

二维三维混杂及准三维嵌套复式光子晶体带隙研究*

韩喻, 谢凯

(国防科学技术大学 材料工程与应用化学系, 长沙 410073)

摘 要:提出了由两套晶格嵌套组成的全新二维/三维混杂及准三维嵌套复式周期光子晶体结构, 并通过理论计算获得了带隙位置主要取决于外周期晶格常量, 内周期有助于获得超窄禁带的新型带隙特性. 这种内外结构周期效应同时发挥带隙调制作用的性质是该类嵌套复式结构所特有. 从理论上验证了嵌套结构利用小尺寸周期调制大波长禁带的可行性.

关键词:三维光子晶体; 嵌套复式结构; 光子带隙; 超窄带

中图分类号: O482.3

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2008)07-1391-5

0 引言

光子晶体又称光子禁带材料, 是两种不同介电常量的介质材料在空间按一定的周期排列所形成的一种人造“晶体”. 光子晶体的能谱呈带状分布, 频率落在能带间隙(即光子“禁带”)的光在任何方向上都不能在晶体中传播, 以此实现对光传播的控制. 由光子晶体的原理可知: 光子禁带的性质取决于光子晶体中介质材料的折射率配比以及不同介电常量材料的填充率和“晶格”结构. 为满足各种复杂带隙调制研究, 研究人员更多地关注于介质材料的种类及填充率的作用, 针对“晶格”结构的研究占光子晶体研究中很少的部分, 研究的内容也大多集中在传统晶格的优化^[1-2]及实现方法上. 其实, 在单一结构无法满足复杂的禁带调制要求时, 将多种结构复合^[3]不失为一种很好的解决办法. 在三种维度的光子晶体中, 三维光子晶体因其空间限制最少而最引人关注, 但简单周期三维光子晶体结构的实现过程已经非常复杂, 要将其繁衍出三维复合结构就更为困难, 直到近两年才见相关研究报道^[4-5], 而且还是以简单结构的叠加为主.

本文提出二维/三维混杂及准三维嵌套两种复式周期光子晶体结构, 它们不同于结构叠加的复合形式, 是用更小尺寸的周期阵列替代阵列中的每个“格点”, 形成两套“晶格”嵌套的复式结构. 它是对结构单元阵列的周期套合, 结构更为精细. 周期结构中“格点”之间的排列称为“外周期”, “格点”内部周期阵列称为“内周期”. “格点”的形状、大小及内外周期的尺寸、排列方式都可独立变化, 它们共同调制光子禁带. 这两种三维嵌套结构是由纯二维嵌套复式周期结构^[6]逐步演变而来. 二维/三维混杂嵌套复

式周期的外周期仍然保留为二维周期阵列, 但内周期却被实验中较易制备的三维面心立方结构(反 Opal 结构)所替代. 而准三维嵌套复式周期结构的外周期也已演变为三维空间内的周期阵列. 本文利用基于平面波展开方法^[7-8]的 MIT Photonic-Bands (MPB) 软件, 通过建模分别对二维/三维混杂及准三维嵌套复式周期结构光子晶体的光子带隙进行了模拟计算, 从理论角度探讨了这两种新结构的带隙特性.

1 计算模型

MPB 一般用于模拟简单周期结构的带隙特性, 但通过建立结构模型也可以实现复杂周期结构光子带隙的计算. 复杂结构模型主要是通过结构叠加的方式来实现. 首先构建大面积的简单周期阵列, 然后将特殊的周期单元叠加在复杂周期指定的坐标位置. 计算平台建立模型时将使用最后设定的参量生成 $1/\epsilon(r)$ 函数, 并代入 Maxwell 方程求解本征 ω . 例如, 介电常量为 ϵ_a , 半径为 r 的球体在介电常量为 ϵ_b 的介质中呈面心立方排列, 如果在坐标原点 $(0, 0, 0)$ 处叠加介电常量为 ϵ_b 半径也为 r 的圆球, 即可实现周期结构中点缺陷模型的构建. 同理, 在其它任意坐标位置叠加介电常量为 ϵ_b 的圆球就可以实现一些复杂三维结构模型的建立. 二维三维混杂及准三维嵌套复式周期结构模型的建立正是基于上述方法, 一般分以下几步:

1) 确定 ϵ_a 和 ϵ_b ; 2) 在介电常量为 ϵ_b 的材料中建立三维面心立方结构(微球介电常量为 ϵ_a); 3) 确定重复单元和外周期单元的尺寸. 如不特别指明, 一般带隙特性的计算都是针对无穷大的周期阵列, MPB 中周期结构模型由重复单元不断重复组成. 简单周期结构模型的重复单元可以为周期单元(单个球体), 也可以为有限个周期单元组成的小型阵列.

