

文章编号: 1000-7032(2011)02-0169-05

二维光子晶体的完全带隙

刘光裕^{1,2}, 宁永强^{1*}, 张立森^{1,2}, 王伟^{1,2},
孙艳芳¹, 秦莉¹, 刘云¹, 王立军¹

(1. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所 激发态物理重点实验室, 吉林 长春 130033;

2. 中国科学院 研究生院, 北京 100039)

摘要: 为了研究二维光子晶体完全带隙的规律, 采用平面波展开法模拟了4种结构二维光子晶体, 在固定光子晶体周期常数 a 的情况下, 研究完全带隙随柱半径 r 的变化规律。研究发现, 六角晶格空气孔型光子晶体的完全带隙出现在 $r=0.42 \sim 0.50 \mu\text{m}$ 的范围, 最大带隙宽度 $\Delta\omega_1 = 0.08(\omega a/2\pi c)$; 方形晶格空气柱型光子晶体在 $r=0.47 \sim 0.50 \mu\text{m}$ 范围内存在完全带隙, 带隙宽度 $\Delta\omega_2 = 0.02(\omega a/2\pi c)$ 。完全带隙中心频率随 r 的增加而增加。六角周期和方形周期的 GaAs 介质柱型光子晶体不存在完全带隙。

关键词: 光子晶体; 平面波展开法; 完全带隙

中图分类号: O431.1

PACS: 42.70.Qs

PACC: 4270Q

文献标识码: A

DOI: 10.3788/fgxb20113202.0169

1 引 言

光子晶体是由不同折射率的介质周期性排列所组成的结构^[1-4]。由于三维光子晶体在制作上的困难, 目前的研究主要集中于二维光子晶体^[5-8]。二维光子晶体具有广泛的应用范围, 如光子微腔^[9]、光子晶体波导^[10]和滤波器^[11]等。

光子晶体的最本质特征是具有光子禁带。通常我们将电磁场分解成 E 偏振波(TM 模, 电场平行于 z 方向)和 H 偏振波(TE 模, 电场垂直于 z 方向)。两种偏振态分别可能具有光子带隙。当光子晶体结构同时具有 TE 和 TM 光子带隙时, 即产生完全带隙。在此范围内的所有光波都不能在其中传播。光子晶体结构所能提供的完全带隙宽度越宽, 所能应用的范围也就越广。因此, 研究光子晶体的完全带隙具有重要意义。

本文采用平面波展开法模拟了4种结构二维光子晶体, 在固定光子晶体周期常数 a 的情况下, 研究了完全带隙随柱半径 r 的变化规律。

2 数值模拟方法

比较常用的计算光子晶体带隙的方法是平面波展开法^[12]。平面波展开法是利用介电常数周期性变化来计算色散关系, 将光子晶体中的电磁波想象成一个被介质周期性调制的平面波。将电磁波的波动方程带入平面波, 并将频率 ω 与时间有关项 $e^{-i\omega t}$ 设为定值。整理出与时间无关的电场、磁场特征方程后, 运用布洛赫定理求得特征值 $\omega_n(k)$ 进而得到光子晶体能带图。

假设在研究的光子晶体中, 不存在静电荷且电流为0, 根据麦克斯韦尔方程组:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (4)$$

其中 $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon(r) \mathbf{E}$, 且 $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ 。将电场和磁场表示为:

收稿日期: 2010-08-25; 修订日期: 2010-10-24

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(60636020, 60676034, 60706007, 10974012; 60876036); 吉林省科技发展项目(20080335, 20080516);

国家自然科学基金重点项目(90923037); 中国科学院知识创新工程领域前沿项目资助

作者简介: 刘光裕(1982-), 男, 吉林白城人, 主要从事半导体光电子器件的研究。

E-mail: lgyciomp@126.com, Tel: (0431) 86176335

通讯联系人: E-mail: ningyq@ciomp.ac.cn, Tel: (0431) 86176348

$$E(\mathbf{r}, t) = E(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (5)$$

$$H(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (6)$$

所以 E 和 H 场的波动方程可以表示为:

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times E(\mathbf{r})] = \frac{\omega^2}{c^2} E(\mathbf{r}), \quad (7)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times H(\mathbf{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} H(\mathbf{r}), \quad (8)$$

由于电磁波在光子晶体中受周期性环境的影响, 满足布洛赫定理, 即

$$H(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_G H_k(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (9)$$

$$E(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_G E_k(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (10)$$

另外, 由于光子晶体的周期性, 介电常数的倒数 $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$ 为一周期函数:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}), \quad (11)$$

可以展开为一个傅里叶级数:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}) = \sum_G \varepsilon^{-1}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad (12)$$

