

G. González de la Cruz¹, F. Ramos² y P. Halevi²

¹Depto. de Física, CINVESTAV-IPN, Apdo. Postal 14-740
07000 México, D.F.; ²Instituto de Física de la UAP
Apdo. Postal J-40 Puebla, Pue.

Recientes experimentos han demostrado la existencia de bandas fotónicas en estructuras periódicas dieléctricas análogas a las bandas electrónicas en sólidos. Usando el método de ondas planas, se estudia en la aproximación escalar la naturaleza de las bandas fotónicas en estructuras donde los "átomos" (funciones delta) de constante dieléctrica ϵ_a son periódicamente distribuidos en un fondo de constante dieléctrica ϵ_b . Los cálculos en la aproximación escalar predicen brechas prohibidas en las cuales no hay propagación de radiación electromagnética.

*Trabajo parcialmente apoyado por CONACYT.

INTRODUCCION

Recientemente, existe un gran interés en estudiar la propagación de ondas electromagnéticas en estructuras desordenadas y periódicas dieléctricas¹. Este interés es parcialmente debido a la posibilidad de observar la localización de Anderson² de ondas electromagnéticas en estructuras dieléctricas desordenadas³⁻⁷ y también la posible existencia de bandas fotónicas en estructuras periódicas dieléctricas⁸⁻¹³. En analogía al caso de ondas electrónicas propagándose en un cristal, ondas de luz viajando en estructuras periódicas serán descritas en términos de bandas fotónicas con la posible existencia de una brecha de frecuencias donde la propagación de ondas electromagnéticas es prohibida. Se ha¹⁰ propuesto que la inhibición de emisión espontánea en dichas brechas puede ser utilizado sustancialmente para aumentar la eficiencia en Láseres de semiconductores y otros dispositivos de la electrónica cuántica. Ultimamente se ha especulado¹⁴ que la ausencia de fluctuaciones en el gap fotónico conducirá a una nueva física.

Para el caso de localización de ondas electromagnéticas, aún no existe³⁻⁷ demostración experimental de localización de ondas clásicas en un sistema dieléctrico desordenado. Drake y Genack¹⁵ recientemente han reportado medidas del coeficiente de difusión óptica en un sistema de esferas de titanio, sugiriendo un régimen crítico para el efecto de localización, John⁸ ha propuesto que la localización óptica para ondas electromagnéticas cerca de la brecha fotónica puede obtenerse desordenando débilmente el arreglo periódico de las esferas. Estos últimos desarrollos sugieren que una clara demostración experimental de localización óptica es inminente.

En base a lo anterior, es muy importante

obtener una estructura con una brecha en la frecuencia donde la propagación de ondas electromagnéticas sea prohibida. Investigación en este campo está en sus primeros principios. Recientemente Yablonovitch y Gmitter¹¹ reportaron la primera observación de bandas fotónicas en una estructura dieléctrica fcc.

El objetivo en este trabajo es calcular la estructura de las bandas fotónicas de un arreglo periódico de "potenciales" delta con constante dieléctrica ϵ_a embebidas en un medio de constante dieléctrica ϵ_b :

La dispersión de ondas electromagnéticas es estudiada en base de las ecuaciones vectoriales. Estas ecuaciones son mucho más complejas de resolver. Soluciones exactas existen en casos simples, por ejemplo, el problema de Mie el cual consiste en la dispersión de ondas electromagnéticas por una esfera. En este trabajo, muchos aspectos importantes de las bandas fotónicas en estructuras periódicas dieléctricas obtenidas en los experimentos pueden entenderse en términos de dispersión de ondas escalares.

La dispersión de una onda escalar $\Psi(r)$ por una red periódica es descrita por la ecuación de onda o ecuación de Helmholtz:

$$\left\{ -\nabla^2 - (\omega^2/c^2)\epsilon_b + v(r) \right\} \Psi(r) = 0 \quad (1)$$

donde

$$v(r) = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_n (\epsilon_b - \epsilon_a) \delta(\vec{r} - \vec{R}_n) \quad (2)$$

La suma es sobre todos los puntos de la red periódica. Las constantes dieléctricas de las esferas y del fondo donde están embebidas son ϵ_a y ϵ_b respectivamente y c es la velocidad de la luz en el vacío. La amplitud de onda clásica Ψ y

su derivada son continuas en todo el espacio.

En este cálculo se emplea el método de ondas planas el cual es un método estándar en el problema de la estructura de bandas electrónico. Aspectos de bandas fotónicas han sido discutidas numéricamente por varios autores^{16,17}.

