

文章编号:1001-5078(2010)07-0766-04

· 光学材料器件与薄膜 ·

二维硅基三角形气孔光子晶体的带隙分析

赵优美, 李 双, 王凤翔, 秦希峰

(山东建筑大学理学院, 山东 济南 250101)

摘 要:研究了以硅为背景介质周期性排列的等边三角形气孔构成的三角晶格二维光子晶体, 把平面波展开法用于光子晶体能带结构的数值研究, 分别改变等边三角形气孔边长、晶格常数和晶格基元旋转角度, 研究带隙变化规律。研究表明:三角形气孔边长、晶格常数和晶格基元旋转角度的适当改变可以使光子晶体出现完全带隙, 优化结构参数给出了一个完全带隙。

关键词:光子晶体; 三角形气孔; 三角晶格; 平面波展开法; 完全带隙

中图分类号: O431

文献标识码: A

Band-gap analysis of Si-based 2D photonic crystal of triangular air hole

ZHAO You-mei, LI Shuang, WANG Feng-xiang, QIN Xi-feng

(School of Science, Shandong Jianzhu University, Ji'nan 250101, China)

Abstract: A two-dimension photonic crystal with triangular air hole was designed in silicon background material. Plane-wave expansion method is used in study of numerical value of energy band structure of 2D photonic crystal. The band gaps were investigated by changing the side length of triangular air hole, lattice period and rotation angle of elements. Research results show that the proper choice of the side length of triangular air hole, lattice period and rotation angle will make the photonic crystals have absolute band gaps. A large absolute band gap is found by optimizing the parameters.

Key words: photonic crystal; triangular air hole; triangular lattice; plane-wave expansion method; absolute band gap

1 引 言

光子晶体是在空间上不同介电材料(或者金属)按周期性排列的一种新型光控材料^[1-2]。近年来人工制造的光子晶体在光电集成领域得到了重要的应用,今后光子晶体在光电领域的角色会越来越重要。光子晶体的两大特性是具有带隙结构和光局域。不同折射系数的介质在空间按一定周期排列,当空间周期与光波长相当时,由于周期性带来的布拉格散射,就能够在一定频率范围内产生光子禁带(也称PBG结构),当光子的频率落在带隙频率范围内光就不能在介质中传播而是被反射掉。另外,光子在光子晶体中呈现很强的Anderson局域^[3],这样,在光子晶体中引入缺陷,和缺陷态吻合的光子就

有可能被局域在缺陷态内,形成较好的滤波。1996年以来先后研制成功了光子晶体直角波导,光子晶体光纤、光子晶体超棱镜、光子晶体反射镜等众多光学器件。1998年,美国sandia国家实验室采用多层沉积/刻蚀方法,制作成的三维光子晶体探测头,可以大大提高探测的灵敏度,是现有尺寸最小的三维光子晶体。三维光子晶体虽具有广泛应用潜力,但是制作工艺复杂,制作非常困难。二维(2D)周期结构光子晶体亦有大大改善光学器件的优良性能,制作工艺比较简单,研究二维光子晶体仍然意义重大。

基金项目:山东省自然科学基金课题(No. ZR2009FM031)资助。
作者简介:赵优美(1973-),女,硕士生,研究方向为光子晶体。
收稿日期:2010-01-18;修订日期:2010-03-23

晶格结构、介质柱形状、相对介电常数和填充率不同的二维光子晶体具有不同的带隙结构,在未来全光器件中的检波、滤波及波分复用等方面具有不同的应用价值。通常情况下,光子晶体带隙越大,则其性能越稳定,也就越有应用价值。因此,寻找大带隙、结构简单的二维光子晶体仍具有十分重要意义。目前已有不少这方面的研究文献^[4-9],但未见关于二维硅基三角形气孔三角晶格带隙结构研究的报道,本文利用平面波展开法研究硅基($\varepsilon_a = 11.9$, $\varepsilon_b = 1$)三角形气孔三角晶格的带隙结构,通过改变其晶格常数、三角形边长和基元旋转角度,研究了晶格参数的变化对带隙结构的影响,并优化结构参数得到了一个完全带隙^[10],对计算结果作了进一步分析讨论。

