

# МЕТОД СООТНОШЕНИЙ ПЕРЕНОСА В ТЕОРИИ РЕЗОНАНСНОГО МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ВОЛН С ПРИМЕНЕНИЕМ К ДИФРАКЦИОННЫМ РЕШЕТКАМ И ФОТОННЫМ КРИСТАЛЛАМ

*Ю. Н. Барабаненков* \*

*Научно-исследовательский центр электронных диагностических систем «Элдис»  
Российской академии наук  
101000, Москва, Россия*

*М. Ю. Барабаненков*

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов  
Российской академии наук  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 6 ноября 2002 г.

Представлен подход в теории многократного рассеяния волновых полей в двумерных неоднородных средах, позволяющий единым образом описывать рассеяние волн на одномерных периодических поверхностях раздела двух диэлектрических сред (оптических решетках) и на двумерных периодических диэлектрических структурах (фотонных кристаллах). Подход основан на методологии трансфер-матриц, состоящей в расслоении рассеивающей среды на элементарные слои с зазорами, но, в отличие от метода трансфер-матриц, приводит к уравнениям инвариантного погружения для матричных коэффициентов отражения и прохождения неоднородной среды. На основе развитого подхода количественно исследованы два оптических явления: резонансное уменьшение коэффициента отражения света от решетки, обусловленное эффектом глубины ее профиля, и экспоненциально-степенной характер затухания оптического излучения в запрещенной зоне двумерного фотонного кристалла по мере увеличения числа его слоев, начиная от одного слоя. Частотный спектр прохождения по мощности электромагнитного излучения через двумерный фотонный кристалл, состоящий из параллельных слоев бесконечных цилиндров, интерпретирован с учетом спектральной зависимости полного сечения рассеяния излучения уединенным цилиндром. Рассмотренная интерпретация частотного спектра с двумя запрещенными зонами совместно с исследованием послышной динамики его формирования позволили выявить роль микроскопического резонансного рассеяния волн на одном цилиндре и макроскопического резонансного рассеяния брэгговского типа на периодической системе цилиндров при формировании спектра прохождения излучения через фотонный кристалл. Дано физическое объяснение появления пиков прозрачности в одной из запрещенных зон спектра прохождения излучения через идеально упорядоченную систему цилиндров в терминах мультипольных резонансов рассеяния уединенным цилиндром.

PACS: 42.70.Qs, 42.79.Dj, 42.25.Bs, 42.25.Fx

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исторически сложилось, что в теории многократного рассеяния волновых полей независимо развивались методы описания рассеяния на неоднородных, в том числе периодических, поверхностях и

в неоднородных (периодических) объемных диэлектрических средах. Рассеяние на поверхности, часто именуемое как поверхностное рассеяние [1], обычно описывается в терминах граничной задачи с применением теории возмущений [2, 3] или рассматривается на основе уравнений Фредгольма, записываемых для граничного поля, с последующим числен-

\*E-mail: Yu.Barab@g23.relcom.ru

ным решением этих интегральных уравнений [4], либо основывается на технике матрицы рассеяния ( $S$ -матрицы) [5]. В теории многократного рассеяния в объемных средах известны три подхода: метод композиции операторов рассеяния Ватсона (техника  $T$ -матрицы) [6], метод инвариантного погружения [7, 8] и получивший недавно распространение метод трансфер-матриц (матриц переноса) [9].

Интенсивные экспериментальные исследования рассеяния электромагнитных волн на структурах с периодическим диэлектрическим «потенциалом» (оптические решетки, фотонные кристаллы) и шероховатых поверхностях стимулировали разработку нескольких новых теоретических методов. Описание ряда оптических резонансных явлений на решетках, как-то: «перпендикулярных» аномалий Вуда [10], связываемых с возбуждением в решетке поверхностных плазмонов [11] падающей волной с ненулевой нормальной к невозмущенной поверхности составляющей электрического вектора, подавления зеркального отражения света [12], гигантского комбинационного рассеяния [13], а также аномального поглощения света шероховатой поверхностью [14] и когерентного усиления обратного рассеяния света шероховатой поверхностью раздела многомодовой волноводной структуры [15], — уже не ограничивалось традиционной дифракционной задачей, сформулированной в терминах уравнений Фредгольма [16, 17]. С помощью приближенных граничных условий в виде поверхностного импеданса [18, 19] вычислялись точно [20] или приближенно [21] возбужденные на поверхности волны, либо ставилась задача о волновом поле в переходной области возмущенной поверхности [20] по аналогии с расчетом распространения волн в периодической слоистой объемной структуре [22].

Инициированные Яблоновичем и Джоном [23] исследования фотонных кристаллов привели к появлению новых методов расчета коэффициентов отражения и прохождения волн для периодических объемных структур, вычисления локальных полей в них и расчета зонного характера их частотного спектра, появление которого обусловлено геометрическим резонансом при брэгговском рассеянии волн. Укажем на метод плоских волн [24–26], алгоритм удвоения слоя [27, 28], наследованный из теории дифракции низкоэнергетичных электронов [29], а также метод конечных элементов [30, 31], основанный на дискретизации уравнений Максвелла, проводимой в реальном пространстве, и упомянутой выше технике трансфер-матриц [9].

Метод плоских волн и алгоритм удвоения слоя

сводятся к матричному уравнению Фредгольма, что характерно для задач поверхностного рассеяния в их традиционной формулировке [4]. В то же время метод эффективного потенциала поверхностного рассеяния, хотя и примененный [15] в рамках гипотезы Рэлея к исследованию явления когерентного усиления обратного рассеяния, наряду с техникой  $S$ -матрицы [5] и методом конечных элементов [30, 31], близким к методу инвариантного погружения [7, 8], можно уже рассматривать как шаг к единообразному описанию поверхностного и объемного многократного рассеяния электромагнитных волн.

С практической точки зрения разработка унифицированного подхода к проблеме многократного рассеяния оптического излучения подталкивается минитюаризацией оптических и оптоэлектронных структур, исключающей возможность однозначного разделения их поверхности и объема, как, например, в случае плоского микросветовода, поверхностью которого является слой коллоидного гексагонального кристалла из сфер [32].

В настоящей работе развит единый точный подход к теоретическому описанию многократного резонансного рассеяния волн на одномерных периодических поверхностях раздела двух диэлектрических сред (оптических решетках) и на двумерных ( $2D$ ) периодических диэлектрических структурах (фотонных кристаллах). Подход является дальнейшим развитием методологии трансфер-матриц [9], состоящей, как известно, в виртуальном расслоении рассеивающей среды на элементарные непересекающиеся слои. Развитие методологии, проведенное в соответствии с методом соотношений переноса [33], состоит в учете рассеяния переходной неоднородной области периодической поверхности или отдельных рассеивателей периодической объемной структуры. С физической точки зрения, применимость трансфер-матриц и к решеткам, и к фотонным кристаллам основана, как показано при выводе соотношений переноса [33], на возможности представления фотонных кристаллов в виде стопки соответствующих решеток.

