

ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA DE BANDAS DE CRISTALES FOTÓNICOS BIDIMENSIONALES CON GEOMETRÍA TRIANGULAR

BAND STRUCTURE STUDY OF TWO-DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTALS WITH TRIANGULAR GEOMETRY

Erik P. Navarro-Barón, Diego N. Bernal-García, Herbert Vinck-Posada

Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Física, Grupo de Óptica e Información Cuántica

(Recibido: Enero/2014. Aceptado: Marzo/2014)

Resumen

Se realizó un estudio de las estructuras de bandas de cristales fotónicos con una red triangular de barras dieléctricas triangulares usando el método de expansión en ondas planas (PWE por sus siglas en inglés). Se analizó el ancho relativo del bandgap fotónico en términos de parámetros geométricos de barras de triángulos equiláteros e isósceles, tanto para los modos de polarización Transverso Magnéticos (TM) como para los Transverso Eléctricos (TE). Para barras equiláteras los parámetros modificados fueron el tamaño de los triángulos y su orientación dentro de la celda unitaria, mientras en el caso de barras isósceles se fijó el área transversal, siendo los ángulos internos y la orientación de los triángulos dentro de la celda unitaria los parámetros modificados. Como resultado de la variación de estos parámetros se encontraron máximos de bandgap según el parámetro geométrico para cada uno de los modos de polarización transversal, lo que permitió encontrar a su vez máximos de bandgap completo.

Palabras clave: Cristales fotónicos, Estructura de bandas, Barras triangulares, PWE, Bandgap.

Abstract

A study of the band structure of photonic crystals with a triangular lattice of triangular rods is made using the Plane Wave Expansion (PWE) method. The relative width of photonic band gap is analyzed in terms of geometrical parameters in either Transverse Magnetic (TM) and Transverse Electric (TE) cases for equilateral and isosceles triangular rods. For equilateral rods the size of the triangles and its orientation in the unit cell are the modified parameters, while in the case of isosceles rods the cross area is fixed as the internal angles and the orientation of the triangle in the unit cell are changed. As a result of varying these parameters, band gaps maximums are found for each transverse polarization mode, besides complete band gaps are found.

Keywords: Photonic crystals, Band structure, Triangular rods, PWE, Band gap.

Introducción

Los arreglos de materiales espacialmente periódicos, gracias a sus interesantes propiedades, han sido el centro de gran parte de las investigaciones en ciencias naturales en los últimos años. Dentro de estas estructuras se destacan los metamateriales, tanto electromagnéticos como acústicos; y los cristales fotónicos. Una de las características más importantes de este tipo de materiales es la manera en que controlan el flujo de ondas en su interior, ya sean electromagnéticas o acústicas. En el caso de los cristales fotónicos, destaca también su capacidad de confinar las ondas de luz de ciertas frecuencias, esto debido a que la transmisión de un conjunto de frecuencias dentro del cristal está prohibida. A este conjunto de frecuencias se le conoce como bandgap fónico (PBG, del inglés *Photonic Band-Gap*), y es el fundamento de las diferentes aplicaciones que tienen los cristales fónicos[1].

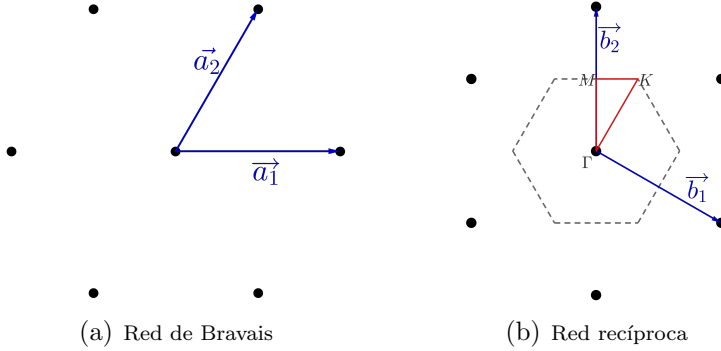


FIGURA 1. Características de la red triangular.

Además del contraste entre la permitividad eléctrica de los medios que forman el cristal, el PBG depende fuertemente de dos características del mismo, su estructura de red (la cual da información sobre la periodicidad en el cristal fotónico) y la forma de sus dispersores, siendo de gran importancia la simetría entre ambas[2].

