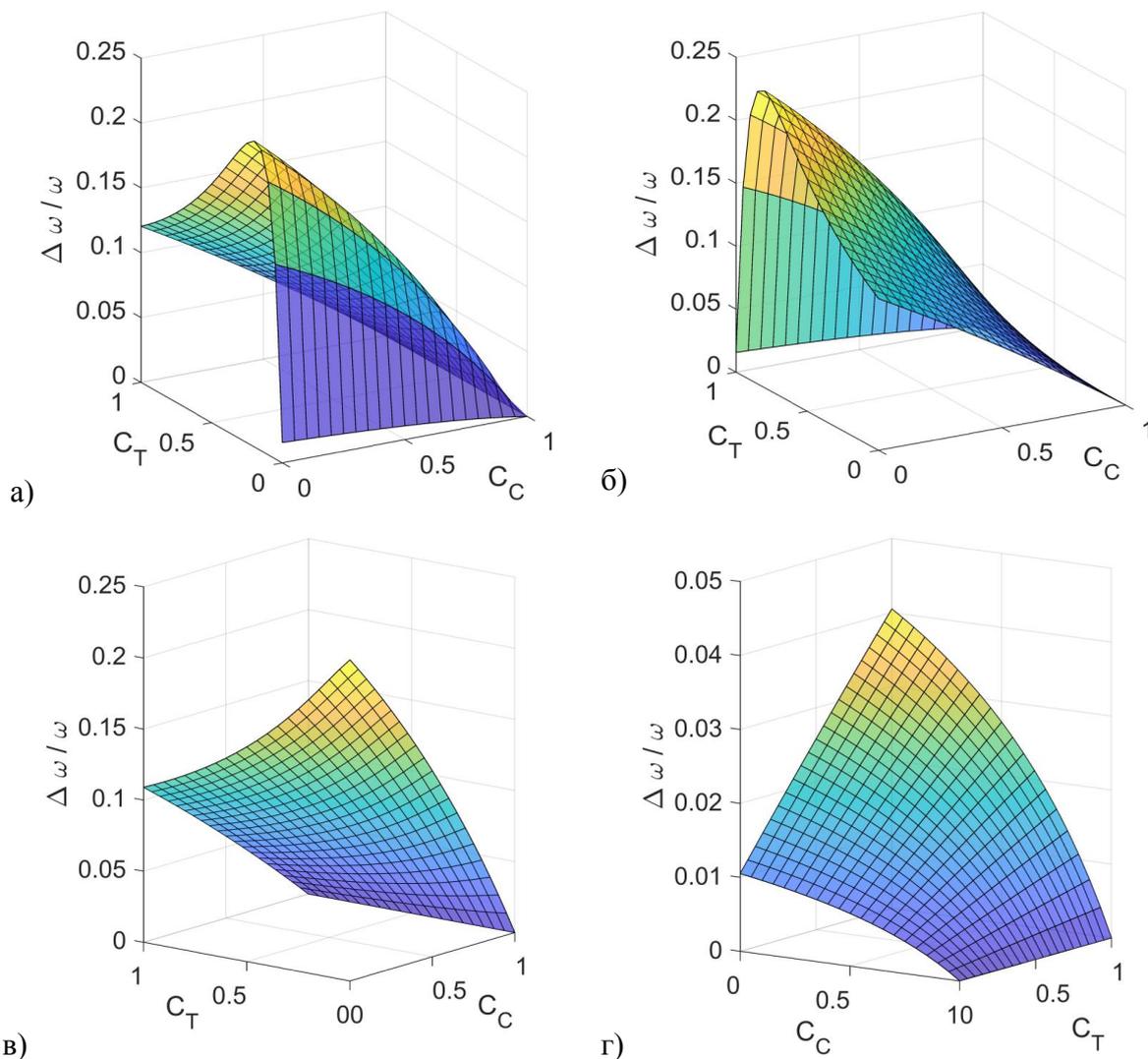


Рисунок 2 – Зависимость относительной ширины $\Delta\omega_1/\omega$ нижней запрещенной энергетической зоны исследуемой неидеальной сверхрешетки многослойника от концентрации C_C, C_T структурных дефектов: а) $a_2^{(1)}/a_1 = 0.03, a_2^{(2)}/a_1 = 7$; б) $a_2^{(1)}/a_1 = 7, a_2^{(2)}/a_1 = 0.03$; в) $a_2^{(1)}/a_1 = 2, a_2^{(2)}/a_1 = 8$; г) $a_2^{(1)}/a_1 = 0.02; a_2^{(2)}/a_1 = 0.08$