В работе записаны уравнения инвариантного погружения для матричных волновых коэффициентов отражения и прохождения периодической поверхности (оптической решетки). Показано, что те же уравнения с соответствующим образом измененными коэффициентами применимы и в случае фотонных кристаллов. Эффективность предложенного подхода демонстрируется на примере исследования двух оптических явлений: 1) «параллельных» аномалий

на решетках, обнаруженных еще Вудом [34], детально исследованных в экспериментах Палмер [35] и по физической сущности не связанных с возбуждением поверхностных плазмонов (электрический вектор падающей волны параллелен образующей рельефа решетки), в отличие от упомянутых выше «перпендикулярных» аномалий [10]; 2) зависимости глубины проникновения оптического излучения в фотонную  $2D$ -структуру по мере увеличения числа ее слоев и при условии, что частота излучения лежит в запрещенной зоне частотного спектра прохождения структуры. Частотный спектр прохождения по мощности упорядоченной системы бесконечных диэлектрических цилиндров интерпретирован с помощью спектральной зависимости полного сечения рассеяния падающего электромагнитного поля уединенным цилиндром. Сопоставление полойной динамики формирования запрещенной зоны спектра прохождения фотонного  $2D$ -кристалла с глубиной затухания волнового поля в слое дискретной случайной сильнорассеивающей диэлектрической  $2D$ -среды, рассчитанной согласно самосогласованной теории локализации [36], позволило провести исследование гипотезы Джона [23] о существенно вероятной реализации явления сильной локализации фотонов в упорядоченной среде с умеренным беспорядком, подавляющим когерентное обратное рассеяние фотонов по некоторым из брэгговских направлений.

## 2. УРАВНЕНИЕ РИККАТИ ДЛЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ОДНОМЕРНОЙ ПОВЕРХНОСТИ И В ДВУМЕРНОЙ ОБЪЕМНОЙ СТРУКТУРЕ

Рассмотрим рассеяние плоской монохроматической электромагнитной волны на периодической одномерной ( $1D$ ) поверхности  $z = f(x)$  раздела двух диэлектрических сред, занимающих верхнее и нижнее полупространства в декартовой системе координат  $x, y, z$ . Пусть периодическая поверхность имеет треугольный профиль в плоскости  $xz$ , вытянутый вдоль оси  $y$  (см. рис. 1а). Плоская линейно поляризованная волна длиной волны  $\lambda$  падает из верхнего полупространства,  $z > f(x)$ , диэлектрическая проницаемость которого  $\epsilon^{bac}$ . Нижнее полупространство,  $z < f(x)$ , состоит из переходной области  $0 < z < f(x)$  и подложки  $-L_o < z < 0$ , имеющих одинаковую диэлектрическую проницаемость  $\epsilon$ , и полуограниченной среды  $z < -L_o$ , аналогичной среде верхнего полупространства. Рассматривается

случай  $TE$  (или  $s$ )-поляризации, что позволяет свести векторные уравнения Максвелла к скалярному волновому уравнению Гельмгольца.

Согласно методу соотношений переноса [33] переходная область расслаивается на систему элементарных слоев, перпендикулярных оси  $z$ , разделенных исчезающе малыми зазорами. Правило Ватсона [6] композиции операторов рассеяния ( $T$ -матриц) системы слоев приводит к смешанной системе точных матричных уравнений (соотношений переноса) для матричных волновых коэффициентов отражения и прохождения системы элементарных слоев и матричных волновых амплитуд волн в зазорах между слоями (локальные поля). Соотношения переноса позволяют записать обобщенное дифференциальное уравнение Риккати для матричного волнового коэффициента отражения и ассоциированное дифференциальное уравнение для матричного волнового коэффициента прохождения периодической поверхности, а также дифференциальное уравнение для локальных полей в переходной области. Параметр погружения этих дифференциальных уравнений с «начальными» (или «конечными») условиями выбран вдоль оси  $z$ .

Уравнение Риккати, записанное для матричного коэффициента  $R_{\mu\nu}(k_{ox})$  отражения усеченной переходной областью, т.е. отражения вспомогательной поверхностью  $\xi = f(x, z)$ , являющейся сечением переходной области плоскостью  $z = \text{const}$ , имеет вид

$$\frac{dR}{dz} - i(\sigma R + R\sigma) = aF(z) + aF(z)R + RaF(z) + RaF(z)R \quad (1)$$

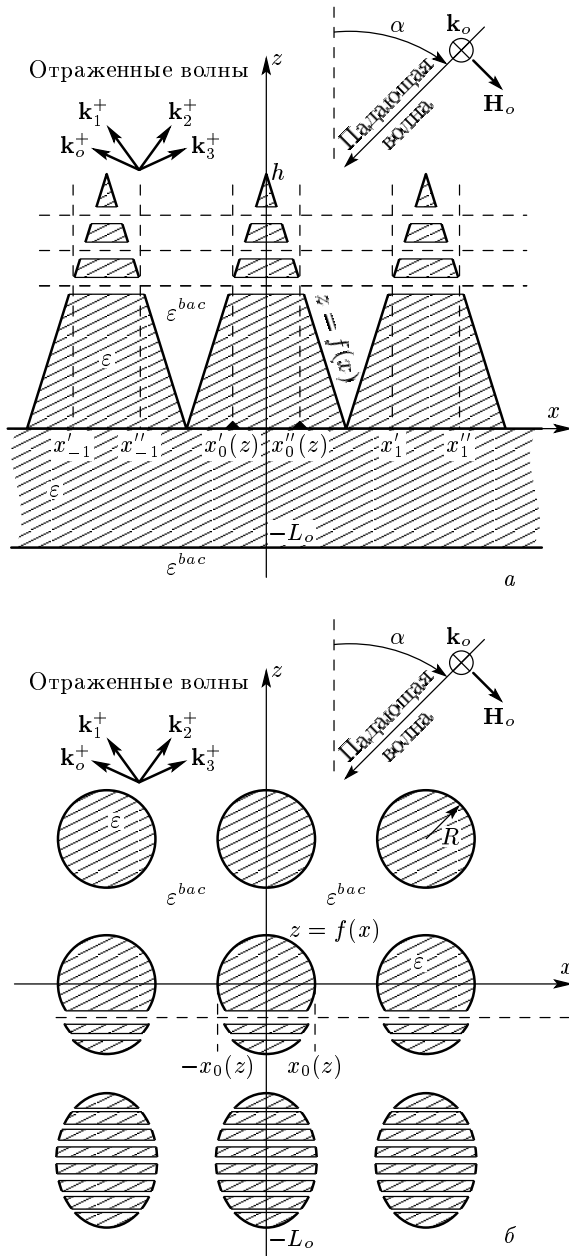
при  $0 < z < h$ . «Начальным» условием для уравнения Риккати является коэффициент отражения подложки  $R(k_{ox})$ , т.е. условие  $R_{\mu\nu}(k_{ox}) \rightarrow R(k_{ox} + 2\pi\nu/\Lambda)\delta_{\mu\nu,0}$  при  $z \rightarrow 0$ . Здесь  $h$  — максимальная глубина профиля поверхности,  $\delta_{\mu\nu}$  — символ Кронеккера. Индексы  $\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  нумеруют дифрагированные и падающие спектральные порядки. В частности,  $\nu = 0$  соответствует падению плоской волны, а  $\mu = 0$  — направлению зеркального отражения.

Уравнение Риккати (1) имеет два коэффициента,  $\sigma$  и  $a$ , являющиеся диагональными матрицами с элементами вида

$$\sigma(\mu) = [k_o^2 - (k_{ox} + 2\pi\mu/\Lambda)^2]^{1/2},$$

$$2\pi a(\mu) = -iV_o/\sigma(\mu).$$

Здесь  $\Lambda$  — период модуляции поверхности,  $V_o = -k_o^2(\epsilon - \epsilon^{bac})/\epsilon^{bac}$  — диэлектрический потенциал;



**Рис. 1.** Схематическое изображение расслоения переходной области между двумя диэлектрическими средами на вспомогательные слои с зазорами. Переходная область имеет вид: *a* — периодической поверхности с треугольным профилем на подложке толщиной  $L_0$ ; *b* — двумерной объемной структуры, в частности, системы параллельных слоев, начиная от одного слоя, бесконечных цилиндров радиуса  $R$ , вытянутых вдоль оси  $y$ , образующей квадратную решетку (начиная с двух слоев) с периодом  $\Lambda$ . Вектор напряженности электрического поля  $\mathbf{E}_0$  плоской волны, падающей под углом  $\alpha$ , параллелен оси  $y$ , ( $TE$ -поляризация). Волновой вектор  $\mathbf{k}_0$  и магнитный вектор  $\mathbf{H}_0$  волны лежат в плоскости падения  $xz$

$k_0 = (\omega/C)(\epsilon^{bac})^{1/2}$  — волновое число оптического излучения,  $\omega$  и  $C$  — циклическая частота излучения и скорость света в свободном пространстве.

