

EFFET DE LA VARIATION DE L'INDICE OPTIQUE SUR LES BANDES INTERDITES DE CRISTAUX PHOTONIQUES 2D A BASE DE NANOPARTICULES

Reçu le 08/06/2008 – Accepté le 02/05/2009

Résumé

En utilisant les simulations FDTD 2D, en polarisation TE, nous présentons les modifications des bandes interdites de cristaux photoniques à base de nanoparticules de semiconducteur.

L'étude est effectuée en fonction de la variation de l'indice optique et de la forme des nanoparticules. Expérimentalement la modification de la permittivité diélectrique est obtenue en dopant du verre avec des nanoparticules de ZnS. Son calcul est estimé en utilisant la théorie de Maxwell-Garnett.

Les nanoparticules supposées sphériques, de rayon $r = 60\text{nm}$, sont disposées périodiquement dans une matrice de verre selon une structure hexagonale. Une seule bande interdite est obtenue. Sa largeur varie avec le facteur volumique f occupé par les particules. En supposant les particules de forme elliptique deux bandes interdites, l'une située dans le visible et l'autre dans l'UV, sont observées.

Mots clés : Cristal photonique, nanoparticules, bande interdite, facteur volumique.

Abstract

We present the modifications of photonic crystal band gap based on semiconductors nanoparticles using FDTD 2D simulations. The study is performed versus the variation of optical index and the nanoparticles shape. Experimentally, the modification of the dielectric permittivity is obtained by doping the glass with nanoparticles of ZnS. The calculation is estimated using the Maxwell-Garnett theory. The nanoparticles are supposed spherical, with radius $r=60\text{nm}$ are disposed periodically in matrix of glass forming an hexagonal structure. Only one band gap is obtained. Its width very with volume fraction f occupied by the nanoparticles elliptical shape, two band gaps, one located in the visible region and the other in UV region are observed.

Keys words : photonic crystal, nanoparticles, band gap, volume fraction

A. LABBANI¹

R. SAOUDI²⁾

A. BENGHALIA¹

¹Laboratoire Hyperfréquences et Semiconducteurs
Faculté des Sciences de l'Ingénieur,
Université Mentouri
Constantine, Algérie.

²Laboratoire Hubert Curien
UMR-CNRS, 5516
Université de Saint Etienne
France

ملخص

TE

FDTD.2D

($r = 60 \text{ nm}$)

. ZnS

الكلمات المفتاحية : البلور الفوتوني، الجزيئات، الشريط الممنوع، المعامل الحجمي

Les cristaux photoniques ou matériaux à bandes interdites photoniques (BIP) ont suscité un très grand intérêt depuis leur invention par Eli Yablonovitch [1] et S. John[2]. Ces matériaux présentent une modulation périodique de la permittivité diélectrique qui peut être à une, deux ou trois dimensions. Cette variation périodique de l'indice optique suivant les trois directions de l'espace entraîne l'apparition de gamme de fréquences pour laquelle la lumière ne peut plus se propager [3]. Cela en fait des réflecteurs efficaces. Les progrès récemment accomplis sur les microguides, les microcavités et les microlasers à cristal photonique sont impressionnants et porteurs d'espoir à la fois pour les applications et les recherches fondamentales.

Nous présentons dans cette étude par des simulations FDTD [4] les caractéristiques des diagrammes de bandes d'une nouvelle classe de matériaux BIP. Ils sont obtenus en dopant du verre avec des particules de ZnS. L'influence de deux paramètres est examinée : la variation de la forme et de l'indice des nanoparticules sur les diagrammes de bandes. La modification locale de la permittivité diélectrique de ce matériau composite est réalisée en utilisant simultanément un traitement thermique et une insolation laser UV [5]. L'originalité de la technique réside dans la possibilité d'obtenir une croissance très locale et contrôlée de nano-objets. Celles ci ne poussent qu'au niveau du point qui a vu l'irradiation. Le verre est choisi comme matrice hôte pour ses propriétés optiques.