Una de las redes más usadas y estudiadas es la red triangular (también llamada red hexagonal), la cual está caracterizada por sus redes de Bravais y recíproca. Dichas redes se muestran en las Figuras 1(a) y 1(b).

Los vectores de la red están definidos por el parámetro de red a como lo indican las Ecuaciones 1 y 2.

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{i} \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{1}{2}\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{j} \right) \quad (1)$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{j} \right) \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}}\hat{j} \quad (2)$$

En la Figura 1(b) el hexágono punteado define la zona de Brillouin (celda unitaria en el espacio recíproco)[3], y los puntos Γ , M y K definen la zona irreducible de Brillouin la cual está formada por reducción de la zona de Brillouin a partir de las simetrías de la red. Esta zona es de gran importancia ya que indica la mínima cantidad de vectores de onda que determinan todos los posibles valores de frecuencias permitidas en el cristal.

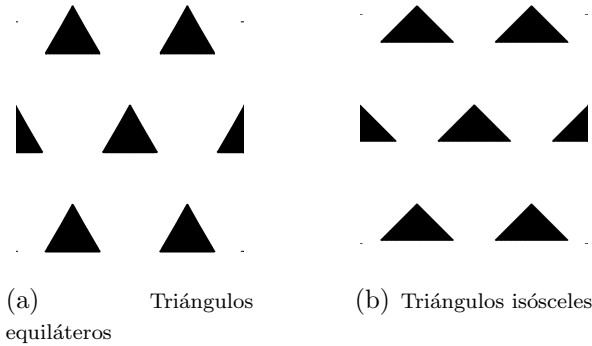


FIGURA 2. Cristales fotónicos con geometría triangular.

Esta red tiene asociados dispersores de forma triangular, los cuales pueden maximizar las propiedades del cristal, en especial el ancho de bandgap. Para ello se deben tener en cuenta diferentes parámetros asociados a dichos dispersores, como son el tamaño, los ángulos internos y la orientación dentro de la celda unitaria. En este artículo nos concentraremos en dos tipos de triángulos, equiláteros e isósceles.

Para la modelación de cristales fotónicos bidimensionales se consideran las ecuaciones de Maxwell para medios materiales. Además se hacen cuatro importantes consideraciones sobre el material[4]:

- La intensidad de los campos es lo suficientemente pequeña, tal que se tiene un régimen lineal, i.e, las componentes del campo desplazamiento dependen linealmente de las componentes del campo eléctrico:

$$D_i = \sum_j \varepsilon_r^{ij} E_j, \quad i, j = 1, 2, 3$$

- El material es macroscópico e isotrópico, por lo cual los campos \vec{D} y \vec{E} están relacionados por un escalar, es decir,

$$\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_r(\vec{r}, \omega) \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, \omega)$$

con $\varepsilon_r(\vec{r}, \omega)$ la permitividad relativa del medio, conocida también como función dieléctrica y ε_0 la permitividad eléctrica en el vacío.

- La dependencia de la permitividad con la frecuencia es ignorada, y son tomados valores promedios de la permitividad según las frecuencias de interés, en este caso las frecuencias ópticas.
- El material es transparente, es decir no absorbe la radiación incidente, así que ε_r es real y positiva.

Bajo estas aproximaciones se considera la relación de dispersión de estos materiales, es decir, la relación entre el vector de onda \vec{k} y la frecuencia ω . Teniendo en cuenta la relación entre la energía y ω se puede determinar también una relación entre \vec{k} y la energía, relación con la que se construye lo que se conoce como estructura de bandas la cual da razón de las energías y frecuencias permitidas dentro del cristal. En el presente trabajo se hace un estudio de la estructura de bandas para cristales fotónicos dos dimensionales de red triangular y dispersores triangulares.

Expansión en Ondas Planas (PWE)

Para este tipo de medios periódicos existe una gran variedad de técnicas numéricas para resolver las ecuaciones de Maxwell que son las que modelan el comportamiento de las ondas electromagnéticas. Entre las más destacadas están: método de diferencias finitas (en el dominio del tiempo y en el dominio de las frecuencias), elementos finitos, análisis de dominio espectral, ecuaciones integrales, método de los momentos (IE/MoM) y expansión en ondas planas (PWE) [5].

