

УДК 539.2:535

## ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛЯРИТОННОГО СПЕКТРА НЕИДЕАЛЬНЫХ 1D ФОТОННЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ДЕФЕКТОВ

*Румянцев В.В.<sup>1</sup>, Федоров С.А.<sup>1</sup>, Воронкин А.С.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина НАН Украины, Донецк, Украина*

<sup>2</sup>*Луганский государственный институт культуры и искусств, Луганск, Украина*

*E-mail: [rumyants@teor.fti.ac.donetsk.ua](mailto:rumyants@teor.fti.ac.donetsk.ua); [alex.voronkin@gmail.com](mailto:alex.voronkin@gmail.com)*

В рамках приближения виртуального кристалла исследована зависимость поляритонного спектра неидеальной фотонной структуры – смектического жидкого кристалла – от концентрации хаотически внедренных инородных (по отношению к идеальной сверхрешетке) слоев (примесей). Полученные особенности концентрационной зависимости величины энергетической щели для различных значений номера поляритонных ветвей свидетельствуют, что путем внедрения в жидкокристаллическую сверхрешетку определенных примесей можно добиться значительного изменения ее энергетической структуры.

**Ключевые слова:** поляритонный спектр, смектический жидкий кристалл, жидкокристаллическая сверхрешетка, энергетическая структура.

### ВВЕДЕНИЕ

Интерес к изучению распространения электромагнитных возбуждений в тонких пленках и слоистых кристаллических средах (в фотонных кристаллах [1–3], в частности, в магнитных [4–6] и композитных материалах на основе кремния и жидкого кристалла [7, 8]) обусловлен, с одной стороны, потребностью твердотельной электроники в различных слоистых структурах с заданными свойствами, а с другой – достижениями технологий, позволяющими создавать тонкие пленки и периодические структуры с контролируемыми характеристиками. Слоистые структуры образуют также и смектические жидкие кристаллы. К возникновению слоистых (ламеллярных) фаз приводит избирательность в отношении растворимости (например, в водных растворах) отдельных частей органических молекул (фотонно-кристаллические системы на основе жидких кристаллов исследовались в монографии [2]).

В данной работе рассмотрено распространение света в неидеальной топологически упорядоченной немагнитной сверхрешетке. Полученный в рамках приближения виртуального кристалла (ПВК) поляритонный спектр фотонного кристалла с произвольным числом слоев в элементарной кристаллической ячейке, [9], конкретизирован для случая жидкокристаллической системы – одномерного кристалла с двумя элементами-слоями в элементарной ячейке. Для различных значений номера поляритонных ветвей исследованы особенности оптических характеристик (показателя преломления, величины энергетической щели.), обусловленные случайной вариацией слоев по толщине и составу.

## 1. АНАЛИЗ ПОСЛЕДНИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ПУБЛИКАЦИЙ

Общая теория оптических волн в периодических кристаллических средах, в том числе состоящих из макроскопических слоев, рассмотрена в [10]. Дальнейшее развитие теории слоистых структур требует рассмотрения более сложных систем – неидеальных сверхрешеток с произвольным числом дефектов, случайным образом распределенных в фотонном кристалле. Очевидно, что при хаотическом распределении примесных слоев их концентрация не является функцией координат, и поляритонные характеристики приобретают зависимость от концентрации. Использование слоистых композитных материалов с слоями переменного состава или толщины существенно расширяет возможности моделирования и создания новых слоистых материалов.

Методика расчета поляритонных возбуждений для указанных систем имеет много общего с методами нахождения квазичастичных возбуждений (электронных, фононных и пр.) в топологически неупорядоченных неидеальных кристаллах. Распространенным методом расчета квазичастичных состояний в неупорядоченных средах является приближение виртуального кристалла, которое заключается в замене конфигурационно зависимых параметров гамильтониана задачи на усредненные их значения [11]. Поляритонные спектры и соответствующие оптические характеристики неидеальных сверхрешеток удобно исследовать, используя именно это приближение, поскольку ПВК позволяет выявлять особенности и трансформацию спектров элементарных возбуждений, обусловленную изменением концентрации дефектов в несовершенных структурах.

## 2. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В НЕОДНОРОДНЫХ СТРУКТУРАХ

Поскольку оптические свойства периодической среды определяются соответствующими материальными тензорами – диэлектрической  $\hat{\epsilon}(\vec{r})$  и магнитной  $\hat{\mu}(\vec{r})$  проницаемостями, то для указанных идеальных систем имеют место равенства:

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

где  $d = \sum_{j=1}^{\sigma} a_j$  – период сверхрешетки,  $\sigma$  – число слоев в элементарной ячейке,  $a_j$  –

толщины соответствующих слоев одномерной цепочки элементов, лежащих на оси  $z$ . Распространение электромагнитных волн в неоднородных структурах описывается уравнениями Максвелла, которые в  $(\vec{k}, \omega)$  – представлении принимают вид:

$$\begin{cases} \vec{k} \times \vec{H}(\vec{k}, \omega) = -\frac{\omega}{c} \int d\vec{q} \hat{\epsilon}(\vec{q}, \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{E}(\vec{q}, \omega); \\ \vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega}{c} \int d\vec{q} \hat{\mu}(\vec{q}, \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{H}(\vec{q}, \omega). \end{cases} \quad (2)$$

$\vec{E}(\vec{k}, \omega)$ ,  $\vec{H}(\vec{k}, \omega)$  – Фурье-амплитуды напряженностей электрического и магнитного полей. В координатном представлении материальные тензоры  $\hat{\epsilon}$  и  $\hat{\mu}$  кристаллической сверхрешетки с произвольным числом  $\sigma$  слоев, которые перпендикулярны оси  $z$ , выражаются в следующей форме:

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}(z) \\ \hat{\mu}(z) \end{pmatrix} = \sum_{n,\alpha} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} \left\{ \theta \left[ z - (n-1)d - \left( \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} - a_{n\alpha} \right) \right] - \theta \left[ z - (n-1)d - \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} \right] \right\}. \quad (3)$$

В (3)  $\theta(z)$  – функция Хевисайда,  $n = \pm 1, \pm 2, \dots$  – номер ячейки одномерного кристалла, индекс  $\alpha = 1, 2, \dots, \sigma$  нумерует элементы ячейки. В частности, при исследовании неидеальной системы, в которой разупорядочение связано лишь с вариацией состава (а не толщины) примесных слоев,  $a_{n\alpha} \equiv a_{\alpha}$ . В этом случае конфигурационно зависимые тензоры  $\hat{\epsilon}_{n\alpha}$ ,  $\hat{\mu}_{n\alpha}$  в нашей модели неидеальной сверхрешетки представляются через случайные величины  $\eta_{n\alpha}^{\nu}$  ( $\eta_{n\alpha}^{\nu} = 1$ , если в узле  $(n\alpha)$  кристаллической цепочки находится слой  $\nu(\alpha)$ -го сорта,  $\eta_{n\alpha}^{\nu} = 0$  – в ином случае):

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} = \sum_{\nu(\alpha)} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \\ \hat{\mu}_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \end{pmatrix} \eta_{n\alpha}^{\nu(\alpha)}. \quad (4)$$

Легко показать, что Фурье-образы материальных тензоров  $\hat{\epsilon}(\vec{k} - \vec{q})$ ,  $\hat{\mu}(\vec{k} - \vec{q})$  в системе уравнений (2) для случая рассматриваемой сверхрешетки имеет вид:

$$\begin{bmatrix} \hat{\epsilon}(\vec{k} - \vec{q}) \\ \hat{\mu}(\vec{k} - \vec{q}) \end{bmatrix} = (2\pi)^2 \delta(k_x - q_x) \delta(k_y - q_y) \sum_{\alpha} F_{\alpha}(k_z - q_z) \sum_n \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} \exp[i(k_z - q_z)nd], \quad (5)$$

где функция  $F_{\alpha}(k_z - q_z)$  определяется выражением:

$$F_{\alpha}(k_z - q_z) = \theta(k_z - q_z) \{ \exp[-i(k_z - q_z)a_{\alpha}] - 1 \} \exp \left[ i(k_z - q_z) \left( \sum_{j=1}^{\alpha} a_j - d \right) \right].$$

Здесь  $\theta(k_z)$  – фурье-образ функции Хевисайда  $\theta(z)$ . Для идеальной сверхрешетки:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}^{(0)}(\vec{k} - \vec{q}) \\ \hat{\mu}^{(0)}(\vec{k} - \vec{q}) \end{pmatrix} &= (2\pi)^2 (k_x - q_x)(k_y - q_y) \times \\ &\times \sum_{\alpha} F_{\alpha}(k_z - q_z) \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{\alpha}^{(0)} \\ \hat{\mu}_{\alpha}^{(0)} \end{pmatrix} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[i(k_z - q_z)na_{\alpha}] - 1 \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

причем  $\hat{\epsilon}_{n\alpha}^{(0)} \equiv \hat{\epsilon}_{\alpha}^{(0)}$ ,  $\hat{\mu}_{n\alpha}^{(0)} \equiv \hat{\mu}_{\alpha}^{(0)}$ .

Расчет поляритонного спектра неидеальной сверхрешетки осуществляется в рамках ПВК (по аналогии с квазичастичным подходом) путем следующей замены:  $\hat{\epsilon} \rightarrow \langle \hat{\epsilon} \rangle$ ,  $\hat{\mu} \rightarrow \langle \hat{\mu} \rangle$  (угловые скобки обозначают процедуру кофигурационного усреднения). При этом из (4) и [18] следует, что:

$$\begin{pmatrix} \langle \hat{\varepsilon}_{n\alpha} \rangle \\ \langle \hat{\mu}_{n\alpha} \rangle \end{pmatrix} = \sum_{\alpha, \nu(\alpha)} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \\ \mu_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \end{pmatrix} C_{\alpha}^{\nu(\alpha)}, \quad (7)$$

где  $C_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$  – концентрация примесного слоя  $\nu(\alpha)$ -го сорта в  $\alpha$ -й подрешетке,  $\sum_{\nu(\alpha)} C_{\alpha}^{\nu(\alpha)} = 1$ . Поскольку конфигурационное усреднение «восстанавливает» трансляционную симметрию в кристаллической системе, то применительно к исследуемому случаю неидеальной сверхрешетки «приобретенная» трансляционная инвариантность одномерной цепочки позволяет представить систему уравнений (2) в виде следующего интегрального матричного уравнения:

$$\int d\vec{q} \begin{pmatrix} \frac{\omega}{c} \langle \hat{\varepsilon}(\vec{K} - \vec{q}) \rangle & \delta(\vec{K} - \vec{q}) \hat{q} \\ \delta(\vec{K} - \vec{q}) \hat{q} & -\frac{\omega}{c} \langle \hat{\mu}(\vec{K} - \vec{q}) \rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{E}(\vec{q}, \omega) \\ \vec{H}(\vec{q}, \omega) \end{pmatrix} = 0. \quad (8)$$

Здесь тензор  $\hat{q} = \begin{pmatrix} 0 & -q_z & q_y \\ q_z & 0 & -q_x \\ -q_y & q_x & 0 \end{pmatrix}$  – антисимметричный, дуальный к волновому

