

文章编号: 1000-7032(2007)01-0007-06

## 二维点缺陷正方光子晶体的微腔结构

陈 松<sup>1,2</sup>, 王维彪<sup>1</sup>, 梁静秋<sup>3</sup>, 夏玉学<sup>1,2</sup>, 雷 达<sup>1,2</sup>, 曾乐勇<sup>1,2</sup>, 陈 明<sup>4</sup>

(1. 中国科学院 激发态物理重点实验室, 吉林 长春 130033; 2. 中国科学院 研究生院, 北京 100049;

3. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033;

4. 清华大学 电子工程系, 北京 100084)

**摘要:** 通过平面波展开法对由  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质棒在空气背景介质中构成含有点缺陷的二维正方光子晶体微腔结构进行研究, 计算得出缺陷态能带以及缺陷态模场分布。缺陷模对应的电磁波波长为 470 ~ 476 nm。对该微腔结构的品质因数的求解, 得出缺陷态光谱曲线。在光谱曲线中, 随着传输波长的增大, 将产生几个峰值, 并且在 475 nm 处的波动最为明显, 反映出在 475 nm 附近的电磁波段在缺陷处的光强较大。进一步利用全矢量等效折射率法研究该结构缺陷模频率的稳定性, 得出等效折射率的变化曲线。从等效折射率变化曲线可以看出, 当传输波长达到 475 nm 时, 该结构已经达到稳定传输的区域。含缺陷模的二维光子晶体微腔结构在光子晶体发光二极管以及高阈值半导体激光器等方面有着重要的应用价值。

**关键词:** 光子晶体; 点缺陷; 光子晶体微腔; 等效折射率**中图分类号:** O472.3; O436**PACC:** 4220**文献标识码:** A

## 1 引 言

Yablonovitch<sup>[1]</sup> 和 John<sup>[2]</sup> 在 1987 年分别各自提出光子晶体的概念。由于光子晶体所具有的独特物理性质, 一经提出立刻引起了科研人员浓厚的兴趣。

光子晶体是折射率在空间呈周期分布的人工微结构材料, 由于光子晶体的折射率具有周期性分布, 所以使光子在传播过程中有着类似于电子在半导体材料中的传播性质, 也会存在类似于能带的带隙, 被称之为光子带隙 (Photonic band gap)。频率落在带隙中的光波, 在光子晶体中是被禁止传播的<sup>[3,4]</sup>。在一块完美的光子晶体中引入某种缺陷, 当电磁波的频率与缺陷态吻合时, 就有可能被局域在缺陷位置。1991 年, 在实验上已经观察到二维光子晶体中的光子局域, 并且 1997 年在半导体粉末中直接得到光子局域的证据。

近年来, 基于光子晶体微腔原理的高品质谐振腔有了很大发展<sup>[5,6]</sup>。与传统谐振腔相比, 光子晶体谐振腔有着高品质因数和小的器件体积等

优点, 在光通信以及高精度光学仪器的设计中有着重要的应用前景<sup>[7,8]</sup>。文中研究了以  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质棒在空气中构成含有点缺陷的二维正方微腔结构的光子局域特性, 并且通过全矢量等效折射率法, 得出等效折射率变化曲线, 进而讨论了该结构的稳定性。通过以上分析可以为设计制备一些光子晶体器件及其应用提供一定的理论参考。

## 2 理论方法

光子晶体的理论研究以电磁场所遵循的基本方程-麦克斯韦方程组作为基本出发点。其一般形式表示为:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (4)$$

方程中的物理量  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$  和  $\rho(\mathbf{r}, t)$  分别表示自由电流密度矢量和自由电荷密度。

平面波展开法是光子晶体能带计算中最常用

收稿日期: 2006-02-10; 修订日期: 2006-04-15

基金项目: 国家自然科学基金(60277030); 中科院长春光机所创新基金(C02N05)资助项目

作者简介: 陈松(1980-), 男, 吉林白山人, 硕士研究生, 主要从事光子晶体方面的研究。

E-mail: chen\_song126@126.com, Tel: (0431)86176339

的方法之一,应用布洛赫定理,把介电常数和电场或磁场用平面波展开,通过对麦克斯韦方程的简化得到一本征方程:

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \quad (5)$$

进行傅里叶变换可以得到

$$-(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \left[ \sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{\mathbf{G}'} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{\mathbf{G}} \quad (6)$$

将磁场和介电常数表示为平面波之和的形式

$$\mathbf{H}_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\lambda=1}^2 h_{\mathbf{G}, \lambda} \hat{e}_{\lambda} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (7)$$

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon^{-1}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (8)$$

代入式(6)得

$$-(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \left[ \sum_{\mathbf{G}', \lambda'} \varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times h_{\mathbf{G}', \lambda'} \hat{e}_{\lambda'} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\lambda} h_{\mathbf{G}, \lambda} \hat{e}_{\lambda} \quad (9)$$

两边同时点乘  $\hat{e}_{\mu}$  得到:

$$-(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \left[ \sum_{\mathbf{G}', \lambda'} \varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times h_{\mathbf{G}', \lambda'} \hat{e}_{\lambda'} \cdot \hat{e}_{\mu} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\lambda} h_{\mathbf{G}, \mu} \quad (10)$$

稍作整理可以写成:

$$\sum_{\mathbf{G}', \lambda'} H_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{\lambda, \lambda'} h_{\mathbf{G}', \lambda'} = \frac{\omega^2}{c^2} h_{\mathbf{G}, \lambda} \quad (11)$$

其中  $H_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{\lambda, \lambda'} = -\varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \hat{e}_{\lambda} \cdot \hat{e}_{\lambda'}$ , 详细写出为:

$$H_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} = -\varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{-1} \begin{bmatrix} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \hat{e}'_1 \cdot \hat{e}_1 & (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \hat{e}'_2 \cdot \hat{e}_1 \\ (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \hat{e}'_1 \cdot \hat{e}_2 & (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \hat{e}'_2 \cdot \hat{e}_2 \end{bmatrix} = \varepsilon_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}^{-1} \|\mathbf{k} + \mathbf{G}'\| \|\mathbf{k} + \mathbf{G}\| \begin{bmatrix} \hat{e}'_2 \cdot \hat{e}_2 & -\hat{e}'_1 \cdot \hat{e}_2 \\ -\hat{e}'_2 \cdot \hat{e}_1 & \hat{e}'_1 \cdot \hat{e}_1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

方程式(11)是光子晶体能带结构所满足的本征值方程,光子晶体内的电磁波的本征值和本征模式可以通过此矩阵的对角化来求解,从而得到光子晶体的能带结构。

### 3 数值结果及讨论

选取  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质棒在空气中构成含有点缺陷的二维正方结构为研究对象,周期  $\Lambda$  为 160 nm。

先利用平面波展开法计算得出该结构的缺陷态频率。

#### 3.1 含点缺陷的二维正方光子晶体的设计

含点缺陷的二维正方光子晶体剖面结构如图 1 所示,其中黑色圆圈表示介质棒的横剖面,把  $\text{Al}_2\text{O}_3$  介质棒按一定规则在空气中排列成正方结构,移除中心的三根介质棒,这样在二维光子晶体中便会形成一个微腔结构的缺陷<sup>[9]</sup>。

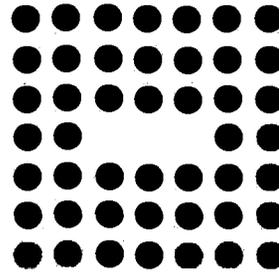


图 1 含点缺陷二维正方光子晶体结构剖面示意图

Fig. 1 The defect structure of two-dimensional square photonic crystal.

我们选取周期为 160 nm,介质棒半径为 0.2  $\Lambda$ , 利用平面波展开法计算得出图 2 所示的能带结构。

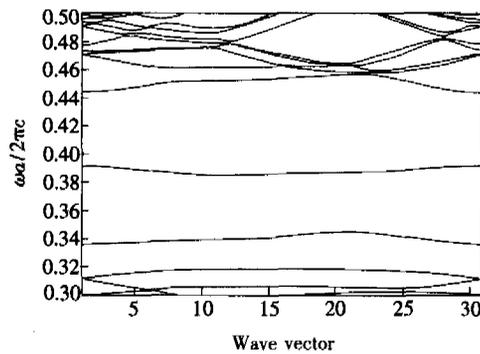


图 2 含点缺陷二维光子晶体带隙结构

Fig. 2 The band-gap of two-dimensional square photonic crystal with point defect.

