

量子受限效应对称性效应对硅光子晶体禁带的影响

周年杰 黄伟其 苗信建 王刚 董泰阁 黄忠梅 尹君

Effects of quantum confinement and symmetry on the silicon photonic crystal band gap

Zhou Nian-Jie Huang Wei-Qi Miao Xin-Jian Wang Gang Dong Tai-Ge Huang Zhong-Mei Yin Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 064208 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.064208

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064208>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I6>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

覆盖 X 和 Ku 波段的低雷达散射截面人工磁导体反射屏

[A low radar crosssection artificial magnetic conductor reflection screen covering X and Ku band](#)

物理学报.2015, 64(2): 024219 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024219>

带多孔硅表面缺陷腔的半无限光子晶体 Tamm 态及其折射率传感机理

[Tamm state of semi-infinite photonic crystal based on surface defect cavity with porous silicon and its refractive index sensing mechanism](#)

物理学报.2014, 63(24): 244207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.244207>

有耗色散光子晶体带隙结构的本征值分析新方法

[A novel eigenvalue method for calculating the band structure of lossy and dispersive photonic crystals](#)

物理学报.2014, 63(18): 184210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.184210>

光子晶体中基于有效折射率接近零的光束准直出射

[Collimating emission from photonic crystals based on the quasi-zero-effective-index](#)

物理学报.2014, 63(17): 174204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.174204>

增益对一维周期结构慢光传输特性影响

[Influence of gain on propagation properties of slow light in one-dimensional periodic structures](#)

物理学报.2014, 63(17): 174202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.174202>

量子受限效应和对称性效应对硅光子晶体禁带的影响*

周年杰 黄伟其[†] 苗信建 王刚 董泰阁 黄忠梅 尹君

(贵州省纳米光子物理研究所, 贵阳 550025)

(2014年6月28日收到; 2014年8月6日收到修改稿)

光子晶体不仅可以用来调控自发辐射, 还可以用来控制光的传输和局域. 采用平面波展开法进行模拟计算, 分析硅背景下的二维正方、三角晶格光子晶体散射基元的形状和空间取向对光子禁带的影响. 计算结果表明: 对称性和量子受限效应之间的竞争是导致光子晶体禁带宽度发生变化的原因.

关键词: 光子禁带, 硅光子晶体, 量子受限效应, 对称性

PACS: 42.70.Qs, 78.20.Bh

DOI: 10.7498/aps.64.064208

1 引言

光子晶体是指具有光子带隙特性的周期性电介质结构. 自从1987年, John^[1]和Yablonovitch^[2]分别独立提出光子晶体概念以来, 把光子晶体与半导体电子晶体进行类比的思想曾一度推动了光子晶体的研究工作, 这种类比的思想也在潜移默化中为人们所接受. 光子晶体的禁带和局域态与半导体电子晶体的情况相似^[3,4]; 多孔硅的带隙与硅量子线的带隙相似, 而光子晶体带隙的形成也只需要短程有序^[5]. 在纳米尺度范围内, 电子晶体存在着量子受限效应: 随着纳米结构尺寸减小, 电子晶体带隙展宽, 特征光谱蓝移^[6-9]. 类比电子晶体量子受限效应(QC), 研究光子晶体的量子受限在理论及应用方面都具有重要的意义.

光子晶体的对称性在形成光子带隙以及展宽带隙方面具有决定性作用. 例如, 在正方或者蜂窝状晶格类型的光子晶体的圆形介质柱散射基元之间插入圆形的介质柱, 会使完全光子带隙展宽^[10]; 调整正方晶格正方介质柱光子晶体散射基元的空间取向, 可以显著地改变 E 和 H 偏振模的位置和带隙宽度, 再在散射基元之间插入圆形介质柱还能

获得更宽的完全光子带隙^[11]; 此外, 在介质背景下的空气腔型光子晶体的空气孔中插入介质柱也会有类似现象^[12]. 在晶体的能带结构上, 处于布里渊区高度对称点处的能级都具有较高的间并度^[13]; 降低晶体的对称性, 这些间并度较高的点会分离, 从而导致新的带隙的出现, 这有利于形成更多的完全光子带隙^[14-16]. 但是, 如果从量子力学的角度来看, 虽然对称性的降低确实会导致间并能级的分离, 促使新的带隙形成, 但带隙的展宽更多地取决于外界对系统进行扰动的强度以及量子之间相互作用的大小.