вектору  $\vec{q}$ , тензор. В соотношении (8) произведена также замена произвольного волнового вектора  $\vec{k}$  на блоховский волновой вектор  $\vec{K}$ . Последнее стало возможным для неидеальной сверхрешетки, благодаря конфигурационному усреднению, «восстановившему» периодичность среды. Согласно теореме Флоке, в периодической среде общее решение системы уравнений (2)

$\begin{pmatrix} \vec{E}(\vec{r}, \omega) \\ \vec{H}(\vec{r}, \omega) \end{pmatrix} = \int d\vec{k} \begin{pmatrix} \vec{E}(\vec{k}, \omega) \\ \vec{H}(\vec{k}, \omega) \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  представляет собой суперпозицию

нормальных мод  $\vec{E}_{\vec{K}}(\vec{r}, \omega) = \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) \varphi(x, y, z, \omega)$ , причем  $\varphi(x, y, z, \omega) = \varphi(x, y, z + d, \omega)$ ,  $\vec{K} = (0, 0, K)$ ,  $K = 2\pi m / Nd$ ,  $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm N$  (среди всевозможных значений  $m$  имеется лишь  $N$  значений, дающих  $N$  независимых мод).

### 3. ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛЯРИТОННОГО СПЕКТРА ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСНЫХ СЛОЕВ В НЕИДЕАЛЬНОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

#### 3.1. Вариация слоев по составу

Для немагнитных систем  $\hat{\mu} = \hat{I}$ , а диэлектрическая проницаемость исследуемой неидеальной сверхрешетки – периодическая функция:  $\langle \hat{\varepsilon}(x, y, z) \rangle = \langle \hat{\varepsilon}(x, y, z + d) \rangle$ . Для одноосного кристалла

(  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{xx} \delta_{xi} \delta_{jx} + \varepsilon_{yy} \delta_{yi} \delta_{jy} + \varepsilon_{zz} \delta_{zi} \delta_{jz}$  , очевидно, что для  $\vec{K} \parallel z$   $zz$ -компоненты тензора  $\hat{\varepsilon}$  в конечных формулах не фигурируют, а  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \equiv \varepsilon$  , В этом случае дисперсионное соотношение  $\omega = \omega_s(\vec{K})$  общего вида, которое следует из (5) и условия разрешимости интегрального уравнения (8), имеет вид:

$$\omega_{s(\pm)}^2(K) = c^2 K^2 \left\{ \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{a_{\alpha}}{d} \langle \varepsilon_{n\alpha} \rangle \pm \frac{1}{2\pi s} \left[ \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \langle \varepsilon_{n\alpha} \rangle \begin{matrix} \exp\left(-i \frac{2\pi s}{d} \sum_{j=1}^{\alpha} a_j\right) - \\ - \exp\left(-i \frac{2\pi s}{d} \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_j - a_{\alpha}\right)\right) \end{matrix} \right] \right\}^{-1} \quad (9)$$

Целочисленный индекс  $s$  нумерует поляритонные ветви.

Ограничимся рассмотрением распространения электромагнитного излучения в жидкокристаллической сверхрешетке с двумя изотропными слоями-элементами в элементарной ячейке. При этом концентрация и диэлектрическая проницаемость основного вещества в первой и второй подрешетках обозначим соответственно, как  $C_1^{(1)}$ ,  $\varepsilon_1^{(1)} = 5,5$  и  $C_2^{(1)}$ ,  $\varepsilon_2^{(1)} = 5,0$ , а примеси –  $C_1^{(2)}$ ,  $\varepsilon_1^{(2)}$  и  $C_2^{(2)}$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}$ .

С учетом вышесказанного дисперсия поляритонного спектра неидеальной бинарной жидкокристаллической системы определяется следующим из (9) дисперсионным уравнением:

$$\omega_{s(\pm)}^2(K) = c^2 K^2 \left\{ \begin{matrix} f_1(C_1^{(2)}) \frac{a_1}{d} + f_2(C_2^{(2)}) \frac{a_2}{d} \pm \\ \pm \left[ f_1(C_1^{(2)}) \frac{\sin(\pi s a_1 / d)}{\pi} + f_2(C_2^{(2)}) \frac{\sin(\pi s a_2 / d)}{\pi} \right] \end{matrix} \right\}^{-1}, \quad (10)$$

где  $f_1(C_1^{(2)}) = \varepsilon_1^{(1)} + (\varepsilon_1^{(2)} - \varepsilon_1^{(1)}) C_1^{(2)}$ ,  $f_2(C_2^{(2)}) = \varepsilon_2^{(1)} + (\varepsilon_2^{(2)} - \varepsilon_2^{(1)}) C_2^{(2)}$ . При получении соотношения (10) использованы те же приближения, что и в работе [11] (в которой изучалась идеальная периодическая структура), поэтому форма дисперсионных кривых качественно не отличается от кривых, приведенных в этой работе. Тем не менее, в отличие от случая, исследованного в [10,12,13], особенность рассмотренной задачи отражается в том, что параметры семейства дисперсионных кривых зависят от концентрации  $C_{\alpha}^{v(\alpha)}$  дефектных слоев. В частности, наша модель позволяет получить выражение для ширины запрещенной зоны, которая для  $\omega = \omega_s(\vec{K})$  в форме (9), имеет вид:

$$\Delta\omega_s = \omega \frac{\left| (\varepsilon_1^{(1)} C_1^{(1)} + \varepsilon_1^{(2)} C_1^{(2)}) \sin(\pi s a_1 / d) / \pi + (\varepsilon_2^{(1)} C_2^{(1)} + \varepsilon_2^{(2)} C_2^{(2)}) \sin(\pi s a_2 / d) / \pi \right|}{(\varepsilon_1^{(1)} C_1^{(1)} + \varepsilon_1^{(2)} C_1^{(2)}) a_1 / d + (\varepsilon_2^{(1)} C_2^{(1)} + \varepsilon_2^{(2)} C_2^{(2)}) a_2 / d} \quad (11)$$