图中横坐标为 Bloch 波矢,纵坐标为归一化频率  $(\omega a / 2\pi c)$ 。正如图 2 所示,在 0.345 ~ 0.442 之间形成宽度很大的禁带,并且在禁带的中央处 (0.384 ~ 0.392) 存在一条能带,这就是我们通过引入缺陷而产生的缺陷模。缺陷模对应电磁频率波长大约为 470 ~ 476 nm。

#### 3.2 缺陷态的光谱分析

为了进一步对缺陷模进行分析,我们利用光子晶体计算中常用的时域有限差分法,通过在缺

陷处对不同波段电磁波的监测<sup>[10,11]</sup>, 得出光子晶体缺陷处光强的光谱分布。

将 Maxwell 方程组中的两个旋度方程:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (13)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \quad (14)$$

展开为标量方程。

$$\text{令 } (i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$$

这样, 任意一个时间和空间的函数可以表示为

$$F^n(i, j, k) = F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) \quad (15)$$

其中,  $i, j, k, n$  为整数。

用中心有限差分式来分别表示函数对空间和时间的偏导数,

$$\frac{\partial F^n(i, j, k)}{\partial x} = \frac{F^n(i+1/2, j, k) - F^n(i-1/2, j, k)}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (16)$$

$$\frac{\partial F^n(i, j, k)}{\partial t} = \frac{F^{n+1/2}(i, j, k) - F^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (17)$$

这样就可以对 Maxwell 方程组中的两个含有时间变量的旋度方程按照一定的规则离散转化为差分方程求解。

品质因数是表征微腔质量的一个重要参数。光学微腔的品质因数定义为

$$Q = \frac{2\pi\nu_c}{r} \quad (18)$$

$$\text{或 } Q = 2\pi \frac{E}{T |dE/dt|} \quad (19)$$

式中  $\nu_c$  为微腔内光波的振荡频率;  $r$  为腔内能量的相对衰减速率, 即光子寿命(光子数衰减到  $1/e$  的时间)的倒数;  $T$  为光学谐振腔的振荡周期。  $E, dE$  分别为腔内能量和能量的损耗量。

通过对缺陷处电磁波的监测, 利用式(20)

$$S(t) = \int_V \varepsilon |E(t)|^2 dV \quad (20)$$

其中  $S(t)$  为缺陷处的监测值,  $\varepsilon$  为介电常数,  $E(t)$  为传输电磁波的电场, 可以得出输出量和电场的关系, 再通过式(21), 求出  $Q$  值与光强的相对关系。

$$Q = \left| \frac{2}{T_0, -T_0} \int |S(t)| dt \right| \quad (21)$$

利用时域有限差分法求解  $Q$  值, 可得到如下光谱分布曲线。如图 3 所示, 横坐标为该结构中传输的电磁波波长, 而纵坐标为该缺陷态产生的相对光强。

从图 3 中可以明显看出, 随着传输波长的增大, 将产生几个峰值, 并且在 475 nm 处的波动最为明显。光谱曲线的结果可以反映出在 475 nm 附近的电磁波段在缺陷处的光强较大, 所以我们设计的二维结构将在该波段产生很强的局域性。

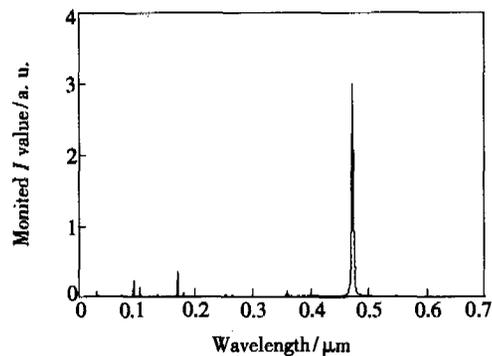


图 3 二维光子晶体缺陷态光谱

Fig. 3 The spectral curve of two-dimensional square photonic crystal.