我们采用平面波展开法^[17](plane wave expansion, PWE)进行模拟计算, 系统地分析硅背景下的二维正方、三角晶格光子晶体散射基元的形状和空间取向对光子禁带的影响. 改变基元的形状和空间取向, 仅仅导致了体系镜面对称的破缺, 体系的平移对称性和旋转对称性并没有发生变化. 为了表述方便, 我们定义光子晶体带隙的定义域宽度 Δf 为填充率在光子晶体禁带从展开到消失的整个过程中的变化量; 定义随着体系对称性的降低而定义域宽度 Δf 减少的带隙为属于高对称性的禁带(简称高对称带隙, 用“0”标示); 定义随着体系对称性

* 国家自然科学基金(批准号: 11264007, 61465003)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: sci.wqhuang@gzu.edu.cn

的降低而定义域宽度 Δf 增加的禁带, 为属于低对称性的禁带(简称低对称带隙, 用“1”标示). 类比电子晶体 QC 的研究发现: 一方面, 对称性通过影响光子禁带的定义域宽度 Δf 间接地调节禁带的宽度, 当光子晶体体系的对称性改善时, 高对称带隙的定义域宽度 Δf 增加, 带隙展宽, 低对称带隙的定义域宽度 Δf 减小, 带隙压缩; 另一方面, 光子晶体的量子受限效应直接地调节光子禁带的宽度, 当光子晶体的量子受限效应增强时, 高对称带隙展宽, 而低对称带隙压缩.

2 模型建立与计算结果讨论

2.1 光子晶体基元形状对光子禁带的影响

空气背景下介质柱型的光子晶体易于形成较好的 TM 带隙, 介质背景下的空气腔型光子晶体易于形成较好的 TE 带隙^[18]. 因此, 计算集中研究硅背景下空气孔周期性排列的光子晶体的 TE 带隙.

硅和空气的介电常数分别取 12.25 和 1(通信波段). 晶格类型为正方晶格和三角晶格, 三角晶格原胞(菱形)的较小角为 $\Phi = 60^\circ$; 空气孔的形状选择圆形、正六边形或者正方形; 晶格常数为 a . 格点上的基元的宽度(圆为直径)为 d , 填充率为 $f = d/a$. 对正方形或者正六角形等对角线有取向的空气孔, 定义旋转角 θ 等于空气孔的同一条对角线在空气孔相对于其对称中心旋转前后的夹角; 晶体致密度 K 定义为晶格原胞的面积 S_C 除原胞内基元的总面积 S_L , 即 $K = S_L/S_C$. 几种二维光子晶格的致密度 K 列于表 1.

表 1 中的空气孔都相对于自身的对称中心都旋转了角度 θ . 图样 1, 2 和 3 都是正方晶格, 空气孔形状分别为圆形、正方形和正六边形; 图样 4, 5 和 6 都是三角晶格, 空气孔形状分别为圆形、正方形和正六边形. 文中提到的致密度的高低都是就相对 f 而言的, 其中三角晶格原胞(菱形)的较小角为 $\Phi = 60^\circ$.

表 1 几种二维光子晶格的致密度 K







晶格类型	 1	 2	 3	 4	 5	 6
致密度 K	$\frac{\pi}{4}f^2$	f^2	$\frac{\sqrt{3}}{2}f^2$	$\frac{\sqrt{3}\pi}{6}f^2$	$\frac{2\sqrt{3}}{3}f^2$	f^2