Физический смысл коэффициента  $\sigma(\mu)$  заключается в том, что диагональ этой матрицы составлена из  $z$ -компонент волновых векторов  $\mathbf{k}_\mu^+$  излучения, рассеянного в  $\mu$ -й дифракционный порядок. Вектор  $\mathbf{k}_\mu^+$  имеет  $x$ -компоненту  $k_{\mu x}^+ = k_{0x} + 2\pi\mu/\Lambda$ , где  $k_{0x} = -k_0 \sin \alpha$ . Через  $\alpha$  обозначен угол падения волны.

Матрица  $F_{\mu\nu}(z) \equiv F_{\mu-\nu}(z)$  с элементами

$$F_\mu(z) = \frac{1}{\mu} \sin \frac{2\pi\mu X_0(z)}{\Lambda} \quad (2)$$

описывает в уравнении (1) взаимное преобразование однородных и неоднородных волн, происходящее при их многократном рассеянии на периодической поверхности. В матричных элементах (2) через  $X_0(z)$  обозначен корень уравнения  $f(x) = f(-x) = z$  при  $0 \leq x \leq \Lambda/2$ .

Среди всех элементов матричного коэффициента отражения  $R_{\mu\nu}$ , соответствующего  $z = h$ , физический смысл имеют только элементы первого столбца  $R_{\mu 0}$ . Действительно, из записи выражения для  $y$ -компоненты напряженности электрического поля волны в верхнем полупространстве  $z > h$ ,

$$E_y(\mathbf{r}) = \exp[i\mathbf{k}_0(\mathbf{r} - h\hat{z})] + \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} R_{\mu 0}(k_{0x}; h) \exp[i\mathbf{k}_\mu^+(\mathbf{r} - h\hat{z})], \quad (3)$$

где через  $\hat{z}$  обозначен орт оси  $z$ , видно, что отраженное от периодической поверхности поле дается слагаемым в виде суммы произведений экспоненциального множителя и частичного коэффициента отражения  $R_{\mu 0}$  падающей на решетку волны.

По аналогии с уравнением Риккати (1) записывается ассоциированное с ним уравнение для матричного волнового коэффициента  $\mathcal{T}_{\mu\nu}(k_{0x})$  прохождения излучения через усеченную периодическую поверхность:

$$d\mathcal{T}/dz - i\mathcal{T}\sigma = \mathcal{T}aF(z) + \mathcal{T}aF(z)R \quad (4)$$

при  $0 < z < h$  с «начальным» условием  $\mathcal{T}_{\mu\nu}(k_{0x}) \rightarrow \mathcal{T}(k_{0x} + 2\pi\nu/\Lambda)\delta_{\mu-\nu,0}$  при  $z \rightarrow 0$ . Здесь  $\mathcal{T}(k_{0x})$  — коэффициент прохождения подложки.

Компонента  $y$  напряженности электрического по-

ля волны в нижнем полупространстве  $z + L_o < 0$  дается выражением

$$E_y(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \mathcal{T}_{\mu o}(k_{ox}; h) \exp \{i\mathbf{k}_{\mu}^{-} [\mathbf{r} + (z + L_o)\hat{\mathbf{z}}]\}. \quad (5)$$

Здесь через  $\mathbf{k}_{\mu}^{-}$  обозначен волновой вектор  $\mu$ -й моды в угловом спектре прошедшего излучения; волновой вектор имеет компоненты  $k_{\mu x}^{-} = k_{\mu x}^{+}$  и  $k_{\mu z}^{-} = -\sigma(\mu)$ . Формулы (3) и (5) представляют собой разложение электрического поля волны по спектральным порядкам (распространяющимся и затухающим вдоль оси  $z$ ) отраженного от периодической поверхности и прошедшего через нее излучения. Подстановка этих формул в определение вектора Пойнтинга  $\mathbf{\Pi}$  приводит к выражениям для плотности потока энергии отраженного и прошедшего электромагнитного поля

$$\Pi_z(z = h) = k_{oz} + \sum_{\mu} k_{\mu z}^{+} |R_{\mu o}(k_{ox}; h)|^2, \quad (6)$$

$$\Pi_z(z = -L_o) = \sum_{\mu} k_{\mu z}^{-} |\mathcal{T}_{\mu o}(k_{ox}; h)|^2, \quad (7)$$

в которых суммирование проводится только по однородным спектральным порядкам, определяемым неравенством  $|k_{ox} + 2\pi\mu/\Lambda| \leq k_o$ . Заметим, что в непоглощающих диэлектрических средах формулы (6) и (7) должны приводить к одинаковому значению плотности потока энергии поля (теорема Пойнтинга).

В численных расчетах бесконечная система уравнений (1) усекалась до системы  $15 \times 15$  уравнений, по которым методом Рунге-Кутты рассчитывались коэффициенты отражения  $R_{\mu\nu}$  в спектральные порядки  $\mu, \nu = 0, \pm 1, \dots, \pm 7$ .

### 3. АНОМАЛИИ ВУДА

Из литературы (см., например, [21]) известно, что коэффициент отражения  $TE$ -поляризованной волны от дифракционной решетки может резко возрасти при определенных значениях периода решетки, либо же напротив резко уменьшиться при определенных значениях глубины ее профиля. Резонансное увеличение отражения (так называемый рэлеевский тип аномалий Вуда [34]) рассмотрено на примере металлической решетки для демонстрации эффективности численного счета по методу соотношений переноса [33]. В данной работе впервые количественно описан эффект резонансной прозрачности

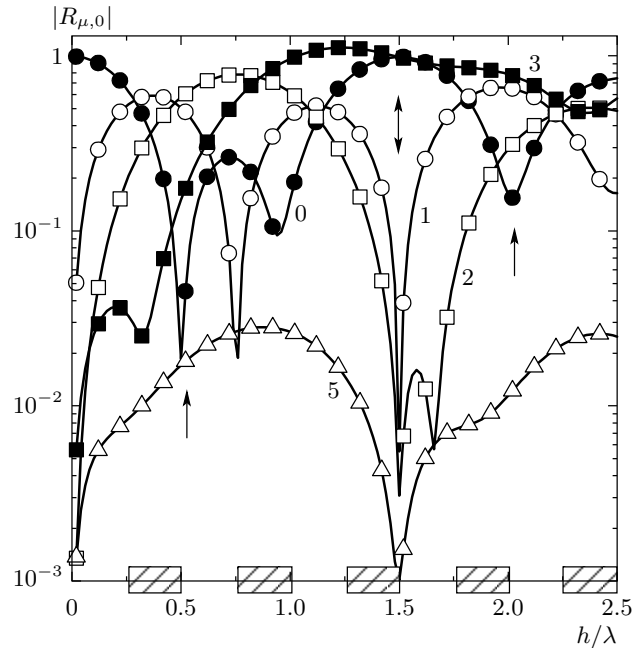


Рис. 2. Модуль частичного коэффициента отражения  $|R_{\mu,0}|$  в  $\mu$ -й спектральный порядок  $TE$ -поляризованной плоской электромагнитной волны ( $\lambda = 632.8$  нм в среде  $\epsilon^{bac} = 1$ ) от серебряной решетки ( $\epsilon = -17.5 + i \cdot 0.7$ ,  $\lambda/\Lambda = 1/3 + 10^{-7}$ ) в зависимости от глубины профиля решетки  $h/\lambda$  при нормальном падении волны  $\alpha = 0$  и полубесконечной подложке  $L_o \rightarrow \infty$ . Кривые помечены номерами дифракционных порядков, которым они соответствуют. Прямоугольники на оси абсцисс иллюстрируют неравенства (8)

решетки, известный как «параллельные» аномалии Вуда [34], исследованные в работах [18, 35].

