

· 光电器件与材料 ·

基于 FDTD 法模拟一维 TiO_2 光子晶体缺陷态的研究

郭茂田, 任志雷

(郑州大学物理工程学院, 河南 郑州 450052)

摘要:介绍了时域有限差分法(FDTD)的基本原理,设计了一个由 TiO_2 和 SiO_2 组成的 $(AB)^M A$ 结构一维光子晶体模型(A 为 TiO_2 , B 为 SiO_2 , $M=8$),并对光子晶体中传播的电磁场作了模拟和分析.结果表明:不通过掺杂的方法,只是改变光子晶体的结构参数也可在光子带隙中引入缺陷态,且缺陷态的中心波长和宽度随结构参数的改变而变化.

关键词:时域有限差分法(FDTD);光子晶体; $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$;光子带隙

中图分类号: TN304.2

文献标识码: A

文章编号: 1673-1255(2010)06-0041-05

FDTD Simulated Study on the Photonic Band Gap of One-Dimensional TiO_2 Photonic Crystal

GUO Mao-tian, REN Zhi-lei

(Physical Engineering College of Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China)

Abstract: The principle of finite difference time domain (FDTD) was presented, A TiO_2 photonic crystal (PC) with $(AB)^M A$ structure was designed, in the structure A is TiO_2 , B is MgF_2 and $M=8$, and analysis of electromagnetic field in 1D photonic scrystal (PC) was performed. The results show that without the doping method, it can also introduce the defect state into the photonic band gap only by changing the structural parameter, and the central wavelength and width of the defect state change with the structural parameter.

Key words: finite difference time domain (FDTD); photonics crystal; $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$; photonics band gap

光子晶体由于具有“光子禁带”和“光子局域”的特性,使得人们对于光子晶体的研究热潮一浪高过一浪.光子晶体不仅具有理论价值,更具有非常广阔的应用前景,这个领域已经成为国际学术界的研究热点.1999年底,光子晶体方面的研究还被《科学》杂志评选为十大重大进展的研究领域之一.

光子晶体的概念是在1987年分别由S. John和E. Yablonovitch提出的.它是一种折射率(或介电常数)沿空间方向按一定周期变化的人工微结构材料,具有调制光子在晶体中传播状态的能力.人们在研究中发现,光在这类材料中传播时具有类似于电子在半导体材料中运动的某些行为,例如频率在一定范围内的人射光禁止在光子晶体中传播,即存在光带隙现象^[1,2].从结构上划分,光子晶体可分为一维、二维和

三维光子晶体,分别对应的是折射率的变化在空间的一个、两个和三个方向上呈现周期性.由于一维光子晶体在结构上最为简单,易于制备,所以目前已在光纤、光滤波器和半导体激光器中得到了应用^[3,4].

无缺陷光子晶体的介质折射率变化是有严格周期性的,类似于本征半导体材料,而晶体中的杂质或缺陷会在禁带中形成杂质能级.受此启发,如果在光子晶体中引入某种程度的缺陷,光子晶体原有的对称性就被破坏,在光子晶体的禁带中就可能出现频率极窄的缺陷态,与缺陷态频率吻合的光子就有可能传播或被局域在缺陷位置,光波一旦偏离其缺陷位置,就将迅速衰减^[5].由于缺陷层的折射率、位置及光学厚度等可以有各种各样的变化,因此对光子禁带中出现的缺陷态的特征也会各不相同.文中利

收稿日期:2010-12-06

作者简介:郭茂田(1960-),男,教授,主要从事光电材料与器件的研究.

用时域有限差分法(FDTD)研究了一维 $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ 光子晶体中不同缺陷层的性质对其缺陷态的影响,该问题的研究对于设计宽带反射镜、超窄带滤波器等都有重要的意义^[6].

1 时域有限差分法(FDTD)

时域有限差分(finite-difference time domain,简称 FDTD)法是一种电磁场的数值计算方法,是解决电磁问题的一种数值技术,它是在 1966 年由 K. S. Yee 首次提出的. FDTD 法是从概括电磁场普遍规律的麦克斯韦方程出发,将 Maxwell 方程组的旋度方程在直角坐标系中展开成 6 个标量场分量的方程,再将方程组中的微分式用有限差分式代替,这样即得到 FDTD 法的差分方程;同时,用具有相同电参量的空间网格来模拟被研究对象,然后选取合适的场初始值和计算空间的边界条件,就可以得到包含时间变量的 Maxwell 方程的四维数值解,再对时间进行迭代,即可得到任意时刻的电磁场分布^[7,8].

