

· 光电器件与材料 ·

## TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>多层膜系一维光子晶体缺陷态特性研究

承 军, 王玮钰, 熊耀兵, 谭文疆

(西安交通大学 电子与信息工程学院, 陕西 西安 710049)

**摘 要:**建立了一种基于TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>多层膜系并含缺陷层的一维光子晶体模型。基于时域有限差分(FDTD)算法,对其基本层周期数,缺陷层位置、光学厚度以及不同材料等情况下的带隙特性在理论上进行了系统的模拟与分析,发现这种一维光子晶体的缺陷态的透过率和带隙宽度受基本层周期数、缺陷层所在位置和材料的影响较大,而缺陷态中心波长位置仅由缺陷层的光学厚度决定。

**关键词:**光子晶体;时域有限差分法(FDTD);TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>;缺陷态

**中图分类号:** TN26

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1673-1255(2012)04-0034-05

## Defect State Properties of One-dimensional TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> Multilayer Photonic Crystal

CHENG Jun, WANG Wei-yu, XIONG Yao-bing, TAN Wen-jiang

(School of Electronic and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract:** A one-dimensional photonic crystal mode based on TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> multilayer films with defect state is designed. The properties of the defect mode dependent on the numbers of base layer cycle, defect layer locations, optical thicknesses, and materials have been theoretically and systematically studied by simulation using the FDTD (Finite Difference Time Domain) method. The results show that the transmittance and width of the defect mode are greatly related with the numbers of base layer cycle, the defect layer locations and the materials, while the location of center wavelength only depends on the optical thickness of the defect layer.

**Key words:** photonic crystal; finite difference time domain(FDTD); TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>; defect state

1987年,光子晶体(photonic crystal)的概念分别由S.John<sup>[1]</sup>和E.Yablonovitch<sup>[2]</sup>首先提出。这两位科学家讨论了周期性电介质结构对材料中光传播行为的影响,并借鉴半导体晶体及其电子带隙的概念,把能带的概念拓展到了光波和电磁波中。光子晶体是一种折射率在波长量级上呈现周期性变化的介质材料,它具有的“光子禁带”和“光子局域”等重要特性,使得其成为国际科学领域的研究热点。1999年底,光子晶体方面的研究被美国的《科学》杂志列为十大科学进展之一。

光子晶体内部具有光子能量和频率的禁带,即处于禁带区域的光子被禁止传播,这就是光子禁带<sup>[3]</sup>。

而当光子晶体结构中存在缺陷时,其能带结构中会出现缺陷,使得处于禁带内特定频率的光子能够透过,这就是光子局域态特性<sup>[4]</sup>。光子晶体按结构划分,可以分为一维、二维和三维光子晶体。其中,一维光子晶体是一种介电常数沿一维空间方向上周期变化的人工微结构材料。相对于二维和三维光子晶体来说,由于其在结构上最为简单,易于制备,所以研究也较为广泛。

目前,对于光子晶体的研究在理论和实验方面都有大量的工作展开,并且重视探索各种不同结构的光子晶体制备和引入缺陷的工艺及其在微波通讯、集成光学等领域的应用开发<sup>[5-7]</sup>。而国内关于光

子晶体的研究还处于起步阶段,在理论研究上较多<sup>[8,9]</sup>,实验方面的研究也在逐步开展<sup>[10,11]</sup>。同时,光子晶体器件的研制和开发都是在光子晶体中引入缺陷,因此对于含缺陷的光子晶体的研究具有较大的实际意义<sup>[12]</sup>。

文中使用时域有限差分法(FDTD)进行数值仿真,系统地研究了TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>多层膜系一维缺陷态光子晶体的特性,对光开关、光滤波器、光限幅等器件的结构设计、性能优化等实际应用具有显著的指导意义<sup>[13,14]</sup>。

## 1 理论模型

时域有限差分法(FDTD)作为一种高效的计算电磁场的数值方法,被广泛的应用于光子晶体的数值仿真中<sup>[3,15]</sup>,文中采用时域有限差分法来研究含缺陷一维光子晶体的透射光谱特性。