En el presente trabajo se hacen los cálculos mediante el método PWE, el cual consiste en considerar que debido a la periodicidad de los materiales, los campos eléctrico y magnético, y la permitividad pueden ser expresados como funciones espacialmente periódicas. Para ello se consideran las ecuaciones de onda en un medio libre de fuentes, es decir:

$$\frac{1}{\varepsilon_r} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} \quad (3)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{H} \quad (4)$$

Donde c es la velocidad de la luz en el vacío. Si se considera que los campos tienen dependencia temporal armónica, esto quiere decir, que $\frac{\partial^2}{\partial t^2} = -\omega^2$ (siendo ω la frecuencia angular de oscilación), entonces se tiene:

$$\frac{1}{\varepsilon_r} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} \quad (5)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H} \quad (6)$$

Estas ecuaciones vectoriales pueden ser escritas como seis ecuaciones escalares, haciendo una separación por componentes [6]. Por otro lado, se considera la dependencia periódica espacial, la cual se puede expandir en una serie de Fourier.

$$\frac{1}{\varepsilon_r} = \sum_{m,n} \kappa_{m,n}^{\varepsilon_r} e^{i(m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2) \cdot \vec{r}} \quad (7)$$

$$E_{x,y \text{ o } z} = \sum_{m,n} \kappa_{m,n}^{E_{x,y \text{ o } z}} e^{i(m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2) \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (8)$$

$$H_{x,y \text{ o } z} = \sum_{m,n} \kappa_{m,n}^{H_{x,y \text{ o } z}} e^{i(m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2) \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (9)$$

Donde los coeficientes κ son de la expansión en la serie de Fourier para cada componente de campo y para la permitividad eléctrica, y el vector \vec{k} es el vector de onda que indica la dirección de propagación de los campos. Se considera que la onda se propaga solo en las direcciones de periodicidad del material, es decir, en el plano xy ; y se consideran, sólo dos modos de polarización. El *modo transversal eléctrico (TE)*, donde el campo eléctrico está contenido en el plano xy y por tanto el campo magnético está en la dirección z ; y el *modo transversal magnético (TM)* donde, análogamente, es el campo eléctrico el que va en la dirección z .

De esta manera, para el modo TE se considera la Ecuación 6, y la expansión para H_z , y para el modo TM se considera la Ecuación 5 y la expansión para E_z .

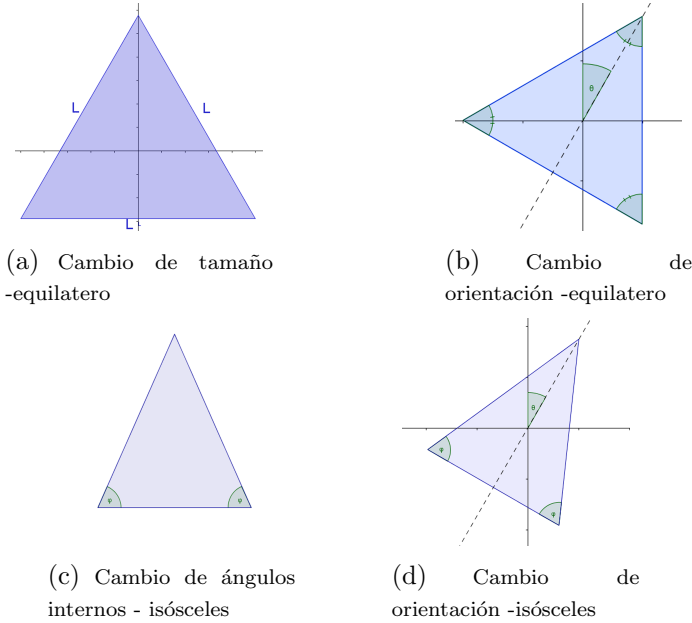


FIGURA 3. *Parámetros para diferentes tipos de barras dieléctricas triangulares.*

De forma tal que cada ecuación queda escrita como un problema de autovalores como se indica en las Ecuaciones 10 y 11.