### 3.2. Вариация слоев по толщине

Рассмотрим неидеальную систему, в которой разупорядочение связано лишь с вариацией толщины (а не состава) примесных слоев, следовательно,  $\hat{\varepsilon}_{n\alpha} \equiv \hat{\varepsilon}_\alpha$ . Конфигурационно зависимые величины  $a_{n\alpha}$  в такой модели неидеальной сверхрешетки представлены через случайные величины  $\eta_{n\alpha}^v$  ( $\eta_{n\alpha}^v = 1$ , если в узле  $(n\alpha)$  кристаллической цепочки находится слой с толщиной  $a_\alpha^{v(\alpha)}$  сорта  $v(\alpha)$ ;  $\eta_{n\alpha}^v = 0$  – в ином случае):

$$a_{n\alpha} = \sum_{v(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_\alpha^{v(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{v(\alpha)}, \quad (12)$$

$r(\alpha)$  – число сортов элементов-слоев в  $\alpha$ -й подрешетке одномерного кристалла.

Очевидно, что конфигурационно усредненные величины  $\langle a_{n\alpha} \rangle \equiv a_\alpha \{C_\alpha^{v(\alpha)}\}$  и  $\langle d_n \rangle \equiv \sum_\alpha \langle a_{n\alpha} \rangle$  равны:

$$\langle a_{n\alpha} \rangle = \sum_{v(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_\alpha^{v(\alpha)} C_\alpha^{v(\alpha)}, \quad \langle d_n \rangle \equiv d \{C_\alpha^{v(\alpha)}\} = \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \sum_{v(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_\alpha^{v(\alpha)} C_\alpha^{v(\alpha)}. \quad (13)$$

Так же, как и в случае неидеальной сверхрешетки с переменным составом, задача нахождения поляритонных характеристик сводится к соответствующей задаче для «идеального» многослойника с толщинами слоев  $a_\alpha \{C_\alpha^{v(\alpha)}\}$  и периодом  $d \{C_\alpha^{v(\alpha)}\}$ .

Поэтому в приближении виртуального кристалла нахождение всех соответствующих величин (спектра, ширины щели и т. д.) осуществляется путем замены:  $a_{n\alpha} \longrightarrow a_\alpha \{C_\alpha^{v(\alpha)}\}$ ,  $d \longrightarrow d \{C_\alpha^{v(\alpha)}\}$ .  $C_\alpha^{v(\alpha)}$  – концентрация слоев с толщиной  $v(\alpha)$ -го сорта в  $\alpha$ -й подрешетке,  $\sum_{v(\alpha)} C_\alpha^{v(\alpha)} = 1$ .

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

$$\begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}(z) \\ \hat{\mu}(z) \end{pmatrix} = \sum_l \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_l \\ \hat{\mu}_l \end{pmatrix} \exp\left(-il \frac{2\pi}{d \{C_\alpha^{v(\alpha)}\}} z\right). \quad (14)$$

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

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_l \\ \hat{\mu}_l \end{pmatrix} &= -\frac{i}{2\pi d} \sum_{\alpha} \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_{n\alpha} \\ \hat{\mu}_{n\alpha} \end{pmatrix} \times \\ &\times \left\{ \exp \left[ i \frac{2\pi}{d \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\}} l \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\} \right] - \exp \left[ i \frac{2\pi}{d \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\}} l \left( \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\} - a_{\alpha} \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

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

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \hat{\mu}(z) \cdot \vec{H}(\vec{r}, \omega), \quad \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \hat{\varepsilon}(z) \cdot \vec{E}(\vec{r}, \omega). \quad (16)$$

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

$$\begin{bmatrix} \vec{E}(\vec{r}, \omega) \\ \vec{H}(\vec{r}, \omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{f}_K^{(E)}(z) \\ \vec{f}_K^{(H)}(z) \end{bmatrix} \exp(-i\vec{\chi} \cdot \vec{\rho} - iKz). \quad (17)$$

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

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_K^{(E)}(z) \\ \vec{f}_K^{(H)}(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{f}_K^{(E)}(z + d \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\}) \\ \vec{f}_K^{(H)}(z + d \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\}) \end{bmatrix} = \sum_p \begin{pmatrix} \vec{f}_{K,p}^{(E)} \\ \vec{f}_{K/p}^{(H)} \end{pmatrix} \exp \left( -ip \frac{2\pi}{d \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\}} z \right). \quad (18)$$

Подстановка соотношения (17) в систему уравнений (16) приводит к следующему соотношению для Фурье-амплитуд  $\vec{f}_{K,p}^{(E,H)}$  электромагнитного поля:

$$\left[ \vec{\chi} + \left( K + p \frac{2\pi}{d \{C_{\alpha}^{v(\alpha)}\}} \right) \vec{e}_z \right] \times \begin{pmatrix} \vec{f}_{K,p}^{(H)} \\ \vec{f}_{K,p}^{(E)} \end{pmatrix} = \frac{\omega}{c} \begin{bmatrix} -\sum_l \hat{\varepsilon}_l \cdot \vec{f}_{K,p-l}^{(E)} \\ \sum_l \hat{\mu}_l \cdot \vec{f}_{K,p-l}^{(H)} \end{bmatrix}, \quad (19)$$

где  $\vec{e}_z$  – орт оси  $z$ . Система уравнений (19) определяет нормальные моды электромагнитных волн, распространяющихся в такой «периодической» среде.