图 1 给出了三角和正方晶格光子晶体带隙的中心频率和宽度相对于填充率 f 的变化规律. 拟合中心频率随填充率 f 的变化曲线, 得到带隙中心频率 E 与 f 关系满足下式:

$$E = A \times (1.155 - f)^{-n}, \quad (1)$$

(1) 式中, A 是光子受限效应系数(可由实验校准), 对不同类型光子晶体, A 和 n 分别取不同值. 将 $(1.155 - f)$ 与电子晶体的纳米尺寸进行类比, 光子晶体表现出与电子晶体相似的量子受限效应: 随着填充率 f 的增大, 光子所处的空间减小, 受到的约束增强, 从而使得光子晶体带隙中心持续蓝移^[19]. 对于电子晶体, 人们通常不考虑对称性对带隙宽度的影响, 而直接由特征光谱随量子点尺寸的减小而蓝移的现象来表征量子受限效应. 但是, 光子晶体结构具有高度的可控性, 这使得人们获得了综合考虑对称性和量子受限效应对晶体带隙的影响; 此时, 用带隙中心的蓝移现象来刻画量子受限效应更具准确性和可行性. 如图 1(a) 所示, 随着填充率 f 的减小, 不同光子晶体的禁带中心越来越接近, 我

们把这些禁带看作是同一禁带在不同展宽规律下形成的. 填充率 f 相同时, 带隙的中心频率的变化曲线的取值越大, 表示量子受限效应越明显.

从量子受限效应的角度来考虑, 光子晶体的带隙中心蓝移的速度与晶体致密度 K 正相关. 在填充率 f 相同时, 致密度 K 越大, 带隙中心频率越高, 即量子受限效应越明显; 对处于较低波段的带隙而言, 致密度 K 相同时带隙中心甚至紧挨在一起(图 1(a), (c) 和表 1). 对带隙的展宽机制, 我们可以确定两点: 1) 带隙的定义域宽度 Δf 越大, 带隙展宽越大(图 1(a), (b)); 2) 光子晶体的量子受限效应越明显, 随着填充率 f 的增加, 高对称带隙的宽度上升得越快(图 1(a), (b)). 由此我们可以肯定, 带隙的宽度与带隙的定义域宽度 Δf 和量子受限效应有关, 但由于计算过程未进行变量(体系的对称性和光子晶体量子受限效应)控制, 带隙的定义域宽度 Δf 与对称性的关系以及带隙展宽机理都不清晰.

值得指出的是: 当光子晶体的空气孔都按相同的规律发生变化时, 光子晶体的(如正方晶格和三

角晶格) 旋转对称性和平移对称性都不会发生变化, 但镜面对称可能发生变化. 例如, 在正方晶格的光子晶体中, 把正方形的空气孔换成正六边形的空气孔, 镜面对称性会降低; 同样地, 在三角晶格的光子

晶体中把正六边形的空气孔换成正方形的空气孔, 镜面对称性也会降低. 本文只考虑了镜面对称破缺的情况.

