

金属插层对 C₆₀/AlN 一维光子晶体带隙的影响*

闫凌云^{a,b}, 韩培德^{a,b}, 谌静^b, 张彩丽^{a,b}, 刘旭光^{a,c}, 许并社^{a,b}

(太原理工大学 a. 新材料界面与工程教育部重点实验室; b. 材料科学与工程学院; c. 化学化工学院, 太原 030024)

摘要:利用传输矩阵方法,研究了金属 Ag 插层对 C₆₀/AlN 一维光子晶体带隙宽度以及反射率的影响.结果表明:在 C₆₀与 AlN 之间插入 Ag 组成的 [C₆₀/Ag/AlN]_n 一维光子晶体,与未插入 Ag 层相比可使带隙增宽 73.91%,最大反射率提高到 91.01%.该结构可望用于制作紫外线波段的宽带反射镜.

关键词:光子晶体;金属插层;传输矩阵法

中图分类号: O43; TN2

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2009)02-277-4

0 引言

自 1987 年 Yablonovitch^[1] 和 John^[2] 分别提出光子晶体概念以来,光子晶体得到了飞速发展.光子晶体即光子禁带材料 (Photonic Band Gap Materials) 是介电常量被周期性调制,具有光子频率禁带的特殊材料,落在禁带中的光被禁止传播,利用光子晶体的这一特性,人们可以控制光子的运动,产生新的物理效应.由于光通信等领域巨大的潜在发展空间,近年来红外及可见光区域光子晶体的研究受到普遍关注.为了获得更宽的禁带,人们在空间结构以及金属插层等方面进行了大量的尝试,取得了明显的效果^[3-9].而对于波长小于可见光的光子晶体,由于处于该波段材料的介电函数呈复数,存在大量的吸收,因此其发展受到了一定限制.但由于其潜在的应用价值,正在成为研究的热点^[10-12].本文作者曾就 C₆₀/AlN 用于紫外线波段的多层膜光子晶体进行了研究^[13],研究发现其在紫外线波段具有一不

完全带隙,为了解决 C₆₀/AlN 仍存在带隙较窄、反射率较低的缺憾.本文将金属膜具有的共振隧穿效应引入到 C₆₀/AlN 结构,探讨金属 Ag 插入对 C₆₀/AlN 紫外波段带隙结构的影响.

1 计算模型和方法

在光子晶体的理论计算方面,有平面波法^[14-15]、传输矩阵法^[16]和时域有限差分方法^[17]等,对于一维光子晶体,传输矩阵法具有计算简便,适于计算具有吸收的反射特性等优点.本文利用传输矩阵方法,从理论上研究金属 Ag 层的插入对 AlN 和 C₆₀ 组成的复合结构光子带隙的影响.

由两种介电常量相差较大的介电材料交替排列组成的一维光子晶体,若在组成光子晶体的结构中插入金属材料,则这种光子晶体形成金属型光子晶体. A、B 和 C 是具有不同介电常量 ($\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$) 的电介质,层的几何厚度分别为 d_1, d_2, d_3 , 结构如图 1, 由 AlN 和 C₆₀ 交替排列形成的周期结构中,插入厚

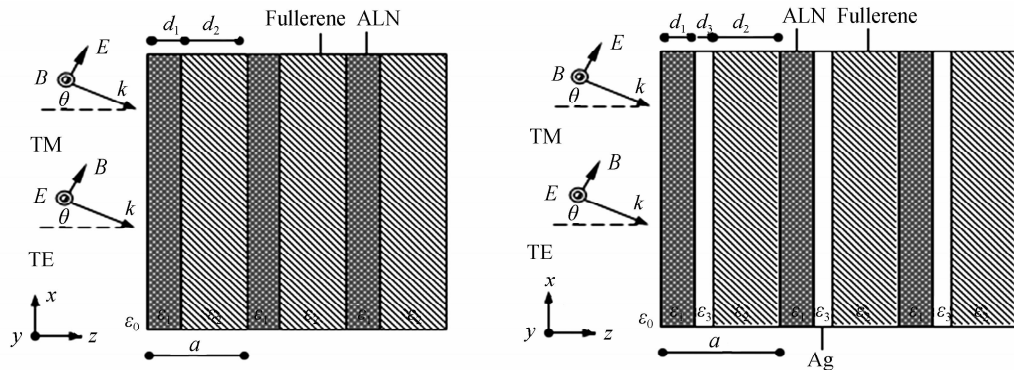


图 1 一维光子晶体和带金属插层光子晶体周期性结构

Fig. 1 Structure of one-dimensional AlN/Fullerene photonic crystal and containing a Ag metal layer photonic crystal