$$\sum_{m,p} \kappa_{m,p}^{Ez} \kappa_{n-m,q-p}^{\varepsilon r} \times \left[\left(\frac{2\pi m}{a} + k_x \right)^2 + \left(\frac{2\pi(2p-m)}{\sqrt{3}a} + k_y \right)^2 \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \kappa_{n,q}^{Ez} \quad (10)$$

$$\sum_{m,p} \kappa_{m,p}^{Hz} \kappa_{n-m,q-p}^{\varepsilon r} \times \left[\left(\frac{2\pi m}{a} + k_x \right) \left(\frac{2\pi n}{a} + k_x \right) + \left(\frac{2\pi(2p-m)}{\sqrt{3}a} + k_y \right) \left(\frac{2\pi(2q-n)}{\sqrt{3}a} + k_y \right) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \kappa_{n,q}^{Hz} \quad (11)$$

Así, en dicho problema los autovalores están relacionados a las autofrecuencias tal que $\lambda_n = \omega_n^2/c^2$, y los autovectores asociados a cada autovalor serán los coeficientes de la expansión de los campos, lo cual nos dará información de los perfiles de intensidad del campo asociados a dicha frecuencia. En las Ecuaciones 10 y 11 se puede ver

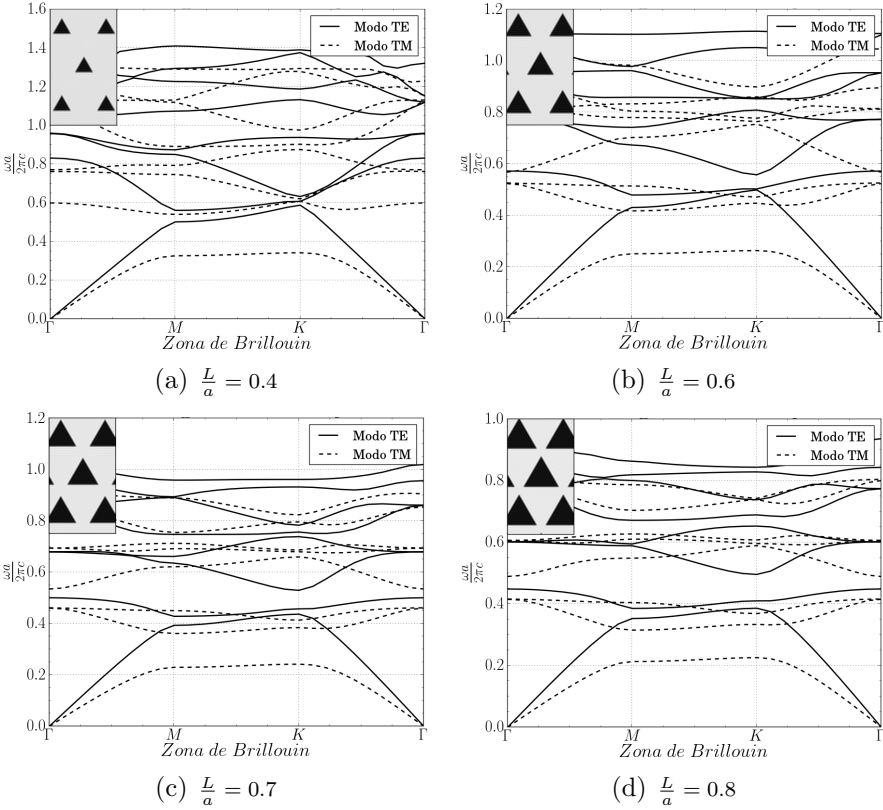


FIGURA 4. Estructura de bandas para triángulos equiláteros.

una dependencia con respecto a $\vec{k} = (k_x, k_y)$ de las autofrecuencias, por lo que para cada posible \vec{k} en la zona reducida de Brillouin, se tendrá un problema de autovalores. Para solucionar cada problema, las series de Fourier, que en principio van desde $-\infty$ hasta ∞ , son truncadas a un número finito N , de tal forma que se debe diagonalizar una matriz de tamaño $N^2 \times N^2$.

