Vol. 39 No. 1 January 2010

文章编号:1004-4213(2010)01-0076-4

可见光波段 SiO₂/CdSe一维光子晶体及缺陷模的研究*

韩培德,张璐,王灿,闫新,许并社

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

摘 要:采用 SiO₂/CdSe 构建了可见光波段一维光子晶体结构,并在其中引入 LiTaO₃ 缺陷层.利用传输矩阵法,分析了电磁波在无缺陷与含 LiTaO₃ 缺陷层两种光子晶体中的带隙结构,研究了缺陷层参量对光子晶体可见光波段带隙结构的影响规律.计算结果表明:LiTaO₃ 的引入,有利于带隙 宽度的增加,调整缺陷层结构参量,缺陷模的位置可在不同颜色区域出现,如红光、黄光等缺陷模. 该结构有望用于制作可见光波段的滤波器.

关键词:光子晶体;缺陷层;可见光波段;传输矩阵法

中图分类号:O43;TN2 **文献标识码**:A

doi:10.3788/gzxb20103901.0076

0 引言

自 1987 年 Yablonovitch^[1]和 John^[2]分别提出 光子晶体以来,光子晶体得到了飞速发展.近几年由 于光子晶体在光通信等领域有着巨大的应用潜力, 尤其红外及可见光区域光子晶体的研究已成为研究 者普遍关注的焦点^[3-6].

光子晶体一方面可以抑制自发辐射,另一方面 若在一维光子晶体中引入缺陷,光子禁带中会出现 品质因子非常高的杂质态,具有很大的态密度,实现 了自发辐射的增强,形成了缺陷模^[7-11].光子晶体中 的禁带和禁带中的缺陷模可以很方便地禁止或允许 一定频率的光子通过,这种特性决定了光子晶体具 有广泛的应用潜力.利用掺杂光子晶体来抑制或增 强自发辐射,可以制造高效率和零阈值的激光器、高 品质的激光谐振腔、以及高效发光二极管等^[12].

光子晶体中引入的缺陷可以是点缺陷、线缺陷 或面缺陷.对于一维光子晶体,可以引入平面缺陷来 产生缺陷模结构,引入缺陷的光子晶体也可看作 F-P腔,可作全介质窄带滤光片,它是在有限的周期结 构中引入缺陷层而构成的.这种结构对于垂直腔反 射激光器分布式布喇格反射器(Distributed Bragg Reflector,DBR)结构设计、高品质的激光谐振腔设 计以及窄带滤波和多通滤波中都有潜在的应用价 值^[13-14]. 本文将在探讨一维光子晶体 SiO₂/CdSe 带隙 结构的基础上,引入缺陷层 LiTaO₃,构造一维缺陷 光子晶体,并进一步探讨插层厚度对缺陷模位置的 影响.

1 计算方法与计算模型

在光子晶体的理论计算方面,有平面波法^[15-16]、 传输矩阵法^[17]和时域有限差分方法^[18-19]等,对于一 维光子晶体,传输矩阵法具有计算简便,适于计算含 有缺陷模型的带隙特性等优点.这里首先构建由 SiO₂/CdSe 组成的一维光子晶体结构模型,图 1 (a),其中 d_1,d_2 分别代表 SiO₂和 CdSe 的厚度,周 期尺寸 $a = d_1 + d_2, \epsilon_1, \epsilon_2$ 分别代表 SiO₂和 CdSe 的 介电常量.为了研究光子晶体 SiO₂/CdSe 在引入插 层 LiTaO₃后的带隙结构,在一维光子晶体 SiO₂/ CdSe 模型的基础上设计了超单胞[SiO₂/CdSe]_N [SiO₂/LiTaO₃/SiO₂][CdSe/SiO₂]_N,见图 1(b), 其中插层 LiTaO₃的厚度为 $2d_3, \epsilon_3$ 为 LiTaO₃的介 电常量.入射波的波矢可表示为 $k = k_2 i_2 + k_3 i_3, 频率$ $表示为 <math>w = c |k|/\epsilon_0$,其中 c 是真空的速度, i_2, i_3 分 别是在 x, z方向上的单位矢量.