В исследуемом случае распространения света вдоль оси  $z$  ( $\vec{\chi} = 0$ ) в немагнитной сверхрешетке ( $\hat{\mu} = \hat{I}$  – единичная матрица), полагая, что вектор Блоха  $K$  близок к значению, определяемому условием Брэгга, основными членами системы уравнений (19) являются  $\vec{f}_{K,p}^{(E,H)}$  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 (19) после исключения  $\vec{f}^{(H)}$  принимают вид:

$$\begin{bmatrix} K^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon^{(0)} & -\frac{\omega^2 \varepsilon^{(1)}}{c^2} \\ -\frac{\omega^2 \varepsilon^{(-1)}}{c^2} & \left( K - \frac{2\pi}{d \{C_\alpha^{(\omega)}\}} \right)^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon^{(0)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} f_{K,0}^{(E)} \\ f_{K,-1}^{(E)} \end{pmatrix} = 0 \quad (20)$$

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 (20)

Концентрацию и толщину слоя основного вещества (матрицы) в первой и второй подрешетках обозначим соответственно  $C_1^{(1)}, a_1^{(1)}$  и  $C_2^{(1)}, a_2^{(1)}$ , а примеси –  $C_1^{(2)}, a_1^{(2)}$  и  $C_2^{(2)}, a_2^{(2)}$ . Несложные преобразования с учетом  $|\varepsilon^{(-1)}| = |\varepsilon^{(1)}|$  позволяют получить следующие соотношения для показателя преломления  $n_{\pm} \equiv cK / \omega_{\pm}$  исследуемой системы:

$$n_{\pm}^2(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) = \varepsilon^{(0)}(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) \pm |\varepsilon^{(1)}(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})| = \varepsilon^{(0)} \left[ 1 \pm \frac{\Delta\omega_1(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}{\omega} \right], \quad (21)$$

причем  $(n_+^2 - n_-^2) / 2\varepsilon^{(0)} = \Delta\omega_1 / \omega$ ,  $\Delta\omega_1 = |\omega_+ - \omega_-|$  – ширина нижней запрещенной зоны. Из формулы (21) следует, что величина  $\Delta\omega_1$  определяется соответствующим коэффициентом Фурье-разложения, в данном случае  $|\varepsilon^{(1)}|$ :

$$\varepsilon^{(0)} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 (a_2^{(1)} / a_1^{(1)}) f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}{1 + (a_2^{(1)} / a_1^{(1)}) f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}, \quad (22)$$

$$|\varepsilon^{(1)}| = \frac{|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}{\pi} \sin \frac{\pi}{1 + (a_2^{(1)} / a_1^{(1)}) f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})}.$$

Функция  $f(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) = \frac{1 - C_2^{(2)}(1 - a_2^{(2)} / a_2^{(1)})}{1 - C_1^{(2)}(1 - a_1^{(2)} / a_1^{(1)})}$  зависит от концентраций примесных

слоев и их относительной толщины. Как показано выше, запрещенные зоны высшего порядка также определяются соответствующими Фурье-коэффициентами диэлектрической проницаемости.

На рис. 1 приводится концентрационная зависимость энергетических щелей в бинарной жидкокристаллической сверхрешетке для различных значений  $s$ . Хорошо видно, что форма соответствующих поверхностей по-прежнему сохраняет монотонный характер зависимости, с увеличением  $s$  ширина щели стремится к нулю. При этом зависимости для четных  $s$  качественно отличаются от соответствующих поверхностей для нечетных  $s$ . Этот факт проиллюстрирован рис. 2, из которого следует, что для определенной области значений  $C_1^{(2)}, C_2^{(2)}$  ширина щели для четных  $s$  часто оказывается уже следующего нечетного значения  $s$ . Ход



поверхностей  $\Delta\omega_s(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})$  на рис.3, изображенных для ряда значений  $\varepsilon_1^{(2)}$  и  $\varepsilon_2^{(2)}$ , указывает на слабую зависимость  $\Delta\omega_s$  от изменения  $\varepsilon_1^{(2)}$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}$ . На рис.4. приведена концентрационная зависимость величины энергетической щели для случая  $s=1$  при вариация слоев по толщине.

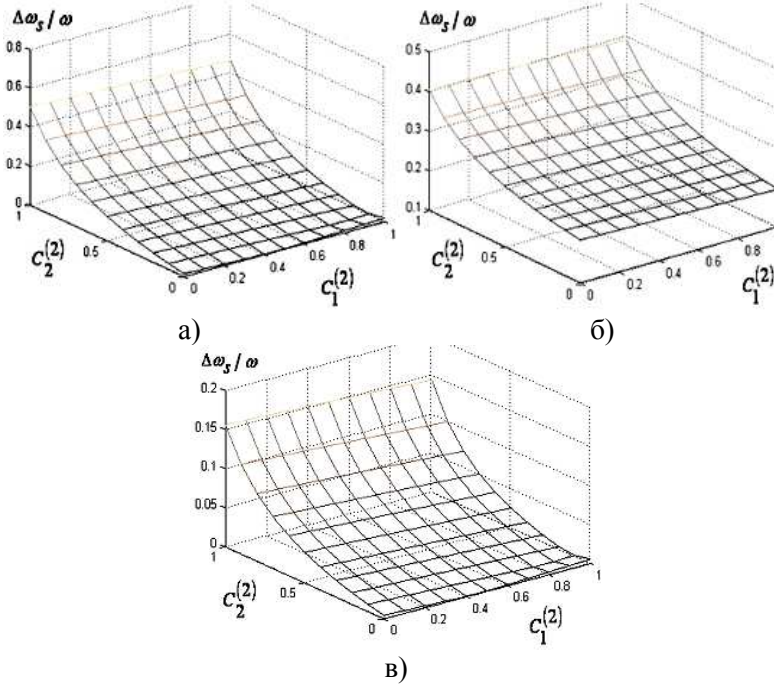


Рис. 1. Концентрационная зависимость величины энергетической щели для различных значений номера поляритонных ветвей: а)  $s = 2$ , б)  $s = 3$ , в)  $s = 4$ , причем  $a_1/d = 0,2$ ,  $a_2/d = 0,8$ ,  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 0,8$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 0,1$ .