在 475 nm 处, 计算得出的二维正方光子晶体微腔结构的缺陷态模场分布如图 4 所示, 从模场分布图我们可以直观地看出该结构对 475 nm 波长的局域性。

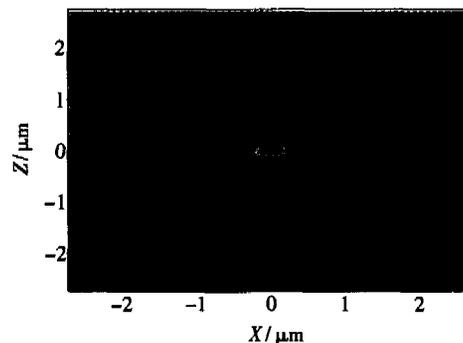


图 4 二维光子晶体缺陷态模场分布示意图

Fig. 4 The defect mode distribution of two-dimensional square photonic crystal.

### 3.3 二维微腔结构的稳定性分析

等效折射率是 Birks 等人<sup>[12]</sup>提出的, 主要应用在光子晶体光纤的计算等方面。通过在紧密排列的六角晶格结构中引入缺陷, 便可以构成光子晶体光纤。该方法主要是对光子晶体光纤的包层

区进行考虑。而我们在二维正方排列的光子晶体中引入缺陷,用等效折射率方法对其包层区进行计算,得出该结构的等效折射率的变化曲线,分析二维微腔结构的等效折射率稳定性。

图 5 所示为正方结构的一个周期性单元示意图,在介质柱半径  $a$  相对不是很大的情况下,把它近似为图 6 的圆形考虑。

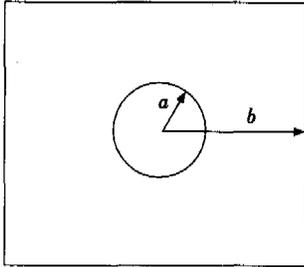


图 5 正方结构单位晶格示意图  
Fig. 5 The square unit cell.

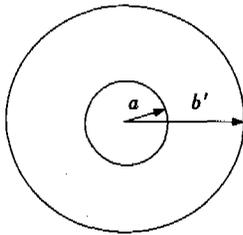


图 6 正方结构近似单位晶格示意图  
Fig. 6 The approximate square unit cell.

正方排列的光子晶体等效单位晶格可以表示为:

$$E_j = E_j(\rho, \theta) e^{i\theta z} \quad (22)$$

$$H_j = H_j(\rho, \theta) e^{i\theta z} \quad (23)$$

$\beta$  为沿着  $z$  轴方向的传播常数,  $j=1, 2$ , 假设空气的折射率为  $n_1$ , 介质的折射率为  $n_2$ 。

把电磁场分解为横向分量和纵向分量之和的形式:

$$E_j(\rho, \theta) = E_{zj}(\rho, \theta) + E_{\perp j}(\rho, \theta) \quad (24)$$

$$H_j(\rho, \theta) = H_{zj}(\rho, \theta) + H_{\perp j}(\rho, \theta) \quad (25)$$

$E_{zj}(\rho, \theta)$ 、 $H_{zj}(\rho, \theta)$  表示电场和磁场的纵向分量,  $E_{\perp j}(\rho, \theta)$ 、 $H_{\perp j}(\rho, \theta)$  表示电场和磁场的横向分量。

电磁场的纵向分量  $E_{zj}$  和  $H_{zj}$  满足下列 Helmholtz 方程:

$$\frac{d^2 E_{zj}}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dE_{zj}}{d\rho} + \left[ k^2 n_j^2 - \beta^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right] E_{zj} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{d^2 H_{zj}}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dH_{zj}}{d\rho} + \left[ k^2 n_j^2 - \beta^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right] H_{zj} = 0 \quad (27)$$