Заключение

Внедрением в изучаемую сверхрешетку определенных структурных дефектов можно добиться необходимого изменения ее энергетического спектра и, как следствие перенормировки энергетической структуры, изменения оптических свойств кристаллической сверхрешетки. Результат данного исследования указывает на возможность существенных изменений ширины запрещенной энергетической зоны и показателя преломления кристаллической 1D сверхрешетки, обусловленных перенормировкой ее энергетического спектра в результате варьирования слоев исследуемого многослойника как по составу, так и по толщине. Возможность контролируемого внедрения структурных дефектов (примесных слоев 1D сверхрешетки) с известными размерными параметрами значительно расширяет рамки моделирования подобных композитных материалов, обусловленного необходимостью их практического использования.

Список литературы

1. Appl. Phys. [Текст] / Lett Ha Young-Ki, Yang Y.-C, Kim J.-E., Park H.Y., Kee C.-S, Lim H., Lee J.-C.– 2000. – V. 79, № 1. – P. 15.
2. Tolmachev V. A. Design criteria and optical characteristics of one-dimensional photonic crystals based on periodically grooved silicon [Текст] / V. A. Tolmachev, T. S. Perova, K. Berwick // Appl. Opt. – 2003. – V. 42, № 28. – P. 5679–5683.
3. Толмачев В. А. Перестройка запрещенных фотонных зон и спектров отражения одномерного фотонного кристалла на основе кремния и жидкого кристалла [Текст] / В. А. Толмачев // Оптика и спектроскопия. – 2005. – Т. 99, № 5. – С. 797–801.
4. Ярив А. Оптические волны в кристаллах [Текст] / А. Ярив, П. Юх. – М. : Мир, 1987. – 616 с.
5. Займан Дж. Модели беспорядка [Текст] / Займан Дж. – М. : Мир, 1982. – 592 с.
6. Лось В. Ф. Метод проекционного оператора в теории неупорядоченных систем [Текст] / В. Ф. Лось // ТМФ. – 1987. – Т. 73, № 1. – С. 85–102.
7. Пашкевич Ю. Г. Поляритонные возбуждения в неидеальных топологически упорядоченных жидкокристаллических сверхрешетках [Текст] / Ю. Г. Пашкевич, В. В. Румянцев, С. А. Федоров // Жидкие кристаллы. – 2006. – Вып. 1-2 (15-16). – С. 7–14.
8. Румянцев В. В. Трансформация поляритонного спектра неидеальных топологически упорядоченных сверхрешеток [Текст] / В. В. Румянцев, С. А. Федоров // Оптика и спектроскопия. – 2007. – Т. 102, № 1. – С. 75–79.
9. Romyantsev V. V. Light propagation in an imperfect 1D photonic crystal [Текст] / V. V. Romyantsev, S. A. Fedorov, Yu. A. Paladyan // Phys Sci & Biophys J. – 2021. – № 5(2). – P. 000189.
10. Покатилов Е. П. Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных системах и сверхрешетках [Текст] / Е. П. Покатилов, В. М. Фомин, С. И. Берил. – Кишинев : Штиинца, 1990. – 278 с.