计算软件使用 Glasgow 大学的 Translight 程 序^[20]. 计算基于传输矩阵(TMM)的原理,通过求解 麦克斯韦方程得到光子晶体的反射性质. 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.

Tel:0351-6014852 收稿日期:2009-02-27

^{*} 国家自然科学基金(50874079)和山西省自然科学基金 (200611053)资助



2 计算结果与讨论

2.1 无缺陷一维光子晶体结构

为了计算 SiO₂/CdSe 多层膜结构在不同周期 层厚度时的反射率,本文取 $a=235 \text{ nm}, d_1/a=0.4$. 在可见光波段下,SiO₂ 和 CdSe 的介电常量分别为 $\epsilon_1=2.8, \epsilon_2=10.2$.

对于由[SiO₂(94 nm)/CdSe(141 nm)],组成的 体系,计算结果如图 2.可以看出在 TE 偏振模式 下,体系在 553~678 nm 波段范围内的反射率随着 周期层数的增加而逐渐增加.当 $n \ge 8$ 时体系在该 带隙波段内的反射率达到最高 100%,即该体系在 553~678 nm 有一光子带隙存在,且当周期层数 $n \ge 8$ 时带隙趋于稳定.



图 2 光子晶体 SiO₂/CdSe TE 偏振模式反射谱 Fig. 2 Calculated reflectivities vs. wavelength for TE-polarization of SiO₂/CdSe multilayer films

为了进一步分析其带隙特性,图 3 为体系在不同入射角下的反射特性.图中曲线周期层数为 16 层,由图中可以看出入射角的变化对带隙位置和宽度产生了一定的影响.当入射角由 Z 轴向 X 轴偏转时,随着掠射角的增加,带隙略微变窄并移向波长较短的方向;而由 Z 轴向 Y 轴偏转时,随着掠射角的增加,带隙宽度略有增加,但带隙位置变化不大.可以看出在仅存在 TE 偏振模式的光子波长范围内,当入射角分别向 X 轴和 Y 轴偏转时,所得到的光子带隙在 553~620 nm 的波段范围内是不受入射角度影响的.





multilayer films for various incidence angles 2.2 一维含缺陷光子晶体结构

在 SiO₂/CdSe 一维光子带隙结构的基础上,在 [SiO₂/CdSe]₁₆中引入 LiTaO₃ 缺陷层构建出含缺陷 层的 超 单 胞 [SiO₂/CdSe]_N [SiO₂/LiTaO₃/SiO₂] [CdSe/SiO₂]_N,其中 N=7,每个单胞的厚度 *a* 仍取 235 nm,SiO₂ 和 CdSe 的厚度 d_1 和 d_2 仍分别取 94 nm和 141 nm,LiTaO₃ 的介电常量 ε_3 取 48.

通过计算无缺陷[SiO₂/CdSe]₁₆和[SiO₂/

 $CdSe]_7[SiO_2/LiTaO_3/SiO_2][CdSe/SiO_2]_7$ 有缺陷的带隙特性,见图4.和原有无缺陷结构相比,插入



- 图 4 [SiO₂/CdSe]₁₆与[SiO₂/CdSe]₇[SiO₂/LiTaO₃/SiO₂] [CdSe/SiO₂]₇反射谱(a)[SiO₂/CdSe]₁₆TE偏振 模式,(b)[SiO₂/CdSe]₇[SiO₂/LiTaO₃/SiO₂] [CdSe/SiO₂]₇TE偏振模式(d₃/a=0.6)
- $\begin{array}{ll} Fig. \ 4 & Calculated \ reflectivities \ vs. \ wavelength \ for \ (a) \\ & TE-polarization \ of \ \left[SiO_2/CdSe \right]_{16} \right\}_2 \ multilayer \\ & films. \ (b) \ TE-polarization \ of \ \left[SiO_2/CdSe \right]_7 \\ & \ \left[SiO_2/LiTaO_3 \right] \ \left[LiTaO_3/SiO_2 \right] \ \left[CdSe/SiO_2 \right]_7 \\ & \ (d_3/a=0.6) \end{array}$

插层后带隙宽度略有增加,且带隙中出现了缺陷模, 在 $d_3 = d_2 = 141$ nm 时,带隙增宽了约 12.80%(548 ~689 nm),缺陷模位置为 642 nm 波段,即在红光 区域出现了缺陷模,缺陷模透射率为 77.75%.