1. MÉTHODOLOGIE :

Il est possible d'obtenir un nouveau matériau en dopant du verre avec des nanoparticules de ZnS (figure 1). La modification de l'indice optique du verre est ajustée en fonction du paramètre f qui représente la fraction volumique occupée par les nanoparticules de ZnS dans la matrice hôte. La zone verre + ZnS est assimilée à une couche composite d'indice optique \tilde{n} .

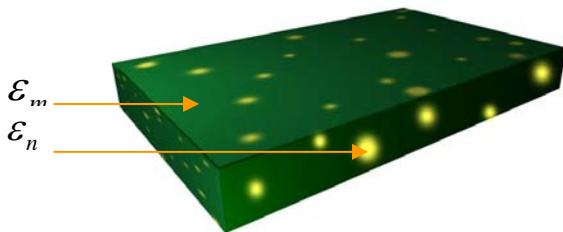


Figure 1 : Schéma du matériau composite formé de verre dopé de nanoparticules ZnS

La permittivité diélectrique du matériau composite est calculée en utilisant la théorie de Maxwell-Garnett [6] dont les conditions de validités sont vérifiées dans notre cas :

$$\varepsilon = \varepsilon_m \frac{\varepsilon_n (1 + 2f) + 2\varepsilon_m (1 - f)}{\varepsilon_n (1 - f) + \varepsilon_m (2 + f)}$$

avec ε_n : permittivité de la nanoparticule de ZnS

ε_m : permittivité diélectrique du verre.

2. RESULTATS

Un cristal photonique est caractérisé, entre autre, par son diagramme de bandes. Nous avons calculé par FDTD, en polarisation TE, les bandes interdites d'un réseau de nano-objets (ZnS + verre) 2D à structure hexagonale. La matrice hôte est constituée par un verre (Fig. 2). Les paramètres suivants ont été choisis pour la simulation : $f = 70\%$ [7], période $a = 0.2 \mu\text{m}$, rayon des nanoparticules $r = 0.06 \mu\text{m}$, $n_{\text{SiO}_2} = 1.455$, $n_{\text{ZnS}} = 2.332$, $\tilde{n} = 2.0314$ et $\Delta n = 0.5764$. Une bande interdite (figure 3) située dans le visible est observée avec une largeur égale à 17.5 nm ($a/\lambda = 0.01152$).

Notons qu'aucune bande interdite n'a été décelée pour une structure carrée 2D et ce quelque soit la polarisation.

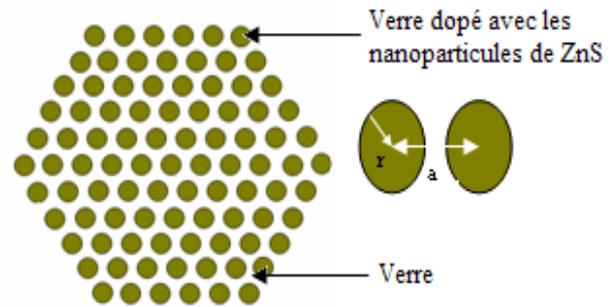


Figure 2 : Structure hexagonale 2D d'un verre dopé avec des nanoparticules de (ZnS+Verre).

Comme on pouvait s'y attendre, pour $f = 80\%$, l'indice \tilde{n} augmente et est égale à 2.1266 . Le contraste d'indice, Δn , vaut 0.6716 . La bande interdite s'élargit (figure 4).

Elle passe de $a/\lambda = 0.01152$ à $a/\lambda = 0.01948$. Avec une telle propriété il est possible de faire des miroirs à bande très réduite qui réfléchissent la lumière dans le plan de la structure. Leur largeur peut être modulée en fonction de la valeur de Δn . Aucune bande n'a été observée pour $f \leq 60\%$.

