

激光全息法制作二、三维光子晶体的模拟 计算及禁带分析*

刘 欢^{1)2)†} 姚建铨¹⁾²⁾³⁾ 李恩邦¹⁾²⁾³⁾

1) 天津大学精仪学院激光与光电子研究所, 天津 300072)

2) 教育部光电信息技术科学重点实验室, 天津 300072)

3) 南开大学、天津大学联合研究院, 天津 300072)

(2005 年 5 月 17 日收到, 2005 年 11 月 4 日收到修改稿)

激光全息法制作二、三维光子晶体相比于传统半导体微加工及精密机械加工技术具有很多优势, 比如通过一次光辐射就可以制作出大体积、均匀的周期性结构, 且能更自由、更容易地控制光子晶体结构. 提出一种多光束干涉模型, 通过设计模型中光束的各项参数, 计算分析出二、三维光子晶体的结构. 基于平面波展开法, 理论计算了 fcc 结构光子晶体的完全禁带随填充率和介电常数比变化的情况. 以上计算结果为后期实验中采用激光全息法制作二、三维光子晶体结构提供了良好的指导方向和理论依据.

关键词: 光子晶体, 激光全息, 多光束干涉, 完全禁带

PACC: 4270Q, 7820P, 7115B

1. 引 言

1987 年 Yablonovitch 和 John 分别独立地在 Phys. Rev. Lett. 上发表论文, 提出“光子晶体”的概念^[1,2]. 光子晶体是一种介电常数空间周期性变化、晶格常数可与光波长相比、具有光子禁带, 能控制光子传播状态的新型人工材料. 正是凭借这些独特的性能, 光子晶体在光子晶体光纤^[3]、光子晶体波导^[4]、光子晶体激光器^[5]、高发射率小型微波天线^[6]、超棱镜^[7]、非线性光子晶体器件^[8]等众多领域得到广泛的应用.

由于光子晶体在光通讯领域中的应用非常广泛, 而标准光纤的通讯波长在 1.3—1.55 μm , 也就是近红外的波段, 因此要求光子晶体的周期常数在微米、亚微米量级. 而目前人工制作周期为微米、亚微米级的三维光子晶体还存在很多困难. 最近出现的激光全息光刻技术非常适合于制造在亚微米尺度上周期性重复的三维结构^[9]. 此技术是采用印刷制版

中平板刻蚀技术, 利用可见光或紫外光的多光束干涉产生二、三维全息图案, 让感光树脂在全息图案中曝光, 再经过冲洗, 形成带有空气孔、大体积、均匀的周期性二、三维结构. 通过调节激光束的光束数、传播方向和偏振态, 可以自由、容易地改变二、三维形状的结构和尺寸, 产生各种不同的对称结构.

2. 制作二、三维光子晶体的多光束干涉模型分析

本文设计了一个多光束干涉形成光子晶体的模型, 通过设计模型中光束的各项参数, 其中包括光束传播和偏振的方向、每束光强度及相位, 计算分析出在不同光强和偏振方向的情况下的二、三维光子晶体结构.

2.1. 激光束的一般表示

为了便于分析二维或三维的多光束干涉图样, 我们首先给出能描述一束光传播方向、偏振态、波前

* 教育部南开大学、天津大学科技合作基金、国家自然科学基金(批准号: 60278001)资助的课题.

† E-mail: maggielh@163.com

形状、及相位的一般表示.光沿 z 轴的电场矢量为

$$E(x, y, z) = [e_x E_x + e_y E_y \exp\{i\delta\}] E(x, y) \times \exp\{i(kz + \Phi(x, y, z))\}, \quad (1)$$

式中 δ 为相位差.若 $\delta = m\pi$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), 表示光束是线偏振光.若 $\delta = \pm\pi/2$ 并且 $E_x = E_y$, 表示光束是圆偏振光;当然在大多数情况下,光束是椭圆偏振光. $E(x, y)$ 表示在 $x-y$ 平面的振幅分布. $\Phi(x, y, z)$ 表示光波的波前形状,若光波为高斯光波,则

$$\Phi(x, y, z) = \Phi_0 + k \frac{x^2 + y^2}{2R(z)} - \tan^{-1}(z/z_0) \quad (2)$$

式中

$$z_0 = \pi w_0^2 / \lambda, \quad R(z) = z [1 + (z_0/z)^2]^{1/2}, \quad (3)$$

式中 Φ_0 为初始位相.(3)式中 w_0 为光束腰半径.若光波为平面光波,那么 $E(x, y)$ 为常数, $\Phi(x, y, z) = \Phi_0$.尽管实际中绝对的平面光波并不存在,但在一些应用中,采用平面光波的模型可以很好地近似真实的激光束,并且能大大简化计算过程.因此在下面的多光束干涉模型研究中,假设入射光为平面光波.