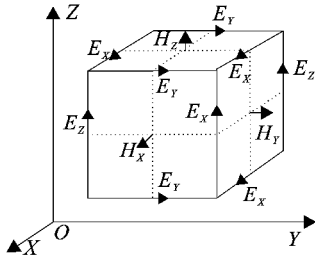


图 1 Yee 元胞中的电场和磁场分量

图 1 是由 Yee 首先提出来的电磁场空间网格划分体系,也叫做 Yee 元胞.这是在直角坐标系下的划分形式,电磁场各分量的空间分布如图 1 所示.电场和磁场被交叉放置,电场分量位于网格单元每条棱的中心,磁场分量位于网格单元每个面的中心,每个磁场(电场)分量都有 4 个电场(磁场)分量环绕.这样不仅保证了介质分界面上切向场分量的连续性条件得到自然满足,而且还允许旋度方程在空间上进行中心差分运算,同时也满足了法拉第电磁感应定律和安培环路积分定律,也可以很恰当地模拟电磁波的实际传播过程.电磁场的 Maxwell 旋度方程为

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} - \sigma_m \vec{H} \quad (1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} \quad (2)$$

其中, ϵ 和 μ 分别为介质的介电常数和磁导率; σ 和 σ_m 为电导率和等效磁导率; \vec{E} 和 \vec{H} 为电场强度矢量和磁

场强度矢量,将其标量化,并根据图 1 定义网格点的坐标 (x, y, z) 为 $(x, y, z) = (i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z)$, 其中 $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 是离散的空间网格坐标分别在 x, y 和 z 方向上的空间网格间距; i, j, k 都为整数.如果用 Δt 表示时间的离散步长, n 表示时间步数,任意一个时间和空间变量的函数可以写成以下形式

$$F^n(x, y, z) = F(i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z, n \Delta t)$$

由于考虑的是一维问题,可得到电磁场量及介电常数只与传播方向有关,故利用中心差分近似,同时利用二阶精度的中心有限差分式来表示函数对空间和时间的偏导数,即可得到一维问题的 FDTD 基本差分式

$$E_x^{n+1}(k) = E_x^n(k) - \frac{\Delta t}{\epsilon(k)} \cdot \frac{H_y^{n+1/2}(k) - H_y^{n+1/2}(k-1)}{\Delta z} \quad (3)$$

$$H_y^{n+1/2}(k) = H_y^{n-1/2}(k) - \frac{\Delta t}{\mu} \cdot \frac{E_x^n(k+1) - E_x^n(k)}{\Delta z} \quad (4)$$

其中, k 为沿 z 方向空间步长 Δz 的个数.

2 模型构建

文中是对 $(AB)^M A$ 结构模型的 TiO_2 光子晶体进行模拟计算和分析,该结构模型中 A 为 TiO_2 , 其折射率为 $n_1 = 2.35$ ^[13], 薄膜厚度为 $W_1 = 319 \text{ nm}$; B 为 SiO_2 , 其折射率为 $n_2 = 1.46$, 薄膜厚度为 $W_2 = 514 \text{ nm}$; $M = 8$; 周边介质为空气, 即折射率 $n_0 = 1.00$. 该光子晶体的模型如图 2 所示.

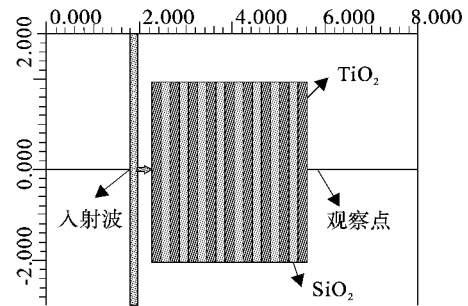


图 2 $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ 多层膜模型

为了得到宽频响应,设置的人射波为高斯调制脉冲波,描述如下

$$E(t) = E_0 \cdot e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{W})^2} \cdot \sin(\omega_0 t) \quad (5)$$

其中, t_0 为时间偏移, W 为高斯半宽, ω_0 为载波角频率, $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$, E_0 为幅值. 设置 $t_0 = 4.0 \times 10^{-14} \text{ s}$, $W = 1.5 \times 10^{-14} \text{ s}$, $\lambda_0 = 3000 \text{ nm}$, $E_0 = 5 \text{ V/m}$. 入射波的时域和频域分别如图 3 所示.