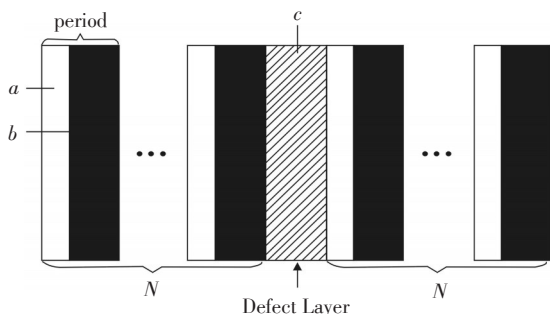


图1 一维含缺陷光子晶体结构图

图1为计算中采用的含缺陷一维光子晶体的结构图,采用 $(ab)^N C (ab)^N$ 的多层膜系结构,其中 $N$ 为该光子晶体单侧基本层周期数, $(ab)^N$ 也常称为一维光子晶体的基本层。为了与实际情况接近,在该模型中采用了三种真实材料相应的光学参数,其中 $a$ 、 $b$ 和 $C$ 分别为TiO<sub>2</sub>、SiO<sub>2</sub>和ZnSe<sup>[16]</sup>,折射率分别为2.49、1.53和2.7,令它们的光学厚度为 $\lambda_0/4$ ,其中 $\lambda_0$ 为常用Nd:YAG激光器的中心波长1 064 nm,即 $n_a d_a = n_b d_b = n_c d_c = \lambda_0/4$ 。当 $N=6$ 时,经计算可得到图2所示的该一维光子晶体的透射谱。从图2中可以看出波长在900~1 300 nm之间光的透过率接近于0,也就是出现了光子禁带,禁带两侧的波长的光则具有较高的透过率,且短波一侧的曲线震荡相对剧烈一些。值得注意的是,在1 064 nm处出现了一个明显的共振透射峰,这正是由于缺陷层 $C$ 的引入所产生的缺陷模式。中心波长处于缺陷态中的光波具有相对较高的

透过率,利用这一特点可以设计光滤波器、光限幅器等光学器件。

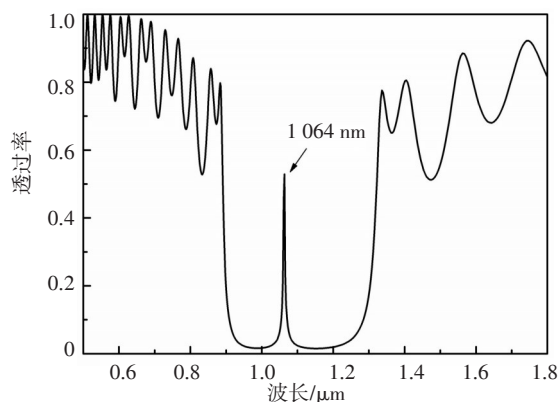


图2 一维含缺陷光子晶体透射谱

实际上,如果没有缺陷层,那么一维光子晶体就相当于是一个 $\lambda_0/4$ 高反膜系,其反射率可以通过选择两材料折射率之比以及层数来改变;而禁带宽度,可以通过选择两材料折射率之比来改变<sup>[17]</sup>。由于已经选定了TiO<sub>2</sub>和SiO<sub>2</sub>作为基本层,所以理论上光子带隙的宽度和中心波长位置已经确定<sup>[3]</sup>。在实际器件如光滤波器、光限幅器等应用中,人们更关心的是处于光子禁带中的缺陷态的光学特性,如缺陷峰透过率和线宽等,下面系统研究了一维光子晶体的基本层周期数、缺陷层所在位置、缺陷层厚度和缺陷层材料对其缺陷态光学特性产生影响的基本规律。

## 2 数值仿真

### 2.1 基本层周期数对光子带隙的影响

在图2中,仿真时采用了 $N=6$ 的结构,即缺陷层的左右两侧各有6个基本层。为了研究基本层周期数对透射谱的影响,分别对 $N=4, 5, 6, 7, 8$ 的一维含缺陷光子晶体进行仿真。