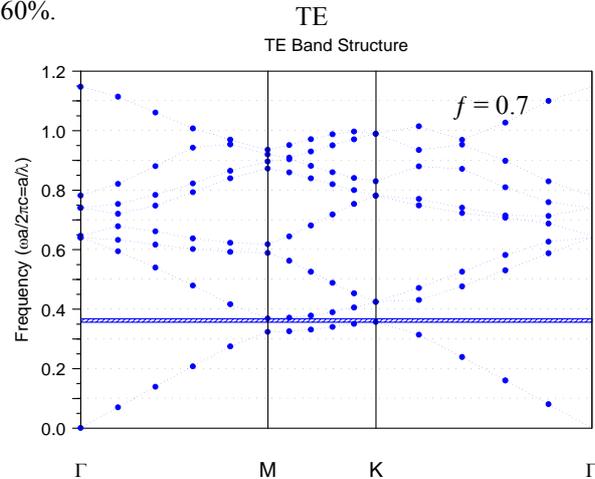


Figure 3 : Diagramme de bandes d'une structure hexagonale en verre dopé avec des nanoparticules de (ZnS+Verre), calculé en TE pour $f = 0.7$

Ce qui signifie qu'il faut que le matériau composite soit occupé à plus de 60% de son volume par des particules de (ZnS + Verre) pour pouvoir présenter des bandes interdites.

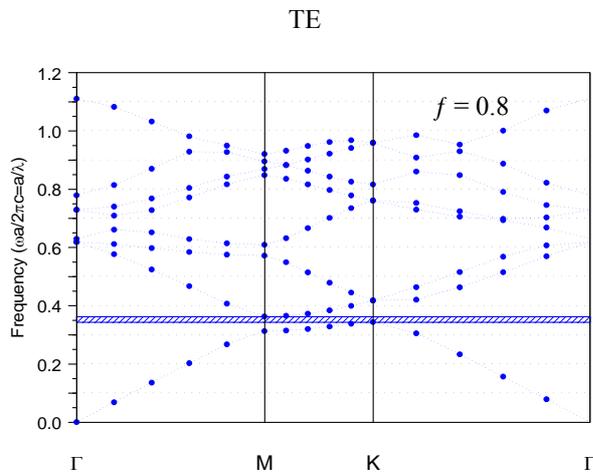
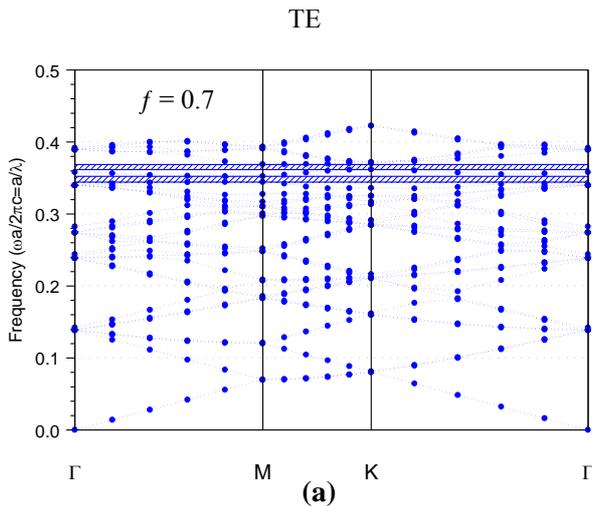
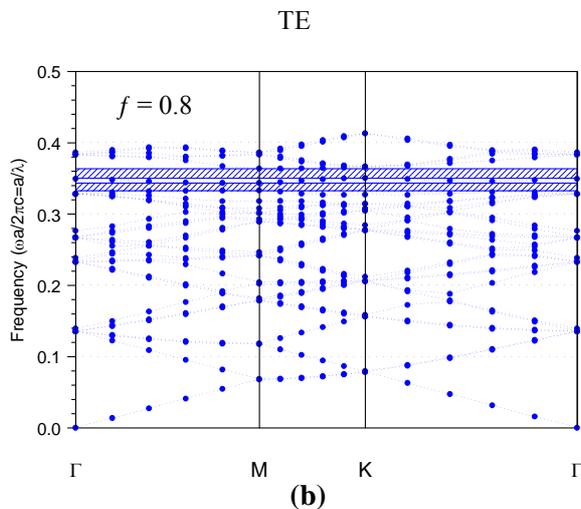


Figure 4 : Diagramme de bandes d'une structure hexagonale en verre dopé avec des nanoparticules de (ZnS+Verre), calculé en TE pour $f=0.8$



(a)



(b)

Figure 5 : Diagramme de bandes d'une microcavité créée dans une structure hexagonale (a) $f=0.7$; (b) $f=0.8$.

