

文章编号: 1001-3806(2009)04-0391-02

## 木堆结构光子晶体最佳参数的理论分析

詹仪

(曲阜师范大学 印刷学院, 日照 276826)

**摘要:** 为了优化3维木堆结构光子晶体的结构参数,采用平面波展开法,从高度和周期之比、填充率、晶格与x轴的夹角3方面理论分析了3维木堆结构光子晶体完全禁带的性质。当填充率在0.25~0.3之间变化时,带隙比变化很小。最佳高度和周期之比为1.3。当晶格与x轴的夹角在40°~50°之间变化时,带隙比超过0.18。当高度和周期之比等于1.3,旋转角度在42°~48°之间变化时,最大带隙比为0.2保持不变。结果表明,3维木堆结构光子晶体的结构参数调节范围比较宽。这一结果为实验室制备带来方便。

**关键词:** 材料;光子禁带;平面波展开法;光子晶体;带隙比

中图分类号: O731 文献标识码: A doi:10.3969/j.issn.1001-3806.2009.04.016

## Theoretical analysis of optimum parameters for woodpile-type photonic crystals

ZHAN Yi

(College of Graphic Arts, Qufu Normal University, Rizhao 276826, China)

**Abstract:** In order to optimize the structure parameters of 3-D woodpile-type photonic crystals, based on the plane-wave method, the property of complete forbidden bands of woodpile structure was theoretically studied in terms of varying aspect height-to-pitch ratios, filling fractions, and rotation angles. It was found that the gap to midgap ratio changed slightly with a filling fraction ranging from 0.25 to 0.30. The optimum height-to-pitch ratio was about 1.3. The gap to midgap ratio became larger than 0.18 when the rotation angle changed from 40° to 50° and the maximum gap to midgap ratio of 0.2 remained unchanged for the rotation angle ranging from 42° to 48° with height-to-pitch ratio of 1.3. The results show this type of woodpile structure can produce big band gaps in a wider parameter range, which offers convenience for preparing three-dimension photonic crystals in laboratory.

**Key words:** materials; photonic bandgap; plane-wave method; photonic crystals; gap to midgap ratio

## 引言

光子晶体的最根本特征是具有光子禁带,即电磁场只在某些特定的频率区间才存在,而在其他频率区间的电磁波都不能传播。光子晶体的这一特性,导致了很多新的物理现象,并使其具备很多潜在的应用<sup>[1-3]</sup>。实现完全禁带是设计光子晶体的主要任务之一。1维、2维光子晶体结构相对简单,目前的理论计算和制作工艺已比较成熟<sup>[4-5]</sup>。3维的金刚石结构光子晶体是具有完全禁带的3维光子晶体<sup>[6]</sup>。但是,由于在高介电材料上钻孔,其机械加工精密、工艺复杂、造价昂贵。自组装法或激光全息干涉法易于制备出密堆积型的面心立方(facet-centered-cubic, FCC)反蛋白石结构的3维光子晶体,该方法成本低廉、工艺简单,但是难于产生完全禁带<sup>[7-8]</sup>。木堆结构的3维光子晶

体是由平行的柱体层层叠加构成,在理论<sup>[9-10]</sup>和实验上<sup>[11-13]</sup>都证明其存在全光子带隙。波长为1.55μm左右的通信波段,要求木堆结构的光子晶体尺寸在亚微米级,其实验室制备具有完全禁带的3维木堆结构光子晶体仍面临很大困难。

作者基于平面波展开法,在理论上计算了3维木堆结构光子晶体的禁带大小和位置,从高度和周期之比、填充率和晶格与x轴的夹角3方面理论分析了木堆型3维光子晶体完全禁带的性质,为以后的实验制备和应用研究提供了良好的指导方向及理论依据。

## 1 3维光子晶体结构

图1是3维木堆结构光子晶体,即用介电柱多层堆积形成有3维完全带隙的介电结构。层与层之间的间隔为h,即柱的高度。柱的宽度为w,最小单元共有4层,其总的高度为c=4h。同一层上,相邻的柱与柱之间的距离为a,即晶格常数。图中第1层与第3层中的柱的取向一致,不过它们之间的杆位置错开了a/2,即半个晶格;第2层与第4层中的杆的取向是一