* 国家 973 重点基础研究与发展计划 (2004CB217808)、国家自然科学基金 (90306014, 50874079) 和山西省自然科学基金 (200611053) 资助

Tel: 0351-6018843 Email: hanpeide@126.com

收稿日期: 2007-08-30

度为 6.13 nm 的 Ag 层形成的金属插层光子晶体,入射波的波矢可表示为 $k = k_2 i_2 + k_3 i_3$, 频率表示为 $\omega = c|k|/\epsilon_0$, 其中 c 是真空中光速, i_2, i_3 分别是在 x, z 方向上的单位矢量. 计算软件应用 Glasgow

大学提供的 Translight 程序^[18-19]. 计算基于转移矩阵 TMM 的原理, 通过求解麦克斯韦方程使得计算更有效而且计算能够得到光子晶体的反射性质, 该程序可以计算介电函数为复数的介质组成的光子晶体. 计算中假设一维光子晶体结构在 z 方向上是有限的, 而在 x 和 y 方向上是无限扩展的.

2 计算结果与讨论

计算了 C_{60}/AlN 多层膜理想结构与金属 Ag 插层型光子晶体在不同周期层厚度时的反射率. 计算采用的介电函数可表示为 $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$, ϵ' 和 ϵ'' 分别表示介电函数的实部和虚部. C_{60} , Ag 和 AlN 介电常量的实部和虚部见图 2^[20-22].

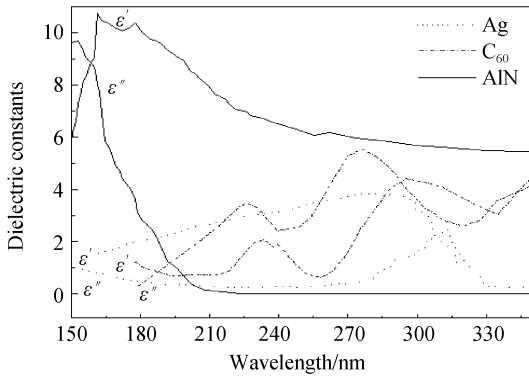
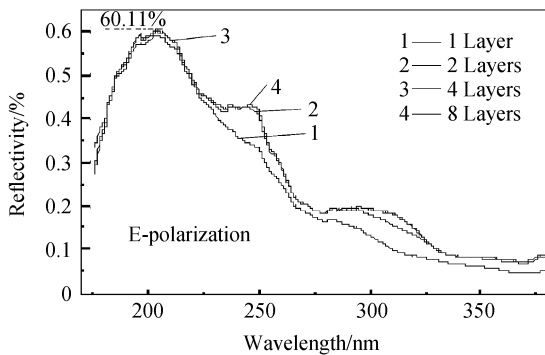


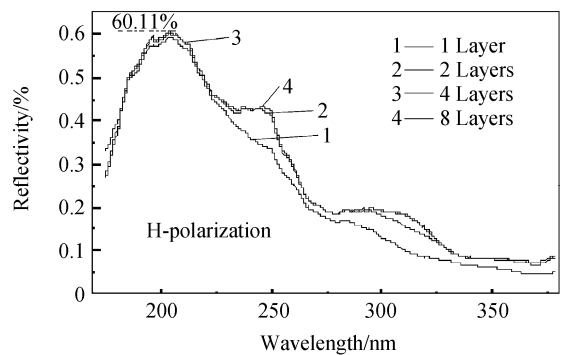
图 2 AlN、C₆₀ 和 Ag 在紫外线波段的介电函数曲线
Fig. 2 Real and imaginary parts of the dielectric function of AlN, C₆₀ and Ag layers in UV region