* 国家部委基金项目支持

Tel: 0731-4573149 Email: yumihan1981@yahoo.com.cn

收稿日期: 2007-03-13

而复杂周期结构模型中的重复单元则通常选用后者. 取重复单元行(列)包含的周期单元个数相等, $N = N_{\text{out}} + 2n$, ($n = 0, 1, 2, 3 \dots$), 式中 N_{out} 为奇数, 是外周期单元直径包含的周期单元个数. 分别增加 N_{out} 和 n , 可提高或降低外周期的填充率; 4) 在指定坐标位置叠加介电常量为 ϵ_a 的微球内周期单元, 从而形成外周期单元截面为六边形柱体的二维三维混杂及准三维复式周期阵列. 定义 R 为嵌套复式周期结构外周期单元尺寸, r 为内周期单元尺寸, d 和 D 分别为内、外周期“晶格常量”, $f_{\text{out}} = R/D$, $f_{\text{in}} = r/d$. 以 $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 12, f_{\text{out}} = 0.5, f_{\text{in}} = \sqrt{2}d/4$ 的结构模型为例进行说明.

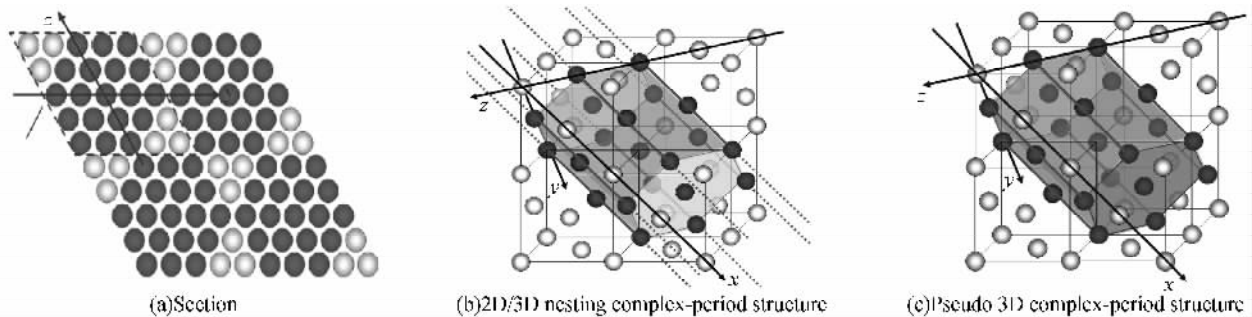


图1 二维/三维混杂及准三维嵌套复式周期结构外周期单元示意图

Fig. 1 The cell of outside period in 2D/3D nesting complex-period structure

准三维嵌套复式周期结构模型是在二维/三维混杂嵌套复式周期结构模型的基础上作进一步衍生. 如图 1(c), 外周期单元六边形柱不再沿 x 方向无限延伸, 而呈间断分布. 以重复单元 $N_y = N_z = 5, N_x = 4$ 时为例, 二维/三维混杂嵌套复式周期结构中组成六边形柱的微球坐标 $x \in [-2, 1]$, 而准三维嵌套复式周期结构中组成外周期单元的微球坐标 x 可设定为 $x \in [-2, 0]$. 由此, 准三维嵌套复式周期结构外周期单元在 yz 平面内呈六边形单元的三角形排列, 而在 xy 和 xy 平面内则呈四边形单元的四方排列且 f_{out} 并不等于 0.5, 搭建的整体结构在三维空间内不是呈同一周期排列, 这也是称其为“准”三维的原因. 该模型由于 xyz 轴非正交, 外周期单元为斜六边形柱.

同理, 变换坐标轴可构建外周期单元六边形柱体轴向沿 y 轴和 z 轴延伸的二维三维混杂及准三维嵌套复式周期结构模型.

