低折射率对比度下有机八重准周期光子晶体 缺陷模的耦合特性

蔡园园1,王智1,陈笑2,李长伟2,冯帅2,王义全2

¹北京交通大学理学院,北京 100044; ²中央民族大学理学院,北京 100081

摘要 基于有机半导体发光材料,研究了低折射率对比度下八重准晶结构中双缺陷微腔之间的缺陷模的耦合特性。研究结果表明,在八重准晶双9孔缺陷情况下,缺陷模不但发生了分裂,还出现了一个由双缺陷微腔与中间散射体所构建的复合腔新模式。在此基础上,利用缺陷模的三维场分布和模式之间的相位关系,揭示了模式耦合的物理机制,这为后续可见光波段有机半导体光子晶体器件的设计与制备提供了理论依据。 关键词 材料;准晶;缺陷模耦合;低折射率对比度;复合腔 中图分类号 TN256 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201838.0216003

Coupling Properties of Defect Modes in Organic Octagonal Quasiperiodic-Photonic-Crystals Under Low-Refractive-Index Contrast

Cai Yuanyuan¹, Wang Zhi¹, Chen Xiao², Li Changwei², Feng Shuai², Wang Yiquan² ¹College of Science, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China;

 $^{\rm 2}$ College of Science, Minzu University of China, Beijing 100081, China

Abstract The coupling properties of defect modes between the double-defect microcavities in the octagonal quasiphotonic-crystals are investigated under a low-refractive-index contrast based on the organic semiconductor luminescent materials. The study results show that, in the quasicrystal structure with double nine-air-hole-missing microcavities, it is observed that not only the modes split, but also a new mode in the composite cavity constructed by the double-defect microcavities and the intermediate scatterers. Based on this, by using the three-dimensional field distribution and the phase relationship among the defect modes, the physical mechanism of mode-coupling is disclosed. These results provides a theoretical foundation for the future design and fabrication of organic semiconductor photonic crystal devices in visible light band.

Key words materials; quasi-photonic-crystals; defect modes coupling; low-refractive-index contrast; compound resonator

OCIS codes 160.5298; 160.5470; 030.4070

1 引 言

光子晶体的概念从 1987 年被提出后就受到了 学者们的广泛关注^[1-2]。光子晶体结构是由两种或 两种以上具有不同介电常数的介质呈周期性或准 周期性排列而成的超晶格结构。光子带隙和光子 局域是光子晶体最重要的特性,学者们利用光子 晶体带隙及其缺陷结构来调控光场分布^[3-4],并以 此为基础设计制作各类光子晶体激光器、滤波器 和耦合器等有源或无源微纳光电子器件,这些光电 子器件广泛应用于以光子晶体为界面的光通信、光 显示等诸多领域^[5-11]。

收稿日期: 2017-07-11; 收到修改稿日期: 2017-10-12

基金项目:国家自然科学基金(61675238,11374378,11204387)、国家重大科研仪器研制项目(61627814)

作者简介:蔡园园(1989—),女,博士研究生,主要从事光子晶体及激光器方面的研究。

E-mail: CAIYUAN_1988@163.com

导师简介:王智(1971一),男,博士,教授,主要从事光纤通信和光电子器件方面的研究。E-mail: zhiwang@bjtu.edu.cn (通信联系人)

目前,研究人员利用多种方法,如超胞平面波展 开法、紧束缚法等,对各类周期光子晶体进行了全面 研究[12-17]。由于周期性光子晶体中每个结构单元周 围的折射率环境完全一致,其缺陷模式和耦合特性 较为单一。准周期光子晶体相较于周期结构具有旋 转对称性和长程指向性等独特性质,因而容易获得 与入射方向无关的完全带隙,且产生完全带隙的折 射率阈值低。对于横磁(TM)模,二维八重准晶产 生完全带隙的相对介电常数阈值只有1.6(折射率为 1.26)^[18],12 重准晶产生带隙的介电常数阈值为 1.35^[19]。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(折射率为 1.45)或者具有优良发光性能的有机材料,如聚对苯 乙炔(PPV)及其衍生物(折射率为 1.4~2.0)。同 时,准晶结构中的格点(除中心点外)的局域环境不 等价,缺陷模式更加丰富和复杂,使得基于缺陷模调 控的光电子器件设计具有更多的灵活性和多样性。 目前,中国科学院物理所在高折射率 Si 或 InP 等无 机半导体准晶光子晶体的研究方面取得出了一系列 重要成果[7,20-21]。