对于由 $[AlN(21\text{ nm})/C_{60}(49\text{ nm})]_n$ 组成的体系, 计算表明, 随着 n 增加, 体系的透射率在 $150\sim 400\text{ nm}$ 范围内逐渐减小, 当 $n \geq 8$ 时在该波段内的透射率基本为零, 即在紫外线波段具有光子带隙, 带隙位置为 $192\sim 215\text{ nm}$. 由于体系在该波段内存在吸收, 因此反射率不是 100%, 最大反射率为 60.11%. 在 $[AlN(21\text{ nm})/C_{60}(49\text{ nm})]_n$ 体系内, 通过在 AlN 和 C₆₀ 之间插入一定厚度的金属 Ag 层, 其结构为 $[AlN/Ag/C_{60}]_n$, 计算结果表明, 插入金属层可以显著扩大光子带隙的宽度. 当体系组成为 $[AlN(21\text{ nm})/Ag(6.13\text{ nm})/C_{60}(49\text{ nm})]_n$, $n \geq 8$ 时, 最大反射率为 64.43%, 带隙位置向长波方向偏移, 位置为 $205\sim 245\text{ nm}$, 带隙的宽度大大增加, 增大率为 73.91%. 图 3 给出了介质光子晶体与金属插层光子晶体 TE/TM 两种模式下的反射率曲线 (垂直入射).

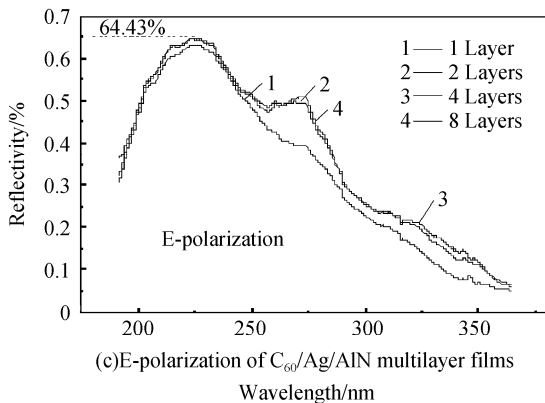
由于 Ag 的厚度在十几纳米内才表现出共振隧穿效应, 选取 Ag 单层厚度为 6.13 nm, 研究了不同入射角下的反射特性. 图 4(a) 是未插入银层前的不同入射角下的 TM 反射图, 图 4(b) 是 Ag 层总厚度在 49.04 nm 时在不同入射角情况下对应不同波长的 TM 反射谱图. 从图中可以看出, 随着掠射角的增加即入射方向的改变, 金属介质光子晶体光子带隙位置和宽度没有太明显的变化; 与介质光子晶体相比变化趋势相近, 但反射率有较大变化, 其中 Ag 层的插入可使反射率提高.



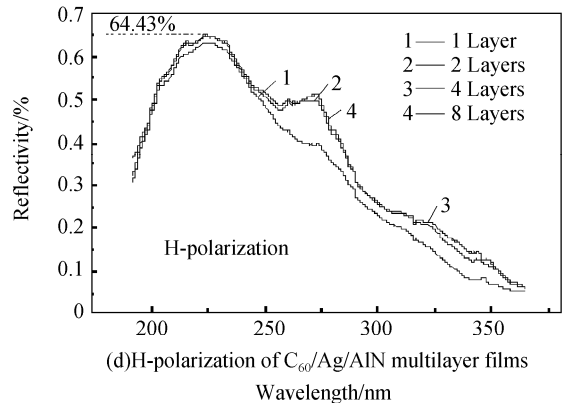
(a) E-polarization of C₆₀/AlN multilayer films



(b) H-polarization of C₆₀/AlN multilayer films



(c) E-polarization of C₆₀/Ag/AlN multilayer films



(d) H-polarization of C₆₀/Ag/AlN multilayer films

图 3 介质光子晶体与金属介质光子晶体反射率

Fig. 3 Calculated reflectivities vs. wavelength for two kinds of photonic crystals

