

ДВУМЕРНЫЙ ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ ФОТОННЫЙ КРИСТАЛЛ С НОВОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ ЭЛЕМЕНТА

А. А. Горбацевич^{1,2}, А. В. Фриман¹, В. С. Горелик¹

В настоящей работе предложен новый тип геометрии элемента фотонного кристалла с гексагональной решеткой, выполненного в виде ячейки Вигнера–Зейтца. Рассчитаны дисперсионные кривые электромагнитных волн и установлены характеристики запрещенных зон фотонного кристалла с использованием методики разложения по плоским волнам. Показано, что предлагаемая геометрия элемента фотонного кристалла приводит к возрастанию ширины запрещенной зоны. Предложен простой метод изготовления прототипов с использованием негативной электронной литографии.

Ключевые слова: фотонный кристалл, PWE, запрещенная зона, планарный кристалл.

Введение. В настоящее время фотонные кристаллы (ФК) являются объектом интенсивного изучения, так как представляют собой структуры с широкими перспективами использования в науке и технике. Фотонным кристаллом называют периодическую структуру, состоящую из материалов с разным показателем преломления. По наличию трансляционной симметрии в различных измерениях различают одномерные, двумерные и трехмерные фотонные кристаллы. Как и в электронном кристалле, в фотонном кристалле существуют запрещенные зоны. Фотонная запрещенная зона – это область частот, в которой запрещено распространение электромагнитных волн внутри фотонного кристалла. Впервые фотонный кристалл для миллиметрового диапазона был создан в работе [1].

Начиная с конца 1990-х годов, особый интерес вызывают двумерные планарные фотонные кристаллы [2]. Планарный фотонный кристалл – это двухслойная или трехслойная структура, состоящая из подложки, слоя с периодическим изменением показателя преломления и верхнего слоя для локализации излучения в кристалле за счет эффе-

¹ ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: friman_a@sci.lebedev.ru.

² Национальный исследовательский университет “МИЭТ”, 124498 Россия, Зеленоград, 4806 пр. 5.

та полного внутреннего отражения. Основным преимуществом планарных фотонных кристаллов является их совместимость с современными технологиями производства микросхем.

Фотонный кристалл, состоящий из материалов без ярко выраженной дисперсии, является масштабируемой структурой. Поэтому основной характеристикой фотонной запрещенной зоны является не её ширина, а отношение частотной ширины зоны к частоте центра зоны, в зарубежной литературе называемое “gap-midgap ratio” [3]. При падении электромагнитного излучения с частотой в запрещенной зоне на поверхность фотонного кристалла глубина проникновения зависит от разности частот излучения и ближайшей разрешенной зоны [4].

В литературе рассмотрены различные варианты геометрии элемента фотонного кристалла; в частности, в работе [5] изучены гексагональные фотонные кристаллы с элементами в виде круга, прямоугольника и треугольника. Если источник излучения находится на расстоянии, многократно превышающем длину волны излучения, можно рассматривать падающее излучение в виде плоской волны. При падении плоской волны на кристалл волновая поверхность в k -пространстве имеет форму зоны Бриллюэна [6], которая в r -пространстве отображается в ячейку Вигнера–Зейтца. Поэтому фотонный кристалл с геометрией элемента в виде ячейки Вигнера–Зейтца (гексагона) представляет особый интерес для максимального отражения излучения с частотой, принадлежащей к запрещенной зоне. В работе [7] были рассчитаны дисперсионные кривые двумерного гексагонального фотонного кристалла, в котором круглые отверстия малого радиуса были расположены по границе ячейки Вигнера–Зейтца. В настоящей работе каждое отверстие имеет форму ячейки Вигнера–Зейтца (рис. 1).