На рис. 2 приведена рассчитанная по уравнению Риккати (1) зависимость модуля коэффициента отражения для нескольких спектральных порядков от глубины  $h/\lambda$  профиля треугольной серебряной решетки с периодом  $\lambda/\Lambda = 1/3 + 10^{-7}$ . В случае треугольного профиля решетки (рис. 1) функция  $X_o(z)$  в матрице трансформации волн (2) имеет вид  $X_o(z) = (\Lambda/2)(1 - z/h)$ . При нормальном падении волны,  $\alpha = 0$ , однородные спектральные порядки определяются неравенством  $1/|\mu| \geq \lambda/\Lambda = 1/3 + 10^{-7}$ , т.е.  $|\mu| < 3$ .

Обсудим результаты, приведенные на рис. 2. Во-первых, три минимума на кривой с нулевым номером означают частичное подавление зеркального отражения [12]. Кроме того, минимумы на кривых, отвечающих различным спектральным порядкам, совпадают с экспериментальными результатами

ми [35], обобщенными в [18] в виде неравенств

$$n/2 > h/\lambda > (2n - 1)/4, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

и представленными на рис. 2 посредством закрашенных прямоугольников на оси абсцисс. Во-вторых, минимуму на кривой, соответствующей распространяющейся моде (см. три стрелки на рисунке), соответствует максимум на кривой, соответствующей затухающей моде, что свидетельствует о существенном перераспределении энергии падающего излучения между различными спектральными порядками отраженного поля. В-третьих, коэффициент отражения для спектрального порядка  $\mu = 3$  близок к единице, за исключением решетки с мелким профилем  $h/\lambda < 0.75$ . Этот результат представляет интерес для спектроскопии ближнего поля, так как третья мода, будучи скользкой (угол скольжения  $0.04^\circ$ ) и затухающей (вдоль оси  $z$ ), не уносит энергии поля от поверхности. И, последнее, каждый из минимумов частотной зависимости коэффициента отражения, как показывают исследования, можно дополнительно усилить за счет наклонного падения волны при фиксированном значении глубины профиля решетки. Однако при угле падения  $\alpha > 70^\circ$  коэффициент отражения (модуль и фаза) практически не зависит от глубины профиля решетки.

Таким образом, расчеты, проведенные для металлической (рис. 2) и, кроме того, диэлектрической ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\epsilon = 4.41$ ) решеток, подтверждают предположение [35] о том, что причиной «параллельных» аномалий коэффициента отражения электромагнитной волны от решетки является многократное отражение волны между склонами двух соседних гребней решетки, т. е. эффект глубины ее профиля.

#### 4. ДВУМЕРНЫЕ ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Уравнение Риккати (1) и ассоциированное с ним уравнение (4) могут быть непосредственно использованы для расчета коэффициентов отражения и прохождения  $TE$ -поляризованной плоской волны от и через фотонный  $2D$ -кристалл, состоящий из слоев стержней, ориентированных в каждом слое вдоль оси  $y$  и формирующих треугольную [25, 31] или прямоугольную [26] ячейку в сечении  $xz$ . Изменение претерпевает только вид выражения  $X_o$  в функции взаимной трансформации мод (2). В частном случае квадратной решетки с периодом  $\Lambda$ , составленной из цилиндров радиуса  $R$  (см. рис. 1б), функция  $X_o$  дается выражением  $X_o(z) = [R^2 - (z - n\Lambda)^2]^{1/2}$ , если выполняется неравенство  $-R + n\Lambda < z < R + n\Lambda$ , т. е.

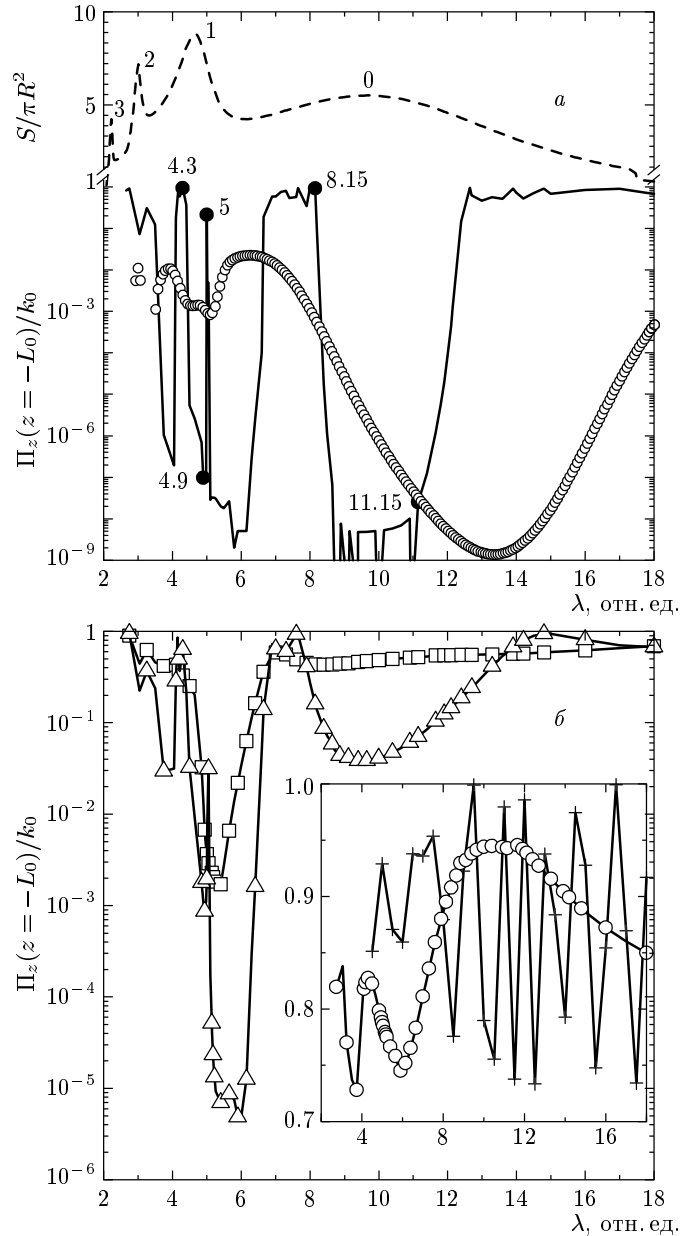


Рис. 3. Рассчитанные по уравнению (1) и теореме Пойнтинга частотные спектры прохождения по мощности  $TE$ -поляризованной волны, нормально падающей ( $\alpha = 0$ ) из среды ( $\epsilon^{bac} = 1$ ) через  $N$  слоев цилиндров ( $R = 0.6$ ,  $\epsilon = 2.9^2$ ,  $\Lambda = 4$ ) без подложки ( $L_o = 0$ ): а —  $N = 18$  (сплошная кривая); б —  $N = 2$  ( $\square$ ),  $N = 4$  ( $\triangle$ ); на вставке:  $N = 1$  ( $\circ$ ),  $N = 18$  ( $+$ , неоднородные спектральные порядки исключены из расчета). На рис. а штриховая линия — частотная зависимость полного сечения  $S$  рассеяния на единицу длины бесконечного уединенного цилиндра;  $\circ$  — частотный спектр прозрачности слоя толщиной  $L = 18\Lambda$  среды ( $\epsilon^{bac} = 1$ ), заполненной случайно расположенными параллельными цилиндрами с плотностью  $n = 1/\Lambda^2$  и сечением рассеяния  $S(\lambda)$

секущая плоскость  $z = \text{const}$  находится в пределах слоя цилиндров с номером  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Если же секущая плоскость находится между слоями цилиндров, то матрица (2) имеет нулевые элементы.