Resultados

Para los cálculos, se consideraron barras dieléctricas triangulares de arseniuro de galio (*GaAs*), con permitividad relativa de 13.2 sumergidas en aire. Se trabajaron dos tipos de triángulos y para cada uno de ellos se tuvieron en cuenta diferentes parámetros (ver

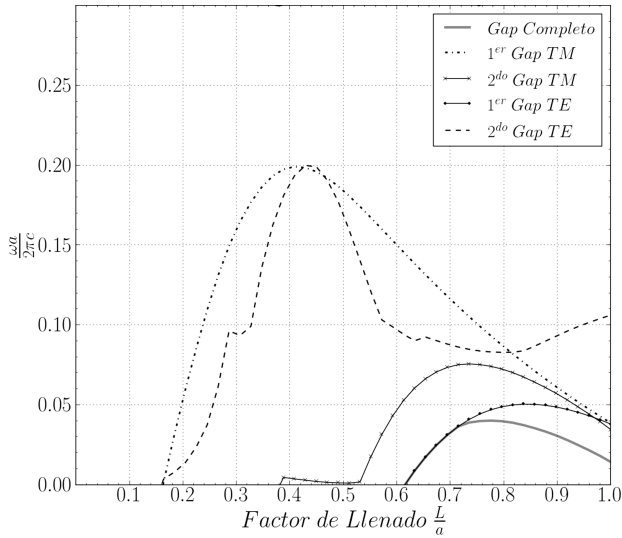
FIGURA 5. Bandgaps en función del factor L/a .

Figura 3); para los triángulos equiláteros se toma como primer parámetro el tamaño del dispersor, el cual es determinado por la longitud (L) de uno de sus lados, posteriormente se fija el parámetro L y se varía la orientación dentro de la celda unitaria, teniendo en cuenta el ángulo (θ) formado con el eje y ; como indican las Figuras 3(a)-3(b).

Para diferentes tamaños se encontraron bandgaps parciales, es decir, en alguno de los dos modos de polarización, y para L lo suficientemente grande se halló un bandgap completo para frecuencias cercanas a $\frac{\omega a}{2\pi c} = 0.5$. La Figura 4 muestra diagramas de bandas para diferentes valores de L .

Además, en la Figura 5 se muestra un estudio del ancho de los diferentes gaps en función del factor L/a . Y se encuentran máximos para cada gap.

Para un tamaño suficientemente grande, se da la aparición de un bandgap completo, esto puede explicarse debido a que la forma en punta del dispersor puede mostrar el papel que generalmente desempeña la estructura de venas, permitiendo un

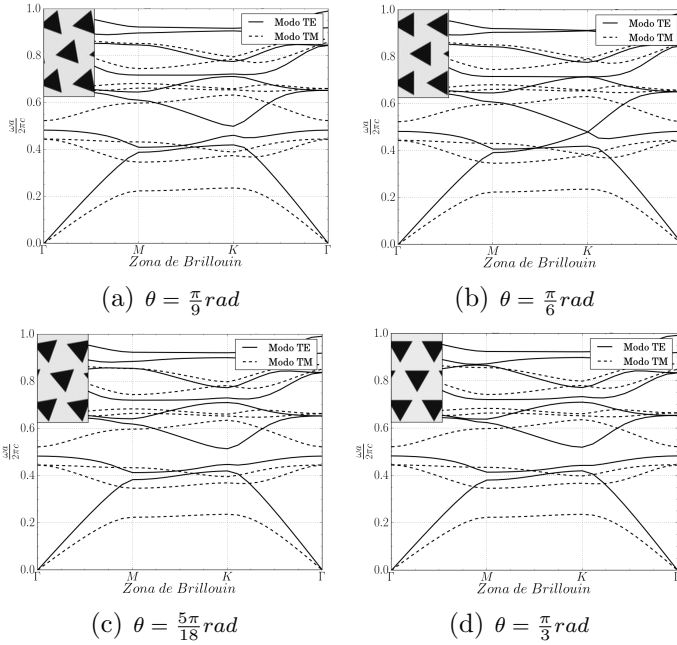


FIGURA 6. Estructura de bandas para triángulos equiláteros rotados.

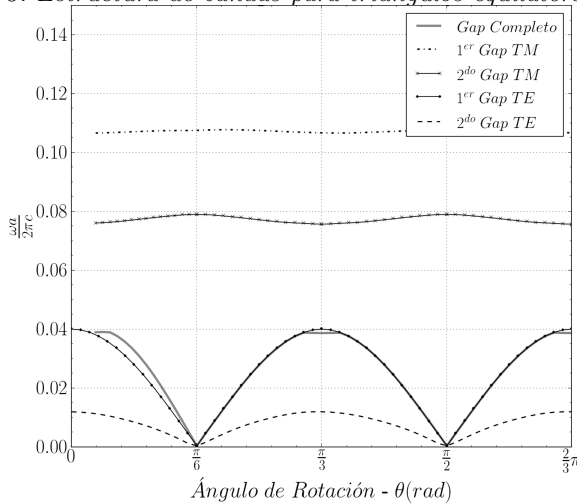


FIGURA 7. Ancho de bandgap en función del ángulo de rotación para triángulos equiláteros.

acoplamiento entre los triángulos. Dicho bandgap completo se maximiza para un factor $L/a = 0.77$ y con un valor del ancho de $\Delta \left(\frac{\omega a}{2\pi c} \right) = 4.026 \times 10^{-2}$.