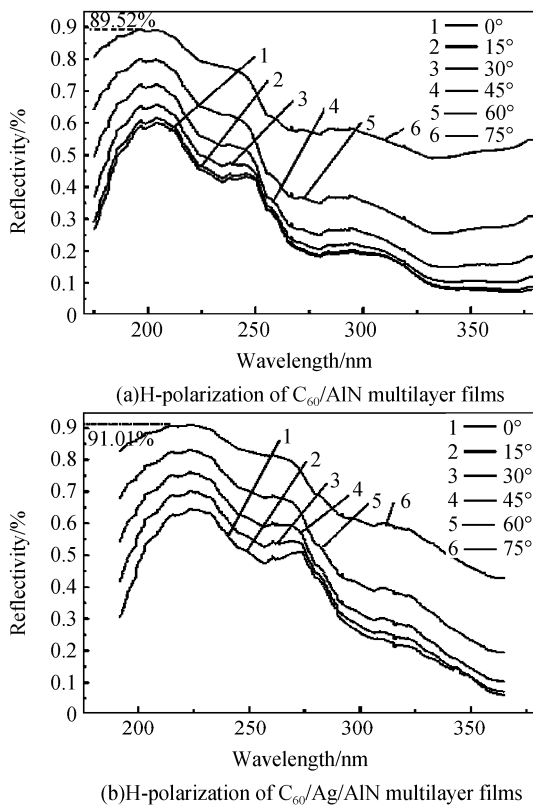


图 4 C_{60}/AlN 多层膜与 $C_{60}/\text{Ag}/\text{AlN}$ 金属介质多层膜电磁波在 z 方向 $0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ$ 方向 TM 偏振模式计算反射谱

Fig. 4 Calculated reflectance for various incidence angles: $0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ and 75°

3 结论

利用传输矩阵方法,研究了由 AlN/C_{60} 一维光子晶体以及插入金属 Ag 形成的金属型光子晶体在紫外波段的光学性质. 研究表明,在 AlN 和 C_{60} 之间引入金属膜 Ag 组成的 $[\text{AlN}/\text{Ag}/C_{60}]_n$ 一维光子晶体,最大反射率可达 91.01%,带隙位置为 205~245 nm,Ag 的插入可使 $[\text{AlN}/C_{60}]_n$ 光子晶体的禁带宽度增大,增大率为 73.91%. 计算数据说明这种结构在紫外波段有增宽带隙的作用,存在不完全带隙,此金属型光子晶体有望制作宽带光学反射镜.

参考文献

[1] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics[J]. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(20): 2059-2062.
 [2] JOHN S. Strong localization of photons in certain disorder-ed dielectric super-lattices[J]. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(23): 2486-2489.
 [3] JIN Chong-jun, CHENG Bing-ying, Man Bao-yuan, et al. Two-dimensional dodecagonal and decagonal quasiperiodic photonic crystals in the microwave region[J]. *Phys Rev B*, 2000, **61**(16): 10762-10767.
 [4] BISWAS R, SIGALAS M M, SUBRAMANIA G, et al.