Para un arreglo periódico de funciones delta, el potencial $v(r)$ puede expandirse en términos de componentes de Fourier $v(\vec{G})$, donde \vec{G} es un vector de la red reciproca

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} v(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad (3)$$

La función de onda $\Psi(\vec{r})$, usando el teorema de Bloch, puede expandirse en términos de ondas planas:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (4)$$

donde \vec{q} es el vector de ondas de Bloch. Sustituyendo la función de onda de Bloch (4) en la ecuación de Helmholtz (1), encontramos que los coeficientes en la expansión $c(\vec{q})$ satisfacen la siguiente ecuación

$$\left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b \right] c(\vec{q}) + \sum_{\vec{G}} v(\vec{G}) c(\vec{q} - \vec{G}) = 0. \quad (5)$$

La transformada inversa de la ec. (3) nos da la expresión para $v(\vec{G})$

$$v(\vec{G}) = \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d^3r = \frac{\omega^2}{c^2} [\epsilon_b - \epsilon_a] \quad (6)$$

de tal manera que la ecuación central (5) resulta ser

$$\left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b \right] c(\vec{q}) + \frac{\omega^2}{c^2} [\epsilon_b - \epsilon_a] \sum_{\vec{G}} c(\vec{q} - \vec{G}) \quad (7)$$

Denotando la suma sobre \vec{G} por el símbolo $f(\vec{q})$ y reorganizando obtenemos

$$c(\vec{q}) = \frac{\omega^2 (\epsilon_b - \epsilon_a) f(\vec{q}) / c^2}{\left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b \right]} \quad (8)$$

si en la última ecuación, cambiamos \vec{q} por $\vec{q} - \vec{G}$ y sumamos sobre \vec{G} , el punto crucial es notar que

$$f(\vec{q} - \vec{G}) = \sum_{\vec{G}'} c(\vec{q} - \vec{G} - \vec{G}') = \sum_{\vec{G}''} c(\vec{q} - \vec{G}'') = f(\vec{q}). \quad (9)$$

Usando esta igualdad se obtiene

$$\frac{\omega^2}{c^2} [\epsilon_b - \epsilon_a] \sum_{\vec{G}} \frac{1}{(\vec{q} - \vec{G})^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b} + 1 = 0 \quad (10)$$

o en una forma similar, la relación de dispersión para la propagación de la radiación electromagnética está dada por:

$$\left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_a \right] + \frac{\omega^2}{c^2} [\epsilon_b - \epsilon_a] \left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b \right]^{-1} \quad (11)$$

$$\sum_{\vec{G}=0} \frac{1}{(q-G)^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b} = 0$$

La estructura de bandas fotónicas es obtenida resolviendo esta ecuación de eigenvalores (ω/c) para cada valor de \vec{q} .

En la Fig. 1 se muestra un gráfico de bandas fotónicas para una estructura fcc. Las bandas son graficadas a lo largo de las líneas de simetría más importantes en la primera zona de Brillouin, para el caso donde $\epsilon_a = 5$, $\epsilon_b = 1$. Una cosa importante en notar es que en el límite de red vacía, esto es $v = 0$, la estructura de bandas puede obtenerse como se calcula en los libros clásicos de estado sólido. Es claro que en este límite, la mayoría de los niveles son degenerados, especialmente en los puntos de alta simetría, y para \vec{q} variando desde el punto Γ al extremo de la zona de Brillouin, las curvas de dispersión son líneas rectas. En el límite de longitud de onda grande $q \rightarrow 0$, la relación de dispersión es lineal en las bandas fotónicas:

$$\omega = cq / \epsilon_a^{1/2} \quad (12)$$

La relación de dispersión lineal Ec.(12), observada en ref. (1) se obtiene despreciando el segundo término en la Ec.(11).

Como se mencionó anteriormente, en el caso de la aproximación de la red vacía, los puntos de alta simetría son degenerados. Esas degeneraciones se rompen debido al potencial periódico que introduce brecha de frecuencia prohibidas en el espectro. La magnitud de esas brechas en el extremo de la zona de Brillouin dependen fuertemente de la magnitud de la transformada de Fourier del potencial periódico. En escencia, el potencial mezcla dos o mas modos degenerados dando como resultado un desdoblamiento de la banda.