В случае непоглощающего материала ( $\text{Im} \varepsilon = 0$ ) прозрачность (7) системы цилиндров по мощности падающего электромагнитного поля может быть вычислена на основе уравнения Риккати (1) и теоремы Пойнтинга, т. е. без решения уравнения (4). На рис. 3 и 4 представлены результаты такого способа расчета спектральной прозрачности по мощности системы бесконечных цилиндров радиуса  $R = 0.6$  и диэлектрической проницаемости  $\varepsilon = (2.9)^2$ , упакованных в воздухе ( $\varepsilon^{\text{bac}} = 1$ ) в квадратную решетку с периодом  $\Lambda = 4$ . Фактор заполнения пространства цилиндрами  $n^* = \pi R^2 / \Lambda^2 \approx 7\%$ . Значения параметров даны в безразмерном виде [37].

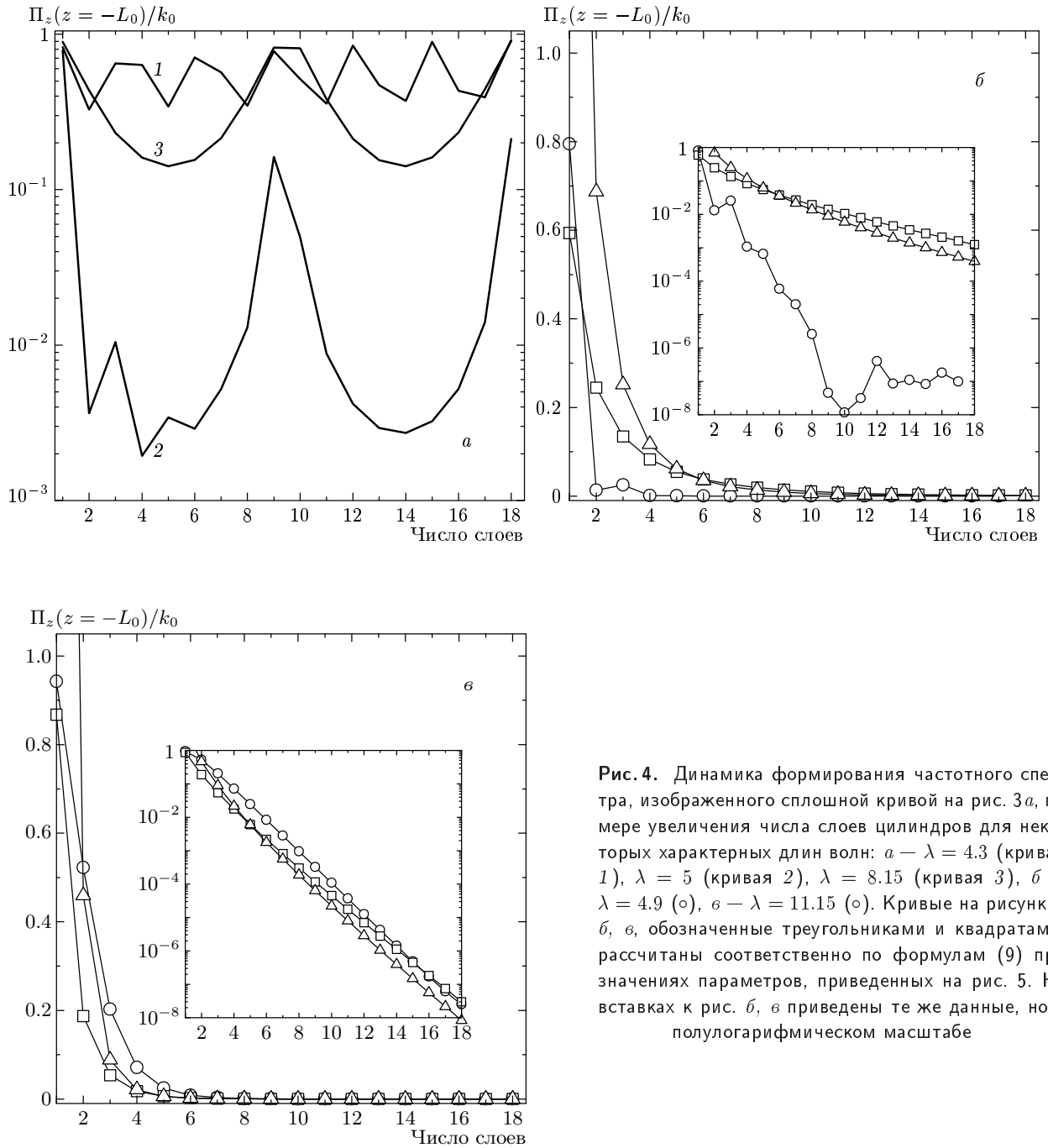
Сплошная кривая на рис. 3а показывает, что упорядоченная система цилиндров при выбранных численных значениях параметров проявляет свойства фотонной структуры. Частотный спектр прохождения по мощности имеет два диапазона практически полного отражения нормально падающего волнового поля (запрещенные зоны или зоны блеска), разделенные областью прозрачности. Запрещенные зоны назовем основной ( $8.2 \leq \lambda \leq 12.4$ ) и дополнительной ( $3 \leq \lambda \leq 6.5$ ). В дополнительной зоне имеются резкие всплески прохождения по мощности. Отметим, что на рис. 4 работы [37] приведена только основная запрещенная зона. Диапазон более коротких волн авторами не рассматривается. В то же время теоретический спектр фотонной 2D-структуры из твердых цилиндров в воздухе ( $\varepsilon = 10$ ,  $n^* = 0.28\%$ ), приведенный на рис. 3а работы [38], имеет две запрещенные зоны; зона блеска в диапазоне более коротких волн не имеет всплесков прохождения. Их отсутствие, может быть, обусловлено различием в диэлектрическом контрасте и геометрических характеристиках упорядоченной системы цилиндров, как-то, числе слоев цилиндров, радиусе цилиндров и постоянной решетки. В работе [38] не приведены значения  $R$  и  $\Lambda$ , а в величине фактора заполнения есть разночтение: в подписи к рис. 1, переносимой на рис. 3а, указан фактор 28%, а в начале третьей части — фактор в сто раз меньший.