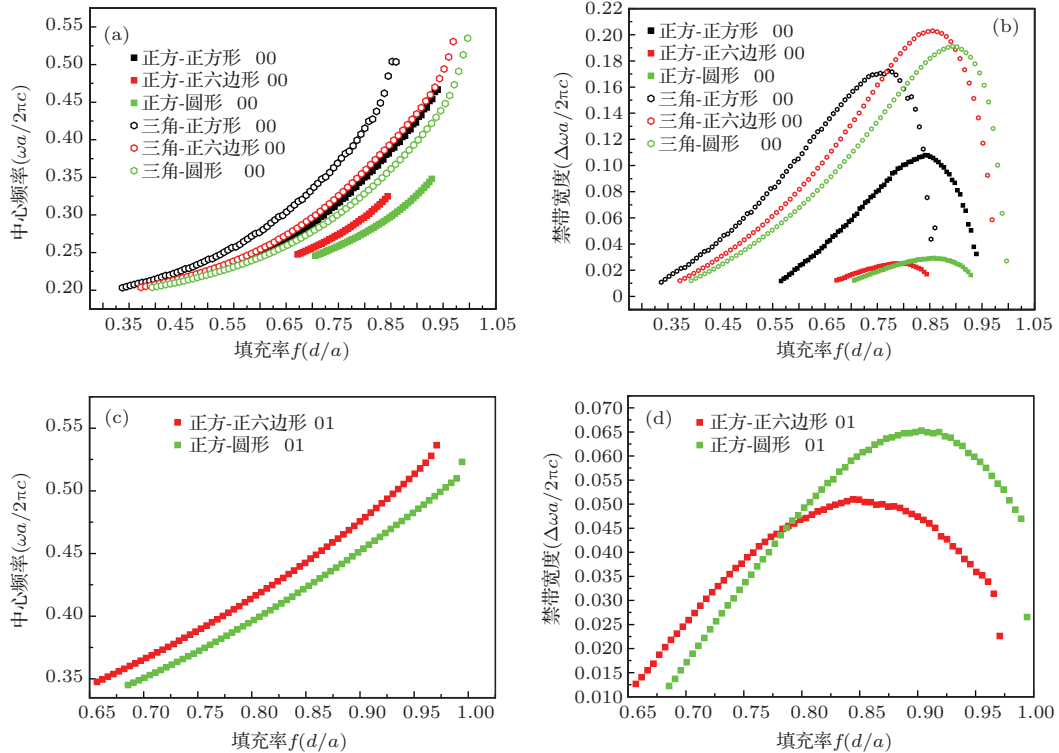


图1 (网刊彩色) 空气孔没有发生任何旋转的情况下, 三角和正方晶格光子晶体带隙的中心频率和宽度相对于填充率 f 的变化规律. 实心正方形代表正方晶格, 用“正方”标记; 空心正六边形代表三角晶格, 用“三角”标记; 黑色代表圆形空气孔, 红色代表正方形空气孔, 绿色代表正六边形空气孔, 00 代表空气孔不发生旋转的高对称带隙, 01 代表空气孔不发生旋转的低对称带隙; (a) 和 (b) 分别为光子晶体的高对称带隙的中心频率和宽度, 相对于填充率 f 的变化规律; (c) 和 (d) 分别为光子晶体的低对称带隙的中心频率和宽度, 相对于填充率 f 的变化规律

2.2 光子晶体散射基元的取向对光子禁带的影响

为了进一步弄清带隙展宽机理的具体内容, 我们研究了当正方晶格的正方空气孔相对于自身的对称中心发生旋转时, 带隙中心和带隙宽度相对于填充率 f 和空气孔的旋转角 θ 的变化规律. 与其他类型的光子晶体相比, 正方晶格正方空气腔型光子晶体的散射基元的旋转周期较大 (90°), 旋转能使体系较大地偏离最佳镜面对称性位置. 空气孔从 0° 旋转到 45° 的过程中, 晶体的镜面对称性经历一个“完美对称 (0°)—最重度破缺 (22.5°)—完美对称 (45°)”的过程; 空气孔从 45° 旋转到 90° 的过程中, 晶体的镜面对称性又经历一个“完美对称 (45°)—最重度破缺 (67.5°)—完美对称 (90°)”的过程. 两个过程中与角度有关规律关于 $\theta = 45^\circ$ 对称. 以前一个过程为例, 首先, 我们分析空气孔的旋转对光

子禁带的中心频率和宽度的影响, 结果如图 2 所示.

在空气孔由 0° 旋转到 22.5° 的过程中, 体系的镜面对称性不断降低 ($\theta = 22.5^\circ$ 时, 对称性最差), 图 2 (e) 中黑色方格线对应的带隙的定义域宽度 Δf 不断减少, 这个带隙是属于高对称性的带隙 (简称高对称性带隙). 在空气孔由 15° 旋转到 45° 的过程中, 体系的镜面对称性先降低 ($\theta = 22.5^\circ$ 时, 对称性最差) 后增加, 图 2 (e) 中红色方格线对应的带隙的定义域宽度 Δf 先增加 ($\theta = 22.5^\circ$ 时, 最大) 后降低, 这个带隙是属于低对称的带隙 (简称低对称带隙).

然后, 基于光子波长越短, 光子对空间结构的变化就越敏感这个事实 (图 2 (a), (c)), 为了更好地理解空气孔的旋转对光子晶体量子受限效应影响, 我们分析空气孔旋转时的晶体的两个几何性质, 并将它们列于表 2 中, 并且根据这些性质进行了一些必要的分析.