作者简介:詹仪(1970-),女,博士,现在主要从事应用光学方面的教学工作。

E-mail: zhanyi246@126.com

收稿日期:2008-07-14;收到修改稿日期:2008-07-30

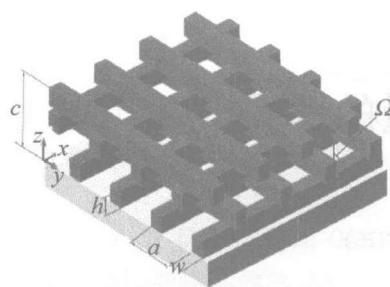


Fig. 1 Schematic of the basic woodpile structure

致,同样也错开了半个晶格。相邻的两层之间的成角为 $90^\circ$ 。4层的结构实际上是光子晶体结构的最小加工单元,复杂的光子晶体结构都可以由这4层结构向空间延伸而成。每一层的晶格对角线和 $x$ 轴的夹角 $\Omega=45^\circ$ ,当光子晶体发生形变时, $\Omega$ 大小也随之发生变化。

## 2 数值模拟与结果分析

选用高介电材料Si( $\epsilon=11.17$ )作为柱体的介电材料,背景材料是空气( $n=1$ )。利用平面波展开法,计算了不同结构参量变化时的带隙比。

首先计算了木堆结构光子晶体在不同填充率下的带隙比。其填充率定义为柱体的横截面宽度与晶格常数 $a$ 之比,即 $f=w/a$ 。图2所示的是不同的单元晶体高度与晶格常数 $a$ 之比( $c/a$ )下,填充率与带隙比之间的关系。可见,当 $c/a=1.414$ ,填充率 $f$ 在 $0.2\sim0.3$ 之间变化时,带隙比较大且变化缓慢。当 $c/a=1.3$ ,填充率 $f$ 在 $0.25\sim0.3$ 之间变化时,带隙比达到 $18\%$ ,且变化非常小。最佳的填充率应选择在 $0.25\sim0.3$ 之间。

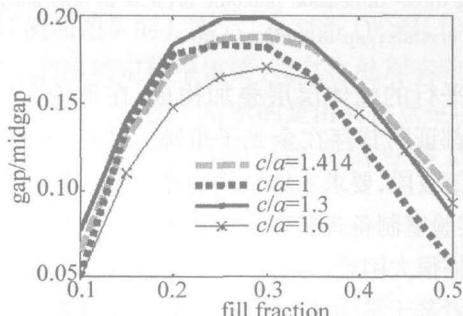
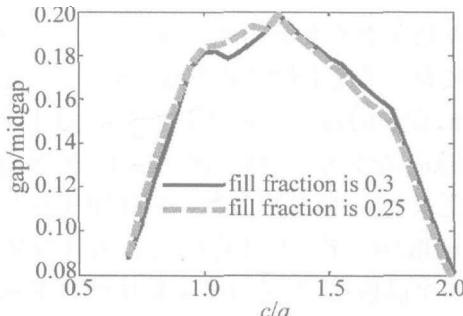


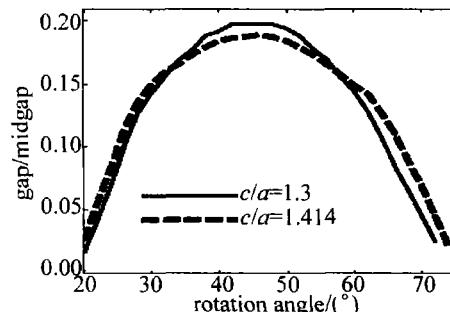
Fig. 2 Filling fractions versus gap to midgap ratio with various aspect ratio  $c/a$  between changes, the gap is relatively large, and the change is slow. When  $c/a=1.3$ , the filling rate  $f$  changes in the range of  $0.25\sim0.3$ , the gap ratio reaches  $18\%$ , and the change is very small. The best filling rate should be selected in the range of  $0.25\sim0.3$ .