Photonic band gaps of porous solids[J]. *Phys Rev B*, 2000, **61**(4): 4549-4553.
 [5] ARTIGAS D, TORNER L. Dyakonov Surface Waves in Photonic Metamaterials[J]. *Phys Rev Lett*, 2005, **94**(1-4): 013901.
 [6] KNIGHT J C. Photonic crystal fibers[J]. *Nature*, 2003, **424**(6950): 847-851.
 [7] CHOI Y K, HA Y K, KIM J E, et al. Antireflection film in one-dimensional metallo-dielectric photonic crystals [J]. *Optics communications*, 2004, **230**(4-6): 239-243.
 [8] LIU Jia-yu, WANG Yong-chang. Transmission of one-dimensional Au/MgF₂ metalodielectric photonic crystals[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(1): 74-78.
 刘佳誉,王永昌. 一维 Au/MgF₂ 光子晶体的透射性质[J]. *光子学报*, 2006, **35**(1): 74-78.
 [9] LIU Qi-neng. Properties of polarization of defect mode of one-dimensional photonic crystal[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, **36**(8): 1431-1434.
 刘启能. 一维光子晶体缺陷膜偏振特性的研究[J]. *光子学报*, 2007, **36**(8): 1431-1434.
 [10] SHEPHERD T J, ROBERTS P J, LOUDON R. Soluble two-dimensional photonic-crystal model[J]. *Phys Rev E*, 1997, **55**(5): 6024-6038.
 [11] YANNOPAPAS V, MODINOS A, STEFANOPOULOS N. Optical properties of metalodielectric photonic crystals[J]. *Phys Rev B*, 1999, **60**(18): 5359-5365.
 [12] LARA A Z, MONDRAGON J J S, CISNEROS M T, et al. Characterization of metal-dielectric photonic crystals [J]. *Optical Materials*, 2006, **29**(1): 60-64.
 [13] XU Bing-she, HAN Pei-de, LIANG Jian, et al. Theoretical investigation of the reflectivity of fullerene-(C_{60}, C_{70})/AlN multilayers in UV region[J]. *Solid State Communications*, 2005, **133**(6): 353-356.
 [14] DAVID A, BENISTY H. Fast factorization rule and plane-wave expansion method for two-dimensional photonic crystals with arbitrary hole-shape[J]. *Phys Rev B*, 2006, **73**(13): 075107.
 [15] UEDA K, DOTERA T, GEMMA T. Photonic band structure calculations of two-dimensional Archimedean tiling patterns [J]. *Phys Rev B*, 2007, **75**(4): 195122.
 [16] LI Zhi-yuan, HO Kai-ming. Application of structural symmetries in the plane-wave-based transfer-matrix method for three-dimensional photonic crystal waveguides[J]. *Phys Rev B*, 2003, **68**(1-20): 245117.
 [17] WANG Wei-jiang, XIAO Wan-neng, ZHOU Jin-yun. The unidirectional transmission properties of nonlinear photonic crystals[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, **36**(3): 399-443.
 王维江,萧万能,周金运. 非线性光子晶体的单向透射性[J]. *光子学报*, 2007, **36**(3): 399-443.
 [18] PENDRY J B, MACKINNON A. Calculation of photon dispersion relation[J]. *Phys Rev Lett*, 1992, **69**(19): 2772-2775.
 [19] BELL P M, PENDRY J B, MORENO L M, et al. A program for calculating photonic band structures and transmission coefficients of complex structure[J]. *Comput Phys Commun*.

- 1995, **85**(2):306-322.
- [20] KATAURA H, ENDO Y, ACHIBA Y, *et al.* Dielectric constants of C_{60} and C_{70} thin films[J]. *J Phys Chem Solids*, 1997, **58**(11):1913-1917.
- [21] FHRENREICH H, PHILIPP H R. Optical Properties of Ag and Cu[J]. *Phys Rev*, 1962, **128**(4):1622-1629.
- [22] BENEDICT L X, WETHKAMP T, WILMERS K, *et al.* Dielectric function of wurtzite GaN and AlN thin films[J]. *Solid State Commun*, 1999, **112**(4):129-133.

Effect of Inserted Metal Ag Layer on Photonic Band Gap of One-dimensional C_{60}/AlN Photonic Crystals

YAN Ling-yun^{a,b}, HAN Pei-de^{a,b}, CHEN Jing^b, ZHANG Cai-li^{a,b}, LIU Xu-guang^{a,c}, XU Bing-she^{a,b}
(*a. Key Laboratory of Interface Science and Engineering in Advanced Materials; b. College of Materials Science and Engineering; c. College of Chemistry and Chemical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

Received date: 2007-08-30

Abstract: The photonic band structure of one-dimensional metallic cladding photonic crystals was simulated by the transfer matrix method (TMM). By inserting metal Ag layers between C_{60} and AlN layers, a new metallic cladding photonic crystal $(C_{60}/\text{Ag}/\text{AlN})_n$ could be made. The new structure shows a wider band gap than in the structure of $(C_{60}/\text{AlN})_n$ in UV region. The modes can broaden the band gaps by 73.91% and exhibit a high reflectivity of 91.01%. The metallic cladding photonic crystals is ideal candidates for making reflector. The characteristics of the structure could be used in a low-loss broad band reflector.

Key words: Photonic crystals; Metallic cladding; Transfer matrix method



YAN Ling-yun was born in 1980. Now he is a M. S. degree candidate at College of Materials Science and Engineering of Taiyuan University of Technology, and his main research interests focus on photonic crystals.