2 模拟结果

$\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 12, f_{\text{out}} = 0.5, f_{\text{in}} = \sqrt{2}d/4$ 外周期单元沿 x 轴延伸的二维三维混杂嵌套复式结构的模拟结果如图 2 和图 3. 图 2 为 MPB 输出的结构模型的介电常量三维空间分布, 与设计结构完全吻合. 而图 3 模拟的六条能带电场分布更加清楚地区分了呈

取 x, y, z 轴与面心立方基矢方向重合. 设 x 轴为外周期单元六边形柱体轴向延伸方向, 因此 $f_{\text{out}} = 0.5$ 可通过在 yz 平面内选择重复单元 $N_y = N_z = 5$, 外周期单元 $N_{\text{out}} = 5$ 来实现, 如图 1(a). 为保证 x 轴向柱体连续, 取 $N_x = 4$. 确定 yz 平面内 $\epsilon_a = 1$ 的微球坐标, 并沿 x 轴递推, 完成外周期单元的构建. 图 1(b) 显示了三维空间内的部分重复单元, 其中微球仅示意空间位置并未体现 f_{in} , 叠加的深色微球 $\epsilon_a = 1$, 其它位置白色微球 $\epsilon_a = \epsilon_b = 12$. 上述重复单元在三维空间排列实现内周期为三维 opal 结构, 外周期为二维空间六边形柱体三角形排列的二维/三维混杂嵌套复式周期结构.

二维排列的外周期和呈面心立方排列的内周期结构. 对该结构的光子带隙(图 4b)及相同材料体系 opal 结构的带隙(图 4a)进行对比可以发现, 二维/三维混杂嵌套复式周期结构的能带频率远大于简单的 opal 结构, 与外周期晶格常量确定的频率接近. 由此可推断, 与纯二维嵌套结构^[3]一样, 二维/三维混杂嵌套结构的带隙位置主要取决于外周期. 另外, 二维/三维混杂嵌套结构的能带分离现象较为明显, 方向性带隙(赝带隙)的数量显著增加(见表 1). 图 4(c)为 $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 12, f_{\text{out}} = 0.5, f_{\text{in}} = \sqrt{2}d/4$ 外周期单元轴向沿 x 轴延伸的准三维嵌套复式周期结构的光子带隙. 其带隙分布与二维/三维嵌套复式周期结构大体相似, 带隙波长由外周期晶格常量主导, 较二维/三维嵌套复式周期结构能带位置发生红

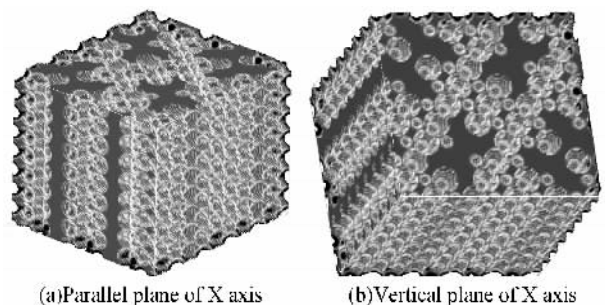


图2 二维/三维混杂嵌套复式周期结构介电常量分布图
Fig. 2 Dielectric distribution in 2D/3D nesting complex-period structure