2 理论分析方法

平面波展开法^[11]是计算晶体能带最早和最常用的方法。其基本思想是根据光子晶体的周期性,利用 Bloch 定理和 Fourier 变换,以平面波叠加的形式在倒格矢空间展开电磁波,将 Maxwell 方程组化成本征方程,然后求解得到波矢所对应的一组本征频率,本征频率的集合就是光子能带。该方法尤其适用于介电常数恒定时,不需引入假定条件,是光子晶体能带结构计算的一个稳定可靠的算法。

因为三角晶格相对其他晶格结构更易产生禁带结构^[12],所以本文采用图 1 所示的等边三角形气孔三角晶格结构排列。

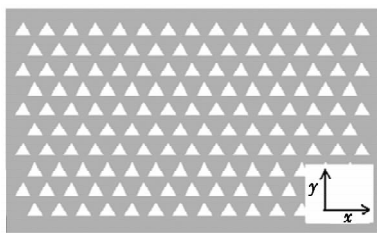


图1 硅基等边三角形气孔三角晶格结构

若光子晶体是无源、无缺陷、介电材料各向同性的,在介质中没有自由电荷和自由电子,电磁波沿 xy 平面正入射,将电磁波分解为 TE 模式和 TM 模式。电磁波在宏观电介质中传播服从 Maxwell 方程组^[13],经计算可得电磁波的电场强度 $E(\vec{r})$ 和 $H(\vec{r})$ 磁场强度运动方程分别是:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times E(\vec{r}) \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 E(\vec{r}) \quad (1)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times H(\vec{r}) \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 H(\vec{r}) \quad (2)$$

式中, $\varepsilon(\vec{r})$ 为介质的介电常数; ω 为电磁波的角频率; c 为真空中的光速。对于磁场分量平行于三角形气孔轴(z 轴)的情况。只有 z 方向存在磁场,按 Bloch 展开 H_z 的表达式为:

$$H_z(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} A(\vec{k}, \vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \quad (3)$$

其中, $\vec{k} = k_x e_x + k_y e_y$ 是第一布里渊区内的波矢量; $\vec{G}$ 为倒格矢。把周期势 $\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}$ 展开成关于 $\vec{G}$ 的 Fourier 级数:

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad (4)$$

Fourier 系数:

$$P(\vec{G}) = \frac{1}{A_c} \int_{A_c} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \times \frac{1}{\varepsilon(x, y)} dx dy \quad (5)$$

结合式(3)~式(5)可以得到 TE 模式:

$$\sum_{\vec{G}'} (\vec{k} + \vec{G}) \cdot (\vec{k} + \vec{G}') P(\vec{G} - \vec{G}') \times A(\vec{k}, \vec{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} A(\vec{k}, \vec{G}) \quad (6)$$

式(6)使得电磁波的磁场在光子晶体中的传播问题变成了求解一个对称矩阵的本征值和本征函数问题。

当电磁波的电场分量平行于三角形气孔轴的情况,即 TM 模式,可得方程:

$$\sum_{\vec{G}'} P(\vec{G} - \vec{G}') |\vec{k} + \vec{G}| \times |\vec{k} + \vec{G}'| \times B(\vec{k}, \vec{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} B(\vec{k}, \vec{G}) \quad (7)$$

式(7)也变成求解本征值和本征函数问题,求解本征方程,可求出光子的色散曲线。

3 数值计算分析

本文以 TE 入射波做模拟,主要研究第 1 能带和第 2 能带之间的带隙变化规律。已知背景硅介质介电常数 $\varepsilon_a = 11.9$,空气介质柱介电常数 $\varepsilon_b = 1$, a 表示晶格常数, l 表示空气孔三角形边长, θ 为晶格基元旋转角度,利用控制变量分别研究晶格常数、三角形边长和基元旋转角度对带隙的影响。

