

# 二维八重准晶有机光子晶体平板的光学传播特性

梁馨元 陈 笑 王义全 冯 帅 杨国建 陈胥冲

(中央民族大学理学院, 北京 100081)

**摘要** 采用时域有限差分法研究了二维八重准晶有机光子晶体的光传输特性, 重点分析了光束在聚苯乙烯空气柱平板结构和聚苯乙烯介质柱结构中的透射特性与光局域特性。研究表明, 即使在低折射率对比度的情况下, 两种完整八重准晶平板结构中均出现了可见光波段的光子带隙和本征模, 且光子带隙中心位置随着平板厚度的增大而红移。当在两种准晶结构中引入缺陷微腔时, 带隙内的缺陷模产生位置和波长红移特性随着微腔结构的变化规律明显不同, 这种差异性是由两种物理机制(即光子晶体缺陷能级变化与微腔所支持的驻波条件)共同作用的结果。这一研究结果将为实验制备有机准晶发光器件提供一定的理论基础。

**关键词** 材料; 光子晶体; 八重准晶; 光子带隙; 有机聚苯乙烯

**中图分类号** TN256 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0116002

## Light Propagation in Two-Dimensional Organic Octagonal Quasiperiodic Photonic Crystal Slabs

Liang Xinyuan Chen Xiao Wang Yiquan Feng Shuai Yang Guojian Chen Xuchong

(College of Science, Minzu University of China, Beijing 100081, China)

**Abstract** Light propagation in photonic band gaps in two-dimensional organic octagonal quasiperiodic photonic crystal slabs is investigated by finite-difference time-domain method. The transmission property and light localization in the polystyrene air-rod slab and air polystyrene-rod slab are compared in detail. The results show that even in extremely low-index dielectric contrast of rods, the photonic band gaps and eigenmodes are observed in the visible spectrum. Besides, the central position of bandgap is red-shifted with the increase of slab thickness. When defects are introduced into two quasiperiodic structures, the occurrence position of defect modes and property of red-shifting in wavelength of modes are different with the increase of size of defect nanocavities. The difference in property originates from the competition consequence of two physical mechanisms which are the energy levels of defects in photonic crystals and the resonance of modes in the defect cavity. The results may give theoretical support for fabricating luminescent devices based on organic quasicrystals.

**Key words** materials; photonic crystal; octagonal quasicrystal; photonic band gap; organic polystyrene

**OCIS codes** 160.5298; 160.5293; 160.4890

## 1 引 言

光子晶体, 即光子带隙(PBG)材料, 是一类在光学尺度上具有周期性介电结构的人工晶体。与半导体晶格对电子波函数的调制相类似, 光子晶体的晶格与带隙结构实际控制着光在光子晶体中的传输。目前的研究结果表明, 具有光子带隙的材料不仅局限于周期性排列的晶体结构中, 在准周期结构中亦

存在可被利用的光子带隙<sup>[1~5]</sup>。相对于周期性光子晶体, 准晶结构的光子晶体主要具有以下特性<sup>[6]</sup>: 1) 具有旋转对称性和长程指向性, 没有平移对称性; 2) 光子带隙不依赖于入射光的方向; 3) 准周期结构中的格点(除中心点外)具有不等价的局域环境, 造成缺陷模式更加丰富和复杂, 为缺陷模的灵活调控带来多样性; 4) 无缺陷和无序性亦可产生局域态<sup>[3,5]</sup>;

**收稿日期**: 2012-07-30; **收到修改稿日期**: 2012-08-30

**基金项目**: “985”工程(98507-010009, 98504-012004)、“211”工程、国家自然科学基金(11204387)和教育部科技研究重点项目(212205)资助课题。

**作者简介**: 梁馨元(1988—), 女, 硕士研究生, 主要从事光子晶体方面的研究。E-mail: liangxinyuan0927@gmail.com

**导师简介**: 陈 笑(1977—), 女, 博士, 副教授, 主要从事激光物理与光子晶体等方面的研究。E-mail: xchen@pku.edu.cn

5)产生完全带隙折射率阈值低。对于 TM 模,二维无限长八重准晶产生完全带隙的相对介电常数阈值只有 1.6(折射率  $n=1.26$ )<sup>[7]</sup>,十二重准晶产生带隙的介电阈值为 1.35<sup>[8]</sup>。这意味着许多基于光子带隙材料的器件可以选用自然界普遍存在的二氧化硅( $n=1.45$ )或者具有优良发光性能的有机材料,如聚苯乙烯( $n=1.59$ )。