Методика расчета. Для расчета дисперсионных характеристик фотонного кристалла нами была использована методика PWE (plane wave expansion), заключающаяся в нахождении собственных значений операторного уравнения:

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{H}(\vec{r}, t). \quad (1)$$

Так как фотонный кристалл обладает трансляционной симметрией, представим собственный вектор напряженности магнитного поля $\vec{H}(\vec{r}, t)$ в виде блоховской волны с волновым вектором \vec{k} и частотой ω :

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{H}_k(\vec{r}, t), \quad (2)$$

где $\vec{H}_k(\vec{r}, t)$ – периодическая с периодом фотонного кристалла $\vec{R} = \sum_{l=1}^3 n_l \vec{R}_l$ функция

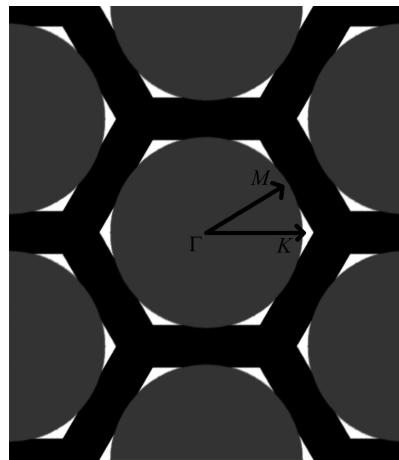


Рис. 1: Сравнение формы отверстий, оптимизированных на максимальную запрещенную зону гексагонального ФК, с элементами в форме ячейки Вигнера–Зейтца (белые области) и гексагонального ФК с элементами круглой формы (серые области).

(блоховский множитель), \vec{R}_l – базисные вектора кристаллической решетки фотонного кристалла. Для краткости записи введем оператор $\hat{\vec{A}}_{\vec{k}}$:

$$\hat{\vec{A}}_{\vec{k}} \times \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) := (\vec{\nabla} + i\vec{k}) \times \frac{1}{\varepsilon} (\vec{\nabla} + i\vec{k}) \times \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}, t). \quad (3)$$

Разложим $\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$ по некоторому ограниченному периодическому базису:

$$\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) \approx \sum_{m=1}^N \vec{h}_m \varphi_m(\vec{r}), \quad (4)$$

здесь $\vec{h}_m := \vec{h}_m(\vec{k})$, N – число базисных функций $\varphi_m(\vec{r})$, $m = 1 \dots N$. Поставив (4) в (3), получаем систему из N уравнений:

$$\sum_{m=1}^N \langle \varphi_l(\vec{r}) | \hat{\vec{A}}_{\vec{k}} | \varphi_m(\vec{r}) \rangle \vec{h}_m = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum_{m=1}^N \vec{h}_m \langle \varphi_l(\vec{r}) | \varphi_m(\vec{r}) \rangle, \quad (5)$$

где $\langle | \rangle$ обозначают интеграл по элементарной ячейке ФК. Введя матрицы $\hat{\vec{A}}$ и B с элементами $A_{lm} = \langle \varphi_l(\vec{r}) | \hat{\vec{A}}_{\vec{k}} | \varphi_m(\vec{r}) \rangle$ и $B_{lm} = \langle \varphi_l(\vec{r}) | \varphi_m(\vec{r}) \rangle$, получим матричное уравнение:

$$\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{h}} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \hat{B} \hat{\vec{h}}, \quad (6)$$

где $\hat{\vec{h}}$ – вектор-столбец коэффициентов \vec{h}_m (4).

Для применения дискретного преобразования Фурье разобьем элементарную ячейку на узлы $\vec{r} \rightarrow \vec{r}_j = \sum_{l=1}^3 n_{lj} \cdot \frac{\vec{R}_l}{N_l}$, $\{n_{lj}\} \equiv [0, N - 1]$. Представим $\varphi_m(\vec{x})$ как суперпозицию пространственных волн $e^{i\vec{G}\vec{r}}$, где \vec{G} раскладывается по векторам обратной решетки \vec{G}_p с коэффициентами m_p , а \vec{x} по векторам кристаллической решетки \vec{R}_l с коэффициентами n_j . Таким образом уравнение (4) приходит к виду:

$$\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}_j) \approx \sum_{\{m_p\}} \vec{h}_{\{m_p\}} \cdot e^{i \sum_{p,l} m_p \vec{G}_p \cdot n_{lj} R_l / N_l} := \sum_{\{m_p\}} \vec{h}_{\{m_p\}} \cdot e^{i 2\pi \sum_p m_p n_{pj} / N_p}, \quad (7)$$