2.2. 多光束干涉分析

根据(1)式,可以给出第 n 束光在坐标系 $x_n-y_n-z_n$ 中的电场矢量为

$$E_n(x_n, y_n, z_n) = [e_{x_n} E_{x_n} + e_{y_n} E_{y_n} \exp\{i\delta_n\}] \times \exp\{i(kz_n + \Phi_{0n})\}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

考虑 n 束光在整体坐标系 $x-y-z$ 中干涉,总的电场矢量可表示为

$$E(x, y, z) = \sum_{n=1}^N [e_{x_n} E_{x_n} + e_{y_n} E_{y_n} \exp\{i\delta_n\}] \times \exp\{i(kz_n + \Phi_{0n})\}. \quad (5)$$

总光强分布为

$$I(x, y, z) = E(x, y, z) \cdot E(x, y, z)^*. \quad (6)$$

坐标系 $x_n-y_n-z_n$ 与整体坐标系 $x-y-z$ 的关系可用以下计算式表示:

$$\begin{aligned} x_n &= x \cos \alpha_{n1} + y \cos \beta_{n1} + z \cos \gamma_{n1}, \\ y_n &= x \cos \alpha_{n2} + y \cos \beta_{n2} + z \cos \gamma_{n2}, \\ z_n &= x \cos \alpha_{n3} + y \cos \beta_{n3} + z \cos \gamma_{n3}, \end{aligned} \quad (7)$$

式中 $\alpha_{nm}, \beta_{nm}, \gamma_{nm}$ ($m = 1, 2, 3$) 分别表示 x_n, y_n 和 z_n 轴在整体坐标系中的方向角.这里我们设计了一个简单的情况,如图1所示,则(7)式可简化为

$$\begin{aligned} x_n &= x \cos \theta + y \sin \theta, \\ y_n &= -x \cos \varphi \sin \theta + y \cos \varphi \cos \theta + z \sin \varphi, \\ z_n &= x \sin \varphi \sin \theta - y \sin \varphi \cos \theta + z \cos \varphi. \end{aligned} \quad (8)$$

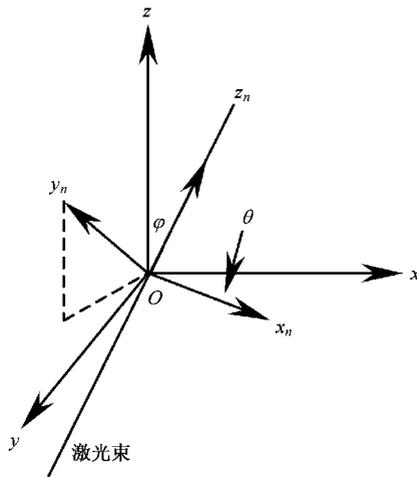


图1 坐标系 $x_n-y_n-z_n$ 在整体坐标系 $x-y-z$ 中的位置

如果入射光的入射角和偏振方向已知,由(2)~(8)式,可以计算出干涉光场的强度分布.再根据光刻胶的光敏性和曝光阈值,可以预测出光子晶体的结构.

2.3. 二维光子晶体结构分析

根据以上多光束干涉模型,若四束激光按图2所示的方式进行干涉,则可以产生二维正方形光子晶体结构.图中 B_1, B_2, B_3, B_4 由一束光经分束镜或衍射光栅产生,并且相对于 z 轴对称. B_1, B_2 在 $x-z$ 面内, B_3, B_4 在 $y-z$ 面内.