3.1 θ 和 a 不变时, l 改变对带隙的影响

图 2 和图 3 给出了保持 θ 和 a ($a = 1 \mu\text{m}$) 不变时,图 1 所示晶格结构的带隙宽度和中心频率随三角形边长 l 的变化规律。其中,带隙宽度

$(\omega_2 - \omega_1)a/2\pi c$ 表示带隙上下边缘频率差,带隙中心频率 $(\omega_2 + \omega_1)a/4\pi c$ 为带隙上下频率点的中心值, $\omega a/2\pi c = a/\lambda$ 为归一化频率。

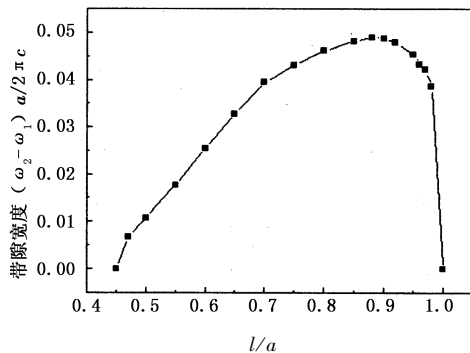


图2 带隙宽度随 l 的变化曲线(l/a 为三角形边长 l 跟晶格常数 a 的比值)

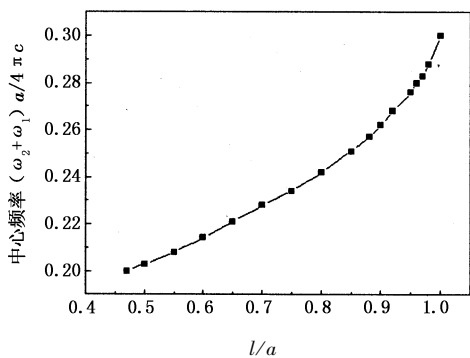


图3 带隙中心频率随 l 的变化曲线

图2可看出在晶格常数 a 不变时,带隙宽度随着边长先增大后减小,在 $l/a = 0.88$ ($l = 0.88 \mu\text{m}$) 时,带隙宽度达到最大值 $(\omega_2 - \omega_1)a/2\pi c = 0.049$,此时是最佳填充率位置。显然,达到最佳填充率之前,带隙宽度随三角形边长增大而增大;达到最佳填充率之后,带隙宽度随三角形边长增大而减小;从曲线斜率看,在 $l/a = 0.45 \sim 0.88$ 区间的曲线斜率小于 $l/a = 0.88 \sim 1$ 区间的斜率,说明最佳填充率之前边长对带宽影响较为缓慢,最佳填充率之后边长对带宽影响较快;同时注意到 $l \geq 1 \mu\text{m}$ 时,晶格出现了相交的情况,此时晶格基元的排列已经不再满足布洛赫格子,介电常数不再成周期排列,即 $(\omega_2 - \omega_1)a/2\pi c = 0$ 。由图3可看出晶格常数不变,改变三角形边长时,带隙中心频率随边长增大而增大,在边长较小时对带隙影响较为缓慢,边长较大时影响较为迅速。