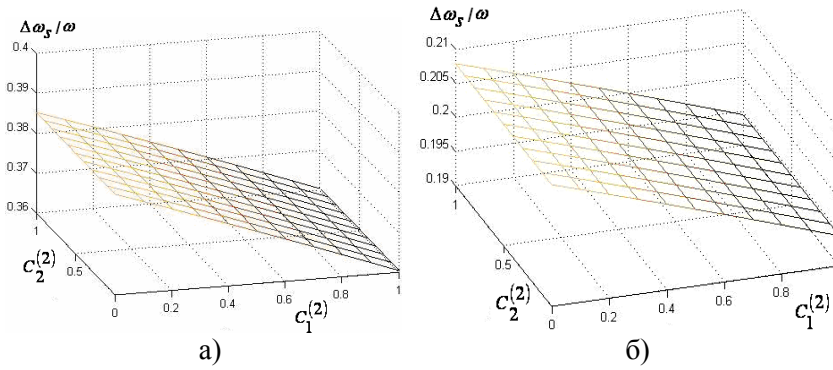


Рис. 2. Концентрационная зависимость величины энергетической щели для различных значений номера поляритонных ветвей: а)  $s = 1$ , б)  $s = 3$ , причем  $a_1/d = 0,2$ ,  $a_2/d = 0,8$ ,  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 0,8$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 1$ .

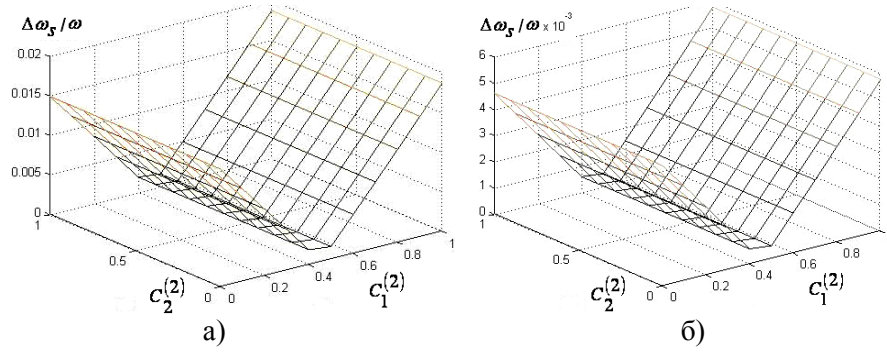


Рис. 3. Концентрационная зависимость величины энергетической щели для различных значений номера поляритонных ветвей: а)  $s = 2$ , б)  $s = 4$ , причем  $a_1/d = 0,2$ ,  $a_2/d = 0,8$ ,  $\varepsilon_1^{(2)}/\varepsilon_1^{(1)} = 0,8$ ,  $\varepsilon_2^{(2)}/\varepsilon_2^{(1)} = 1$ .

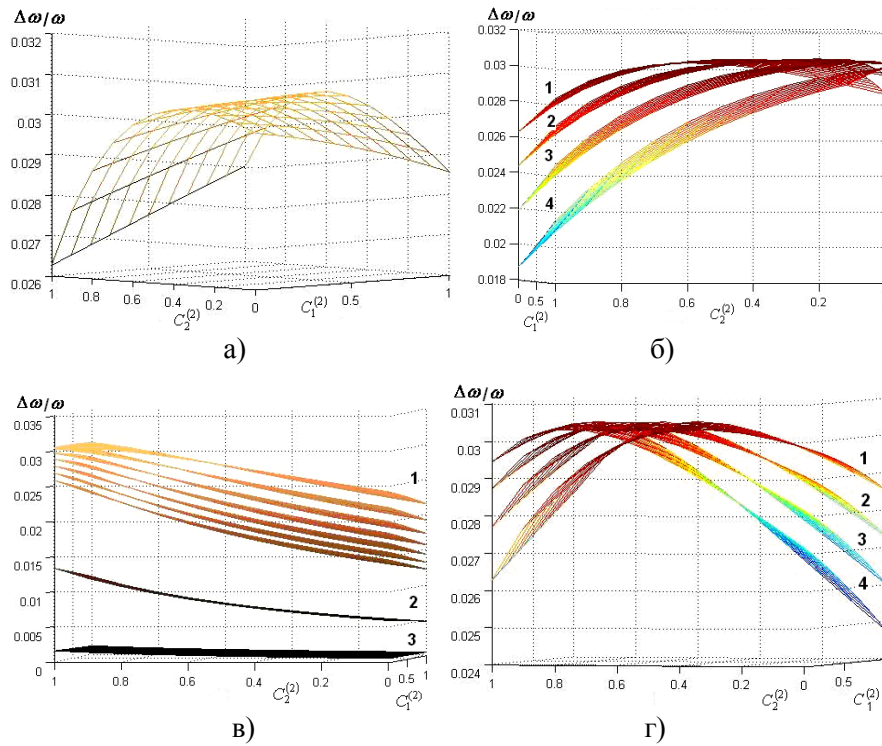


Рис. 4. Концентрационная зависимость величины энергетической щели для случая  $s=1$  при вариации слоев по толщине, где  $a_2^{(2)}/a_2^{(1)} = 0,4$ ;  $a_1^{(2)}/a_1^{(1)} = 0,8$  : а)  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,3$ ; б) 1 соответствует отношению  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,3$ ; 2 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,1$ ; 3 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 0,9$ ; 4 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 0,7$ ; в) для группы 1 отношение  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,9...3,1$ ; 2 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 15$ ; 3 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 150$ ; г)  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,3$ ; 2 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,7$ ; 3 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 1,9$ ; 4 –  $a_2^{(1)}/a_1^{(1)} = 2,1$ .