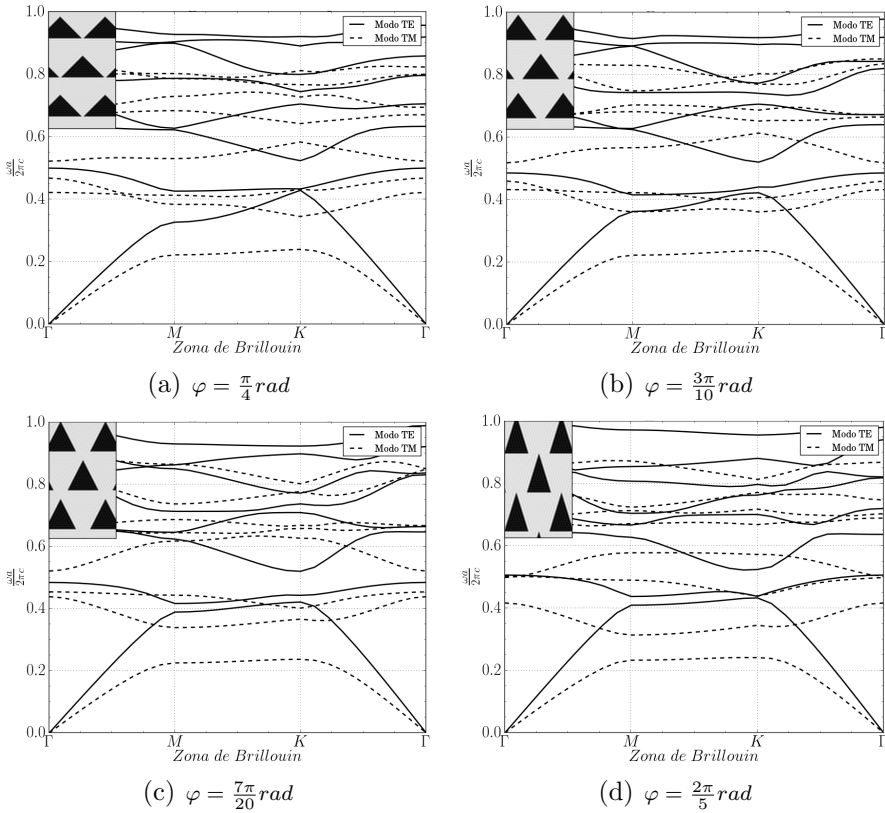


FIGURA 8. Estructura de bandas para triángulos isósceles.

Ahora, se presentan los resultados obtenidos al rotar los triángulos, para ello y en adelante el área de los dispersores será fijada al área correspondiente a la de un triángulo equilátero de factor $L/a = 0.73$, en la Figura 6 se muestran diagramas de bandas para diferentes valores de θ .

Como era de esperar se tiene un comportamiento periódico del ancho de los diferentes bandgaps con un período de $\pi/3 \text{ rad}$ relacionado a la simetría de la red, obteniéndose máximos para múltiplos de $\pi/3 \text{ rad}$ con un valor del ancho de 4.008×10^{-2} . Dicho comportamiento es mostrado en la Figura 7. Así mismo, se observa que el bandgap completo desaparece para múltiplos impares de $\pi/6 \text{ rad}$.