光子晶体缺陷模是由缺陷周围结构所构建的微

腔对光波的反射形成的。在准晶光子晶体中,缺陷 模的性质除与缺陷分布有关外,还与光子晶体本身 属性有关。考虑到光子晶体材料的折射率对比度对 光反射局域有较大的影响,以及准晶结构获得完全 带隙的折射率阈值低等特性,本文研究了低折射率 对比度下有机八重准晶结构中缺陷模的形成和缺陷 模耦合特性。这些研究结果为后续基于低折射率有 机半导体材料的光子晶体发光器件的研究,如有机 发光二极管和垂直腔面发射激光器的研究提供了一 定的理论依据。

2 有机八重准晶的单缺陷模

完整的二维八重准晶的结构示意图如图 1(a) 所示,其中晶格常数 a = 240 nm,空气孔半径 r = 65 nm。计算中,光子晶体材料选用有机共轭聚合物 PPV 衍生物 MEH-PPV[聚(2—甲氧基,5(2'-乙基 己氧基)-1,4-苯撑乙烯撑)],其折射率为 1.77,荧光 波长为 550~650 nm^[8]。图 1(b)所示为横电(TE) 波在有机八重准晶结构中的透射谱,结果表明,该结 构在波长 580~610 nm 范围内具有优良的光子禁 带,且与有机材料发光谱匹配良好。



图 1 有机八重准晶。(a)示意图;(b)透射谱

Fig. 1 Organic octagonal quasicrystal. (a) Schematic; (b) transmission spectrum

在八重准晶结构中引入单缺陷。当去掉1个 空气孔来构建点缺陷微腔时,较低的材料折射率 造成微腔对光的反射较弱,不能形成缺陷模。在 此基础上,去掉9个空气孔来构造大缺陷微腔,如 图2(a)、(b)所示。在不考虑边模的情况下,光子 带隙内出现了波长分别为603.26 nm 和604.59 nm 的两个缺陷模,如图2(c)所示。这两个缺陷模对 应的场分布分别为四极子模和偶极子模。当9孔 微腔设置在图3(a)所示的中心偏左侧位置时,由 于准晶旋转对称性造成了微腔周围的折射率环境 不同,因此两缺陷模略微蓝移至601.47 nm 和 602.45 nm 处,如图3(b)所示;其对应局域模也是 四极子模和偶极子模式,如图 3(c)所示,模式类型 与图 2(c)一致。

3 有机八重准晶的多缺陷模耦合

在有机半导体光源的制备工艺中,光子晶体发 光单元的级联或利用多缺陷构建发光点阵是制备高 功率光源的常用方法^[22-23]。光子晶体多缺陷的发光 波长及效率等物理特性与缺陷模的耦合密切相关, 因此分析了两种情况下有机准晶双缺陷模式的耦合 特性:1)中心9孔和左侧9孔微腔所组成的双缺陷 模耦合,如图4(a)所示;2)对称分居在中心两侧的 9孔微腔所构建的双缺陷模耦合,如图5(a)所示。



Y 有机八重准晶石两中心 9 孔诚庄。(a) 水息图;(b) 透射盾;(c) 对应峡陷侯时切方印
 Fig. 2 Organic octagonal quasicrystal with a 9-hole-missing defect microcavity located at center. (a) Schematic;
 (b) transmission spectrum; (c) field distributions for the corresponding defect modes





Fig. 3 Organic octagonal quasicrystal with a 9-hole-missing defect microcavity located at left side of center.

(a) Schematic; (b) transmission spectrum; (c) field distributions for the corresponding defect modes

与完整准晶的光子带隙相比,图4(b)所示的光 子带隙里出现了波长分别为593.51,601.60, 603.50 nm的三个模式;图5(b)中也出现了三个模 式,谐振波长分别为599.62,601.74,604.08 nm。虽 然这两种微腔组合均是由两个9孔缺陷组成,并且 在带隙内均出现了三个缺陷模,但是其缺陷模的波 长有较大差异。

为了理解上述缺陷模波长差异的原因,分别模 拟了两种组合结构中缺陷模的场分布。由图 4(c) 可见,谐振波长为 593.51 nm 的偶极子模能量几乎



图 4 中心 9 孔和左侧 9 孔微腔所组成的双缺陷结构。(a)示意图;(b)透射谱;(c)对应缺陷模的场分布 Fig. 4 Double-defect structure composed by microcavities with 9-hole-missing defects located at center and left side. (a) Schematic; (b) transmission spectrum; (c) field distributions for the corresponding defect modes



图 5 分居中心左右两侧的 9 孔微腔所组成的双缺陷结构。(a)示意图;(b)透射谱;(c)对应缺陷模的场分布 Fig. 5 Double-defect structure composed by microcavities with 9-hole-missing defects located on each side of its center. (a) Schematic; (b) transmission spectrum; (c) field distributions for the corresponding defect modes