## ВЫВОДЫ

В современной трактовке квазичастичные возбуждения (например, поляритоны) удобно описывать также на языке функций Грина. В случае разупорядоченных макроскопически однородных (в частности, топологически упорядоченных) неидеальных систем используют усредненные одночастичные функции Грина, которые в узельном представлении трансляционно инвариантны и выражаются через резольвенту  $\langle \hat{R}(\omega) \rangle = \left\langle \left( \frac{1}{\hbar\omega - \hat{H}} \right) \right\rangle$  соответствующего квазичастичного гамильтониана  $\hat{H}$  [14, 16]. Хорошо известно, что расчет  $\hat{R}(\omega)$  сводится к вычислению массового оператора  $\hat{\Sigma}(\vec{k}, \omega, C)$ , зависящего от концентрации  $C$  примесей, частоты  $\omega$  и волнового вектора  $\vec{k}$ . Вещественная часть  $\hat{\Sigma}(\vec{k}, \omega, C)$  определяет перенормировку квазичастичного спектра, а мнимая – затухание (и, следовательно, длину свободного пробега) соответствующих возбуждений. Указанное описание справедливо лишь для тех частотных интервалов, для которых выполняется неравенство

$$Im \hat{\Sigma} \ll Re \hat{\Sigma}. \quad (23)$$

Частотные интервалы, для которых выполняется (23), зависят от определенных соотношений между параметрами системы, а также от величины концентрации дефектов. Нахождение критериев выполнимости неравенства (23) представляет собой достаточно трудоемкую отдельную задачу, проведенную, в частности, в работах [17, 18]. Поскольку (23) выполняется не всегда, выбор и применение определенных приближений для нахождения  $\hat{\Sigma}(\vec{k}, \omega, C)$  должны опираться на экспериментальные данные.

Для рассматриваемых в данной работе (как и в [12, 13, 19]) трансляционно инвариантных модельных систем (конфигурационное усреднение восстанавливает конфигурационную инвариантность) применяется приближение виртуального кристалла [11], следовательно,  $Im \hat{\Sigma} = 0$  [14–16]. Мы не занимались обоснованием применимости ПВК (и нахождением рамок выполнения условия (23)). Очевидно, что ПВК – самое грубое из указанных [14–16] приближений, которое годится для общей (без детализации тонкой структуры квазичастичного спектра) интерпретации экспериментальных данных (величин, выражающихся через усредненную функцию Грина). Оно годится не всегда, и наша работа не претендует на объяснение конкретных данных эксперимента (которых и не имеется), а лишь посвящена решению модельной задачи.

Следует отметить, что здесь, как и в предыдущих работах, касающихся исследования трехмерных [12,13] или квазидвумерных [19] систем, объектом изучения не является одномерная цепочка. Именно поэтому фурье-образ усредненной функции Грина (а следовательно, и массового оператора) зависит от трехмерного волнового вектора  $\vec{k}$  (но не одномерного, как для одномерной цепочки). Переход к модели одномерной цепочки осуществляется путем обращения

в нуль поляризуемости среды в пространстве, окружающем цепочку (эта процедура в работе не проделывалась, поскольку соответствующая модель в работе не использовалась). Рассматриваемая в данной работе задача относится к частному случаю для направления  $\vec{k}$  вдоль нормали к слоям. Нам не известны работы, в которых для трехмерных и квазидвумерных систем при определенных соотношениях параметров системы во всей частотной области выполняется соотношение:  $Im \hat{\Sigma} \approx Re \hat{\Sigma}$ . Таким образом, нет категорических запретов на возможность распространения электромагнитных возбуждений в трехмерных и квазидвумерных слоистых системах с произвольным числом инородных слоев (как в [12, 13]) или страйпов [19,20].

ПВК-приближение, выбранное для описания трансформации поляритонного спектра достаточно простой модели сверхрешетки – первый шаг к изучению неидеальных систем. Исследование особенностей поляритонного спектра (и определяемых им физических величин, например, плотности состояния элементарных возбуждений и характеристик нормальных электромагнитных волн) более сложных объектов требует привлечения и более сложных методов описания (в зависимости от поставленной задачи): метода когерентного потенциала (одно- или многоузельного), [14], метода усредненной Т-матрицы, [15], и их модификаций. В целом проведенное в работе исследование указывает на возможность значительных изменений оптических свойств кристаллической сверхрешетки, которые обусловлены перенормировкой ее поляритонного спектра в результате присутствия инородных слоев.