图3所示的是四束光干涉形成的二维正方形图样,所有入射光都在 $x-z$ 平面内偏振,并且相互之间无相位差.为了比较入射光的偏振方向对干涉图样的影响程度,将 B_3, B_4 的偏振方向改为在 $y-z$ 面内偏振,图4所示的就是计算结果.比较图3和图4可以发现,图4的图样取向和周期常数与图3完全不同.由于 (B_1, B_2) 和 (B_3, B_4) 的偏振面相互正交,因此,干涉分别仅在 (B_1, B_2) 和 (B_3, B_4) 之间进行,图4干涉图样的形成其实是2组 $((B_1, B_2), (B_3, B_4))$ 一维图样的叠加.我们还计算了当所有入射光都是圆偏振光的情况,所得图样和图4近似.我们还进一

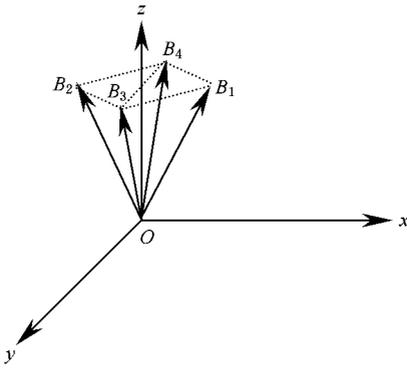


图 2 四束激光在坐标系中的位置

步研究了在入射光中引入相位差对干涉图样的影响,计算表明,当所有入射光都在 $x-z$ 面内线偏振时,我们给任何一束光引入 0 至 π 的相位差,产生的干涉图样结果会从图 3 慢慢过渡到图 4. 这个有趣的现象在文献 [10] 中也提到过.

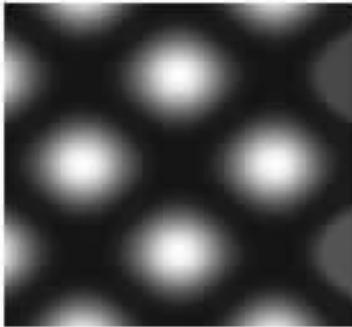


图 3 四束光干涉图样,其中所有的光束都是线偏振光,且都在 $x-z$ 面内振动,相互之间无相位差

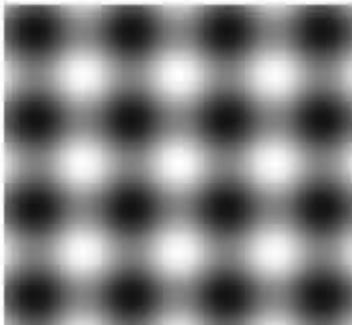


图 4 四束光干涉图样,其中所有的光束都是线偏振光, B_1, B_2 在 $x-z$ 面内振动, B_3, B_4 在 $y-z$ 面内振动,相互之间无相位差

2.4. 三维光子晶体结构分析

根据以上分析的多束光干涉的模型,同样可以

计算出由图 5 所示的四束光干涉形成的三维结构. 图 5 所示的制作三维光子晶体结构的光路在文献 [11, 12, 13] 中已经应用过,在模拟计算中, B_1, B_2, B_3 光强相等,且都是线偏振光; B_4 的光强是其他的双倍,是圆偏振光;采用的激光波长是三倍频 Nd:YAG (355nm); B_1, B_2, B_3 的入射角 φ 都是 38.9° .

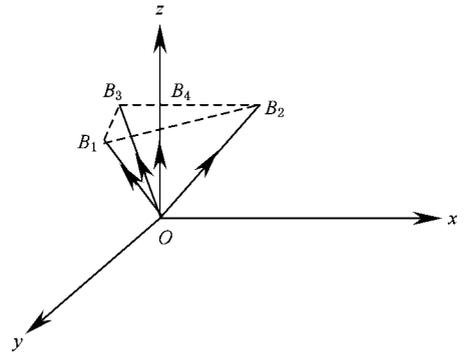


图 5 四束激光在坐标系中的位置

正如预先设想的那样,四束光干涉形成的是 fcc 三维结构. 图 6 所示的是 $x-y$ 平面四束光的干涉图样,即 fcc 结构 (111) 面的干涉图样. 在计算中,设定四束光的总曝光量是光刻胶曝光阈值的 1.5 倍. 之所以选择总曝光量作为控制参数,是为了便于在实验中直接测量和调整. 从图 6 和图 7 还发现干涉图样不是圆形的而是三角形的.