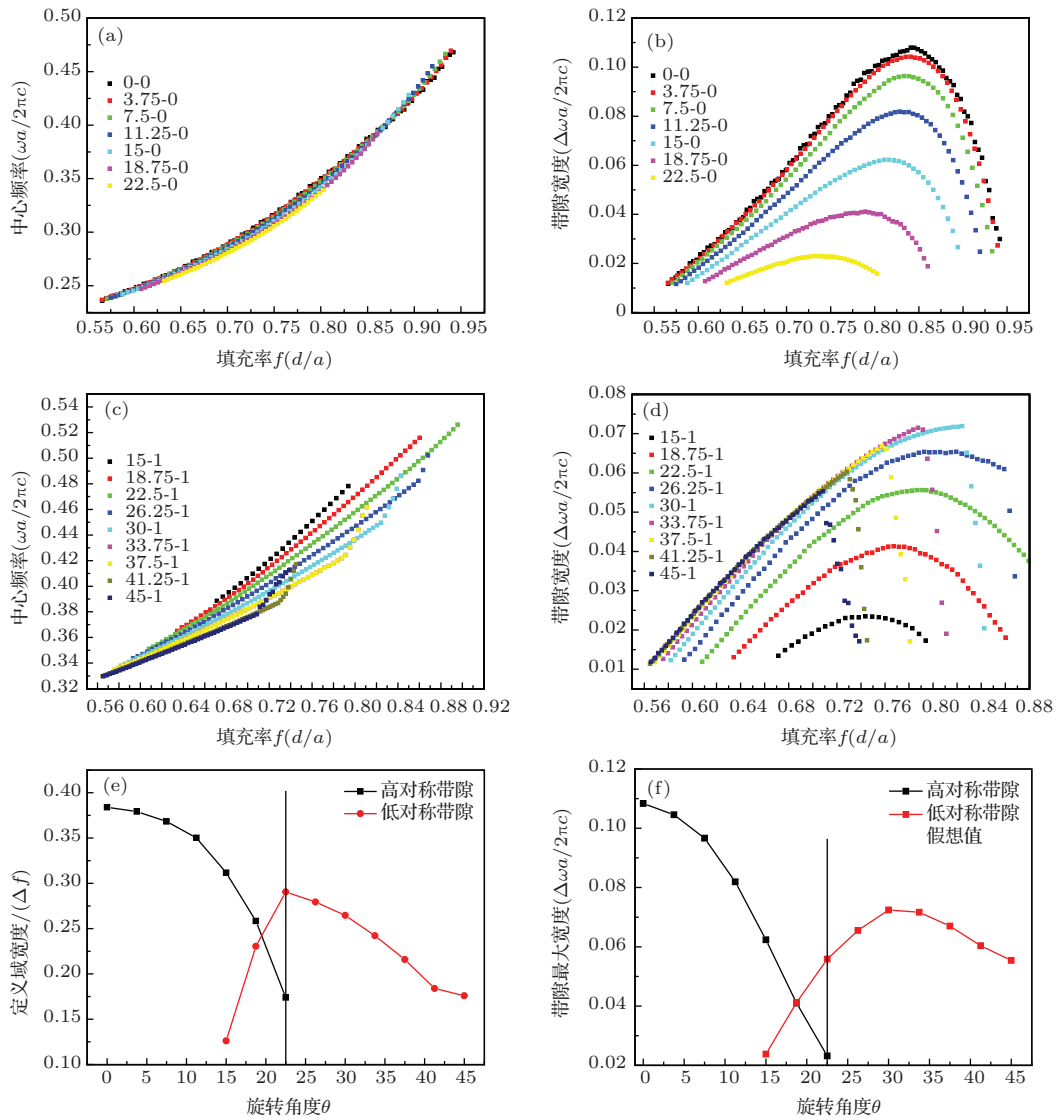


图2 (网刊彩色) 正方空气腔的旋转对光子禁带的中心频率和宽度的影响 (a) 和 (b) 分别为光子晶体的高对称带隙的中心频率和宽度相对于填充率 f 的变化规律; (c) 和 (d) 分别为光子晶体的低对称带隙的中心频率和宽度相对于填充率 f 的变化规律; (e) 带隙的定义域宽度 Δf 相对于旋转角度 θ 的变化规律; (f) 带隙宽度的最大值相对于旋转角度 θ 的变化规律; (e) 和 (f) 中的黑色细线垂直横轴于 $\theta = 22.5^\circ$, 代表镜面对称最重度破缺的情况; “ $\theta=0$ ” 和 “ $\theta=1$ ” 分别对应空气孔旋转 θ 后的高对称带隙和低对称带隙

表2 空气孔发生旋转时晶体的两个几何性质

旋转角度 θ	阴影部分面积	间距
面积 S	$S = [\sqrt{2}a \sin(\theta + \frac{\pi}{4}) - d]^2$	$L = a \cos \theta - d$

表2中图形所示的阴影部分(黑色正方形)指由正方形原胞中次临近原胞中心的正方形基元边的延长线所围成的正方形. 随着旋转角的增加, 阴影部分的面积会不断增大(最小为 $(a-d)^2$, 最大为 $(\sqrt{2}a-d)^2$), 这会导致量子受限效应的减弱. 这种现象在光子波长较短时更加明显(图2(c)). 随着填充率 f 的增大, 空气孔之间的间距 L 会不断减小, 各个阴影部分之间的相互作用会减弱. 当间距 L 小于某一确定值时, 随着填充率 f 的增加, 阴影部分

之间的相互作用会快速减弱, 使得阴影部分对光子的约束快速增强, 从而导致了带隙中心反常地快速蓝移(图2(c), (d)中的41.25°和45°等旋转角对应的曲线), 光子带隙宽度急速下降. 空气孔之间的间距 L 的这个特殊值, 会随着空气孔旋转角 θ 的增加而减小, 例如, $\theta = 30^\circ$ 时, $L = 0.04162a$; $\theta = 37.5^\circ$ 时, $L = 0.03365a$.