利用边界条件:  $\rho = r$  处切向分量连续, 可以得出:

$$E_{z1}(r, \theta) = E_{z2}(r, \theta) \quad (28)$$

$$H_{z1}(r, \theta) = H_{z2}(r, \theta) \quad (29)$$

$$E_{\theta 1}(r, \theta) = E_{\theta 2}(r, \theta) \quad (30)$$

$$H_{\theta 1}(r, \theta) = H_{\theta 2}(r, \theta) \quad (31)$$

在等效周期晶格的边界  $\rho = R$  处, 假定理想边界条件, 有

$$E_{z2}(R, \theta) \equiv 0 \quad (32)$$

$$H_{z2}(R, \theta) \equiv 0 \quad (33)$$

满足以上边界条件的 Helmholtz 方程的解可以表示为:

$$E_{z1}(\rho, \theta) = E_{10} I_m(w\rho) e^{im\theta} \quad (34)$$

$$H_{z1}(\rho, \theta) = H_{10} I_m(w\rho) e^{im\theta} \quad (35)$$

$$E_{z2}(\rho, \theta) = E_{20} P_m(\rho) e^{im\theta} \quad (36)$$

$$H_{z2}(\rho, \theta) = H_{20} P_m(\rho) e^{im\theta} \quad (37)$$

$E_{10}$ 、 $H_{10}$  和  $E_{20}$ 、 $H_{20}$  表示电磁场量的振幅,  $P_m(\rho)$  为:

$$P_m(\rho) = J_m(u\rho) Y_m(uR) - Y_m(u\rho) J_m(uR) \quad (38)$$

其中  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $J_m$ 、 $Y_m$  分别为第一类和第二类 Bessel 函数,  $I_m$  为第一类改性 Bessel 函数。

参数  $w, u$  可表示为:

$$w^2 = \beta^2 - n_1^2 k^2 \quad (39)$$

$$u^2 = n_2^2 k^2 - \beta^2 \quad (40)$$

通过数值计算, 得出基空间填充模的传输常量  $\beta_{FSM}$ , 进而依据  $n_{eff} = \beta_{FSM}/k_0$  得出基空间的等效折射率, 其中  $k_0$  为自由空间波矢量<sup>[13,14]</sup>。

图 7 所示为等效折射率的变化曲线。

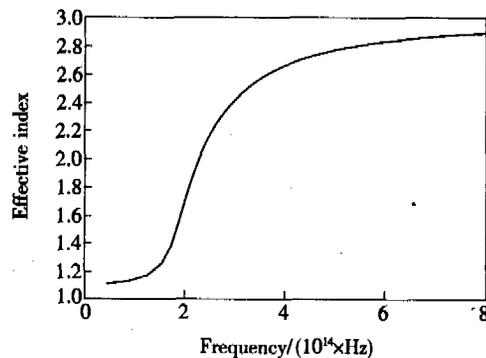


图 7 等效折射率变化曲线

Fig. 7 The variational curve of effective index.

从图7中可以看出,横坐标为传播的电磁波频率(Frequency),纵坐标为相应的等效折射率(Effective index)。这是等效折射率随着频率变化的色散关系曲线。很明显可以看出,在低频区等效折射率随着入射频率的增加变化幅度比较大,在很窄的频率范围内等效折射率迅速增大,而到了高频区曲线则逐渐趋于平坦,变化幅度很小,并且等效折射率达到比较大的数值。由等效折射率变化曲线可以得出,该结构在475 nm波段电磁波处,等效折射率随频率的变化渐趋平坦,变化幅度不大。结果表明光子晶体为微腔结构在475 nm以上的频率范围内提供一个稳定的环境。

## 4 结 论

通过对由 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 介质棒在空气中构成含有有点缺陷的二维正方光子晶体微腔结构的研究,得出二维微腔结构的缺陷态波长。同时对缺陷态的光谱进行分析,可以看出在475 nm处的电磁波动最为明显,反映出在475 nm附近的电磁波段在缺陷处的光强较大。并且我们用等效折射率方法对该结构的稳定性进行了一定的讨论,得出该结构在475 nm处具有稳定的传输环境的结论。该研究方法以及结果对光子晶体二极管以及光子晶体半导体激光器等前沿光子器件的设计方面提供一定的理论参考。