#### Список литературы

1. Joannopoulos J.D. Photonic crystals. Molding the flow of light / Joannopoulos J.D., Johnson S.G., Winn J.N., Meade R.D. – [second ed.]. – Princeton : Princeton University Press, 2008. – 305 p.
2. Шабанов В.Ф. Оптика реальных фотонных кристаллов / Шабанов В.Ф., Ветров С.Я., Шабанов А.В. – Новосибирск : СО РАН, 2005. – 240 с.
3. Jalali B. Can silicon change photonics? / Jalali B. // Phys. Stat. Sol. (a), 2008. – V. 205. – № 2. – P. 213-224.
4. Figotin A. Nonreciprocal magnetic photonic crystals / Figotin A., Vitebsky I. // Phys. Rev., 2001. – Vol. 63. – P. 066609.
5. Lyubchanskii I.L. One-dimensional bigyrotropic magnetic photonic crystals / Lyubchanskii I.L., Dadoenkova N.N., Lyubchanskii M.I., Shapovalov E.A., Lakhtakia A., Rasing Th. // Applied Phys. Lett., 2004. – V. 85. – № 24. – P. 5932-5934.
6. Belotelov V.I. Optical properties of the magnetic photonic crystals at the oblique light incidence / Belotelov V.I., Kotov V.A., Zvezdin A.K., Alameh K., Vasiliev M. // Int. Conf. "Functional Materials". Abstracts, (Ukraine, Cremea, Partenit, October 3–8, 2005). – P. 132.
7. Толмачев В.А. Перестройка запрещенных фотонных зон и спектров отражения одномерного фотонного кристалла на основе кремния и жидкого кристалла / Толмачев В.А. // Оптика и спектроскопия, 2005. – Т. 99. – № 5. – С. 797-801.
8. Tolmachov V.A. Thermo-tunable defect mode in one dimensional photonic structure based on grooved silicon and liquid crystal / Tolmachov V.A., Perova T.S., Astrova E.V. // Phys. Stat. Sol. (RRL), 2008. – V.2, № 3. – P. 114-116.
9. Блейкмор Дж. Физика твердого тела / Блейкмор Дж. – М. : Мир, 1988. – 608 с.
10. Ярив А. Оптические волны в кристаллах / Ярив А., Юх П. – М. : Мир, 1987. – 616 с.

11. Parmenter R.H. Energy Levels of a Disordered Alloy / Parmenter R.H. // Phys. Rev. – 1955. – V. 97. – № 3. – P. 587-698.
12. Румянцев В.В. Поляритонный спектр неидеальной лиотропной ламеллярной системы / Румянцев В.В., Федоров С.А. // Жидкие кристаллы, 2007. – Вып. 1. – С. 67-74.
13. Rumyantsev V.V. Peculiarities of photonic band gap width dependence upon concentration of the admixture layers randomly included in composite material / Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Shtaerman E.Ya. // Functional Materials, 2008. – V. 15. – № 2. – P. 223-228.
14. Займан Дж. Модели беспорядка / Займан Дж. – М. : Мир, 1982. – 592 с.
15. Лось В.Ф. Метод проекционного оператора в теории неупорядоченных систем / Лось В.Ф. // ТМФ, 1987. – Т. 73. – №1. – С. 85-102.
16. Пашкевич Ю.Г. Метод оператора проектирования в теории многоподрешеточных неупорядоченных систем с недиагональным беспорядком / Пашкевич Ю.Г., Румянцев В.В., Федоров С.А., Белоусова Е.С. // Вісник Донецького університету. – [Сер. А. Природничі науки]. – 2003. – №2. – С. 313-323.
17. Эрих Г. Электронная структура сплавов / Эрих Г., Шварц Л. – М. : Мир, 1979. – 200 с.
18. Лифшиц И.М. Введение в теорию неупорядоченных систем / Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастор Л.А. – М. : Наука, 1982. – 360 с.
19. Румянцев В.В. Распространение света в квазидвумерной Si/SiO<sub>2</sub> сверхрешетке с переменной толщиной полос / Румянцев В.В., Федоров С.А. // Оптика и спектроскопия, 2009. – Т. 106. – №4. – С. 700-705.
20. Rumyantsev V.V. Light-matter coupling in imperfect quasi-two-dimensional Si/SiO<sub>2</sub> photonic crystal / Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Shtaerman E.Ya. // Superlattices and Microstructures. – 2010. – V. 47. – N 1. – P. 29-33.

**Румянцев В.В. Залежність поляритонного спектру неідеальних 1D фотонних рідинних кристалів від концентрації дефектів / Румянцев В.В., Федоров С.А., Воронкін О.С. // Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2011. – Т. 24(63), №2. – С. 67-79.**

У рамках наближення віртуального кристала досліджена залежність поляритонного спектру неідеальної фотонної структури – смектичного рідинного кристалу, що обумовлено наявністю хаотично впроваджених сторонніх (стосовно ідеальної надгратки) домішок-шарів. Отримані особливості концентраційної залежності величини енергетичної щільності для різних значень номера поляритонних гілок свідчать, що шляхом впровадження в рідкокристалічну надгратку певних домішок можна домогтися значної зміни її енергетичної структури.

**Ключові слова:** поляритонний спектр, смектичний рідинний кристал, рідкокристалічна надгратка, енергетична структура.

**Rumyantsev V.V. Polariton spectrum dependence upon concentration of the admixture in imperfect 1D photonic liquid crystal / Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Voronkin A.S. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2011 – Vol. 24(63), No.2 – P. 67-79.**

Investigation of disorder effects in imperfect liquid superlattice allowing modeling the crystal properties is still of a great interest. We consider a model of liquid superlattice as a macroscopically homogeneous system with randomly included admixture layers. The virtual crystal approach which is the method to describe quasi-particle excitations in disorder media is used. Polariton spectrum of imperfect superlattice (which is one-dimensional liquid crystal with two elements-layers in the cell) is obtained. Peculiarities of the dependence of band gap width on admixture layers concentration have been studied for different polariton branch. The results are the evidence of substantial polariton spectrum reconstruction caused by presence of defect layers.

**Keywords:** polariton spectrum, liquid crystal, liquid superlattice, power structure.

*Поступила в редакцію 31.01.2011 г.*