Интерпретируем прозрачность фотонного 2D-кристалла на основе двух явлений: макроскопического многократного рассеяния брэгговского типа на периодическом «потенциале» и микроскопического резонансного рассеяния Ми (Mie) оптического излучения на уединенном «потенциале» (цилиндре). С этой целью на рис. 3а приведена частотная

зависимость полного сечения рассеяния на единицу длины бесконечного уединенного цилиндра. Зависимость, рассчитанная по формуле (38) работы [39] и приведенная штриховой кривой, имеет несколько максимумов, обусловленных мультипольностью рассеяния и соответственно пронумерованных от 0 до 3. Укажем, что пик монополюсного рассеяния (возбуждение основной нулевой собственной моды) на цилиндре данного радиуса и диэлектрического контраста приходится на  $\lambda = 9.7$ ; дипольный (пик 1), квадрупольный (пик 2) и октупольный (пик 3) резонансы возбуждаются при  $\lambda = 4.67, 3.01$  и  $2.22$  соответственно.

Сопоставим сплошную и штриховую линии на рис. 3а. Как видно, максимум монополюсного рассеяния приходится приблизительно на середину запрещенной зоны спектра фотонного кристалла. Это соответствие было отмечено как неожиданный факт в работе [40] по разработке метода линейной комбинации резонансов Ми для решения задач многократного рассеяния в дискретных случайных и упорядоченных 2D-средах [38]. Расчеты, проведенные в настоящей работе по уравнению Риккати (1), позволяют указать на корреляцию между частотой возбуждения нулевой собственной моды уединенного цилиндра и частотным положением основной запрещенной зоны в спектре прохождения упорядоченной системы цилиндров. Существенно то, что корреляция имеет место при величине фактора заполнения пространства цилиндрами  $n^*$  из интервала значений  $3 \leq n^* \leq 20\%$ , что соответствует изменению радиуса цилиндров в пределах  $0.4 \leq R \leq 1$  при фиксированном значении  $\Lambda = 4$ . Как показывает исследование, пик монополюсного рассеяния (пик 0 на рис. 3а) сдвигается в сторону более длинных волн при увеличении радиуса цилиндра. Такое же смещение претерпевает и основная запрещенная зона. Вне интервала  $0.4 \leq R \leq 1$  пик монополюсного рассеяния на цилиндре смещается от диапазона длин волн запрещенной зоны в коротковолновую ( $R < 0.4$ ) или длинноволновую ( $R > 1$ ) сторону.

Таким образом, частотное положение запрещенной зоны фотонной 2D-структуры, характеризуемой фактором заполнения из диапазона  $3 \leq n^* \leq 20\%$  при данном диэлектрическом контрасте, определяется частотой возбуждения нулевого резонанса в уединенном цилиндре. При этом не обнаружено корреляции между амплитудой и шириной пика монополюсного рассеяния и амплитудой и шириной запрещенной зоны. В то время как пик монополюсного рассеяния растет по амплитуде и уширяется с увеличением радиуса цилиндра, запрещенная зона в спек-



**Рис. 4.** Динамика формирования частотного спектра, изображенного сплошной кривой на рис. 3а, по мере увеличения числа слоев цилиндров для некоторых характерных длин волн: а —  $\lambda = 4.3$  (кривая 1),  $\lambda = 5$  (кривая 2),  $\lambda = 8.15$  (кривая 3), б —  $\lambda = 4.9$  (○), в —  $\lambda = 11.15$  (○). Кривые на рисунках б, в, обозначенные треугольниками и квадратами, рассчитаны соответственно по формулам (9) при значениях параметров, приведенных на рис. 5. На вставках к рис. б, в приведены те же данные, но в полулогарифмическом масштабе

тре упорядоченной системы цилиндров углубляется и уширяется, проходя максимальные значения, а затем сужается и мельчает.

Условия резонансного рассеяния падающего монохроматического излучения объемной модой  $M_{10}$ , возбуждаемой в уединенном цилиндре,  $2\pi R/\lambda \ll 1$  и  $2\pi R/\lambda_1 \sim 1$ , где  $\lambda_1 = \lambda/\sqrt{\epsilon}$ , дают оценку  $\lambda \sim 2\pi R\sqrt{\epsilon} \sim 10.9$  (сравните, максимум монополь-

ного рассеяния наблюдается при  $\lambda \sim 9.7$ ; штриховая кривая рис. 3а). Отстроимся по длине волны от монопольного резонанса. Более длинные волны ( $\lambda \geq 12.4$ ) не приводят к возбуждению собственных мод цилиндра; сечение рассеяния на уединенном цилиндре монотонно уменьшается; решетка из цилиндров становится практически прозрачной (см. рис. 3а). При смещении от частоты монопольного



резонанса в сторону меньших длин волн сечение рассеяния цилиндра имеет немонотонный характер вследствие возбуждения более высоких собственных мод цилиндра. Как видно на рис. 3а, спектральная ширина пика дипольного рассеяния (пик 1) совпадает с шириной дополнительной запрещенной зоны фотонной структуры. Причем плавное изменение сечения рассеяния цилиндра между дипольным (пик 1) и монополюсным (пик 0) резонансами обуславливает монотонный характер правого края дополнительной запрещенной зоны. И, напротив, квадрупольный и октупольный резонансы (пики 2 и 3 на штриховой кривой) на коротковолновом склоне пика дипольного рассеяния приводят к сложной структуре коротковолнового края дополнительной запрещенной зоны фотонной структуры. Подчеркнем, что сопоставление пиков дипольного и более высокой мультипольности рассеяния с дополнительной запрещенной зоной и характером ее краев также справедливо при величине фактора заполнения фотонного  $2D$ -кристалла в диапазоне значений  $3 \leq n^* \leq 20\%$ .

Рассмотренное соответствие между условиями возбуждения собственных мод уединенного цилиндра и формирования запрещенных зон в частотном спектре упорядоченной системы цилиндров является одной из двух причин, по которой две зоны блеска фотонной структуры названы основной (нулевая мода цилиндра) и дополнительной (более высокие моды). Другая причина связана с тем, как формируются эти зоны с ростом числа слоев цилиндров. Практически полное отражение волн из диапазона  $8.2 \leq \lambda \leq 12.4$  наблюдается (см. рис. 3б) лишь для совокупности некоторого (практически небольшого) числа слоев цилиндров, т. е. основная запрещенная зона присуща именно кристаллу. Дополнительная запрещенная зона формируется, начиная с одного слоя (см. кривую из кружков на вставке и кривую из квадратов на рис. 3б). Отметим, что всплески прозрачности (см.  $\lambda = 4.3$  и  $5$  на рис. 3а) в дополнительной зоне наблюдаются уже на слое цилиндров (дифракционной решетке), разрешаясь по частоте при увеличении числа решеток (рис. 3б).

По поводу результатов, представленных на рис. 3 и 4, сделаем четыре замечания. Во-первых, два узких пика ( $\lambda = 4.3$  и  $5$  на рис. 3а) визуально схожи со всплесками прозрачности в запрещенной зоне фотонных структур, появление которых обычно обусловлено нарушением периодичности структур, т. е. внесением структурных дефектов (см., например, [40, 37]). В нашем случае спектры рис. 3 соответствуют идеальному  $2D$ -кристаллу. Тем не менее всплески прозрачности,  $\lambda = 4.3$  и  $5$ , можно объ-

яснить появлением в структуре эффективных дефектов, природа которых состоит в следующем. При возбуждении падающим электромагнитным излучением все более высоких собственных мод цилиндра аккумулированное в цилиндре поле концентрируется во все более тонком приповерхностном слое. Происходит радиальное расслоение аккумулированного поля. Расслоение, происходящее при дипольном и более высокой мультипольности рассеянии на цилиндре с постоянной диэлектрической проницаемостью, возможно пытаться смоделировать при монополюсном рассеянии на цилиндре с радиально неоднородной диэлектрической функцией. Наличие неоднородной диэлектрической проницаемости у некоторых цилиндров приводит к тому, что совершенная фотонная структура как бы приобретает динамические дефекты в некотором частотном диапазоне дифрагирующего на ней излучения. Заметим, что изменение диэлектрической проницаемости рассеивателей является одним из трех способов внесения разупорядочения в фотонные структуры [38].