3.2 θ 和 l 不变, a 对带隙的影响

图4、图5给出了保持 θ 和 l ($l = 0.88 \mu\text{m}$) 不变时,图1所示晶格结构的带隙宽度和中心频率随

晶格常数 a 的变化规律。

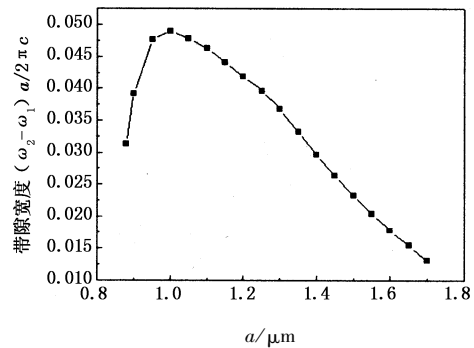


图4 $l = 0.88 \mu\text{m}$ 时,带隙宽度随 a 的变化曲线

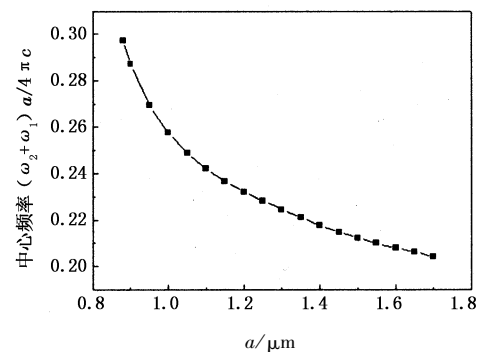
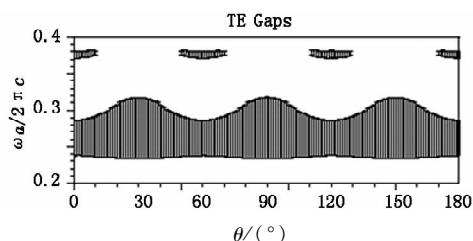


图5 $l = 0.88 \mu\text{m}$ 时,带隙中心频率随 a 的变化曲线

图4表明三角形边长 l 不变,改变晶格常数 a 时带隙宽度随周期先增大后减小,在 $a = 1 \mu\text{m}$ ($l/a = 0.88$) 时,带隙宽度最大,对应最佳填充率位置。最佳填充率之前带隙宽度逐渐增大,最佳填充率之后带隙宽度逐渐减小,从曲线斜率看出晶格常数 a 大于 $1 \mu\text{m}$ 时对带隙影响较为缓慢。由图5可以看出带隙中心频率在三角形边长 l 不变时,随晶格常数 a 增大而减小。从斜率可看出在晶格常数 a 在 $0.88 \sim 1.2 \mu\text{m}$ 区间对带隙影响较快,在 a 大于 $1.2 \mu\text{m}$ 时,晶格常数对带隙影响较为缓慢。

3.3 l, a 不变,改变 θ 对带隙的影响

我们还对晶格基元的旋转角度对带隙的影响做了研究,图6给出了保持 l ($l = 0.88 \mu\text{m}$), a ($a = 1 \mu\text{m}$) 不变时,带隙宽度随基元旋转角度 θ 的变化规律。扫描角度 θ 转过 180° 过程中,发现带隙结构呈 60° 周期规律变化。对于第1能带和第2能带之间带隙,在 $0^\circ \sim 30^\circ$ 时带隙宽度随角度增加而增大, 30° 时带隙宽度最大值为 0.08 ; $30^\circ \sim 60^\circ$ 时带隙宽度随角度增大而减小, 60° 时带隙宽度最小值是 0.049 ,对于三角形结构基元旋转 60° 过程就可以得出带隙变化规律。

图6 l, a 不变,带隙随 θ 的变化曲线

3.4 完全带隙

一般说来,两种偏振模式的光子晶体都具有带隙,而且彼此重叠时,二维光子晶体才具有完全带隙。具有完全带隙的光子晶体因对于不同传播方向上的光都存在光子带隙而最具有使用价值。已有研究表明,TM 带隙容易出现在高介电材料孤立分布的结构中,TE 带隙容易出现在高介电材料连续分布的结构中。这为我们在大边长处寻找完全带隙提供了启示。通过优化结构参数,计算得出 $l/a = 0.7 \sim 1$ 时出现完全带隙,完全带隙宽度随边长增大而增大,空气柱边长越接近晶格常数完全带隙越宽,即空气柱间有很薄的介质层隔开,这样刻蚀工艺难度加大^[13], $l/a = 0.99$ 时,完全带隙宽度为 0.04,带隙中心频率为 0.55,如图 7 所示。