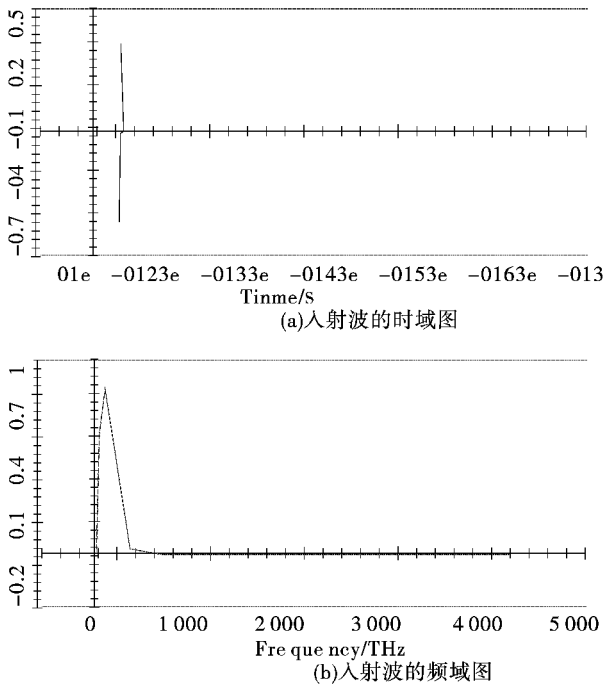


图 3 入射波的时域图和频域图

3 仿真计算及分析

3.1 不改变(AB)^MA 模型的结构参数时所得的透射谱

首先,不改变(AB)^MA 模型的结构参数,通过 FDTD 法进行计算,可得透射谱如图 4 所示.由图 4 可以看出:在(AB)^MA 模型所构成的光子晶体中存在一个明显的光子带隙,带隙宽度为 85 nm,中心波长为 3 005 nm.