图3中给出了不同的填充率下、单元晶体高度与晶格常数 $a$ 之比( $c/a$ )与带隙比之间的关系。可见, $c/a=$

Fig. 3 Gap to midgap ratio versus varying aspect ratio  $c/a$  with filling fractions

1.3时,填充率 $f$ 在 $0.25\sim0.3$ 之间变化,带隙比达到最大值。木堆结构光子晶体的最佳参量 $c/a=1.3$ 。

晶格与 $x$ 轴的夹角与带隙比之间的关系如图4所示。当 $\Omega$ 在 $40^\circ\sim50^\circ$ 之间变化时,带隙比高于 $18\%$ 。

Fig. 4 Gap to midgap ratio as a function of rotation angles  $\Omega$  with  $c/a=1.3$  and  $c/a=1.414$ 

当 $c/a=1.3$ 时,最大的带隙比达到 $20\%$ ,并且在 $42^\circ\sim48^\circ$ 之间不变。因此,对3维木堆结构光子晶体,当旋转角度存在 $6^\circ$ 偏差时,对带隙比影响很小。

当 $c/a=1.3$ , $\Omega=45^\circ$ 和 $f=0.25$ 时,3维木堆结构光子晶体的光子带隙如图5所示。由图可见,归一化频率在 $0.34\sim0.42$ 之间,3维木堆结构光子晶体存在完全禁带。

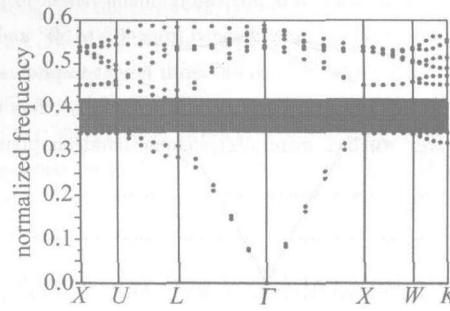


Fig. 5 Complete band gap in woodpile structure

## 3 结 论

综上所述,分析了高度和晶格常数之比、填充率和夹角 $\Omega$ 等因素对3维木堆结构光子晶体完全禁带的影响。通过理论计算发现,当填充率在 $0.25\sim0.3$ 之间变化时,带隙比达到 $18\%$ ,且变化非常小。当高度和晶格常数之比等于1.3,旋转角度在 $42^\circ\sim48^\circ$ 之间变化时最大带隙比 $20\%$ 保持不变。填充率和旋转角度的调节范围较宽,这给实验制备的精度要求带来了方便。木堆结构是由层层叠加法制作出来的,虽然制作工艺比较复杂,但产生的禁带宽度和最大带隙率都比较理想。以上理论分析的结果对今后实验室进行3维光子晶体的制备和应用研究将具有重要的指导意义。

## 参 考 文 献

- [1] ZBAY E Ö. Layer-by-layer photonic crystals from microwave to far-infrared frequencies [J]. JOSA, 1996, B13(9): 1945-1955.

(下转第396页)

率的频谱图。由图4和图5可知,通过改变等离子体密度分布在保持禁带的周期性的同时可以实现对光子禁带的拓展,等离子体的电子密度越高其禁带的宽度越大,密度越低其禁带宽度越窄。这主要是因为当入射电磁波的频率一定时,电子的密度越低即等离子体越稀薄,从而被电磁波极化的电子也越少,等离子体对电磁波的吸收也相应越小。相反,电子的密度越大即等离子体越稠密,被电磁波极化的电子也越多,等离子体对电磁波的吸收也相应越大。由图6和图7可知,通过对温度和等离子体电子密度在一定范围内的调整,在保持禁带周期性的同时,来实现对禁带宽度的控制是完全可行的。在温度较低而等离子体的电子密度较大的情况下,可以较好地实现对禁带的拓展。如图6所示,温度为500K、最大等离子体频率为7GHz时右旋极化波产生的禁带特性较温度为5000K、最大等离子体频率为2GHz时的禁带特性要好。当温度升高即等离子碰撞频率增大时,等离子体对电磁波的吸收增大,可以实现使得光子禁带的中心频率向高频方向移动。等离子体电子密度增大时,有更多的自由电子响应入射电磁波的电场作用,使得禁带宽度得到了拓展。

## 5 结论

采用等温近似,用磁化等离子体的分段线形电流密度卷积时域有限差分算法研究了1维磁化等离子体光子晶体的禁带特性。以高斯脉冲为激励源,引入了PML吸收边界。用算法公式所得的电磁波透射系数来讨论了温度、等离子体层密度对其禁带特性的影响。结果表明,对由左旋和右旋极化波透射率频谱形成的光子禁带而言,通过对温度和等离子体电子密度在一定范围内的调整,可以在保持其周期性的同时,实现对

禁带宽度的控制。仅仅通过升高温度几乎不能实现对其宽度的拓展。等离子体的密度越大,其宽度越大,从而能实现对禁带的拓展。在一定范围内无论是单一的改变温度还是改变等离子体的密度,都不会明显改变其周期特性。其宽度对温度不太敏感,对等离子层的密度较为敏感。