现有的研究表明,绝大多数光子晶体材料都来自 III-V 族的半导体材料。与无机半导体材料相比,有机半导体材料具有易于制备、热稳定性好和非线性系数高等优点。有机材料的光致发光特性和准周期结构的高度旋转对称性相结合,为光子晶体微腔激光器和发光二极管提供了优良的增益介质和面内各方向均匀有效的光局域特性,有利于达到超低激励阈值和较高斜效率等重要指标。此外有机材料如共轭聚合物具有更高的非线性系数  $n_2$ (约  $10^{-16}$  m<sup>2</sup>/W)和更快的响应时间(以电子云畸变为主要响应机制,约  $10^{-14}$  s),为器件获得实际可利用的调谐性能提供了基础。

目前人们对于以低折射率聚苯乙烯为材料的准晶平板结构的研究还很少,光束在有机材料空气柱准晶平板和对应反结构(以空气为基底的介质柱结构)中的光局域以及带隙特性的差异性分析尚未开展。鉴于此,本文重点研究二维八重准晶聚苯乙烯光子晶体平板的光学传输特性,比较两种结构下光子晶体微腔结构变化对带隙和缺陷模的影响,分析对应的调控机制,并确定影响光学传输特性的物理参数,以期实现带隙的有目的调控和缺陷模,为实验制备有机准晶发光器件提供一定的理论基础。

## 2 数值模拟与结果

利用低折射率聚苯乙烯和空气作为光子晶体的构成材料,采用时域有限差分法模拟研究了二维八重准晶光子晶体空气柱平板结构及其对应反结构的光子带隙和局域模特性。八重准晶的结构参数设置如下:晶格常数  $a=260$  nm,散射体半径  $r=65$  nm,平板厚度  $H$  分别为 300、400、500 nm,聚苯乙烯和空气的折射率分别设为 1.59 和 1。通常当相对高介电常数的介质做散射体时,TM 模易产生禁带;反之,选取相对低介电常数的介质做散射体,TE 模易产生禁带<sup>[9]</sup>。因此,在下面的讨论中重点研究空气柱平板结构的准 TE 模和介质柱平板结构的准 TM 模的光传输特性,计算结果如图 1 所示。由图 1 可见,即使在低折射率对比度的情况下,两种完整准晶平板结构中均出现了可被利用的光子带隙。这一结果比已报道的二维无限长八重准晶产生完全带隙的最小相对折射率 1.26<sup>[7]</sup>更有实际应用价值。并且随着平板厚度的增加,两种结构的光子带隙中心波长均发生了明显红移。由于准晶光子晶体的结构特征,在准晶光子晶体带隙中存在若干本征模<sup>[3,5]</sup>,模拟结果同样证实了这一观点,但对于两种结构的光子晶体计算结果具有较大的差异。图 1(a)中厚度为 400 nm 的空气柱结构带隙位置位于可见光波段 532~619 nm,带隙内存在 3 个本征模,对应波长分别为 589,556,547 nm。这一光子带隙波段与有机发光材料聚苯乙烯的荧光光谱基本一致,为未来制备可见光波段的有机光子晶体激光器和发光二极管提供了可能。不同于空气柱结构,图 1(b)中,厚度为 400 nm