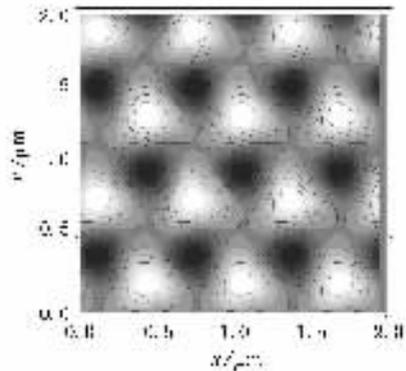


图 6 $x-y$ 平面四束光干涉图样

在此计算模型下,我们还计算出光子晶体的填充率随曝光量的变化趋势,如图 8 所示. 横轴表示经光刻胶曝光阈值归一化后的曝光值,纵轴表示填充率. 从图中可以看到,随着曝光量的增长,填充率几乎成线性增长. 当曝光量超过光刻胶曝光阈值时,填充率开始趋于饱和. 需要指出的是,填充率和曝光量之间的关系还依赖于入射光之间的光强比和它们的

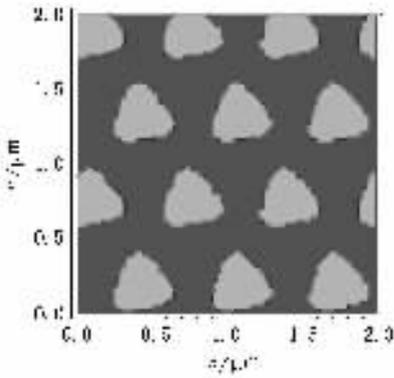


图 7 图 6 所示的干涉图样经曝光后在光刻胶上形成的图案(深色部分表示光刻胶冲洗后形成的空气孔)

偏振态.

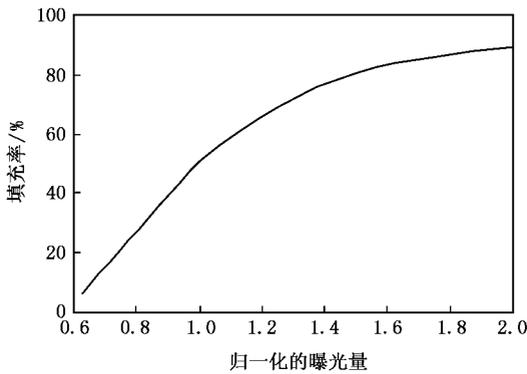


图 8 曝光量与填充率的关系图

当 B_1, B_2, B_3, B_4 都为圆偏振光 ,且 B_4 的光强为其他光束光强的两倍时 ,形成的干涉图样分布如图 9 所示 .这里需要说明一下 ,图 9 ,10 ,11 和图 6 ,7 一样 ,在 x 和 y 方向的最大值均为 $2\mu\text{m}$.当 B_1, B_2, B_3 都为线偏振光 , B_4 为圆偏振光 ,且 B_4 的光强为其他光束光强的两倍时 ,形成的干涉图样分布如图 10 所示 .当 B_1, B_2, B_3, B_4 都为圆偏振光 ,且 B_4 的光强为其他光束光强的一半时 ,形成的干涉图样分布如图 11 所示 .和图 7 相比 ,图 11 的干涉图样是圆形的 ;由于 B_4 光强减小 , B_1, B_2, B_3 之间的干涉就比较明显 ,因此图 11 的周期常数比较小 .计算中 ,通过改变光束的偏振态和光束之间的光强比 ,可以得到各种不同的三维光子晶体结构 ,从而为实验阶段制作三维光子晶体结构提供前期分析和预测 .