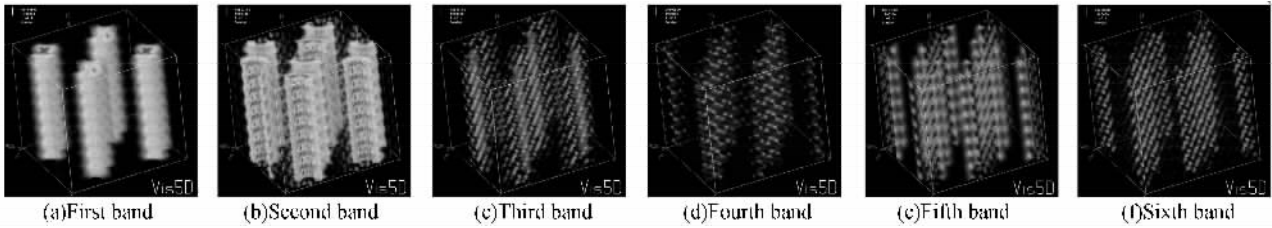


图3 布里渊区边界U点各能带的电场分布图
Fig.3 Fields at U in 2D/3D nesting complex-period structure

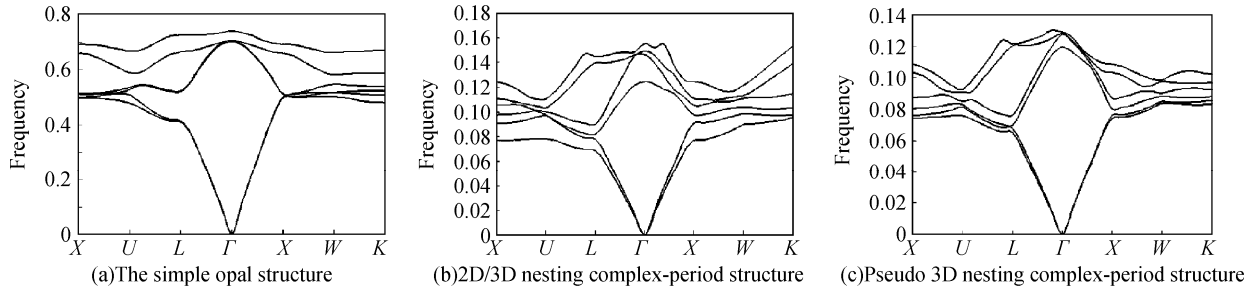


图4 带隙模拟结果
Fig.4 Calculated results

表1 带隙特性比较

	$\langle 100 \rangle$		$\langle 111 \rangle$		$\langle 110 \rangle$	
	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d
Opal	-	0	2.175 0	0.495 0	-	0
2D/3D	10.607 6	0.778 6	12.465 5	0.603 9	9.943 1	0.578 7
准3D	12.760 1	0.717 7	14.520 1	0.450 0	11.506 2	0.285 4

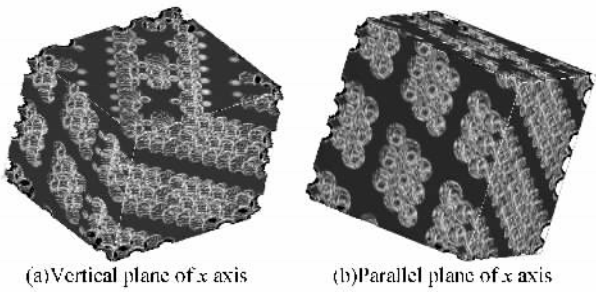


图5 准三维混杂嵌套复式周期结构介电常量分布图
Fig.5 Dielectric distribution in pseudo 3D nesting complex-period structure

移,并且各方向带隙均变窄.图5为模拟显示的准三维嵌套结构介电常量分布.

虽然二维/三维混杂及准三维嵌套两种结构的带隙宽度比简单周期结构略有增加,但带宽比却高了一个数量级,可归为超窄禁带.这一特性可解决目前探测器激光防护等领域防护波长太宽覆盖探测波段而影响探测器效率等关键技术问题.

变换外周期单元轴向延伸方向,可获得如表2,表3的带隙模拟结果.光波沿 $\langle 100 \rangle \langle 111 \rangle \langle 110 \rangle$ 三个方向入射延伸方向不同的三种混杂嵌套复式结构

表2 2D/3D 嵌套复式周期结构带隙特性比较

外周期单元 轴向延伸 方向	$\langle 100 \rangle$		$\langle 111 \rangle$		$\langle 110 \rangle$	
	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d
x 轴	10.607 6	0.778 6	12.465 5	0.603 9	9.943 1	0.578 7
y 轴	9.615 7	0.220 1	10.003 5	0.207 9	9.906 8	0.120 3
z 轴	9.566 4	0.144 0	12.623 2	0.495 3	9.915 5	0.385 1

表3 准3D 嵌套复式周期结构带隙特性比较

外周期单元 轴向延伸 方向	$\langle 100 \rangle$		$\langle 111 \rangle$		$\langle 110 \rangle$	
	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d	带隙中心 频率/d	带隙宽度/d
x 轴	12.760 1	0.717 7	14.520 1	0.450 0	11.506 2	0.285 4
y 轴	11.389 9	0.179 3	11.729 3	2.782 0	11.842 4	0.440 4
z 轴	12.273 5	0.355 2	13.889 8	0.199 5	11.163 93	0.150 0

时,出现带隙的波长相近,但带隙宽度却略有差别.对于 2D/3D 混杂嵌套复式周期结构,禁带位置由呈二维三角形排列的外周期所主导,却能够在三维方向形成带隙,原因应该归结于呈三维排列的内周期.而这种内外结构周期效应同时发挥带隙调制作用的性质与纯二维嵌套复式周期结构是相同的,因此该性质为这种两套晶格嵌套组成的复式结构所特有.

3 结论

1)在 MPB 计算平台中建立了正确的二维/三维混杂和准三维嵌套复式周期结构模型,并对两种结构的光子带隙进行模拟.计算结果初步显示:两种嵌套结构的带隙位置主要取决于外周期晶格常量,而外周期结构实际是由更细微结构的周期阵列构成,通过控制这些细微结构组成外周期单元的方式及数量就可以在较这些细微结构晶格常量大得多的波段范围形成光子带隙,与纯二维嵌套复式周期结构一样,达到了小尺寸调制大波长的效果.