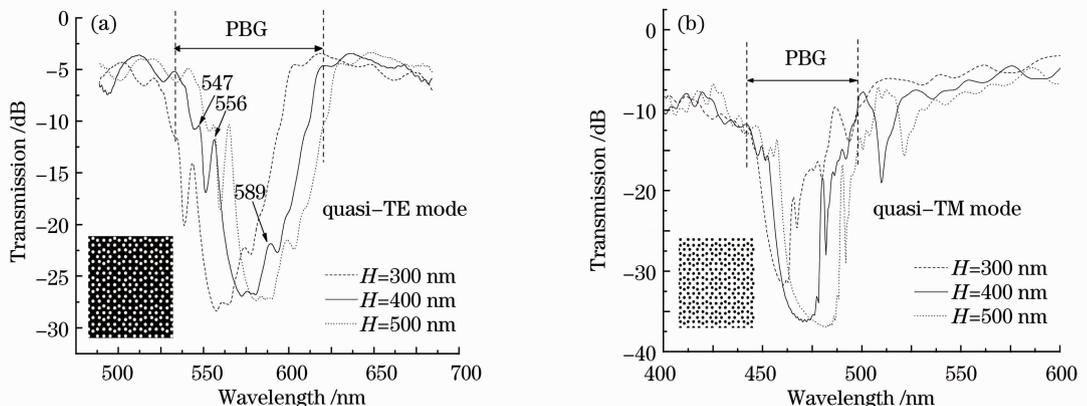


图 1 (a)二维八重准晶聚苯乙烯空气柱平板结构和(b)空气中聚苯乙烯介质柱平板结构的透射光谱图

Fig. 1 Transmission spectra of the two-dimensional octagonal quasicrystal. (a) Air rods in polystyrene material; (b) polystyrene rods in air

的准晶聚苯乙烯介质柱结构的带隙位于蓝绿波段 442~495 nm,带隙内仅存在 1 个波长为 480 nm 的本征模。由于两种结构带隙内的本征模均处于带边,因此本征模的场分布并未有明显的光局域。

众所周知,当在光子晶体中引入缺陷时,缺陷光子晶体将支持一定的缺陷局域模。为进一步掌握准晶光子晶体的光学特性,研究了缺陷对八重准晶光子晶体带隙和局域特性的影响。去除准晶结构中心位置处的一个散射体构成纳米缺陷微腔。图 2(a)

为平板厚度为 400 nm 的纳米微腔空气柱光子晶体的透射谱。与完整结构相比,中心散射体的缺失几乎不影响带隙位置、宽度、带隙内的本征模以及透射率,这说明八重准晶空气柱结构的光子晶体平板的传输特性与中心空气柱无关。相比而言,图 2(b)在去除中心介质柱的情况下,虽然带隙和本征模 480 nm 的特性未发生变化,但是在低频带边出现一个波长 486 nm 的新缺陷模。

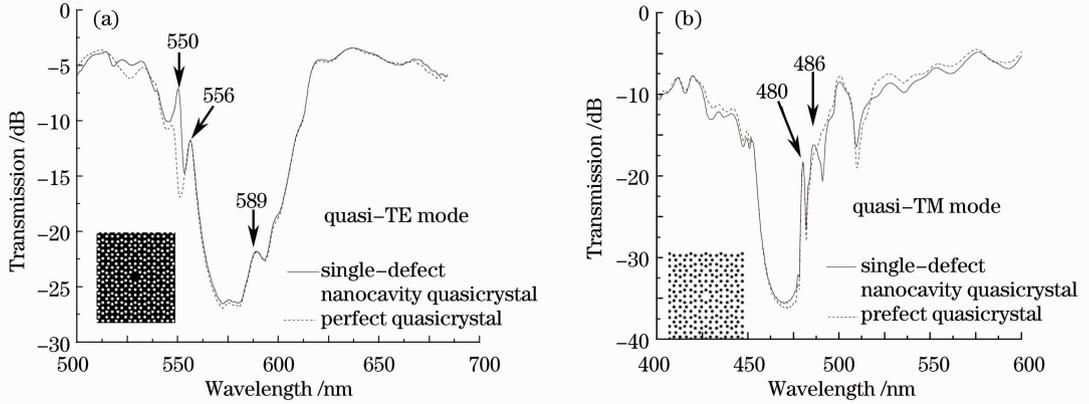


图 2 (a)八重准晶聚苯乙烯空气柱点缺陷微腔和(b)空气中聚苯乙烯介质柱点缺陷微腔的透射光谱图

Fig. 2 Transmission spectra of the single-defect nanocavity quasicrystal. (a) Air rods in polystyrene material; (b) polystyrene rods in air