联立式(7) ~ (12), 可以得到

E 偏振:

$$\sum_G \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |k + \mathbf{G}| |k + \mathbf{G}'| H_G = \frac{\omega^2}{c^2} H_{G'}, \quad (13)$$

H 偏振:

$$\sum_G \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (k + \mathbf{G}) (k + \mathbf{G}') H_G = \frac{\omega^2}{c^2} H_{G'}, \quad (14)$$

上式是一个本征值方程, 解此本征值方程, 即可得到多个本征频率, 将这些频率对波向量作图, 便可以得到光子晶体的带隙图。

3 数值模拟与讨论

3.1 六角晶格空气孔结构

我们研究的对象采用的材料都为 GaAs 介质, GaAs 的折射率 $n = 3.4$ 。

在一个二维 GaAs 平板上刻蚀周期性排列的空气孔, 这些空气孔以六角形周期排列, 形成光子晶体结构, 如图 1 所示。

采用平面波展开法进行数值模拟, 计算图 1 所示的光子晶体结构带隙图。首先取光子晶体的周期常数 $a = 1 \mu\text{m}$, 然后以空气孔的半径 r 为变量扫描, 寻找该结构的完全带隙。 r 的扫描范围为 $0.10 \sim 0.55 \mu\text{m}$, 扫描步长为 $0.003 \mu\text{m}$ 。得到的结果如图 2 所示。

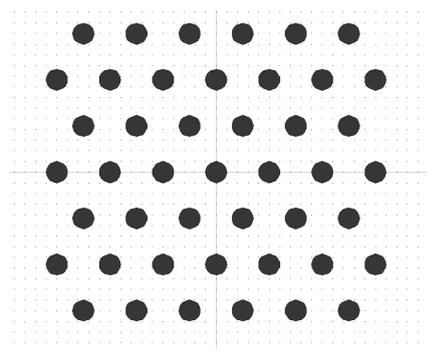


图 1 六角晶格光子晶体结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of hexagonal lattice photonic crystal

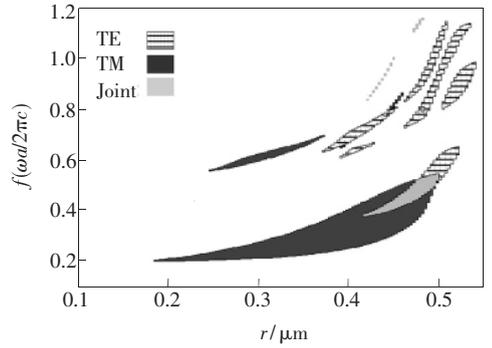


图 2 六角晶格空气孔型光子晶体带隙随半径 r 的变化
Fig. 2 Relationship between the bandgap of hexagonal lattice photonic crystal air holes and the variation of column radius r

随着空气孔半径 r 的增大, 在 $r = 0.18 \mu\text{m}$ 时, 出现首个 TM 能带并且其带隙宽度不断变大; 当 $r = 0.37 \mu\text{m}$ 时, 出现首个 TE 能带。在该结构中出现多个完全禁带, 我们只考虑带隙范围最大的完全禁带。该结构最大完全禁带出现在 $r = 0.42 \sim 0.5 \mu\text{m}$ 范围, 频率范围 $\Delta\omega_a = (0.38 \sim 0.54) (\omega a / 2\pi c)$ 。当空气孔半径变大时, 完全带

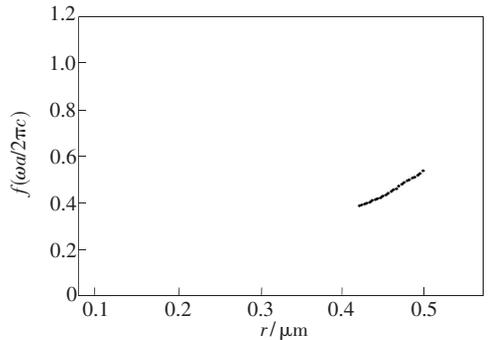


图 3 六角晶格空气孔型光子晶体完全禁带中心频率变化

Fig. 3 Relationship between the bandgap center frequency of hexagonal lattice photonic crystal air holes and the variation of column radius r

隙的宽度增加,在 $r = 0.48 \mu\text{m}$ 时,完全禁带的宽度达到最大值, $\Delta\omega_1 = 0.08 (\omega a/2\pi c)$ 。 r 继续增大,完全禁带的宽度略有下降。其能带中心频率的变化如图 3 所示,随着空气孔半径的增大而上升。

3.2 六角晶格介质柱结构

这一结构排列方式与 3.1 所讨论的结构一致,只是以空气为背景,GaAs 介质柱以六角晶格周期排列。讨论过程与 3.1 类似,采用平面波展开法模拟计算得到该结构带隙随介质柱半径 r 的变化如图 4 所示。