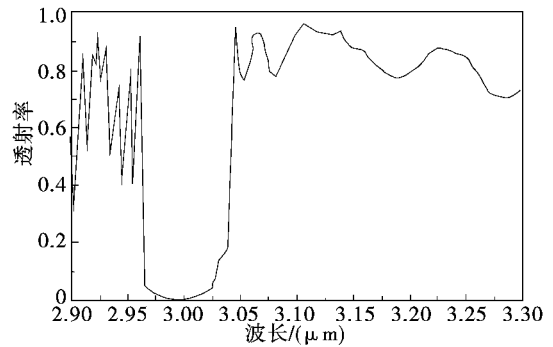


图 4 未改变(AB)^MA 模型的结构参数时所得的透射谱

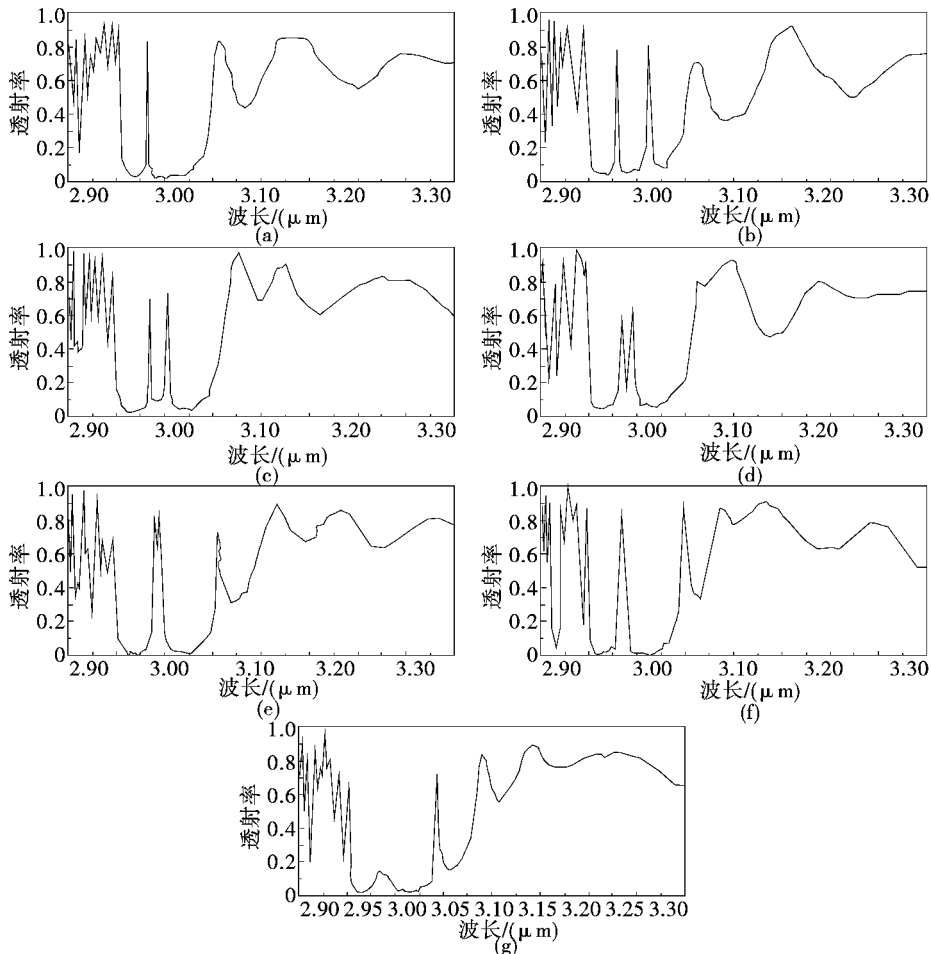


图 5 改变不同层薄膜厚度所得的透射谱

3.2 (AB)^MA 模型中不同层薄膜的厚度变化对缺陷态的影响

通过改变(AB)^MA 模型中不同层薄膜的厚度,研究不同结构参数对光子晶体缺陷态的影响.具体方法为:①将第 9 层 TiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 638 nm;②将第 8、10 层 SiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 1 028 nm;③将第 7、11 层 TiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 638 nm;④将第 6、12 层 SiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 1 028 nm;⑤将第 5、13 层 TiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 638 nm;⑥将第 4、14 层 SiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 1 028 nm;⑦将第 3、15 层 TiO₂ 薄膜的厚度增加一倍,为 638 nm.用 FDTD 法分别进行模拟计算,可得透射谱如图 5 所示.

对上述透射谱曲线分析可知:通过改变光子晶体的结构参数,可在光子带隙中引入缺陷态.当第 9 层 TiO₂ 薄膜厚度变为原来的 2 倍时,在 2 980 nm

处出现了一个很窄的缺陷峰,光子带隙宽度略有展宽,为 98 nm.当第 8、10 层 SiO₂ 薄膜的厚度增加一倍时,光子带隙中出现了 2 个很窄的缺陷峰,分别在 2 975 nm 和 3 016 nm 处,光子带隙展宽为 115 nm.随着厚度变化的薄膜层由中间逐渐向外,两缺陷峰逐渐靠近,当第 4、14 层 SiO₂ 薄膜的厚度增加一倍时,两缺陷峰合为一个较宽的缺陷峰,缺陷峰中心波长为 2 985 nm,宽度为 10 nm.当第 3、15 层 TiO₂ 薄膜的厚度增加一倍时,缺陷峰下降明显,接近消失.

3.3 (AB)^MA 模型中第 9 层 TiO₂ 薄膜取不同厚度时对缺陷态的影响

为研究(AB)^MA 模型中薄膜厚度变化对缺陷态的影响,取最中间一层,即第 9 层 TiO₂ 薄膜作为研究对象,其厚度分别取 400、500、600、700、800 和 900 nm,其他各层参数不变.用 FDTD 法分别进行模拟计算,得到的透射谱如图 6 所示.