从以上结果看出,虽然在两种八重准晶光子晶体中具有相同的旋转对称性,但由于两种准晶光子晶体的平均折射率不同,它们所表现的缺陷特性具有明显的差别。为了确定两种结构准晶光子晶体缺陷与缺陷局域模的关系,在图 2 的基础上将中心周围的 8 个散射体向外移动  $0.2a$ ,如图 3 所示。在空气柱结构中,随着周围中心第一圈散射体的外移,介质缺陷微腔区增大,带隙中结构所支持的本征模

556 nm 与 547 nm 明显红移至 562 nm 和 554 nm,其中波长 562 nm 已几乎移至带隙中央,且 Q 值显著增大。这一结果说明本征模和局域特性受第一圈空气柱的影响较大,它对本征模的调制效应超过中心空气柱的影响。图 3(a)给出对应波长 562 nm 的模场分布图,由于波长 562 nm 的光束在缺陷微腔边界的约束下满足共振增强条件,因此即使在低折射率对比度的情况下,依然在模体积仅为亚微米量级的区域内形成

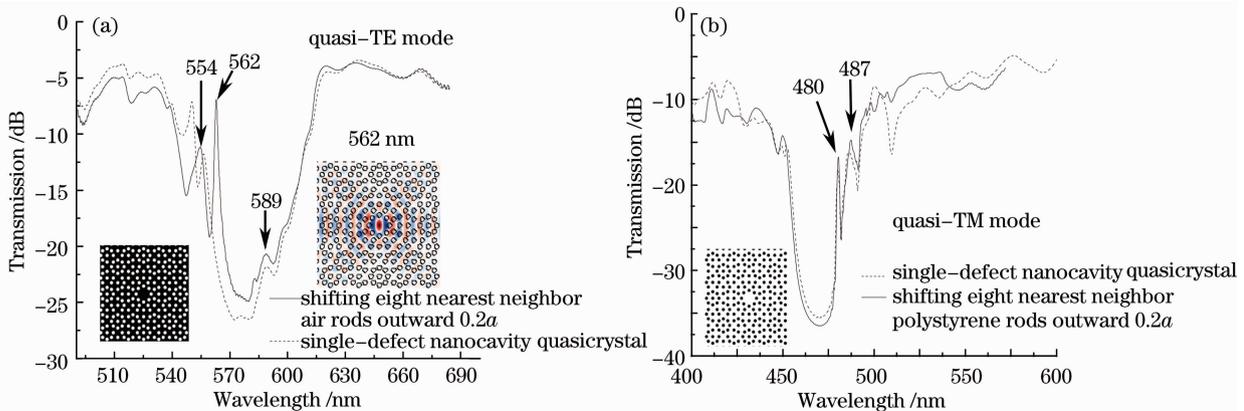


图 3 八重准晶点缺陷周围 8 个散射柱向外移动  $0.2a$  条件下的透射光谱图。(a)空气柱结构;(b)介质柱结构

Fig. 3 Transmission spectra of the single-defect nanocavity quasicrystal by (a) shifting eight nearest neighbor air rods outward  $0.2a$  in polystyrene material and (b) shifting eight nearest neighbor polystyrene rods outward  $0.2a$  in air

高  $Q$  值驻波,这一局域模类似于微盘激光器中的回音壁模式<sup>[4]</sup>。不同于空气柱结构,图 3(b)结果表明外移周围 8 个介质柱  $0.2a$  对带隙和本征模特性几乎没有影响。在此基础上,进一步去除周围 8 个散射体,增