Este desdoblamiento se puede estimar dentro de la aproximación de fotón casi libre, equivalente a las aproximaciones de electrón casi libre en Teoría de bandas. Por ejemplo, en el punto X el punto \vec{q} y $\vec{q} - \vec{G}$ son degenerados. El potencial periódico rompe esta degeneración con las frecuencias dadas por la Ec.(11), omitiendo el pequeño acoplamiento de las bandas de mayor frecuencia de la condición

$$\left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_a \right] + \frac{\omega^2}{c^2} (\epsilon_b - \epsilon_a) \left[q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b \right]^{-1} \quad (13)$$

$$\frac{1}{(q-G)^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_b} = 0$$

en el punto X $|\vec{q}| = |\vec{q}-\vec{G}|$, por lo tanto el acoplamiento de los dos modos se desdoblan y tenemos dos soluciones:

$$\omega_1 = \frac{cq}{\epsilon_b^{1/2}}, \quad \omega_2 = \frac{cq}{[2\epsilon_a - \epsilon_b]^{1/2}} \quad (14)$$

El desdoblamiento, Ec. (14), corresponde a la brecha de frecuencias prohibidas en el punto X mostrado en la fig. 1.

En resumen, se estudió la naturaleza de las bandas fotónicas en la aproximación escalar, despreciando el carácter vectorial de los campos electromagnéticos y además despreciando la estructura "atómica" del potencial periódico. Consideramos que el carácter vectorial del campo electromagnético es importante en el estudio de las bandas fotónicas, dicho aspecto será considerado en un trabajo posterior.

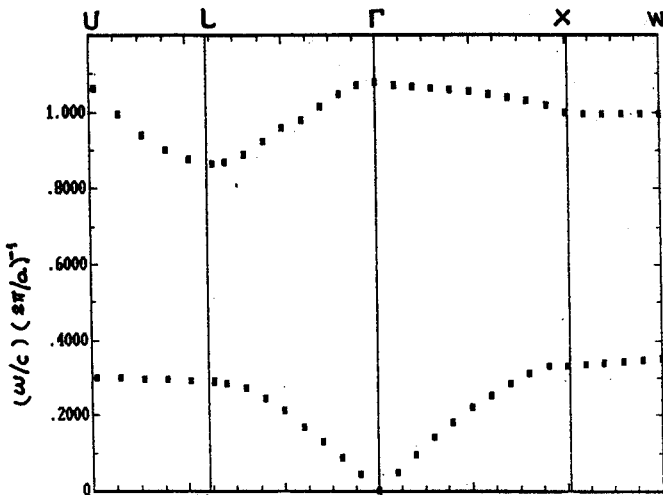


FIG. 1 Bandas fotónicas para una estructura fcc en la aproximación escalar.

REFERENCIAS

1. For a recent review of the field see Scattering and Localization of Classical waves in Random Media, ed. by P. Sheng (World Scient. Singapore, (1990).
2. P.W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958); Philos.Mag. B52, 5050 (1985).
3. S.John, Phys. Rev. Lett. 53, 2169 (1984); Phys. Rev. B31, 304 (1985).
4. P.Sheng and Z.Q. Zhang, Phys. Rev. Lett. 57, 1879 (1986).
5. K.Arya, A.B.Su, and J.L.Birman, Phys. Rev. Lett. 57, 2725(1986).
6. C.A.Codat and T.R.Kirkpatrick, Phys. Rev. Let. 58, 226(1987).
7. C.M. Soukoulis, E. N. Economou, G. S. Grest, and M.H.Cohe, Phys. Rev. Lett. 62, 575 (1989); E.N.Economou and C.M. Soukoulis, Phys., Rev. B40, 7977 (1989).
8. S.John, Phys. Rev. Lett. 58, 2486(1987); S.John and R.Rangarajan, Phys. Rev. B38, 10101 (1988).
9. E.N.Economou and A.Zdetsis, Phys. Rev. B40, 1334 (1989).
10. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).
11. E.Yablonovitch and T.J.Gmitter, Phys. Rev. Lett. 63, 1950(1989); and E. Yablonovitch, in Analogies in Optics and Micro Electronics, ed. by W. van Haeringen and D.Lenstra (Kluwer Academic, Netherlands, 1990) p. 117-133.
12. S.Satpathy, Ze Zhang, and M. R. Salehpour, Phys. Rev. Lett. 64, 1239 (1990).
13. K.M.Ho, C.T.Chan, and C.M. Soukoulis (to be published).
14. G.Kurizki and A.Z.Genack, Phys. Rev. Lett. 61, 2269(1988).
15. J.M.Drake and A.Z.Genack, Phys. Rev. Lett. 63,259 (1989).
16. S.Satpathy, Ze. Zhang and M. R. Salehpour Phys. Rev. Lett. 64, 1239 (1990).
17. K.M.Leung and Y.F. Liv Phys. Rev. 41, 10188 (1990).