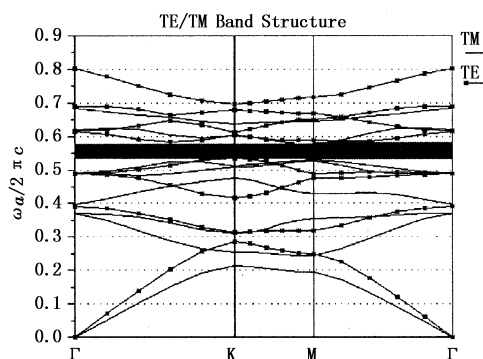


图7 完全带隙宽度(实线对应 TM 波;星线对应 TE 波)

4 结论

本文利用平面波展开法研究了硅基三角形气孔三角晶格二维光子晶体各参数变化对带隙结构的影响。①保持 a 不变,改变边长 l ,发现在达到最佳填充率之前,边长增大带隙宽度增大;在最佳填充率之后,边长增大带隙宽度减小,而中心频率随边长增大向高频方向移动;②保持 l 不变,改变晶格常数 a ,得出在达到最佳填充率之前,晶格常数增大带隙宽度增大;在最佳填充率之后,晶格常数增大带隙宽度减小,而中心频率随晶格常数增大向低频处移动;③基元旋转角度 θ 也影响带隙,其宽度呈 60° 周期变化。

在 $\theta = 30^\circ, l = 0.88 \mu\text{m}$ 时带隙宽度最大值为 0.08,在 60° 时带隙宽度最小值 0.049;④给出一个完全带隙,计算得出 $l/a = 0.7 \sim 1$ 时出现完全带隙,完全带隙宽度随边长增大而增大, $l/a = 0.99$ 时,完全带隙宽度为 0.04,带隙中心频率为 0.55。

参考文献:

- [1] John D J, Steven G J, Joshua N W, et al. Photonic crystals-molding the flow of light [M]. Princeton: Princeton Univ. Press, 2008: 2-4.
- [2] Berrier A, Mulot M, Swillo M, et al. Negative refraction at infrared wavelengths in a two-dimensional photonic crystal [J]. Phys. Rev. Lett., 2004, 93(7): 073902-073905.
- [3] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 58(23): 2486-2489.
- [4] 梁华秋,冯尚申,周小莉. 两种大带隙的长方晶格二维光子晶体[J]. 激光与红外, 2005, 35(10): 776-778.
- [5] 吴炳坚,郑浩,方明阳,等. 二维光子晶体三角形结构带隙研究[J]. 激光与红外, 2006, 36(10): 974-976.
- [6] Agio M, Andreani L C. Complete photonic band gap in a two-dimensional chessboard lattice [J]. Phys. Rev. B. 2000, 61(23): 15519-15522.
- [7] 陈海波,高英俊,胡素梅. 具有复介电缺陷一维三元光子晶体禁带特性的研究[J]. 激光与红外, 2008, 38(6): 593-596.
- [8] Kee C S, Kim J E, Park H Y. The negative refraction and applications of a novel metamaterials [J]. Phys. Rev. E., 1997, 56(6): 6291-6293.
- [9] 王媛媛,宋健,黄益强,等. 二维正方柱结构光子晶体禁带的研究[J]. 激光与红外, 2009, 39(9): 969-973.
- [10] Cassagne D, Jouanin C, Bertho D. Hexagonal photonic-band-gap structures [J]. Phys. Rev. B., 1996, 53(11): 7134-7142.
- [11] Zhuang Fei, Wu Liang, He Sai-ling. A two-dimensional photonic crystal with six large band gaps formed by a hexagonal lattice of anisotropic cylinders [J]. Chin. Phys. Letts., 2002, 11: 834-838.
- [12] Plihal M, Maradudin A A. Photonic band structure of two-dimensional systems: the triangular lattice [J]. Phys Rev B., 1991, 44(16): 8565-8571.
- [13] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. Phys. Rev. Lett., 1990, 65(25): 3152-3155.