为了考察缺陷层 LiTaO₃ 厚度对缺陷模的影响,选取不同的 d_3/a 来进行计算,计算结果如图 5, 当 d_3/a (a = 235 nm) = 0.3 时,带隙增宽了约 16.80%(546~692 nm),这时出现了两个缺陷模,

- $\mathbb{E} \ 5 \ \left[\operatorname{SiO}_2/\operatorname{CdSe}\right]_7 \left[\operatorname{SiO}_2/\operatorname{LiTaO}_3/\operatorname{SiO}_2\right] \left[\operatorname{CdSe}/\operatorname{SiO}_2\right]_7$
- 电磁波在 z方向,不同 $d_3/a(a=235 \text{ nm})$ TE Fig. 5 Calculated reflection coefficients response for

different d_3/a (a=235 nm) for TE

位置分别为 563 nm 和 669 nm,这两个缺陷分别对 应于黄光区域和红光区域,缺陷模透射率分别为 94.91%和 98.18%;当 $d_3/a(a=235 \text{ nm})=0.96$ 时,带隙增宽了约 13.60%(546~688 nm),这时出 现了两个较为明显的缺陷模,位置分别为 555 nm 和 626 nm,即在绿光和红光区域分别出现了缺陷 模,缺陷模透射率分别为 91.61%和 18.75%.



可以看出,通过引入不同厚度的 LiTaO。缺陷 层,可以展宽原有带隙宽度,并在可见光波段内的单 色光波段出现缺陷模,如可以在可见光波段的红光、 黄光、绿光等区域得到透射率较好的缺陷模.

3 结论

利用传输矩阵方法,研究了 SiO₂/CdSe 一维光子晶体以及引入缺陷层 LiTaO₃ 形成的光子晶体[SiO₂/CdSe]₇[SiO₂/LiTaO₃/SiO₂][CdSe/SiO₂]₇ 在可见光波段的光学特性.研究结果表明,与无缺陷 SiO₂/CdSe 一维光子晶体相比,插入插层后形成的含缺陷一维光子晶体[SiO₂/CdSe]₇[SiO₂/LiTaO₃/SiO₂][CdSe/SiO₂]₇,在可见光波段的带隙较无缺陷结构带隙宽度略有加宽,通过改变插层 LiTaO₃ 的厚度,可以在可见光波段的不同颜色区域得到缺陷模,此结构有望用作可见光波段的滤波器.

参考文献

- 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 disordered dielectric super-lattices[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(23):2486-2489.
- [3] BISWAS R, SIGALAS M M, SUBRAMANIA G, et al. Photonic band gaps of porous solids[J]. Phys Rev B,2000,61: 4549-4553.
- [4] ARTIGAS D, TORNER L. Dyakonov surface waves in photonic metamaterials[J]. Phys Rev Lett, 2005, 94:013901.
- [5] KNIGHT J C. Photonic crystal fibers [J]. Nature, 2003, 424 (6950):847-851.