что соответствует формуле дискретного фурье-преобразования (ДФП) для дискретной функции $h(m_p)$, $\vec{h}_{\{m_p\}} = h(m_p) \cdot \vec{R}_p$. Так как и ДФП, и оператор ротора представляют собой линейные отображения, то оператор ротора в фурье-пространстве имеет простой вид $\vec{\nabla} \times \vec{f}(\vec{r}) \xrightarrow{\mathfrak{F}} i\vec{G} \times \vec{F}(\vec{k})$ [8], где $\vec{F}(\vec{k})$ – фурье-образ $\vec{f}(\vec{r})$. Приведение задачи к ДФП значительно повышает скорость вычислений, так как ДФП позволяет применить один из наиболее отработанных вычислительных алгоритмов – быстрое преобразование Фурье.

На практике не обязательно находить все собственные значения матричного уравнения (6), так как нас интересуют только несколько первых фотонных зон. Для сокращения времени расчета используют итерационные алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений [9].

В качестве практической программной реализации указанных методов был выбран программный пакет MPB (MIT Photonic Bands) [10].

Анализ результатов расчета. Нами был произведен расчет дисперсионных кристаллов гексагональных фотонных кристаллов, представляющих собой пластину вещества с показателем преломления $n = 3.398$ и вытравленными в ней воздушными отверстиями различных форм. Показатель преломления $n = 3.398$ соответствует показателю преломления GaAs [11] на стандартной телекоммуникационной длине волн 1.55 мкм. На рис. 2 представлена зависимость верхней и нижней границ запрещенной зоны от доли заполнения воздухом элементарной ячейки. Максимальное соотношение ширины запрещенной зоны к середине зоны для ФК с круглыми элементами соответствует 57.21% заполнению и равно 0.5007. Для ФК с элементами в виде ячейки Вигнера–Зейтца максимальное соотношение ширины запрещенной зоны к середине зоны соответствует 59.41% заполнению и равно 0.5223. Таким образом, нам удалось реализовать увеличение запрещенной зоны на 4.3% по сравнению с ФК с круглыми элементами.

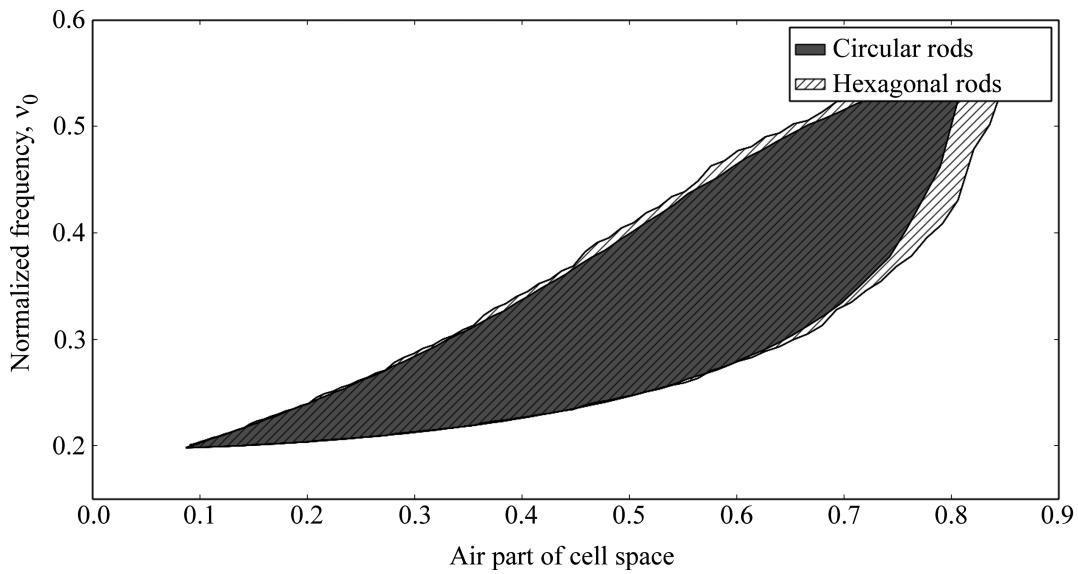


Рис. 2: Зависимость частот нижней и верхней границ запрещенной зоны фотонных кристаллов с гексагональными (Hexagonal rods) и круглыми (Circular rods) элементами от доли площади отверстия относительно площади кристаллической ячейки. Характерная частота ν_0 – отношение скорости света (c) к периоду фотонного кристалла (R).