## 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 disordered dielectric superlattices [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23):2486-2489.
- [3] Abdurusul, Parhat. Electromagnetic waves propagation in periodic medium and two dimensional photonic band structure [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2003, **24**(2):125-129 (in Chinese).
- [4] Chen Ming, Ma Shaojie, Li Chunfei, et al. Eye-protection glasses against laser disservice based on the bandgap reflection of one-dimensional photonic crystal [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2004, **25**(3):325-328 (in Chinese).
- [5] Tang Haixia, Wang Qiming. Theoretical simulation of enhanced luminescence from nc-Ge/Si islands by photonic crystal [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2004, **25**(3):325-328 (in Chinese).
- [6] Chen Shuwen, Wang Xianming, Li Hong, et al. Physical model on normal coupled modes in a symmetric one-dimensional photonic crystal [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2005, **26**(6):699-703 (in Chinese).
- [7] Herrmann R, Sünner T, Hein T, et al. Ultrahigh-quality photonic crystal cavity in GaAs [J]. *Opt. Lett.*, 2006, **31**(9):1229-1231.
- [8] Topol'ancik J, Chakravarty S, Bhattacharya P, et al. Electrically injected quantum-dot photonic crystal micro-cavity light sources [J]. *Opt. Lett.*, 2006, **31**(2):232-234.
- [9] Hirayama H, Hamano T, Aoyagi Y. Novel spontaneous emission control using 3-dimensional photonic bandgap crystal cavity [J]. *Mater. Sci. Engin. B*, 1998, **51**(1-3):99-102.
- [10] Reynolds A L, Chong H, Thayne I G, et al. Transmission response for in-plane and out of plane propagation for a 2D photonic crystal with a planar cavity [J]. *Synth. Metals*, 2001, **116**(1-3):433-437.
- [11] Li Yunhui, Jiang Haitao, Li Hongqiang, et al. New progress in research of photonic crystal cavities [J]. *J. Tongji University (Natural Science)* (同济大学学报,自然科学版), 2005, **33**(7):864-868 (in Chinese).
- [12] Birk T A, Robert P J, Russell P St, et al. Full 2-D photonic bandgaps in silica/air structure [J]. *Electron. Lett.*, 1995, **31**(22):1941-1943.
- [13] Ren Guobin, Wang Zhi, Lou Shuqin, et al. Study on photonic crystal fibers by effective-index model [J]. *Chin. J. Lasers* (中国激光), 2004, **31**(6):723-727 (in Chinese).
- [14] Ren Guobin, Lou Shuqin, Wang Zhi, et al. Study on dispersion properties of photonic crystal fiber by equivalent-index model [J]. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2004, **24**(3):319-323 (in Chinese).

## Two-dimensional Square Photonic Crystal Microcavities

CHEN Song<sup>1,2</sup>, WANG Wei-biao<sup>1</sup>, LIANG Jing-qiu<sup>3</sup>, XIA Yu-xue<sup>1,2</sup>

LEI Da<sup>1,2</sup>, ZENG Le-yong<sup>1,2</sup>, CHEN Ming<sup>4</sup>

(1. Key Laboratory of Excited State Processes, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;

2. Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3. National Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;

4. Department of Electronic Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** Photonic crystals are new manual microstructure materials with periodic refractive indices distribution. The photonic crystals have photonic band gaps analogous to the electronic band gaps in semiconductors. If the frequencies of electromagnetic waves are within the photonic band gaps, they cannot propagate in the photonic crystals. We introduce the new structure in the research of photonic crystal microcavities. Two-dimension square photonic crystal microcavities composed of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  are studied by plane wave expansion method. The physical mechanism and numerical simulation are detailed. We can obtain the band gap and the frequency of defect mode. The range of defect mode is 470 ~ 476 nm. The spectral curve of defect mode is given by calculating the quality factor of photonic crystal microcavities. In spectral curve, there are many peak values when transmission wavelength is increased. The highest quality factor achieved at 475 nm. And more study on the effective index of cladding was performed by fully vectorial effective index method. We study the stability of photonic crystal microcavities by effective index method, and obtain the variational curve of effective index. There is a steady field when transmission wavelength is about 475 nm. These methods are valuable in the design of optical devices based on photonic crystal cavities. Photonic crystal semiconductor laser and photonic crystal diode can be designed under this guidance.

**Key words:** photonic crystal; point defect; photonic crystal microcavities; effective index