## 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. Localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(23): 2486-2489.
- [3] MEI L Q, YE W M, ZEN C. Characteristic properties of transmission research of 2-D photonic crystals using the transfer matrix method (TMM) [J]. *Acta Sinica Quantum Optica*, 2003, 9(2): 88-92 (in Chinese).
- [4] OUYANG Zh B, AN H N, RUAN S C, et al. Promoting the coupling efficiency of waves by a 2-D photonic crystal [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2004, 33(1): 69-72 (in Chinese).
- [5] WU W Q, CHEN X W, ZHOU H, et al. Investigation of the ultraflat-tended dispersion in photonic crystal fibers with hybrid cores [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, 35(1): 109-113 (in Chinese).
- [6] LI Y, ZHENG R S, FENG Y C, et al. Influence of disordered photonic crystal on light extraction of a kind of light emitting diode model [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, 35(6): 903-905 (in Chinese).
- [7] HOJO H, MASE A. Dispersion relation of electromagnetic waves in one-dimensional plasma photonic crystals [J]. *Journal of Plasmas and Fusion Research*, 2004, 80(2): 89-90.
- [8] LIU Sh B, HONG W, YUAN N C. Finite-difference time-domain analysis of unmagnetized plasma photonic crystals [J]. *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 2006, 27(3): 403-423.
- [9] LIU Sh B, MO J J, YUAN N C. FDTD simulation for magnetized plasma photonic crystals [J]. *Acta Physica Sinica*, 2005, 54(6): 2804-2808 (in Chinese).
- [10] ZHUANG Z W, YUAN N C, LIU Sh B, et al. Plasma stealth technology [M]. Beijing: Science Press, 2005: 13-14 (in Chinese).
- [11] PETRIN A B. Transmission of microwaves through magnetoactive plasma [J]. *IEEE Trans Plasma Sci*, 2001, 29(3): 471-478.

(上接第392页)

- [2] YABLONOVITCH E, GMITTER T J, BHAT R. Inhibited and enhanced spontaneous emission from optically thin AlGaAs/GaAs double heterostructures [J]. *Phys Rev Lett*, 1988, 61(22): 2546-2549.
- [3] HO K M, CHAN C T, SOUKOULIS C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phys Rev Lett*, 1990, 65(25): 3152-3155.
- [4] FANG Y T, SHEN T G, TAN X L. Absolute photonic band gaps of 2-D cubic compound lattice [J]. *Laser Technology*, 2004, 28(4): 344-345 (in Chinese).
- [5] QI J X, WEN Sh Ch. Research of optical properties of one-dimensional photonic crystals constructed by positive-negative refractive materials [J]. *Laser Technology*, 2006, 30(5): 504-506 (in Chinese).
- [6] YABLONOVITCH E, GMITTER T J, LEUNG K M. Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing non-spherical atoms [J]. *Phys Rev Lett*, 1991, 67(17): 2295-2298.
- [7] LEUNG K M, LIN Y F. Full vector calculation of photonic band structure in face-centered-cubic dielectric media [J]. *Phys Rev Lett*, 1990, 65(25): 2646-2649.
- [8] XIA Y N, GATES B, LI Z Y. Self-assembly approaches to three-dimensional photonic crystals [J]. *Advanced Materials*, 2001, 13(6): 409-413.
- [9] EL-KADY I, SIGLAS M M, BISAWAS R, et al. Dielectric waveguides in two-dimensional photonic bandgap material [J]. *Journal of Lightwave Technology*, 1999, 17(11): 2042-2049.
- [10] KOPPERSCHMIDT P. Tetragonal photonic woodpile structures [J]. *Appl Phys*, 2003, B76(7): 729-734.
- [11] LIN S Y, FLEMING J G. A three-dimensional optical photonic crystal [J]. *Journal of Lightwave Technology*, 1999, 17(11): 1944-1947.
- [12] NODA S, YAMAMOTO N, IMADA M, et al. Alignment and stacking of semiconductor bandgaps by wafer-fusion [J]. *Journal of Lightwave Technology*, 1999, 17(11): 1948-1954.
- [13] FLEMING J G, LIN S Y. Three-dimensional photonic crystal with a stop band from 1.35 to 1.95 μm [J]. *Opt Lett*, 1999, 24(1): 49-51.