均匀分布在两个微腔中,而谐振波长分别为 601.60 nm和 603.50 nm 的两个四极子模的大部 分能量则分别局域在中心 9 孔微腔左侧和中心 9 孔微腔中。这是准晶光子晶体的特性及组成光子 晶体的低折射率材料所决定的。虽然组合中两个 缺陷微腔的形貌、尺寸相同,但由于准晶结构不具 备平移对称性,处于不同位置处的两个缺陷周围 的折射率环境不同,因此这两个 9 孔缺陷微腔的 缺陷模谐振波长略有差异。但是,当这两个缺陷 形成组合时,单独的中心微腔的缺陷模 603.26 nm 和单独左侧微腔的缺陷模 601.47 nm 并没有产生 耦合,这是因为空间结构的相互影响使谐振波长发 生了变化。值得注意的是,组合中波长为593.51 nm 的偶极子局域模的缺陷模波长与缺陷微腔单独 存在时所支持的缺陷模波长差异较大。根据耦 合理论,该模式不可能是由缺陷单独存在时的缺 陷模的相互耦合产生。图 4 显示了该偶极子局 域模的能量几乎平均分布在两个组合微腔中,是 属于整个组合的,这与其他两个局域模的形成机 制不同。其主要原因是构成光子晶体的有机材料 的折射率较低,因此局域模的局域长度较大,当两 个微腔距离较近时,微腔之间的散射体对电磁场 影响不大,因而两个9孔缺陷和它们之间的散射 体可以构成一个较大的微腔,该微腔的腔长增大, 因此所支持的谐振波长与单缺陷模波长的差异 较大。

在此基础上分析第二种双缺陷组合,即两个 9 孔微腔对称分居在准晶中心两侧,如图 5(a)所示。 由于两微腔位置对称、形貌相同,因此它们单独存在 时所支持的缺陷模是完全相同的。两个微腔组合后 形成的缺陷模如果发生耦合,理论上将分裂成四个 模式,但图 5(b)模拟结果表明光子带隙内只出现了 三个局域模。 为分析这一原因,模拟仿真这三个模式的场分 布。图 5(c)中波长分别为 599.63 nm 和 604.08 nm 的两个偶极子模是由两个微腔单独存在时所支持的 602.45 nm 模耦合分裂产生的。虽然组合结构中两 缺陷的距离比较远,但由于构成光子晶体的材料折 射率较小,局域模的局域长度较大,因此单个缺陷 所支持的偶极子模在组合结构中的电场交叠较 多,耦合增强,进而分裂为两个偶极子模。图 5 中 601.74 nm 模是四极子局域模,能量分别被束缚在 两个微腔中,可以判定它是两个微腔单独存在时 所支持的缺陷模,仅仅波长略有移动。这个四极 子模并没有像上述偶极子模那样发生模式分裂。 为解释这一现象,分别模拟同一时刻下左右两个 微腔单独存在时所支持的四极子模的三维场分 布,如图 6 所示。





Fig. 6 Quadrupole mode field at 601.47 nm supported by microcavity with 9-hole-missing defects located independently at left or right side of quasicrystals. (a) Two-dimensional distributions; (b) three-dimensional distributions

图 6(a)所示是同一时刻下左侧和右侧 9 孔缺 陷单独存在时位于 601.47 nm 处的四极子模场分布 平面图,红色虚线代表 y 轴,图 6(b)所示是对应三 维场分布图。由于四极子模的电磁场沿着 xy 平面 的对角线传播,因此这个组合结构中波长为 601.74 nm的四极子模的电场会在空间坐标轴 $(0,1.40 \ \mu m),(0,-1.40 \ \mu m)$ 处发生交叠,但是由 于两者在交叠处的光场相位相差 π ,局部放大如 图 6(b)所示,因此这两个模式不会发生耦合。

此外,虽然图 5 中两个微腔之间有能量的弱耦合,如位于波长 604.08 nm 处的缺陷模,但两缺陷的距离较大,两个缺陷和缺陷之间散射体不能构建复合腔。

4 结 论

基于有机半导体发光材料,研究了低折射率对 比度下八重准晶光子晶体双缺陷微腔缺陷模的耦合 特性。不同于应用于通信波段的常规高折射率无机 材料,基于低折射率的有机准晶光子晶体缺陷模更 加丰富和复杂。研究结果表明:在低折射率对比度 下的八重准晶结构中,单个9孔缺陷微腔能较好地 支持偶极子模和四极子模。在双缺陷和多缺陷情况 下,由于材料本身的折射率较小,材料对光的反射能 力较弱,光子晶体微腔对光的局域能力有限,当两个 缺陷发生耦合时,缺陷模不但发生分裂,更主要的是 会忽略两个缺陷之间的散射体,形成一个复合腔,在 离单缺陷模式较远处产生了一个新模式。在此基础 上,利用模场三维分布图分析了缺陷模之间的相位 关系,从而确定了模式之间的耦合特性。这些研究 结果对后续可见光波段有机半导体光子晶体光电子 器件的研究具有十分重要的意义。