假定光束 B_1, B_2, B_3 的入射角为 35° ,相互之间夹角为 120° ,光束 B_1, B_2, B_3, B_4 均为线偏振光 , B_4 沿 y 轴偏振 , B_1, B_2, B_3 分别在 与入射面垂直的方

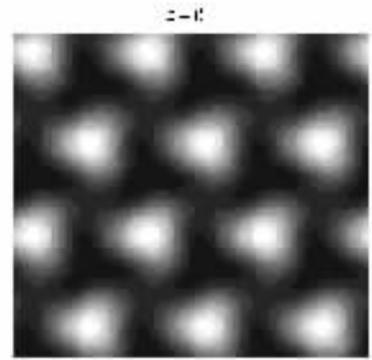


图 9 四束光均为圆偏振光 , B_4 的光强为其他光束光强两倍时 ,在 $z=0$ 处 $x-y$ 平面上计算出的干涉图样分布

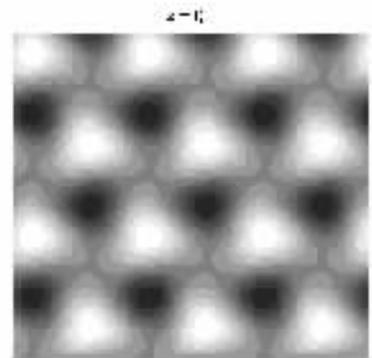


图 10 B_1, B_2, B_3 为线偏振光 , B_4 为圆偏振光 , B_4 的光强为其他光束光强两倍时 ,在 $z=0$ 处 $x-y$ 平面上计算出的干涉图样分布

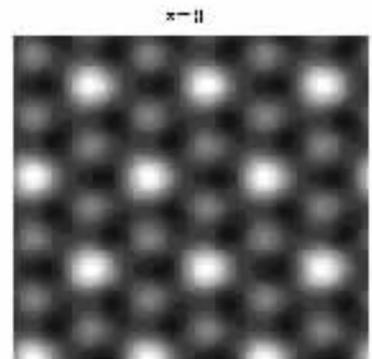


图 11 四束光均为圆偏振光 , B_4 的光强为其他光束光强一半时 ,在 $z=0$ 处 $x-y$ 平面上计算出的干涉图样分布

向偏振 ,两种介质的折射率比值为 1.67 .按此假设条件 根据 (2) — (8) 式 ,再由 matlab 软件画图 ,可以预测出如图 12(a) 所示的三维光子晶体结构 ,图 12 (b) 为图 12(a) 的反图 .

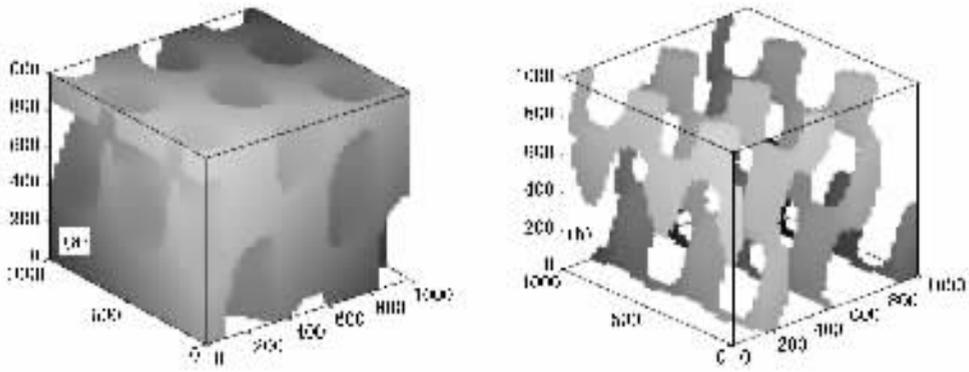


图 12 三维光子晶体结构示意图

3. 三维光子晶体 fcc 结构完全禁带的理论计算与最佳参数分析

平面波展开法(plane wave expansion method)是计算周期结构最常用的方法之一,应用布洛赫(Bloch)定理,对某一入射方向 k ,以平面波的形式展开电磁场,将 Maxwell 方程化成一个本征方程,求出 k 对应的一组频率本征值^[14,15].这种方法的优点是没有事先引入假设条件,计算出的频带结构精确有效^[15].基于平面波展开法,我们计算了三维光子晶体 fcc 结构的禁带大小和位置,分析了对光子禁带产生影响的各种因素,为以后的实验制备提供了良好的指导方向及理论依据.