2)能够产生超窄带,以及由呈二维三角形排列的外周期所主导的 2D/3D 混杂嵌套复式周期结构却能够在三维方向形成带隙的原因都可以归结为内周期三维有序阵列的作用,而这种内外结构周期效应同时发挥带隙调制作用的性质为嵌套复式结构所特有.

3)两种嵌套结构产生的带隙均属超窄带,为探测器激光防护等需求窄带光子晶体效应的应用领域提供了全新的实现方法.

但是针对二维/三维混杂及准三维嵌套复式周期结构的系统研究还需进一步展开.关于内、外填充率,外周期阵列排列方式等结构因素对两种嵌套复式结构带隙特性的影响研究正在进行.另外,针对这两种结构的制备已展开了系统研究,成功制备出“嵌埋在硅槽中的硅反 opal 结构”^[9],验证了 2D/3D 混杂嵌套复式周期结构实现的可行性.准 3D

嵌套复式周期结构的制备也在进一步完善中.

参考文献

- [1] FENG Shang-shen, SHEN Lin-fang, HE Sai-ling. A two-dimensional anisotropic photonic crystal with a large absolute band gap[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(2): 235-238.
冯尚申,沈林放,何赛灵.一种具有大带隙的各向异性二维光子晶体结构[J].光子学报,2003,**32**(2):235-238.
- [2] YANG Yi-biao, WANG Yun-cai, LI Xiu-jie, et al. Numerical simulation of the photonic bandgap of two-dimensional photonic crystals with Kagome lattice [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(5): 724-728.
杨毅彪,王云才,李秀杰,等.二维 Kagome 格子光子晶体禁带的数值模拟[J].光子学报,2006,**35**(5):724-728.
- [3] TANG Liang, YUAN Chang-sheng, CHEN Yan-feng, et al. A new type of omnidirectional reflection: the one-dimensional photonic band gap structure with gradual periods [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(5): 573-576.
汤亮,袁长胜,陈延峰,等.连续渐变周期的一维光子带隙结构全能反射器[J].光子学报,2004,**33**(5):573-576.
- [4] YAN Qing-feng, ZHAO X S, ZHOU Zuo-cheng. Fabrication of colloidal crystal heterostructures using a horizontal deposition method [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2006, **288**: 205-208.
- [5] DEUBEL M, WEGENER M, LINDEN S, et al. 3D-2D-3D photonic crystal hetero-structures fabricated by direct laser writing [J]. *Optic Lett*, 2006, **31**(6): 805-807.
- [6] HAN Yu, XIE Kai. Investigation on preparation of photonic bandgap of nesting complex-period photonic crystals [J]. *Journal of Synthetic Crystals*, 2006, **12**(6): 1351-1354.
韩喻,谢凯.嵌套复式周期结构二维光子晶体的光学禁带特性及制备研究[J].人工晶体学报,2006,**12**(6):1351-1354.
- [7] LEUNG K M, LIU Y F. Photon band structures: the plane wave method [J]. *Phys Rev B*, 1990, **41**(14): 10188-10190.
- [8] LI Zhi-yuan, LIN Lan-lan. Photonic band structures solved by a plane-wave-based transfer-matrix method [J]. *Phys Rev E*, 2003, **67**(4): 046607.
- [9] HAN Yu, XIE Kai. Preparation of Si inverse opal structure embedded in Si flute by PECVD [J]. *Journal of Functional Materials and Devices*, 2006, **12**(6): 537-540.
韩喻,谢凯. PECVD 制备嵌埋在硅槽中的硅反 opal 结构 [J]. 功能材料与器件学报, 2006, **12**(6): 537-540.

Theoretical Investigation on Photonic Bandgap of 2D/3D Nesting and Pseudo 3D Nesting Complex-period Photonic Crystals

HAN Yu, XIE Kai

(*Department of Materials Engineering and Applied Chemistry, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

Received date: 2007-02-13

Abstract: The photonic bandgap of some new 2D/3D and pseudo 3D nesting complex-period structures are theoretically investigated. The calculation indicates that the range of bands are mostly adjusted by outside-period structure, and it is the inside-period structure that leads to super narrow photonic band. The property that the outside and inside period structure affect the band together only belongs to nesting complex-period structures. The results validate that the band can be adjusted by much little period structure.

Key words: 3D photonic crystal; Nesting complex-period structure; Photonic band gap



HAN Yu was born in 1981. Now she is a candidate for Ph. D. degree in National University of Defense Technology. Her major research fields are the design, preparation and application of photonic crystals.