- [6] CHOI Y K, HA Y K, KIM J E, et al. Antireflection film in onedimensional metallo-dielectric photonic crystals [J]. Opt Commun, 2004, 230:239-243.
- [7] NODA S, CHUTINAN A, IMADA M. Trapping and emission of photos by a single defect in a photonic bandgap structure
 [J]. Nature, 2000, 407:608-610.
- [8] SHI B, JIANG Z M, WANG X. Defective photonic crystals with greatly enhanced second - harmonic generation[J]. Opt Lett, 2001,26(15):1194-1196.
- [9] FIGOTIN A, GORENTSVEIG V. Localized electromagnetic waves in a layered periodic dielectric medium with a defect[J]. *Phys Rev B*, 1998, 58(1):180-188.
- [10] KURIZKI G, HAUS J W. Special issue on photonic band structures[J]. J Mod Opt, 1994, 41(2):171-172.
- [11] RARITY J, WEISBUCH C. Microcavities and photonic bandgaps[M]. Dordrecht: Kluwer Academic Press, 1996.
- [12] CHEN Xian-feng, SHEN Xiao-ming, JIANG Mei-ping, et al. Studis on the defect mode properties of 1D photonic crystal
 [J]. Acta Photonica Sinica, 2005, 34(12):1876-1880.
 陈宪锋,沈小明,蒋美萍,等.一维光子晶体的缺陷模特性研究
 [J]. 光子学报, 2005, 34(12):1876-1880.
- [13] XU Gui-wen, OU-YANG Zheng-biao. A new double-wavelength photonic crystal resonator [J]. Acta Photonica Sinica, 2007, 36(3):429-433.
 许桂雯,欧阳征标. 一种新型光子晶体双色谐振腔[J]. 光子学

报,2007,36(3):429-433.

- [14] QIAN Xiang-zhong. Design of the tunable photonic crystal filter based on ferroelectric liquid crystal defect [J]. Acta Photonica Sinica, 2007, 36(3):425-428.
 钱祥忠. 铁电液晶缺陷光子晶体调谐滤波器的设计[J]. 光子 学报,2007,36(3):425-428.
- [15] DAVID A, BENISTY H. Fast factorization rule and planewave expansion method for two-dimensional photonic crystals with arbitrary hole-shape[J]. *Phys Rev B*,2006,**73**:075107.
- UEDA K, DOTERA T, GEMMA T. Photonic band structure calculations of two-dimensional Archimedean tiling patterns
 [J]. Phys Rev B, 2007, 75: 195122.
- [17] 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,2003,68:245117.
- [18] CHAN C T, YU Q L, HO K M. Order-N spectral method for electromagnetic waves[J]. Phys Rev B, 1995, 51(23): 16635-16642.
- [19] WARD A J, PENDRY J B. Calculating photonic Green's functions using a nonorthogonal finite- difference time-domain method[J]. Phys Rev B, 1998, 58(11):7252-7259.
- [20] PENDRY J B, MACKINNON A. Calculation of photon dispersion relation[J]. Phys Rev Lett, 1992, 69:2772-2775.

Doped Modes of SiO₂/CdSe One-dimensional Photonic Crystal with LiTaO₃ in Visible Region

HAN Pei-de, ZHANG Lu, WANG Can, YAN Xin, XU Bing-she

(a. Key Laboratory of Interface Science and Engineering in Advanced Materials, Ministry of Education;
 b. College of Materials Science and Engineering,
 Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: SiO₂ and CdSe are used to construct one-dimensional photonic crystal in visible region, including the introduction of LiTaO₃ defect layer. The formation of photonic band gaps is exhibited and confirmed by a calculation of the transfer matrix method (TMM). There becomes defect modes in the photonic forbidden band gap compared with the photonic crystals without defects. The position, amount and reflection properties of the defect modes are related with the form of defect and the thickness of defect and periodicity of photonic crystals. It is shown that the variety of the width of impure layer in one-dimensional photonic crystal and the periods number layers of photonic crystal can alter the transmission, the location and numbers of photonic defect mode. When the thickness of LiTaO₃ inserts layer is regulated properly, for instance, the defect module can be appeared on red light, yellow light area of visible region. The structure should enable new applications for photonic crystal devices design.

Key words: Photonic crystals; Defect mode; Visible region; Transfer matrix method



HAN Pei-de was born in 1964. He is a professor, Doctor of Engineering, his research interests focus on the molecular simulationis and photonic crystals.