光子晶体的完全禁带越宽,其性能越好.光子晶体禁带宽度主要取决于晶格结构、介电常数比、填充率、以及介质的连通性等因素的影响.对于晶格结构,完全禁带更容易出现在具有近球形第一布里渊区的结构中,因此二维六角结构和三维面心结构能得到较大的带隙^[16-18].构成光子晶体材料的介电常数对比度越高,布拉格散射越强烈,就越有可能出现光子禁带^[19].通过激光全息法四束光干涉产生的三维光子晶体结构一般都是 fcc 结构,因此对 fcc 结构的带隙情况进行深入的理论计算是十分必要的.

通过计算发现,在高介电材料 Si($\epsilon = 11.7$)球形成的 fcc 结构中,由于球形构成的 fcc 结构具有很高的对称性,对称性引起的能级简并使它很难产生完全禁带,因此无论怎样变化小球的半径,即改变填充率,都没有完全禁带出现.

我们又计算了在高介电材料 Si 中,由空气小球形成 fcc 结构的带隙情况.图 13 所示的是小球半径(r)和完全禁带之间的关系.在小球无重叠排列的情

况下, fcc 结构并没有完全禁带,当小球半径在 $0.35a-0.36a$ ($a = \text{period} = 1\mu\text{m}$)之间变化,即空气小球密堆积排列时,才产生完全禁带.填充率变化范围小,且带隙率也较低.在 $r = 0.36a$ 时,最大带隙率仅为 3.86%.此结果和文献[20]中的报道也是相符合的.

我们通过优化介电常数比,即折射率比,来提高 fcc 结构的带隙率.图 14 所示的是当小球半径为 $0.36a$,即填充率为 21.83%时,改变背景材料的折射率,观察其完全禁带的变化.随着背景材料折射率的增大, fcc 结构的完全禁带宽度和带隙率不断提高.当 $n_{\text{background}} \geq 3.2$ 时, fcc 结构开始产生完全禁带,当 $n_{\text{background}} = 4$ (Ge, $\epsilon = 16$)时,完全禁带宽度为 $0.7171a-0.7695a$,带隙率提高到 7.05%.

激光全息干涉法是近年来一种有潜力的微加工技术,此法易于制备出 fcc 结构的光子晶体,用它们作为模板,还可以制备出具有高折射率比值的完全禁带结构^[11,12,21].另外,自组装法也是在实验室制备三维光子晶体时常选用的方法之一.该方法成本低

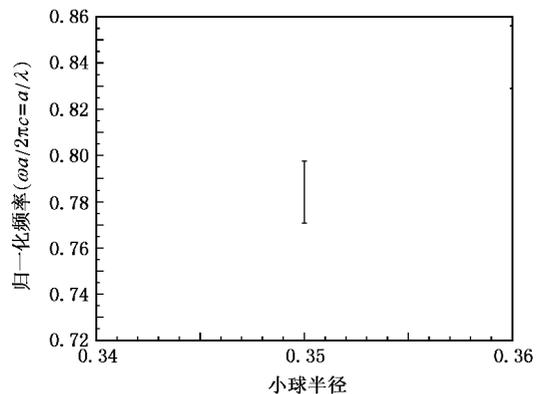


图 13 fcc 结构的完全禁带宽度、位置与结构填充率的关系

廉,工艺简单,易于产生密堆积型的 fcc 反蛋白石结构,目前已有不少相关报道^[20,22,23]。因此,球形构成的 fcc 结构虽然难于产生完全禁带,但由于在实验中比较容易实现,目前仍是实验室制作中采用的主要结构之一。