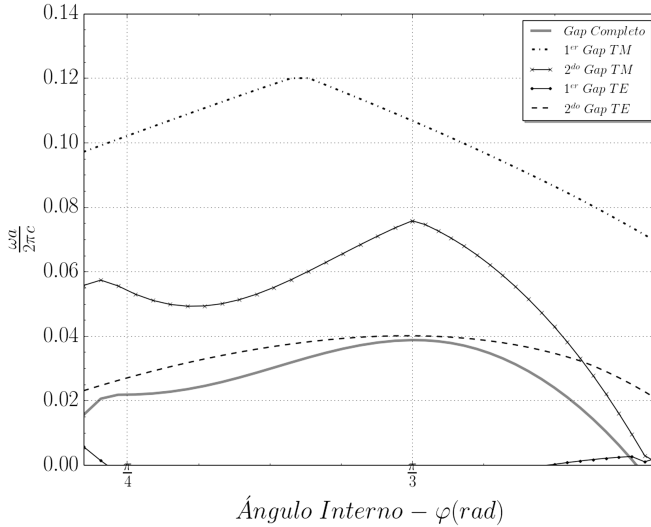


FIGURA 9. Ancho de bandgap en función del ángulo interno (φ) para triángulos isósceles.

Por otro lado, para triángulos isósceles se deja fija el área, y se toman como parámetros de estudio los ángulos internos del triángulo y su orientación en la celda unitaria, para ello se tienen en cuenta dos ángulos: φ , correspondiente al ángulo interno doble dentro del triángulo; y θ , el ángulo de rotación, como lo muestran las Figuras 3(c)-3(d).

Primero, se presenta el estudio sobre el efecto de los ángulos internos donde se encuentran cambios en los tamaños del bandgap para diferentes valores de φ como se puede ver en las estructuras de bandas de la Figura 8.

Un comportamiento de los diferentes bandgaps en función φ es mostrado en la Figura 9, donde se pueden observar máximos en diversos puntos para cada bandgap diferente. En particular, para el bandgap completo se halla un máximo en $\varphi = \pi/3 \text{ rad}$, lo que corresponde a un triángulo equilátero, resaltándose de nuevo la importancia de la simetría entre la red y la forma del dispersor.

Por último, se procede a estudiar el efecto de la rotación para diferentes valores de θ teniéndose en cuenta dos valores diferentes

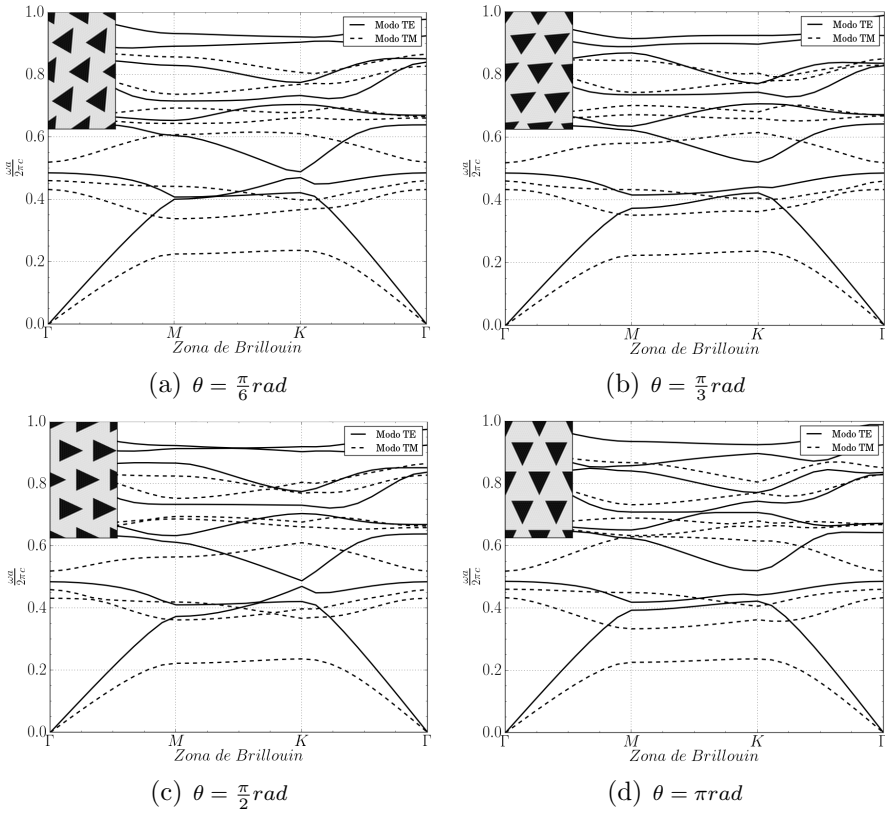


FIGURA 10. Estructura de bandas para triángulos isósceles rotados.

de φ , 55° y 65° . En la Figura 10 se muestran diagramas de bandas para diferentes valores de θ y $\varphi = 65^\circ$.