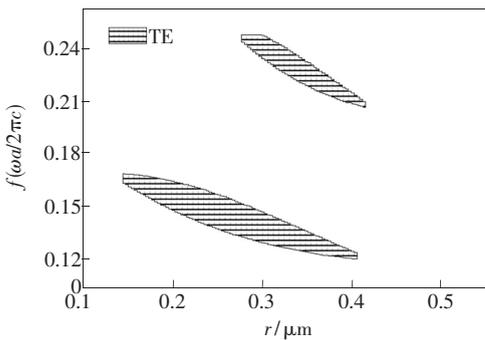


图 4 六角晶格介质柱型光子晶体带隙随半径 r 变化
Fig. 4 Relationship between the bandgap of hexagonal lattice photonic crystal media column and the variation of column radius r

从计算结果发现,该结构只存在 TE 模式的带隙,没有 TM 带隙存在,也就不存在完全带隙。

3.3 方形晶格空气孔结构

方形晶格空气孔型光子晶体同样是以 GaAs 介质为背景,空气孔呈方形晶格周期性排列,构成光子晶体,如图 5 所示。

采用平面波展开法进行模拟计算,与 3.1 类似的讨论过程得到该结构的带隙图如图 6 所示。

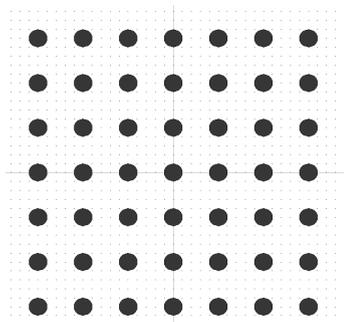


图 5 方形晶格光子晶体结构示意图
Fig. 5 Schematic diagram of square lattice photonic crystal

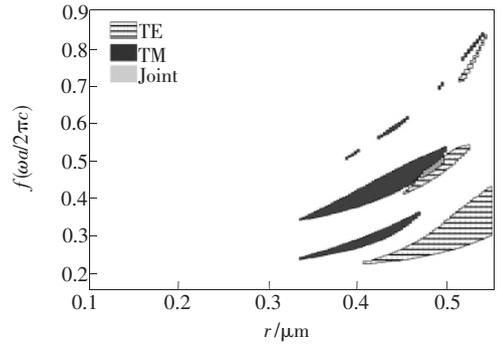


图 6 方形晶格空气孔型光子晶体带隙随半径 r 变化
Fig. 6 Relationship between the bandgap of square lattice photonic crystal air holes and the variation of column radius r

方形晶格空气孔型光子晶体结构在 $r = 0.47 \sim 0.5 \mu\text{m}$ 范围只存在一个完全带隙,频率范围 $\Delta\omega_b = (0.45 \sim 0.51) (\omega a/2\pi c)$ 。当空气半径 r 增加时,完全带隙的宽度变化不大,并且宽度较窄,约为 $\Delta\omega_2 = 0.02 (\omega a/2\pi c)$ 。其禁带中心频率随半径 r 的增加而增加,如图 7 所示。

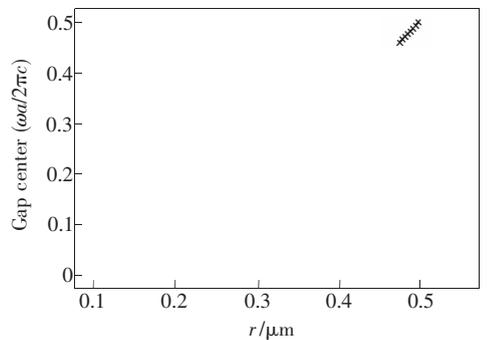


图 7 方形晶格空气孔型光子晶体带隙中心频率随半径 r 变化
Fig. 7 Relationship between the bandgap center frequency of square lattice photonic crystal air holes and the variation of column radius r

3.4 方形晶格介质柱结构

GaAs 介质柱在空气中以方形晶格周期性排列,变形成了方形晶格介质柱型光子晶体。周期常数如前所述 $a = 1 \mu\text{m}$,以介质柱半径 r 为变量扫描,采用平面波展开法数值模拟计算光子带隙图。

从图 8 中可以观察到虽然方形晶格介质柱型光子晶体同时存在 TE 和 TM 带隙,但是两种模式的带隙没有交叠部分,因此不存在完全带隙。

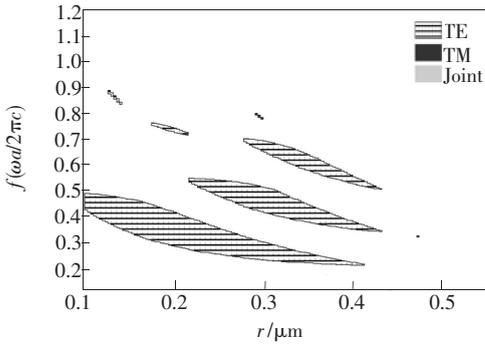


图 8 方形晶格介质柱型光子晶体带隙随半径 r 变化

Fig. 8 Relationship between the bandgap of square lattice photonic crystal media column and the variation of column radius r