综合上述的数据和分析, 得到如下结论: 1) 对称性通过影响带隙的定义域宽度 Δf 间接地调节带隙的宽度, 随着对称性的降低, 高对称带隙的定义域宽度 Δf 减小, 带隙压缩, 低对称带隙的定义域宽度 Δf 增加, 带隙展宽; 2) 量子受限效应直接地调节着带隙的宽度, 随着量子受限效应的增强, 高

对称带隙展宽, 低对称带隙压缩. 如 2.1 所述, 光子晶体的量子受限效应越明显, 随着填充率 f 的增加, 高对称带隙的宽度上升得越快. 这意味着在对称性不变的情况下, 量子受限效应的增强必将导致高对称带隙进一步展宽. 当空气孔旋转角由 22.5° 增加到 30° 的过程中, 晶体的量子受限效应随旋转角度的增加而减弱 (图 2(c) 中的低对称带隙的带隙中心不断下降), 对称性不断增强, 图 2(f) 中的红线对应的低对称带隙的最大宽度不断增大. 这是因为对称性和量子受限效应竞争的结果是量子受限效应占优, 从而使得量子受限效应减弱, 展宽了低对称带隙.

在分析对称性对带隙展宽所起的作用方面, 我们的结论与文献 [20, 21] 的结论是一致的. 但进一步分析文献 [20, 21] 的模型, 发现文献 [20] 中的拓扑结构获得的宽带隙是低对称带隙, 起源于量子受限效应的减弱和低对称性; 文献 [21] 中的宽带隙是高对称带隙, 起源于量子受限效应的增强和高对称性. 在文献 [10, 11] 中, 通过在散射基元之间插入圆形介质柱来展宽光子禁带的做法, 实际上是通过增强光子晶体量子受限效应, 进而展宽了高对称带隙. 最后指出, 因为研究只考虑镜面对称破缺的情况, 对其他对称性的破缺情况并未涉及, 所以结论本身存在局限性.