References

1. Ha Young-Ki, Yang Y.-C, Kim J.-E., Park H.Y., Kee C.-S, Lim H., Lee J.-C. Appl. Phys. Lett, 2000, V. 79, N 1, P.15.
2. Tolmachev V.A., Perova T.S., Berwick K. Design criteria and optical characteristics of one-dimensional photonic crystals based on periodically grooved silicon. *Appl. Opt.*, 2003, V. 42, N 28, P. 5679-5683.
3. Tolmachev V.A. Perestroyka zapreshennykh fotonnykh zon i spektrov otrazheniya odnomernogo fotonnogo kristalla na osnove kremniya i zhidkogo kristalla [Rearrangement of forbidden photonic zones and reflection spectra of a one-dimensional photonic crystal based on silicon and liquid crystal]. *Optika i spektroskopiya* [Optics and spectroscopy], 2005, V.99, № 5, P. 797-801.
4. Yariv A., Yeh P. *Opticheskiye volny v kristallakh* [Optical Waves in Crystals: Propagation and Control of Laser Radiation], Wiley, New York, 1984. 616 p.
5. Ziman J.M. *Modeli besporyadka* [Models of disorder: The theoretical physics of homogeneously disordered systems], Cambridge University Press, Cambridge, 1979, 592 p.
6. Los' V.F. Metod proyeksionnogo operatora v teorii neuporyadochennykh system [The projection operator method in the theory of disordered systems]. *TMF* [Theor. Math. Phys.], 1987, V. 73, N 1, P. 85-102.
7. Pashkevich Yu.G., Romyantsev V.V., Fedorov S.A. Polyaritonnyye vozvuzhdeniya v neideal'nykh topologicheskii uporyadochennykh zhidkokristallicheskih sverkhreshetkakh [Polariton excitation in imperfect topological ordered superlattice of liquid crystal]. *Zhidkiye kristally* [Liquid crystals], 2006, V. 1-2 (15-16), P. 7-14.
8. Romyantsev V.V., Fedorov S.A. Transformatsiya polyaritonnogo spektra neideal'nykh topologicheskii uporyadochennykh sverkhreshetok [Transformation of the polariton spectrum of nonideal topologically ordered superlattices]. *Optika i spektroskopiya* [Optics and Spectroscopy], 2007, T. 102, № 1, P. 75-79.
9. Romyantsev V.V., Fedorov S.A., Paladyan Yu.A. Light propagation in an imperfect 1D photonic crystal. *Phys Sci & Biophys J*, 2021, 5(2), P. 000189.
10. Pokatilov E.P., Fomin V.M., Beril S.I. *Kolebatel'nyye vozvuzhdeniya, polyarony i eksitony v mnogoslounnykh sistemakh i sverkhreshetkakh* [Vibrational excitations, polarons and excitons in multilayer systems and superlattices], Chisinau, Stiinza, 1990, 278 p.

RESUME

Yu. A. Paladyan, V. V. Rummyantsev, S. A. Fedorov, K. V. Gumennyk
Numerical Simulation of the Propagation Features of an Electromagnetic Wave in a Nonideal 1D Photonic Crystal

The results obtained earlier by the authors of the study of the features of electromagnetic wave propagation in an imperfect 1D superlattice have been transferred to similar calculations of the width of the forbidden energy zone and the refractive index of the crystalline 1D photonic crystal, due to the renormalization of its energy spectrum as a result of varying the layers of the studied multilayer both in composition and thickness.

Materials and methods: Numerical modeling.

Calculations of the dependence of the width of the forbidden energy zone and the refractive index of a non-ideal crystalline 1D superlattice on the defect concentration of the investigated silicon-LC multi-layer structure are carried out.

Mathematical modeling of the dependence of the width of the forbidden energy zone and the refractive index of a non-ideal crystalline 1D superlattice on the defect concentration of the studied silicon-LC structure with variation of the layers of the model system both in composition and thickness is carried out within the framework of the virtual crystal approximation.

The obtained results open up the possibility of controlled introduction of structural defects (impurity layers of a 1D superlattice) with known dimensional parameters and significantly expand the scope of modeling of such composite materials due to the need for their practical use.

РЕЗЮМЕ

Ю. А. Паладян, В. В. Румянцев, С. А. Федоров, К. В. Гуменник
Численное моделирование особенностей распространения электромагнитной волны в неидеальном 1D фотонном кристалле

Полученные авторами ранее результаты исследования особенностей распространения электромагнитной волны в несовершенной 1D сверхрешетке перенесены на аналогичные расчеты ширины запрещенной энергетической зоны и показателя преломления кристаллической 1D фотонного кристалла, обусловленных перенормировкой ее энергетического спектра в результате варьирования слоев исследуемого многослойника как по составу, так и по толщине

Материалы и методы: Численное моделирование.

Проведены расчеты зависимости ширины запрещенной энергетической зоны и показателя преломления неидеальной кристаллической 1D сверхрешетки от концентрации дефектов исследуемой кремний-ЖК многослойной структуры.

Выполнено в рамках приближения виртуального кристалла математическое моделирование зависимости ширины запрещенной энергетической зоны и показателя преломления неидеальной кристаллической 1D сверхрешетки от концентрации дефектов исследуемой кремний-ЖК структуры при вариации слоев модельной системы как по составу, так и толщине.

Полученные результаты открывают возможность контролируемого внедрения структурных дефектов (примесных слоев 1D сверхрешетки) с известными размерными параметрами и значительно расширяют рамки моделирования подобных композитных материалов, обусловленного необходимостью их практического использования.

Статья поступила в редакцию 13.07.2021.