Во-вторых, как видно на рис. 4а, прозрачность фотонной структуры из цилиндров на длинах волн  $\lambda = 4.3$  и  $5$  имеет различную динамику изменения при увеличении числа слоев цилиндров. Именно, прозрачность изменяется слабо на длине волны  $\lambda = 4.3$  (кривая 1) и более чем на порядок величины и со значительно большей периодичностью по числу слоев на длине  $\lambda = 5$  (кривая 2). Для сравнения на том же рисунке приведен некоторый промежуточный режим (кривая 3).

В третьих, вставка на рис. 3б иллюстрирует роль неоднородных спектральных порядков, возникающих при дифракции  $TE$ -поляризованной волны на периодической  $2D$ -структуре. Кривая из крестиков изображает спектр пропускания по мощности 18 слоев цилиндров в отсутствие взаимного преобразования однородных и неоднородных волн. Взаимная трансформация этих волн исключалась в расчетах путем проведения суммирования в уравнении Риккати (1) только по однородным спектральным порядкам (как в компоненте вектора Пойнтинга (7)). Расчет показывает определяющую роль взаимного перераспределения энергии дифрагирующего поля между распространяющимися и затухающими (вдоль оси  $z$ ) дифракционными порядками в формировании частотного спектра с запрещенной зоной. Если в процессе многократного рассеяния электромагнитного излучения между цилиндрами фотонной структуры энергия поля перераспределяется только между распространяющимися модами, то амплитуда изменения прозрачности 18 слоев ци-

линдров (см. кривую, обозначенную крестиками, на вставке рис. 3б) порядка амплитуды изменения прозрачности одного слоя цилиндров (см. кривую, обозначенную кружками), но рассчитанной с учетом и неоднородных мод.

И последнее, четвертое, замечание состоит в том, что для формирования на практике фотонной 2D-структуры нет необходимости изготовления 18 слоев цилиндров. Рисунок 3б иллюстрирует, что в спектре прохождения двух слоев (□) уже формируется спектрально узкая зона блеска по уровню прохождения 0.1% от мощности падающего электромагнитного поля; четыре слоя цилиндров (△) имеют более широкую и глубокую (по уровню 10<sup>-3</sup>%) запрещенную зону в диапазоне волн 5 ≤ λ ≤ 6 и мелкую (по уровню ~ 5%), но широкую зону в длинноволновой части спектра.

Обратимся теперь к исследованию динамики формирования зон блеска фотонной 2D-структуры по мере увеличения числа составляющих структуру слоев цилиндров. Темп изменения прозрачности структуры сопоставим с выведенным в самосогласованной теории локализации [36] экспоненциально-степенным характером спада прохождения скалярных классических волн через слой дискретной случайной среды. Рисунки 4б, в демонстрируют динамику формирования запрещенных зон (○) в частотном спектре фотонного 2D-кристалла (сплошная кривая на рис. 3а) на примере двух волн, длины которых приходятся на дополнительную (λ = 4.9) и основную (λ = 11.15) запрещенные зоны. На этих же рисунках приведены результаты расчетов прохождения волн через слой случайной среды в зависимости от числа слоев (см. формулы (23) и (24) работы [36]),

$$T_{loc} = \begin{cases} (\ell_e/N)^2 \exp(-N/N_o), & \text{если } \xi > L, \\ (a/N) \exp(-N/N_o), & \text{если } \xi < L, \end{cases} \quad (9)$$

где  $L = N\Lambda$  — толщина слоя,  $\xi$  — длина локализации,  $N_o = \xi/\Lambda$ ,  $a = (\ell_c - \ell_e)/\Lambda$ ,  $\ell_c = \lambda$  — порог локализации,  $\ell_e = 1/nS$  — длина свободного пробега по отношению к упругому рассеянию,  $n = 1/\Lambda^2$  — плотность рассеивателей с сечением рассеяния  $S(\lambda)$ . Частотный спектр прозрачности слоя случайной среды, рассчитанный по формулам (9) при  $L = 18\Lambda$ , приведен на рис. 3а в виде кривой из кружков. Слой случайной среды аналогичен фотонному кристаллу, состоящему из  $N = 18$  слоев упорядоченных цилиндров, по толщине, числу цилиндров и среднему расстоянию между цилиндрами. Зависимости величин  $\ell_e$ ,  $N_o$  и параметра  $a$  от длины падающей волны показаны на рис. 5.

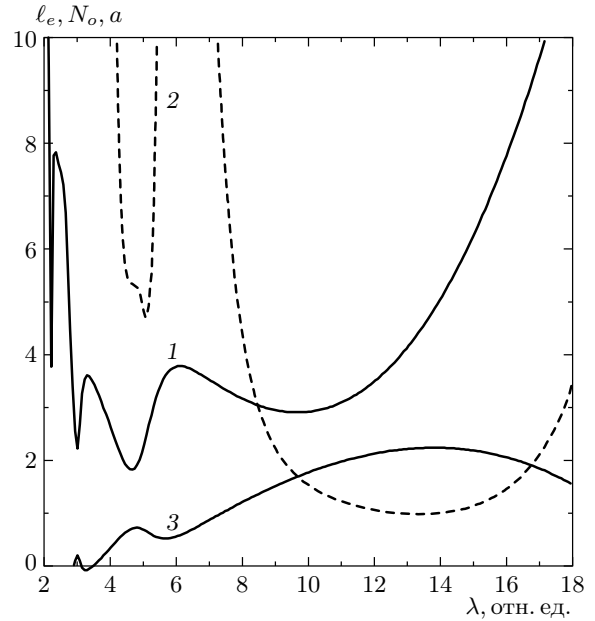


Рис. 5. Зависимости длины  $\ell_e$  свободного пробега волнового поля по отношению к упругому рассеянию (кривая 1) и длины локализации  $\xi$  (кривая 2 соответствует  $N_o = \xi/\Lambda$ ) от длины волны, падающей на слой случайной среды, рассчитаны по формулам (49) и (68) работы [39] по самосогласованной теории локализации акустических волн. Кривая 3 иллюстрирует изменение параметра  $a = (\lambda - \ell_e)/\Lambda$

Сопоставление сплошной кривой и кривой, изображенной кружками на рис. 3а, предварим следующим замечанием. Эксперименты с упорядоченной системой твердых цилиндров в воздухе (см. рис. 2 работы [41]) и расчеты для цилиндрических пузырей в воде (см. рис. 2с работы [42]) показали, что при внесении позиционного беспорядка в систему цилиндров запрещенная зона для TE-поляризованного излучения сужается, практически не мельчает в ее центральной части в случае твердых цилиндров и несколько мельчает в случае *vice versa*. Как видно на рис. 3а, результаты расчета прозрачности слоя случайной среды, выполненные по формулам (9) самосогласованной теории локализации, согласуются в общих чертах как с упомянутыми результатами работы [41], так и с расчетами по уравнению Риккати (1). В спектре прозрачности слоя случайной среды можно также выделить две запрещенные зоны, а в дополнительной зоне можно указать на некоторое подобие локальных всплесков прозрачности.