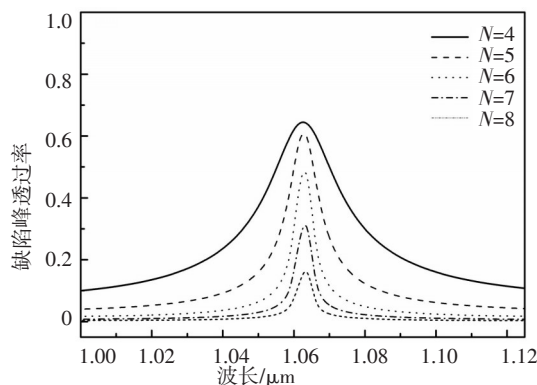


图3 不同基本层周期数时缺陷峰图

图3为不同基本层周期数时,该一维光子晶体缺陷峰的透射光谱。可以看出,随着基本层周期数的增加,缺陷峰的中心波长并没有发生变化,始终处于1 064 nm处,而缺陷峰值逐渐降低,峰的宽度变窄。图4和图5分别为缺陷峰透过率和线宽随基本层周期数变化的规律。随着周期数 $N$ 的增大,缺陷峰透过率衰减的速度逐渐加快,而缺陷峰线宽减小的速度则逐渐变缓。在基于一维光子晶体技术的滤波器等实际器件设计中,不仅要求缺陷态的峰值透射率尽可能大,同时也要求其线宽尽可能地窄,图4与图5的结果说明对于基本层周期数的改变,对这两种需求而言是相互矛盾的,实际器件设计时需要均衡考虑,选择适合的基本层周期数。

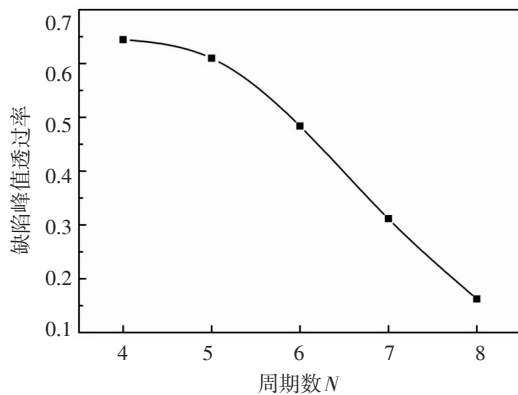


图4 缺陷峰值随基本层周期数变化曲线

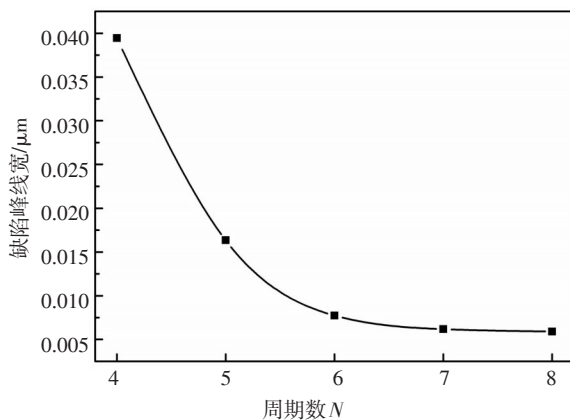


图5 缺陷峰线宽随基本层周期数变化曲线

## 2.2 缺陷层位置对光子带隙的影响

在光子晶体的基本层及周期数确定的情况下,对其透射光谱特性起重要作用的是缺陷层的特性,比如缺陷层的位置、厚度和折射率。文中首先考虑缺陷层在光子晶体结构中所处的位置对其特性的影

响。仿真时,令光子晶体基本层单侧周期数 $N=6$ ,因此缺陷层可以处于13个位置。假定缺陷层所在位置为 $M$ ,并考虑缺陷层处于光子晶体内部的情况,那么 $M$ 的取值为2到12,下面对各种情况分别进行仿真。图6为缺陷态峰值透过率和线宽随缺陷层位置变化的关系图(由于 $M=1,11$ 时缺陷峰线宽过大,而 $M=12$ 时峰已经消失,所以在图6中并未展示其数据点),从中可以发现,缺陷层处于两侧的时候,缺陷态峰值明显较小,线宽也相对较大,而当缺陷层处于中间的时候,缺陷态峰值达到最大值,相应的线宽也较小。同时,由于在仿真中采用的 $(ab)^N C (ab)^N$ 为非对称结构,因此缺陷态峰值透过率的最大值出现在 $M=6$ 处,而并非处于整个结构的中间层,即 $M=7$ 处。