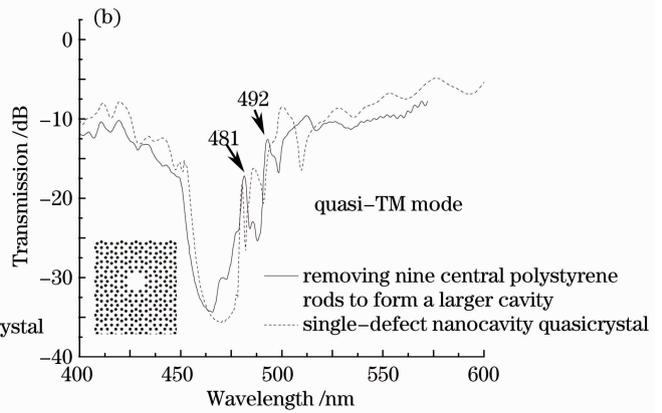
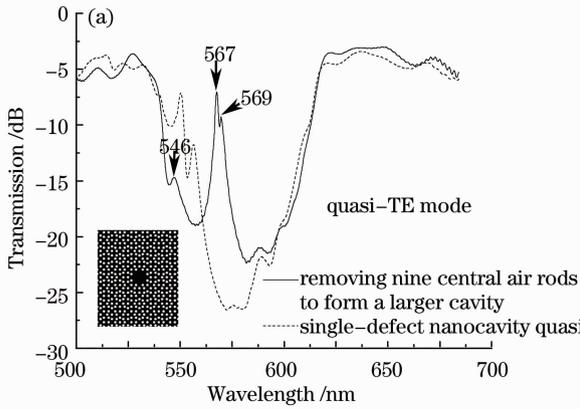


图 4 八重准晶结构中去除中心及周围 8 个散射柱条件下的透射光谱图。(a)空气柱结构;(b)介质柱结构

Fig. 4 Transmission spectra of the single-defect nanocavity quasicrystal by (a) removing nine central air rods to form a larger cavity and (b) removing nine central polystyrene rods to form a larger cavity

对于这两种准晶纳米微腔结构本征模波长红移特性的差异(空气柱结构的本征模波长红移比介质柱结构的本征模波长红移明显)以及缺陷模出现位置的不同(空气柱结构的缺陷模式从高频带边出现,而介质柱结构的缺陷模从低频带边出现),进一步从物理机制上深入分析,光子晶体对光束的调控机制主要依赖于光子带隙,其过程类似于半导体材料对电子运动的控制。光子带隙的高频禁带边为空气带,低频禁带边为介质带<sup>[10]</sup>。高频模式(空气带)的电磁能量主要集中于低介电常数区域,空气带对低介电常数区域的变化较敏感。相应的低频模式(介质带)电磁能量主要集中于高介电常数区域,介质带对高介电常数区域的变化较敏感。众所周知,在半导体材料中引入缺陷或掺入杂质,将会影响半导体材料的能带结构。如果向高纯度的半导体中掺入少量杂质,禁带中会出现杂质能级和缺陷能级。与半导体相类似,在光子晶体中引入缺陷或掺入杂质,由于缺陷或杂质的引入同样会在光子带隙中产生缺陷态,光子晶体的能带结构将会受到影响。这种影响表现在当缺陷是额外引入的高介电材料时(空气柱结构介质微腔),其特性与向半导体材料中掺杂施主原子相类似,缺陷能级起始于空气带底端(高频带边),同时随着引入缺陷的增大,缺陷能级将会向介质带移动,使得模式从高频向低频移动(波长红移)。如果缺陷是额外引入的低介电材料(介质柱结构空气微腔),其特性与向半导体材料中掺杂受主原子相类似,缺陷能级将起始于介电带顶端(低频带边),同

大微腔区。计算结果如图 4 所示。空气柱结构中 3 个本征模分别红移至 599,569,567 nm 处,且在高频带边 546 nm 处出现一个新的缺陷模。相比较而言,介质柱微腔的整体红移现象依然并不明显。

时随着引入缺陷的增大,缺陷能级将会向空气带移动,即模式从低频移向高频(波长蓝移)。这样通过引入缺陷,并且有目的地改变缺陷区域大小,可以调控缺陷区介电常数变化,从而实现有效调谐带隙中缺陷模位置的目的。

对于八重准晶空气柱结构,本征模波长红移现象明显,而在介质柱结构中不明显的差异是两种物理机制共同作用的结果。在空气柱结构中,一方面随着光子晶体介质缺陷微腔的增大,类似于半导体材料中掺杂的施主原子增多,促使模式出现波长红移;另一方面,微腔空间尺寸的增大,造成在微腔中满足驻波条件的模式对应的波长变大,也促使红移的发生。这两种机制的相长作用使得在空气柱结构中模式的波长红移明显。对于介质柱结构,这两种机制是相消的效果,一方面空气缺陷微腔的增大造成模式的波长蓝移,另一方面微腔空间尺寸的增大又造成模式红移。两种机制的共同作用最终造成介质柱结构中模式移动不明显。