4 结 论

研究了 4 种二维结构的光子晶体。综合比较这 4 种结构的光子晶体,以 GaAs 介质为背景,空气孔型光子晶体无论是六角晶格还是方形晶格都存在完全带隙,六角晶格空气孔型光子晶体的完全带隙宽度比方形晶格的大。当空气孔半径变大时,六角晶格完全带隙的宽度增加,在 $r = 0.48 \mu\text{m}$ 时,完全禁带的宽度达到最大值 $\Delta\omega_1 = 0.08(\omega a / 2\pi c)$; r 继续增大,完全禁带的宽度略有下降。方形晶格的禁带宽度比较窄,随介质柱半径 r 的变化不大。两种结构的完全禁带中心频率都随 r 的增大而增加。六角晶格和方形晶格介质柱型光子晶体不存在完全禁带。研究结果对不同结构的光子晶体的进一步应用具有指导意义。

参 考 文 献:

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58** (20): 2059-2062.
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2486-2489.
- [3] Liang Lanju. Propagation characteristic of 2D triangular lattice photonic crystal in THz range [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2010, **30**(1): 35-39 (in Chinese).
- [4] Zhang Haifeng, Ma Li, Liu Shaobin. The forbidden band gap of time-varying magnetized plasma photonic crystals [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2010, **30**(2): 142-146 (in Chinese).
- [5] Yan Mingbao, Wang Hailong, Hou Ping. Transmission properties of 2D photonic crystals with triangular dielectric rods [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2009, **30**(1): 1-5 (in English).
- [6] Yu Jianli, Shen Hongjun. Study of defect modes in two-dimensional square photonic crystal consisting of anisotropic cylinders [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2009, **30**(1): 25-29 (in Chinese).
- [7] Li L M. Two dimensional photonic crystals: Candidate for wave plates [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **78**(22): 3400-3402.
- [8] Ao X, He S. Polarization beam splitters based on a two-dimensional photonic crystal of negative refraction [J]. *Opt. Lett.*, 2005, **30**(16): 2152-2154.
- [9] Chen Song, Wang Weibiao, Liang Jingqiu, et al. Two-dimensional square photonic crystal microcavities [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2006, **28**(1): 7-11 (in Chinese).
- [10] Wu Yaode, Li Jijun, Chen Haiyan. Propagating characteristics and applications of parallel photonic crystal waveguides [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2006, **30**(5): 674-677 (in Chinese).
- [11] Qiu M, Jaskorzynska B. Design of a channel drop filter in a two-dimensional triangular photonic crystal [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **83**(6): 1074-1076.
- [12] Meade R D, Rappe A M, Brommer K D, et al. Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials [J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **48**(11): 8434-8437.

Two-dimension Photonic Crystal Complete Bandgap

LIU Guang-yu^{1,2}, NING Yong-qiang¹, ZHANG Li-sen^{1,2},
WANG Wei^{1,2}, SUN Yan-fang¹, QIN Li¹, LIU Yun¹, WANG Li-jun¹

(1. *Laboratory of Excited State Processes, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;*
2. *Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China*)

Abstract: Photonics crystal (PhC) is the material in which the refractive index changes periodically and the PhC has a band structure and location mode, this structure can control light. In order to study two-dimensional PhC complete band gap in this paper, plane wave expansion method was employed to simulate four types of two-dimensional PhC. We study the relationship between the complete bandgap and the variation of column radius r with a fixed lattice constant. We found that hexagonal lattice PhC air holes complete band gap appears in the $r = 0.42 \sim 0.50 \mu\text{m}$ range, complete band gap width does not increase with the air column radius r , but there is a maximum width. The maximum band gap width is $\Delta\omega_1 = 0.08(\omega a/2\pi c)$. When air column radius $r = 0.47 \sim 0.50 \mu\text{m}$, square lattice PhC exists complete bandgap, the band gap width $\Delta\omega_2 = 0.02(\omega a/2\pi c)$. And complete band gap center frequency increases with r . Results indicate that for hexagonal and square GaAs columnar PhC there is no complete band gap.

Key words: photonic crystal; plane wave expansion method; complete band gap

CLC number: O431.1 **PACS:** 42.70.Qs **PACC:** 4270Q **Document code:** A

DOI: 10.3788/fgxb20113202.0169