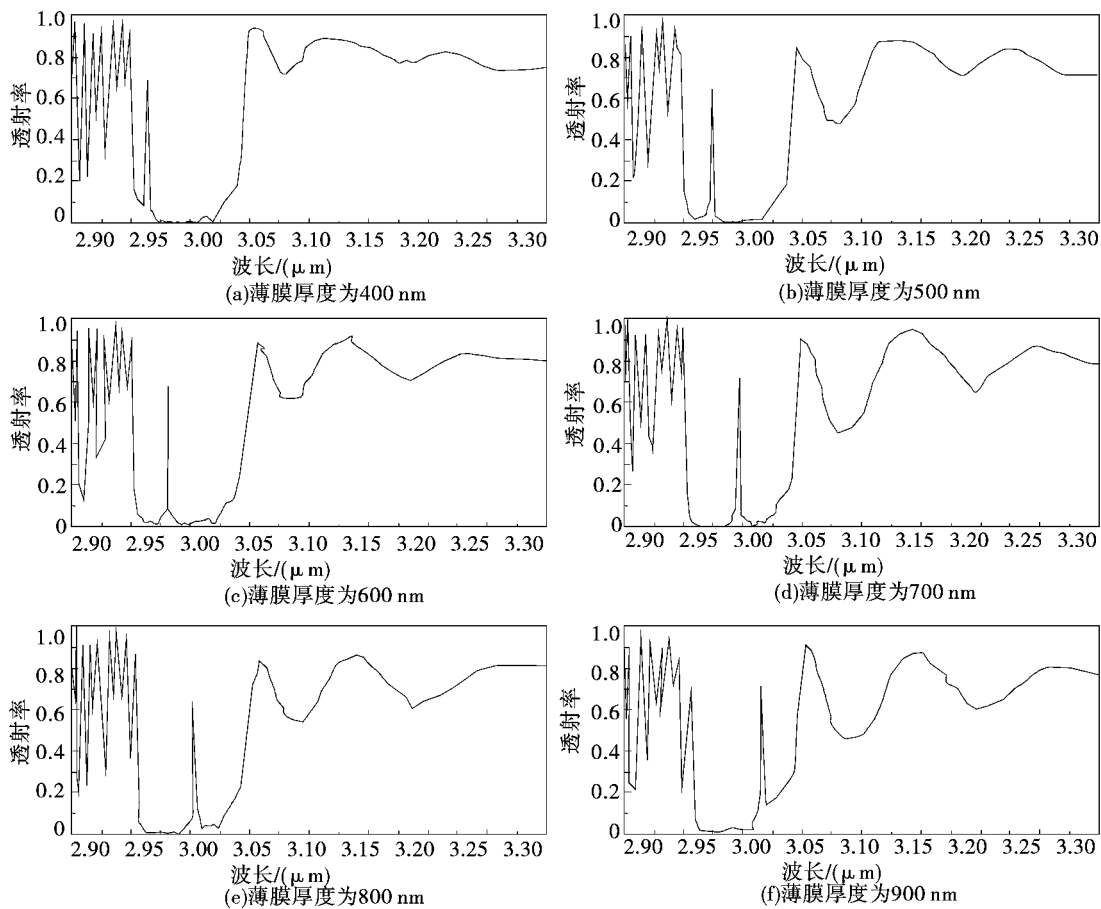


图 6 不同薄膜厚度下模拟的透射谱

通过对上述透射谱曲线的分析可知:随着第 9 层 TiO₂ 薄膜厚度的增加,光子带隙中的缺陷峰逐渐

向长波方向移动,不同厚度下缺陷峰的中心波长分别为 2 962、2 975、2 986、2 993、3 005 和 3 016 nm.

当厚度为400、800和900 nm时,带隙的左、右边界有不同程度提升;当厚度为500、600和700 nm时,带隙左右边界基本不变,但带隙宽度有所展宽。

4 结 论

文中利用FDTD法设计了一个 $(AB)^MA$ 结构的一维ZnO光子晶体(A为TiO₂,B为SiO₂,M=8),并研究了光子晶体的结构参数对其缺陷态的影响。通过模拟计算和分析可得:通过改变光子晶体的结构参数,可在光子带隙中引入缺陷态。当第9层TiO₂薄膜厚度变为原来的2倍时,在2980 nm处出现了一个很窄的缺陷峰。当第8、10层SiO₂薄膜的厚度增加一倍时,光子带隙中出现了2个很窄的缺陷峰,且随着厚度变化的薄膜层由中间逐渐向外,两缺陷峰逐渐靠近,并在第4、14层SiO₂薄膜的厚度增加一倍时合为一个较宽的缺陷峰。随着中心第9层TiO₂薄膜厚度的不断增加,光子带隙中的缺陷峰逐渐向长波方向移动,光子带隙左侧震荡加剧,右侧边界更加平缓。