El comportamiento del bandgap en función de θ es mostrado en la Figura 11, donde se presenta dicho comportamiento para los dos valores de φ especificados anteriormente. De nuevo, como se esperaba, se observa un comportamiento periódico, y además se destaca un desfase de π entre los valores de φ menores y mayores de $\pi/3$ para el primer bandgap de los modos TM, lo cual resalta de nuevo a este valor como un punto de simetría; en este caso se observa una inversión.

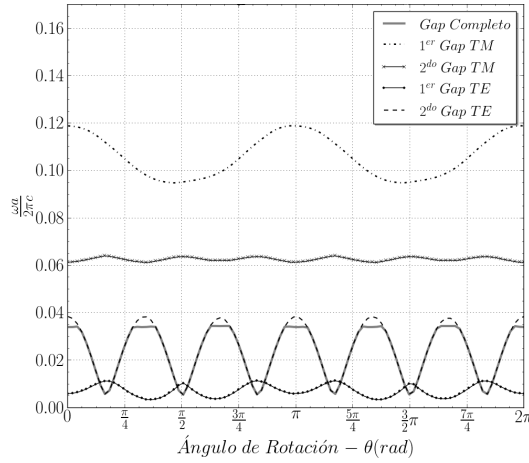
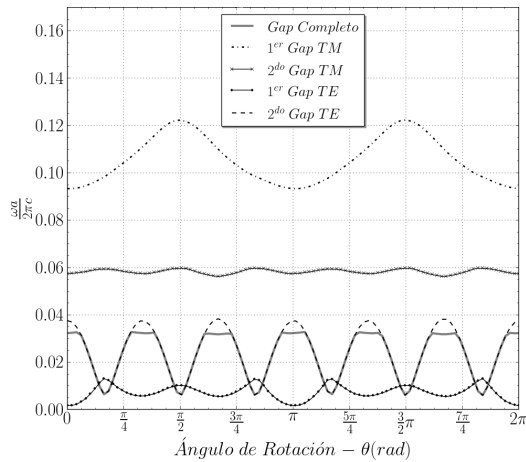
(a) $\varphi = 55^\circ$ (b) $\varphi = 65^\circ$

FIGURA 11. Ancho del bandgap en función del ángulo de rotación para triángulos isósceles.

Conclusiones

Las características geométricas de los cristales fotónicos bidimensionales de barras triangulares, juegan un papel importante en su estructura de bandas. Dentro de estas características se destacan el tamaño del dispersor y la orientación del mismo dentro de la celda unitaria, así como los ángulos internos (para triángulos isósceles). Por un lado, el tamaño es importante en la aparición de

bandgap completo, así cuando los triángulos son lo suficientemente grandes su forma en punta permite un acople entre los dispersores, lo cual generalmente se logra conectando los dispersores mediante una estructura de venas. Por otro lado, se destacan los ángulos internos (φ) y la orientación (θ) de los triángulos, donde en ambos casos el valor de $\pi/3$ es de gran importancia en la simetría entre la red y el dispersor, permitiendo maximizar el bandgap completo. Así, dentro de todos los posibles triángulos isósceles se destaca el triángulo equilátero, para el cual se obtiene máximo bandgap completo.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por Colciencias dentro del proyecto con código 110156933525, contrato número 026-2013 y código HERMES 17432. Por otra parte, reconocemos el apoyo técnico y computacional del Grupo de Óptica e Información Cuántica de la Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.

Referencias

- [1] W. Kuang, Z. Hou, Y. Liu, and H. Li, *J. Opt. A: Pure Appl. Op.* **7**, 525 (2005).
- [2] R. Wang, X.-H. Wang, B.-Y. Gu, and G.-Z. Yang, *J. Appl. Phys.* **90**, 4307 (2001).
- [3] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. (Wiley, 2004).
- [4] J. Joannopoulos, R. Meade, and J. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, 1995).
- [5] John David Shumpert, *Modeling of periodic dielectric structures (electromagnetic crystals)*, Ph.D. thesis, University of Michigan (2001).
- [6] Aaron J. Danner, "An introduction to the plane wave expansion method for calculating photonic crystal band diagrams," (2002), university of Illinois.