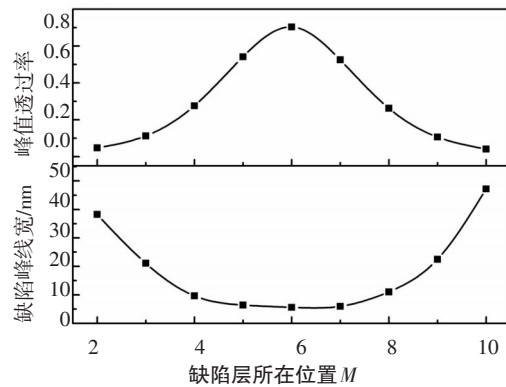


图6 缺陷峰值透过率和线宽随缺陷层位置变化曲线

## 2.3 缺陷层厚度对光子带隙的影响

上面讨论了缺陷层处于光子晶体中不同位置时缺陷态的特性,下面将研究缺陷层厚度对透射谱的影响。仍取 $(ab)^N C (ab)^N$ 结构,设 $N=6$ ,缺陷层厚度分别取 $\lambda_0/8, \lambda_0/4, 3\lambda_0/8, \lambda_0/2, 5\lambda_0/8, 3\lambda_0/4$ ,对这6种情况分别进行仿真。

图7分别展示了6种情况下较完整的透射谱情况,从中发现,缺陷层厚度对整个光子禁带的位置与宽度并没有影响。而从图7a~图7c的比较中可以发现,随着缺陷层厚度的增加,缺陷峰不断向长波方向移动,而其中当缺陷层厚度为 $\lambda_0/4$ 时,缺陷峰的中心波长恰好在1 064 nm处。在图7d中缺陷层厚度为 $\lambda_0/2$ 时,在缺陷峰继续向长波方向移动到带隙右侧的同时,整个带隙的左侧已经出现了一个新的缺陷峰。比较图7d~图7f发现,随着缺陷层厚度的不断增加,旧的缺陷峰消失的同时,新的缺陷峰仍向长波方向移动,在厚度达到 $3\lambda_0/4$ 时,新的缺陷峰恰好也处于

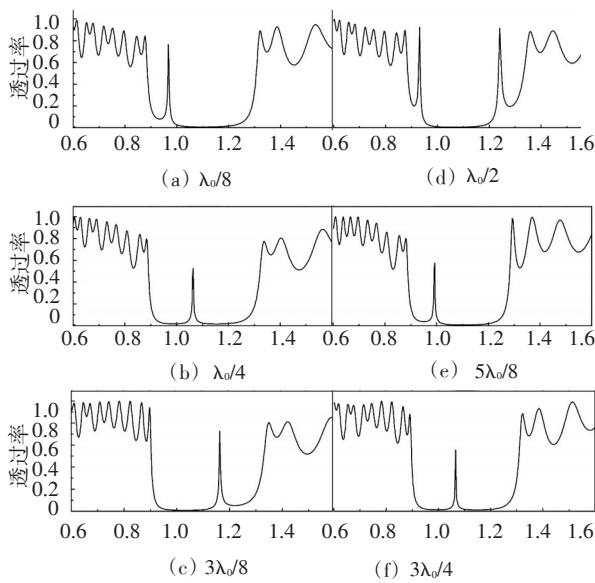
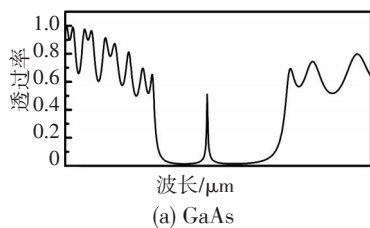