На рис. 3 представлены дисперсионные кривые фотонных кристаллов с площадями заполнения, соответствующими максимальным значениям запрещенной зоны. Видно, что положения нижней разрешенной зоны двух фотонных кристаллов незначительно различаются, а положение верхней зоны фотонного кристалла с элементами в виде ячейки Вигнера–Зейтца смешено вверх по шкале частот.

Методика изготовления. Одним из недостатков фотолитографического метода изготовления планарных структур является высокая себестоимость при малых партиях образцов. Это обусловлено необходимостью изготовления отдельного фотошаблона для каждой структуры. При использовании электронной литографии не требуется изготовление фотошаблонов. В настоящее время технология электронной литографии позволяет создавать структуры с линиями толщиной менее 10 нм и расстоянием между линиями в 10 нм [12], что превышает возможности фотолитографии.

Метод составления из линий структур, соответствующих гексагональной кристаллической решетке с элементами в виде ячейки Вигнера–Зейтца, был предложен в работе группы Кишимото, посвященной субдифракционной микроскопии [13]. Схема, по которой решетка составляется из линий, представлена на рис. 4.

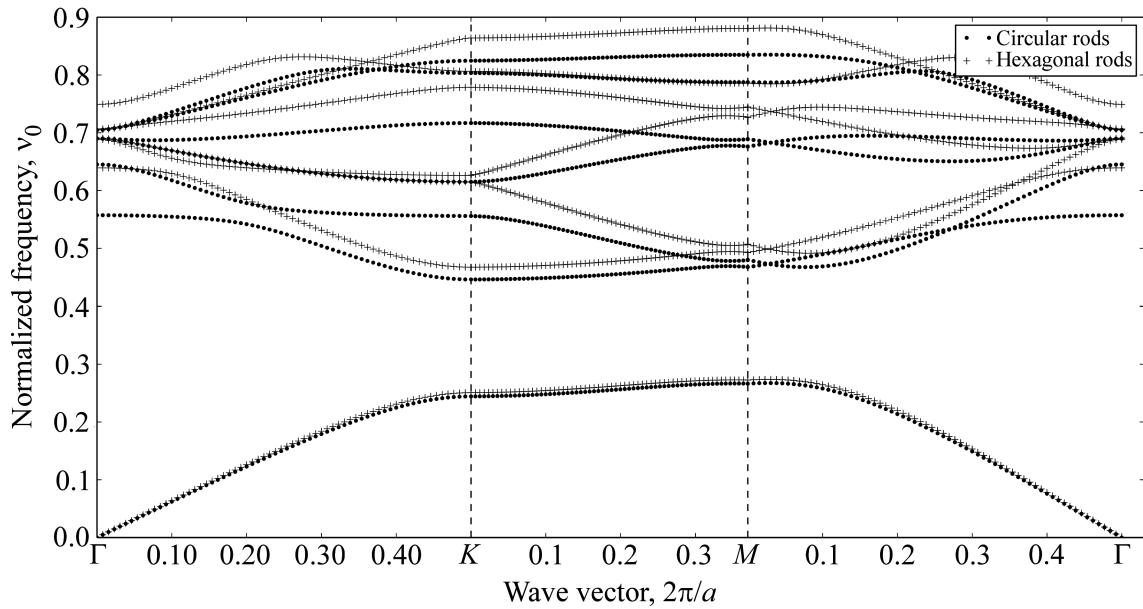


Рис. 3: Дисперсионные кривые. Характерная частота ν_0 – отношение скорости света (c) к периоду фотонного кристалла (R).