Исследуя динамику формирования запрещенной зоны в спектре слоя упорядоченной и неупорядо-

ченной  $2D$ -сред, отметим, что в диапазоне коротких волн ( $\lambda = 4.9$ ) упорядочение цилиндров обуславливает существенно более быстрый спад прошедшей мощности электромагнитного поля по сравнению с экспоненциально-степенным законом (9) (см. рис. 4б). На более длинных волнах согласие с самосогласованной теорией локализации значительно лучше, а для некоторых длин волн — почти совершенное (см. рис. 4в). Заметим, что в частотном диапазоне основной запрещенной зоны (см. выше, почему основная запрещенная зона имеет такое название) спектр упорядоченной структуры формируется за счет резонансного рассеяния на основной собственной моде Ми цилиндра при существенном вкладе резонансного рассеяния брэгговского типа на периодической системе цилиндров. Представляется естественным искать наступление явления локализации классических волн в случайной среде именно в условиях существования основной запрещенной зоны, внося разупорядочение в периодическую систему цилиндров. Сохранение некоторой степени дальнего упорядочения при нарушении ближнего порядка обусловит рассеяние брэгговского типа при подавлении когерентного обратного рассеяния фотонов по некоторым брэгговским направлениям. «Соотношения переноса» с вытекающим из них уравнением Риккати после некоторой дальнейшей разработки позволят с контролируемой точностью рассчитать частотный спектр прозрачности слоя упорядоченной  $2D$ -среды с любой степенью беспорядка.

## 5. ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод соотношений переноса применен к единому теоретическому рассмотрению резонансных эффектов многократного рассеяния электромагнитного излучения на периодической поверхности и при прохождении через фотонный кристалл. Впервые количественно продемонстрирован эффект аномального уменьшения коэффициента отражения  $TE$ -поляризованной волны в дискретных диапазонах глубины профиля оптической решетки. На примере периодической системы параллельных слоев твердых цилиндров с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon = (2.9)^2$  в воздухе установлено, что формирование коротковолновой запрещенной зоны в спектре прохождения фотонного кристалла, включая узкие всплески прозрачности, обусловлено, в основном, мультипольными резонансами Ми уединенного цилиндра. Напротив, многократное рассеяние брэгговского типа вносит существенный

вклад в формирование длинноволновой запрещенной зоны, частотное положение центра которой коррелирует, в диапазоне  $3 \leq n^* \leq 20$  % фактора заполнения пространства цилиндрами, с частотой монополюсного резонанса Ми уединенного цилиндра. Затухание электромагнитного излучения в фотонном кристалле по мере увеличения числа его слоев удовлетворительно описывается экспоненциально-степенной формулой самосогласованной теории локализации в диапазоне волн из длинноволновой запрещенной зоны. Однако в диапазоне волн из коротковолновой запрещенной зоны упорядочение цилиндров приводит к значительно более быстрому затуханию излучения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. P. Beckmann and A. Spizzichino, *The Scattering of Electromagnetic Waves from Rough Surfaces*, Macmillan, New York (1963).
2. F. G. Bass and I. M. Fuks, *Wave Scattering from Statistically Rough Surfaces*, Pergamon, New York (1978).
3. V. I. Tatarskii, *Waves in Random Media* **3**, 127 (1993).
4. L. Tsang, I. A. Kong, and R. T. Shin, *Theory of Microwave Remote Sensing*, Wiley-Interscience, New York (1985).
5. A. G. Voronovich, *Wave Scattering from Rough Surfaces*, Springer, Berlin (1994).
6. М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений*, Мир, Москва (1967).
7. R. Bellman and G. M. Wing, *An Introduction to Invariant Imbedding*, Wiley-Interscience, New York (1975).
8. В. И. Кляцкин, *Метод погружения в теории распространения волн*, Наука, Москва (1986).
9. C. Barnes and J. B. Pendry, *Proc. R. Soc. Lond. A* **435**, 185 (1991).
10. R. W. Wood, *Proc. Phys. Soc. (London)* **18**, 396 (1902); *Phil. Mag.* **4**, 396 (1902).
11. H. Raether, *Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings*, Springer-Verlag, Berlin (1988).
12. D. Maystre and R. Petit, *Opt. Comm.* **17**, 196 (1976).

13. E. Burstein, C. Y. Chen, and S. Lundqvist, *Light Scattering in Solids*, ed. by J. L. Birman, H. Z. Cummins, and K. K. Rebane, Plenum, New York (1979), p. 479.
14. I. Ursu, I. N. Mihăilescu, Al. Popa, A. M. Prokhorov, V. M. Konov, V. P. Ageev, and V. N. Tokarev, *Appl. Phys. Lett.* **45**, 365 (1984).
15. J. A. Sanchez-Gil, A. A. Maradudin, Jun Q. Lu, V. D. Freilikher, M. Pustilnik, and I. Yurkevich, *Phys. Rev. B* **50**, 15353 (1994).
16. D. Maystre, *Progress in Optics*, ed. by E. Wolf, North-Holland, Amsterdam (1984), Vol. 21, p. 1.
17. A. A. Maradudin, T. Michel, A. R. McGurn, and E. R. Mendez, *Ann. Phys. N. Y.* **203**, 255 (1990).
18. A. Hessel and A. A. Oliver, *Appl. Opt.* **4**, 1275 (1965).
19. Г. М. Гандельман, П. С. Кондатенко, *Письма в ЖЭТФ* **38**, 246 (1983).
20. K.-T. Lee and T. F. George, *Phys. Rev. B* **31**, 5106 (1985).
21. С. А. Ахманов, В. Н. Семиногов, В. И. Соколов, *ЖЭТФ* **93**, 1654 (1987).
22. F. Toigo, A. Marvin, C. Celli, and N. R. Hill, *Phys. Rev. B* **26**, 2907 (1982).
23. E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987); S. John, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2486 (1987).
24. K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3152 (1990).
25. M. Plihal and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **44**, 8565 (1991).
26. K. Sakoda, *Phys. Rev. B* **51**, 4672 (1995).
27. N. Stefanou, V. Karathanos, and A. Modinos, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 7389 (1992).
28. K. Ohtaka and Y. Tanabe, *J. Phys. Soc. Jap.* **65**, 2265, 2276 (1996).
29. S. Y. Tong, *Prog. Surf. Sci.* **7**, 1 (1975).
30. J. B. Pendry and A. Mackinnon, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2772 (1992).
31. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. M. Economou, C. T. Chan, and K. M. Ho, *Phys. Rev. B* **48**, 14121 (1993).
32. Y. Zhao, I. A. Avrutsky, and B. Li, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3596 (1999).
33. Yu. N. Barabanenkov, V. L. Kouznetsov, and M. Yu. Barabanenkov, *Progress in Electromagnetic Research (PIER)*, ed. by J. A. Kong, EMW Publishing, Cambridge MA (1999), Vol. 24, p. 39; *J. Electr. Waves and Applications* **13**, 1335 (1999).
34. R. W. Wood, *Phil. Mag.* **23**, 315 (1912); *Phys. Rev.* **48**, 934 (1935).
35. C. H. Palmer, *J. Opt. Soc. Am.* **42**, 269 (1952).
36. D. Sornette, *J. Stat. Phys.* **56**, 669 (1989).
37. E. Centeno, B. Guizal, and D. Felbacq, *J. Opt. A.: Pure Appl. Opt.* **1**, L10 (1999).
38. E. Lidorikis, M. M. Sigalas, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **61**, 13458 (2000).
39. C. A. Condat and T. R. Kirkpatrick, *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, ed. by Ping Sheng, World Scientific, Singapore (1990), Vol. 8, p. 423.
40. E. Lidorikis, M. M. Sigalas, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1405 (1998).
41. M. Bayindir, E. Cubukcu, I. Bulu, T. Tut, E. Ozbay, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **64**, 195113 (2001).
42. Y.-Y. Chen and Z. Ye, *Phys. Rev. B* **65**, 056612 (2002).