图7 不同缺陷层厚度透射谱

1 064 nm处。这说明了缺陷峰是随着缺陷层厚度的增加有规律的产生与消失,其周期为 $\lambda_0/2$ ,并且在缺陷层厚度为 $\lambda_0/4$ 的奇数倍时,缺陷峰的位置处于入射光的中心波长 $\lambda_0=1\ 064\ \text{nm}$ 处。

### 2.4 缺陷层材料对光子带隙的影响

在实际的器件设计中,为了满足不同的需求,缺陷层会选取不同的材料,这里仅考虑3种常用的不同折射率的半导体材料,分别为CdS、ZnSe和GaAs,其折射率分别为2.34、2.7和3.47。仿真时,折射率和厚度仍满足 $n.d.=\lambda_0/4$ ,以保持缺陷层的厚度始终不变。图8即为缺陷层采用3种不同材料的透射谱线图。从结果可见,3种情况下整个光子禁带的位置与宽度不发生变化,而缺陷峰也处于相同位置,区别在于折射率越大峰值透过率越小,分别为0.59,0.53和0.52。而光子晶体禁带左侧震荡加剧,波谷降低,右侧边界则趋于平缓。



(a) GaAs

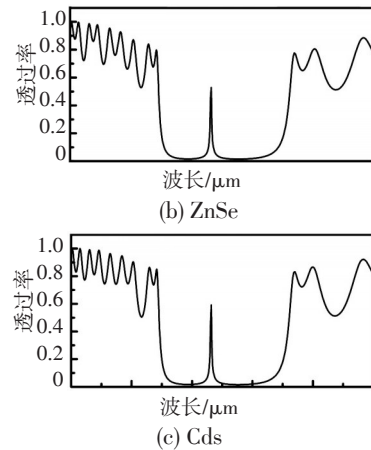


图8 不同缺陷层材料透射谱

## 3 结 论

选用TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>作为基本层,用FDTD算法模拟了 $(ab)^N C(ab)^N$ 结构的一维含缺陷光子晶体的透射特性,分别研究了不同基本层周期数、缺陷层位置、缺陷层厚度和缺陷层材料的透射谱特性,发现整个光子禁带的中心位置与带宽始终都没有变化,而随着基本层周期数 $N$ 的增加,缺陷峰的高度逐渐降低,线宽逐渐变窄;缺陷层位于中央附近位置时,缺陷态的峰值较大且线宽较窄;缺陷层厚度增加时,缺陷峰向长波方向移动,且以 $\lambda_0/2$ 为周期规律性的产生与消失;缺陷层采用不同折射率的材料时,缺陷峰的高度随折射率的增加而减小。

### 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] 马锡英.光子晶体原理及应用[M]. 北京:科学出版社, 2010:35–44.
- [4] 叶卫民.光子晶体导论[M]. 北京:科学出版社, 2010:1–9.
- [5] Fink Y, Winn J N, Fan Shanhui, et al. A dielectric omnidirectional reflector[J]. Science, 1998, 282 (5394) : 1679–1682.
- [6] Barvestani J. Analytical investigation of one-dimensional photonic crystals with a dielectric–superconducting pair defect[J]. Optics Comm, 2011, 284(1):231–235.