参考文献

- [1] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. Phys. Rev. Lett, 1987, 58 (23): 2486 - 2489.
 - [2] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission solid-state physics and electronics [J]. Phys. Rev. Lett, 1987, 58 (20): 2059 - 2061.
 - [3] T F Krauss. Photonic crystals for integrated optics [C]// European Conference on Integrated Optics, EC102001. Paderborn, 2001.
 - [4] C N Francis, J Toulouse, T Hodson, et al. Optically tunable silicon photonic crystal microcavities [J]. opt. Express, 2006, 14(11): 4835 - 4841.
 - [5] 张友俊, 杨庆祥, 李英. 光子晶体的发展和应[用]. 上海大学学报, 2004, (10): 283 - 288.
 - [6] 邓开发, 是度芳, 蒋美萍, 等. 光子晶体的研究进展 [J]. 量子电子学报, 2004, 21: 555 - 564.
 - [7] 王长清, 祝西里. 电磁场计算中的时域有限差分法 [M]. 北京: 北京大学出版社, 1994.
 - [8] A Taflov, S C Hagness. Computational Electrodynamics: The Finite - Difference Time-Domain Method [M]. Boston: Artech House, 2000.
-
- (上接第33页)
- ing sensors [C]// Fiber Optic Sensors and Applications II, 2010, 76770 (7677).
 - [3] Lin Yu-chi, Wang Wei. A novel fiber Bragg Grating sensor with temperature compensation [C]// 2009 Symposium on Photonics and Optoelectronics, 2009, 11 (34): 1726 - 1728.
 - [4] Li Bao-shu, Zhong Xiao-jiang, Tong Weiguo. Fiber bragg grating current sensor based on magnetostrictive effect [J]. Diangong Jishu Xuebao/Transactions of China Electrotechnical Society, 2009, 1(24): 95 - 100.
 - [5] Tosi Daniele, Olivero Massimo, Perrone Guido, et al. Simple fiber bragg grating sensing systems for structural health monitoring [C]// IEEE Computer Society, 2009: 80 - 86.
 - [6] 乔学光, 贾振安, 傅海威, 等. 光纤光栅温度传感器理论与实验 [J]. 物理学报, 2004, 53(2): 494 - 497.
 - [7] 孙明武, 陈国能, 戴康勤. 掺铒紫外光敏光纤制备及特性研究 [J]. 中国建材科技, 2000(1): 32 - 34.
 - [8] 江俊峰, 张以谟, 刘铁根, 等. 掺铒光纤的光敏机理及增敏方法的研究现状与发展 [J]. 光学技术, 2003, 29(3): 131 - 135.
 - [9] 赵勇. 光纤传感原理与应用技术 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2007: 6 - 11.
 - [10] 孙安, 乔学光, 贾振安, 等. 大范围光纤布拉格光栅温度传感器增敏实验研究 [J]. 光学学报, 2004, 24(11): 1491 - 1493.
 - [11] 何伟, 徐先东, 姜德生. 聚合物封装的高灵敏度光纤光栅温度传感器及其低温特性 [J]. 光学学报, 2004, 10(24): 1316 - 1319.
 - [12] Yage Zhana, Hua Wua, et al. Fiber grating sensors for high-temperature measurement [J]. Optics and Lasers in Engineering, 2008, 46: 349 - 354.
 - [13] 刘春桐, 李洪才. 铝合金箔片封装光纤光栅传感特性研究 [J]. 光电子·激光, 2008, 19(7): 905 - 908.
 - [14] 衣红钢, 巩宪锋, 王长松. 高灵敏度光纤光栅温度传感器的研究 [J]. 传感器与微系统, 2006, 25(8): 10 - 14.