参考文献

- Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. Physical Review Letters, 1987, 58(20): 2059-2062.
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. Physical Review Letters, 1987, 58(23): 2486-2489.
- [3] Okano M, Kako S, Noda S. Coupling between a point-defect cavity and a line-defect waveguide in three-dimensional photonic crystal[J]. Physical Review B, 2003, 68(23): 235110.
- [4] Song B S, Noda S, Asano T. Photonic devices based on in-plane hetero photonic crystals[J]. Science, 2003, 300(5625): 1537-1537.
- [5] Mekis A, Chen J C, Kurland I, et al. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides[J]. Physical Review Letters, 1996, 77(18): 3787-3790.
- [6] Park H G, Kim S H, Kwon S H, et al. Electrically driven single-cell photonic crystal laser[J]. Science, 2004, 305(5689): 1444-1447.
- [7] Wang Y Q, Liu J, Zhang B, et al. Simulations of defect-free coupled-resonator optical waveguides constructed in 12-fold quasiperiodic photonic crystals[J]. Physical Review B, 2006, 73(15): 155107.
- [8] Cai Y Y, Chen X, Li N, et al. Electrically pumped photonic crystal laser constructed with organic semiconductors[J]. Laser Physics, 2017, 27 (3): 035801.
- [9] Jeong K Y, No Y S, Hwang Y, et al. Electrically driven nanobeam laser[J]. Nature Communications, 2013, 4: 2822.
- [10] Niu N, Woolf A, Wang D Q, et al. Ultra-low threshold gallium nitride photonic crystal nanobeam laser[J]. Applied Physics Letters, 2015, 106(23): 231104.
- [11] Su K, Wang Z M, Liu J J. Three waveguides directional coupler based on two dimensional square lattice photonic crystal[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(6): 0323002.

苏康, 王梓名, 刘建军. 二维正方晶格光子晶体三光波

导方向耦合器[J]. 光学学报, 2016, 36(6): 0323002.

- [12] Cai X H, Lin X S, Shi Q, et al. Resonant frequency shift in coupled photonic crystal defects described by the tight-binding method[J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56(5): 2742-2746.
- Sozuer H S, Haus J W, Inguva R. Photonic bands: Convergence problems with the plane-wave method[J]. Physical Review B, 1992, 45(24): 13962-13972.
- [14] Yariv A, Xu Y, Lee R K, et al. Coupled-resonator optical waveguide: A proposal and analysis[J]. Optics Letters, 1999, 24(11): 711-713.
- Bayer M, Gurbrod T, Forchel A, et al. Optical demonstration of a crystal band structure formation[J].
 Physical Review Letters, 1999, 83(25): 5374-5377.
- [16] Bayindir M, Temelkuran B, Ozbay E. Tight-binding description of the coupled defect modes in threedimensional photonic crystals[J]. Physical Review Letters, 2000, 84(10): 2140-2143.
- [17] Li C H, Wan Y, Mao Q M. Research of slow light performances of photonic crystal coupled resonator optical waveguides formed by oval rods cavities[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(4): 0416002.
 李长红,万勇,毛强明.椭圆柱微腔光子晶体耦合腔 波导的慢光特性研究[J].光学学报, 2015, 35(4): 0416002.
- [18] Romero V J, Chigrin D N, Lavrinenko A V, et al. Resonant add-drop filter based on a photonic quasicrystal[J]. Optics Express, 2005, 13(3): 826-835.
- [19] Dyachenko P N, Miklyaev Y V. Band structure calculations of 2D photonic pseudoquasicrystals obtainable by holographic lithography[C]. SPIE, 2006, 6182: 618221.
- [20] Wang Y Q, Feng Z F, Xu X S, et al. Uncoupled defect modes in a two-dimensional quasiperiodic photonic crystal[J]. Europhysics Letters, 2003, 64(2): 185-189.
- Wang Y Q, Jin C J, Han S Z, et al. Defect modes in two-dimensional quasiperiodic photonic crystal[J].
 Japanese Journal of Applied Physics, 2004, 43(4A): 1666-1671.
- [22] Wang Z C, Tian B, Marianna Pantouvaki, et al. Room-temperature InP distributed feedback laser array directly grown on silicon[J]. Nature Photonics, 2015, 9(12): 837-842.
- [23] Frost T, Jahangir S, Stark E, et al. Monolithic electrically injected nanowire array edge-emitting laser on (001) silicon[J]. Nano Letters, 2014, 14(8): 4535-4541.