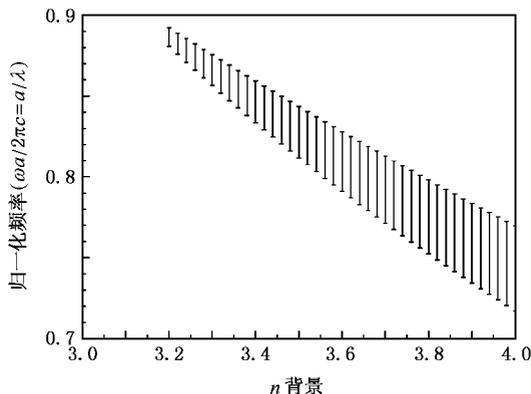


图 14 fcc 结构的完全禁带宽度、位置与背景材料折射率的关系

4. 结 论

在为预测二、三维光子晶体结构而设计的多光束干涉模型中,我们考虑到激光束的各种光学参数,其中包括光传播方向、偏振态、以及由于光路带来的相移。计算结果表明,干涉图样依赖于四束光的偏振态和四束光之间的光强比,比如,当四束入射光均为圆偏振光时,其三维光子晶体干涉图样就接近于圆形。通过调整入射光的光学参数,可以控制光子晶体结构中空气孔的形状。我们还计算了在不同曝光量下,三维结构填充率的变化情况。此外,通过理论计算发现,fcc 结构由于高对称性引起的能级简并,除了在高介电材料背景下空气小球密堆积排列时能产生完全禁带,其他情况下不产生完全禁带。因此,通过以上的理论计算与分析,可以为实验中采用激光全息法制作光子晶体结构提供多种光学参数以及与之相匹配的光刻胶的选择。

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [3] Knight J C, Broeng J, Birks T A *et al* 1998 *Science* **282** 1476
- [4] Chutinan A, Noda S 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3739
- [5] Painter O, Lee R K, Scherer A *et al* 1999 *Science* **284** 1819
- [6] Brown E. R, Parker C D, Yablonovitch E 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 404
- [7] Kosaka H, Kawashima T, Tomita A *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** R10096
- [8] Ni P G, Ma B Q, Cheng B Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1925 (in Chinese)[倪培根、马博琴、程丙英等 2003 物理学报 **52** 1925]
- [9] Berger V, Gauthier-Lafaye O, Costard E 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 60
- [10] Kondo T, Matsuo S, Juodkazis S *et al* 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 725
- [11] Cambell M, Sharp D N, Harrison M T *et al* 2000 *Nature* **404** 53
- [12] Divliansky I, Mayer T S, Holliday K S *et al* 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1667
- [13] Wang X, Xu J F, Su H M *et al* 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 2212
- [14] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152
- [15] Shen L F, He S L, Wu L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1133 (in Chinese)[沈林放、何赛灵、吴 良 2002 物理学报 **51** 1133]
- [16] Cassagne D, Jouanin C, Bertho D 1996 *Physical Review B* **53** 7134
- [17] Yablonovitch E 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 283
- [18] Zhuang F, Wu L, He S L 2002 *Chin. Phys.* **11** 834
- [19] Dong H Y, Liu M, Wu Z H *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3194 (in Chinese)[董慧媛、刘 楣、吴宗汉等 2005 物理学报 **54** 3194]
- [20] John S, Busch K 1999 *J. Lightwave Technol.* **17** 1931
- [21] Shoji S, Kawata S 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2668
- [22] Bogomolov V N, Gaponenko S V, Germanenko I N *et al* 1997 *Phys. Rev. E* **55** 7620
- [23] Wijnhoven J E G J, Willem L V 1998 *Science* **281** 802

Simulated calculation and analysis of the forbidden band for fabricating two- and three-dimensional photonic crystal structures using holographic lithography^{*}

Liu Huan^{1,2,3)} Yao Jian-Quan^{1,2,3)} Li En-Bang^{1,2,3)}

1) College of Precision Instrument and Opto-Electronics Engineering, Institute of Laser and Optoelectronics, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

2) Key Laboratory of Optoelectric Information Science and Technology, Ministry of Education, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

3) Cooperated Institute of Nankai University and Tianjin University, Tianjin 300072, China)

(Received 17 May 2005 ; revised manuscript received 4 November 2005)

Abstract

Compared with the semiconductor and micromachining fabrication technology, the holographic lithography method offers a number of advantages, including its ability to create large volume of periodic structures through one irradiation process, the uniformity of period, and more degrees of freedom to control the structures. In this study, a multi-beam interference model is presented for predicting two- and three-dimensional photonic crystal structures through designing the beam intensities, polarization directions and phase delays. Based on plane wave expansion method, complete forbidden bands of three-dimensional photonic crystals with fcc structure are also studied. The calculated results provide a useful guide for choosing proper optical parameters to fabricate two- and three-dimensional photonic crystal structures.

Keywords : photonic crystals, laser holography, multi-beam interference, complete forbidden band

PACC : 4270Q, 7820P, 7115B

^{*} Project supported by the Science & Technology Cooperation Foundation of Nankai University and Tianjin University, the Ministry of Education and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60278001).