La création de défaut dans la périodicité en enlevant la nanoparticule centrale de la structure représentée sur la figure 2 crée un niveau d'énergie permis dans la bande interdite. La fréquence du mode du défaut pour f allant de 70% à 80% se décale des fréquences les plus élevées vers les fréquences les plus basses allant de $a/\lambda=0.3578$ à $a/\lambda=0.3491$. Ce qui correspondant respectivement à $\lambda_1 = 0.558\mu\text{m}$ et $\lambda_2= 0.573\mu\text{m}$ (figure 5(a) et figure 5(b)). Ce niveau permis peut représenter une source ponctuelle émettrice de lumière. Donc en gardant une dimension constante pour les particules de ZnS+Verre, il est possible d'augmenter progressivement la longueur d'onde d'émission du défaut en jouant sur la proportion du volume de la matrice hôte occupé par ces particules.

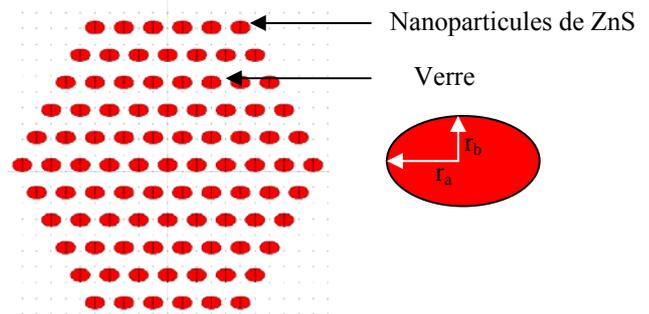


Figure 6 : Structure hexagonale 2D d'un verre dopé avec des nanoparticules de ZnS.

On peut imaginer que dans la réalité les nanoparticules ZnS peuvent être plus ou moins déformées. Dans la littérature ces nano-objets sont élaborés avec une forme spécifique voulue [8] pour exécuter une fonction optique donnée. Pour étudier l'influence de la forme des particules ZnS sur le diagramme de dispersion, nous avons supposé qu'elles sont elliptiques en gardant toujours une structure hexagonale (figure 6).

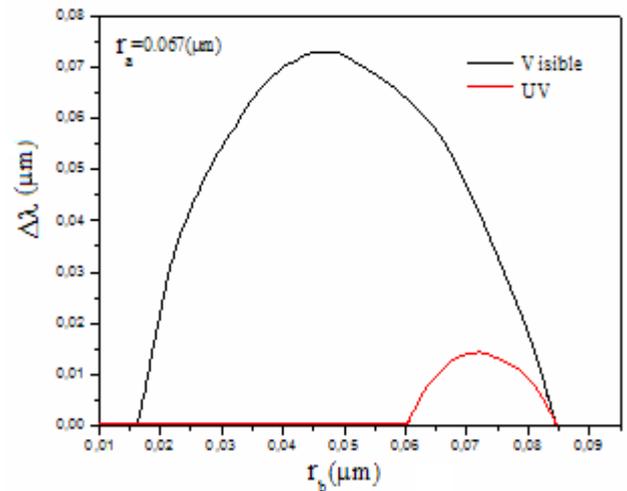


Figure 7 : Variation de la largeur de la bande interdite avec r_b pour $r_a = 0.067 \mu\text{m}$

Les simulations ont été effectuées en polarisation TE avec une période a fixée à $0.2 \mu\text{m}$. Pour un rayon majeur r_a fixé à $0.067 \mu\text{m}$ et un rayon mineur r_b variable, deux bandes interdites ont été obtenues (figure 7).

L'une est située dans le visible et l'autre dans l'ultra-violet. Leur largeur de bande $\Delta\lambda$ passe par un maximum pour respectivement r_b égal à $0.048 \mu\text{m}$ et $0.073 \mu\text{m}$. La largeur de la bande visible est très supérieure à celle de la bande UV. Cette dernière n'est observée qu'à partir de r_b valant $0.06 \mu\text{m}$.