3 结 论

光子晶体的对称性和量子受限效应的竞争机理是导致光子禁带宽度发生变化的原因. 对称性通过影响带隙的定义域宽度 Δf 间接地调节带隙的宽度; 随着对称性降低, 高对称带隙的定义域宽度 Δf 减小, 带隙压缩, 低对称带隙的定义域宽度 Δf 增加, 带隙展宽. 量子受限效应直接地调节着带隙的宽度; 随着量子受限效应的增强, 高对称带隙展宽, 低对称带隙压缩. 在光子禁带展宽过程中, 对称性效应和量子受限效应总是同时存在, 并发挥作用.

参考文献

- [1] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [2] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [3] John S 1991 *Phys. Today* **44** 32
- [4] Yablonovitch E, Gmitter T J, Meade R D, Rappe A M, Brommer K D, J Joannopoulos J D 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3380
- [5] John S 1996 *Photonic Band Gap Materials* (Dordrecht: Kluwer Dordrecht Publishers) p563
- [6] Proot J P, Delerue C, Allan G 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 1948
- [7] Huang W Q, Huang Z M, Cheng H Q, Miao X J, Shu Q, Liu S R, Qin C J 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 171601
- [8] Huang W Q, Miao X J, Huang Z M, Liu S R, Qin C J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 094207
- [9] Huang W Q, Jin F, Wang H X, Xu L, Wu K Y, Liu S R, Qin C J 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 221910
- [10] Anderson C M, Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
- [11] Wang X H, Gu B Y, Li Z Y, Yang G Z 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11417
- [12] Liu H, Liu D, Zhao H, Gao Y H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 194208 (in Chinese) [刘会, 刘丹, 赵恒, 高义华 2014 物理学报 **63** 194208]
- [13] Chong Y D, Wen X G, Marin S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235125
- [14] Ruij W, Wu B, Zhao H Y, Li J B, He C F 2010 *Solid State Commun.* **150** 1463
- [15] He X D, Shen J J, Liu B, Li S J 2013 *Opt. Commun.* **303** 8
- [16] Sheng J J, He X D, Liu B, Li S J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 084213 (in Chinese) [沈娟娟, 何兴道, 刘彬, 李淑静 2013 物理学报 **62** 084213]
- [17] Plihal M, Maradudin A A 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8565
- [18] Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N, Meade R D 2008 *Photonic Crystals* (Princeton: Princeton University Press) p243
- [19] Miao X J, Huang W Q, Huang Z M, Zhou N J, Yin J 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 030203 (in Chinese) [苗信建, 黄伟其, 黄忠梅, 周年杰, 尹军 2014 物理学报 **63** 030203]
- [20] Florescu M, Torquato S, Steinhardt P J 2009 *PNAS* **106** 20658
- [21] Sigmund O, Hougaard K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 153904

Effects of quantum confinement and symmetry on the silicon photonic crystal band gap*

Zhou Nian-Jie Huang Wei-Qi[†] Miao Xin-Jian Wang Gang Dong Tai-Ge
Huang Zhong-Mei Yin Jun

(*Institute of Nanophotonic Physics, Guizhou University, Guiyang 550025, China*)

(Received 28 June 2014; revised manuscript received 6 August 2014)

Abstract

Photonic crystal not only can be used to inhibit the spontaneous emission and redistribute the energy into useful forms, but also can be designed to control and confine photons. Since the concept was introduced by John and Yablonovitch in 1987, there have been discussed the machinery of broadening the band gap and a quest for the optimal structure. Band structures of two-dimensional photonic crystals with different lattices and scatters of air hole of various shapes, orientations and sizes are investigated by the plane wave expansion method. The calculation results suggest that the variation of the photonic crystal band gap is attributed to the competition between symmetry and quantum confinement effects.

Keywords: photonic band gap, silicon photonic crystal, quantum confinement effect, symmetry

PACS: 42.70.Qs, 78.20.Bh

DOI: [10.7498/aps.64.064208](https://doi.org/10.7498/aps.64.064208)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11264007, 61465003).

[†] Corresponding author. E-mail: sci.wqhuang@gzu.edu.cn