### 3 结 论

以低折射率聚苯乙烯为材料,研究了光束在聚苯乙烯八重准晶空气柱平板结构和对应反结构中的传输特性,重点分析了两种有机平板结构中的光局域以及带隙特性。研究表明,即使在低折射率对比度的情况下,两种完整八重准晶平板中均出现了可见光波段的光子带隙和本征模。当在两种准晶

结构中引入缺陷时,带隙内的缺陷模产生和变化规律明显不同。随着缺陷微腔的变大,空气柱结构内的带隙本征模式均发生了明显的波长红移,获得了高Q值光束局域模,并且在高频带边出现了新的缺陷模。相比较而言,聚苯乙烯介质柱结构中新缺陷模出现在低频带边,且带隙内模式没有明显移动。这种模式变化的差异是由两种物理机制共同作用的结果。在空气柱结构中,一方面随着光子晶体介质缺陷微腔的增大,类似于半导体材料中掺杂的施主原子增多,缺陷能级起始于高频空气带底端,且缺陷能级逐步向低频介质带移动,即波长红移;另一方面,微腔空间尺寸的增大,造成在微腔中满足驻波条件的对应模式波长变大,也促使波长红移。这两种机制的相长作用使得在空气柱结构中波长红移明显。对于介质柱结构,一方面空气缺陷微腔的增大造成缺陷能级起始于介质带顶端,并逐步向高频空气带移动,即模式波长蓝移,另一方面微腔空间尺寸的增大又造成驻波模式波长红移。两种机制的相消作用造成介质柱结构中模式移动不明显。这一研究结果将为实验制备有机准晶发光器件提供一定的理论基础。

### 参 考 文 献

1 Y. S. Chan, C. T. Chan, Z. Y. Liu. Photonic band gaps in

- two-dimensional photonic-quasicrystals[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**(5): 956~959
- 2 Y. S. Chan, C. T. Cahn, Z. Y. Liu. Band gaps and wave guiding effect in quasiperiodic photonic crystal[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(13): 1848~1850
- 3 Y. Q. Wang, X. Y. Hu, X. S. Xu *et al.*. Localized modes in defect-free dodecagonal quasiperiodic photonic crystals[J]. *Phys. Rev. B*, 2003, **68**(16): 165106
- 4 P. T. Lee, T. W. Lu, F. M. Tsai *et al.*. Whispering gallery mode of modified octagonal quasiperiodic photonic crystal single-defect microcavity and its side-mode reduction[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **88**(20): 201104
- 5 K. Wang. Light localization in photonic band gaps of quasiperiodic dielectric structures[J]. *Phys. Rev. E*, 2010, **82**(4): 045119
- 6 Yin Jianling, Huang Xuguang, Liu Songhao *et al.*. Properties and applications of photonic quasicrystals [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2010, **47**(1): 011601  
殷建玲, 黄旭光, 刘颂豪 等. 准晶光子晶体特性及应用[J]. *激光与光电子学进展*, 2010, **47**(1): 011601
- 7 J. Romero-Vivas, D. N. Chigrin, A. V. Lavrinenko *et al.*. Resonant add-drop filter based on a photonic quasicrystal[J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(3): 826~835
- 8 P. N. Dyachenko, Y. V. Miklyaev. Band structure calculation of 2D photonic pseudoquasicrystals obtainable by holographic lithography[C]. *SPIE*, 2006, **6182**: 618221
- 9 Wen Xisen. Theory and Technology of Photonic/Phononic Crystals[M]. Beijing: Science Press, 2006. 117  
温熙森. 光子/声子晶体理论与技术[M]. 北京: 科学出版社, 2006. 117
- 10 J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, S. H. Fan. Photonic crystals: putting a new twist on light [J]. *Nature*, 1997, **386**(6621): 143~149

栏目编辑: 王晓琰