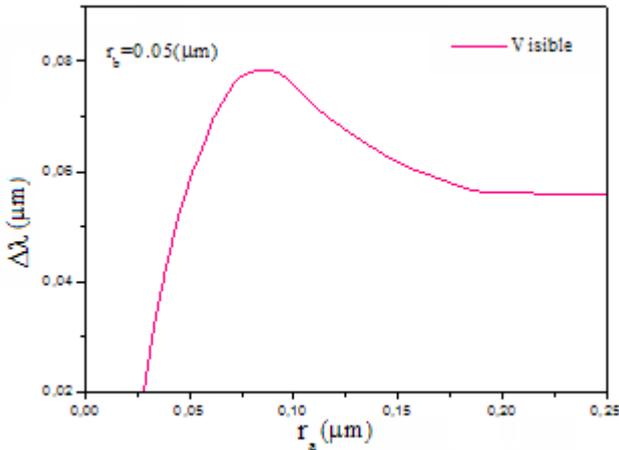


Figure 8 : Evolution de la largeur de la bande interdite avec r_a pour $r_b = 0.05 \mu\text{m}$

Les maximum visible et UV, $\Delta\lambda$, valent respectivement $0.073 \mu\text{m}$ et $0.015 \mu\text{m}$. Pour r_b égal à $0.085 \mu\text{m}$, il n'y a aucune bande interdite et $\Delta\lambda$ tombe naturellement à zéro. Avec r_b fixé à $0.05 \mu\text{m}$ et r_a variable, une seule bande située dans le visible est observée (figure 8). $\Delta\lambda$ passe par un maximum pour r_a égal à $0.095 \mu\text{m}$ et atteint une valeur de saturation à partir de $r_a = 0.20 \mu\text{m}$.

CONCLUSION

Nous avons montré par des simulations FDTD 2D sur une structure hexagonale en polarisation TE l'effet de l'indice des nanoparticules ZnS +Verre et de la forme des nanoparticules ZnS sur les diagrammes de dispersion d'une telle structure.

Une surface de forme circulaire des particules ZnS +Verre ne permet d'obtenir qu'une seule bande interdite située dans le visible dont la largeur augmente avec le contraste d'indice. Pour un rayon majeur fixé et un rayon mineur variable de la particule ZnS, supposée elliptique, deux bandes interdites ont été obtenues. L'une se trouve dans le visible et l'autre dans l'UV. Leur largeur de bande à mi-hauteur, $\Delta\lambda$, présente un maximum. En faisant varier r_a et en maintenant r_b constant, une bande interdite située dans le visible est observée. On y note la présence d'un maximum et d'une saturation pour $r_a \geq 0.20 \mu\text{m}$. L'exemple de la microcavité présenté montre que la fréquence de l'état permis varie avec le facteur volumique f pour une taille des particules constante.

REFERENCES

- [1] E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics, *Phys. Rev. Lett.*58, pp. 2059 (1987).
- [2] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices, *Phys. Rev. Lett.*58, pp. 2486 (1987).
- [3] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade et J.N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, Princeton University Press, Princeton, 1 edition, (1995).
- [4] A. Taflov et S. Hagness, *Computational Electrodynamics : the finite-difference time-Domain method*, Artech House Publishers, 2 edition, (2000).
- [5] S. E. Mekhlouf, A. Boukenter, M.Ferrari, F. Goutaland, N. Ollier and Y.Ouerdane, UV assisted local crystallization in Er³⁺ doped oxy-fluoride glass, *J. Non-Cryst. Solids*.Vol. 353, pp. 506–509 (2007).
- [6] J. C. Maxwell - Garnett, *Philos. Trans. R. Soc. London, Serv. A* 203-385 (1904).
- [7] A. Abdolvand, A. Podlipensky, G. Seifert et H. Graener Electric field-assisted formation of Percolated silver nanolayers inside glass, *Optics Express*, Vol. 13, N°4, pp.1266-1274 (2005).
- [8] R. F. Zhuo, H.T. Feng, D. Yan, J. T. Chen, J. J. Feng, J.Z. Liu et P.X. Yan Rapid growth and Photoluminescence properties of doped ZnS one-dimensional nanostructures, *J. Crystal Growth*, Vol. 310, pp. 3240-3246 (2008).