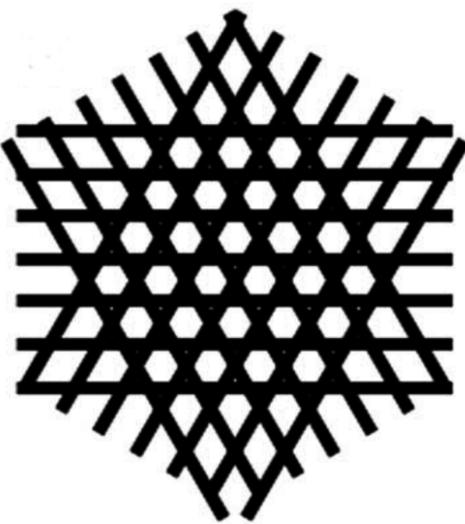


Рис. 4: Пример схемы составления гексагональной кристаллической решетки, с элементами в виде ячейки Вигнера–Зейтца, из линий [13].

Электронный резист, как и фоторезист, различается на позитивный и негативный. При использовании позитивного резиста засвеченная область смывается; при использовании негативного фоторезиста смывается незасвеченная область. Таким образом, для

нанесения по предложенной схеме топологии структуры на негативный электронный резист, достаточно будет провести электронным пучком прямые линии.

Для изготовления образцов двумерных фотонных кристаллов с гексагональной кристаллической решеткой с элементами в виде ячейки Вигнера–Зейтца предлагается следующая последовательность действий: нанесение негативного электронного резиста на пластину GaAs, облучение резиста по представленной схеме, смывка электронного резиста и травление.

Заключение. Таким образом в данной работе предложено формирование двумерного фотонного кристалла с элементами в виде гексагональной ячейки Вигнера–Зейтца (гексагона). На основе проведенных расчетов показано, что максимальная ширина запрещенной зоны двумерного фотонного кристалла с элементом в виде гексагона превышает ширину запрещенной зоны двумерного фотонного кристалла с элементом в виде круга на 4.3%. Изготовление фотонных кристаллов с элементом в виде гексагона имеет ряд преимуществ по сравнению с фотонными кристаллами с элементом в виде круга, так как при их изготовлении могут быть использованы современные методы литографии без использования специальных фотошаблонов.

Работа была выполнена на вычислительных ресурсах ВЦ ФИАН.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**(20), 2059 (1987).
- [2] N. Fukaya and T. Baba, “First successful fabrication and evaluation of 2-dimensional photonic crystal waveguides with bends”, in: *Proc. of the 7th Micro Optics Conference (MOC'99, Makuhari)* (Group of Microoptics, Tokio, 1999).
- [3] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals. Molding the Flow of Light* (Princeton NJ: Princeton University Press, 2008).
- [4] В. Горелик, Квантовая электроника **37**(5), 409 (2007).
- [5] R. Padjen, J. Gerard, and J. Marzin, Journal of Modern Optics **41**(2), 295 (1994).
- [6] Н. Ашкрофт, Н. В. Мермин, *Физика твердого тела:* В двух томах (М., Мир, 1979).
- [7] D. Jovanovic, R. Gajic, and K. Hinger, Acta Physics Polonica A **116**(4), 642 (2009).
- [8] R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer, et al., Phys. Rev. B **48**, 8434 (1993).
- [9] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, et al., Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).

- [10] S. G. Johnson and J. D. Joannopoulos, “The mit photonic-bands package home page”, <http://ab-initio.mit.edu/mpb/>.
- [11] M. Bass, C. DeCusatis, J. Enoch, et al., *Handbook of Optics, Third Edition Volume IV: Optical Properties of Materials, Nonlinear Optics, Quantum Optics (set)*. Handbook of Optics (New York, McGraw-Hill Education, 2009).
- [12] H. Duan, D. Winston, J. K. W. Yang, et al., *J. Vac. Sci. Technol. B* **28**(6), 58 (2010).
- [13] Q. Wang, S. Kishimoto, and Y. Yamauchi, *Opt. Lett.* **37**(4), 548 (2012).

Поступила в редакцию 15 апреля 2014 г.