- [7] Ye Jing Yong, Mitsuru Ishikawa. Enhancing fluorescence detection with a photonic crystal structure in a total-internal-reflection configuration[J]. *Optics Lett*, 2008, 33(15): 1729-1731.
- [8] Zhu Qiaofen, Zhang Yan. Defect modes and wavelength tuning of one-dimensional photonic crystal with lithium niobate [J]. *Optik*, 2009, 120(4): 195-198.
- [9] Tang Tingting, Liu Wenli, Gao Xiuying, et al. Band gaps and nonlinear defect modes in one-dimensional photonic crystals with anisotropic single-negative metamaterials[J]. *Optics and Laser Technology*, 2011, 43(6): 1016-1019.
- [10] 袁纵横, 王明, 张静. 含缺陷光子晶体传光特性的实验研究[J]. *量子光学学报*, 2009, 15(3): 260-263.
- [11] Ma G H, Shen J, Rajiv K, et al. Optimization of two-photon absorption enhancement in one-dimensional photonic crystals with defect states[J]. *Appl Phys (B)*, 2005, 80(3): 359-363.
- [12] Ma G H, Shen J, Zhang Z, et al. Ultrafast all-optical switching in one-dimensional photonic crystal with two defects [J]. *Optics Express*, 2006, 14(2): 858-865.
- [13] Liu Xin, Chen Shuqi, Zang Weiping, et al. Optical limiting in one-dimensional photonic bandgap material with a bulk nonlinear defect[J]. *J Opt*, 2011, 13(1): 2040-8978.
- [14] Ma G H, Shen J, Zhang Z J, et al. Ultrafast all-optical switching in one-dimensional photonic crystal with two defects[J]. *Optics Express*, 2006, 14(2): 858-865.
- [15] 王艳玲, 苗峰, 韩文达. EastFDTD, 一款优秀的国产光电磁模拟软件[J]. *激光与光电子学进展*, 2009, 46(5): 69-71.
- [16] Hideyuki Inouye, Yoshihiko Kanemitsu. Direct observation of nonlinear effects in a one-dimensional photonic crystal [J]. *Appl Phys Lett*, 2003, 82(8): 1155-1157.
- [17] 章志鸣, 沈元华, 陈惠芬. 光学[M]. 2版. 北京: 高等教育出版社, 2000: 145-156.

(上接第20页)

- [8] 张爱珍, 业宁. 基于图像模式识别技术的牛顿环检测[J]. *物理实验*, 2003(8): 33-35.
- [9] 朱竹青. 牛顿环实验数据的采集与处理[J]. *物理实验*, 2002(7): 10-13.
- [10] 虞仲博, 屠全良. 牛顿环实验等精度测量及其不确定度的评定与表示[J]. *物理实验*, 2000(5): 17-18.
- [11] 张广祥. 牛顿环实验的新方法[J]. *物理实验*, 1998(3): 6-9.
- [12] 单慧波. 牛顿环实验的拓展[J]. *物理实验*, 1996(6): 290.

(上接第33页)

数模型, 对窄脉冲激光探测电路的参数设计进行了详细分析。通过优化负载电阻、补偿电容参数, 有效提高系统的信噪比, 通过仿真测试表明, 该设计方法可提高探测系统性能, 可适用于不同参数激光脉冲探测系统的设计。

## 参考文献

- [1] 陈宏哲, 郑荣山, 张英远, 等. 激光主动侦察技术应用[J]. *光电技术应用*, 2007, 22(2): 19-21.
- [2] 李发泉, 程学武, 杨勇, 等. 星载威胁激光探测告警的技术需求分析[J]. *红外与激光工程*, 2008, 37: 331-334.
- [3] 何初冬, 邱琪. 短脉冲激光信号接收灵敏度的研究[J]. *光电技术应用*, 2009, 24(2): 37-39.
- [4] 霍戍文, 李伟, 李进, 等. 光电探测微信号放大器设计[J]. *浙江理工大学学报*, 2005, 22(3): 259-262.
- [5] Jerald Graeme. Photodiode amplifiers op AMP solutions[M]. 1995: 31-49.
- [6] 占建明, 汶德胜, 王宏, 等. 瞬变光探测系统前置放大电路的设计[J]. *红外*, 2011, 32(3): 14-18.
- [7] 张红旗, 梁谦. 激光引信前置放大器设计[J]. *航空兵器*, 2008(5): 34-37.
- [8] 阎鹤, 张记龙, 田二明, 等. 多窗口编码激光预警系统设计与性能分析[J]. *传感器与微系统*, 2010, 29(10): 59-61.
- [9] 严福兴. 极微弱光电流测量电路的设计[J]. *武汉理工大学学报*, 2006, 28(11): 114-116.
- [10] 刘日龙, 殷德奎. 激光干涉仪光电检测电路的设计[J]. *半导体光电*, 2010, 31(2): 284-287.