

文章编号: 1001-3806(2010)01-0075-03

## 面心立方3维光子晶体带隙数值研究

汤炳书<sup>1,2</sup>, 沈廷根<sup>2</sup>, 王刚<sup>3</sup>

(1. 连云港师范高等专科学校 物理系, 连云港 222006; 2. 江苏大学 应用物理研究所, 镇江 212003; 3. 江苏大学 通信工程系, 镇江 212003)

**摘要:** 为了数值研究面心立方晶格球形散射体3维光子晶体能带结构, 采用平面波展开方法分别计算了空气中的介质球与介质中的空气球在不同参量下的能带。结果表明, 空气中的介质球不论选任何参量都不出现完全禁带, 介质中的空气球在选取适当参量时能出现禁带, 禁带宽度与适当空气球半径、适当基质介电常数的关系相似, 禁带位置中心坐标与适当空气球半径、适当基质介电常数的关系相反。此结论推广和补充了相关文献的研究。

**关键词:** 光电子学; 面心立方3维光子晶体; 平面波展开法; 能带结构; 带隙

**中图分类号:** O734 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1001-3806.2010.01.021

### Numerical study on band gap structure in face centered cubic lattice of 3-D photonic crystal

TANG Bing-shu<sup>1,2</sup>, SHEN Ting-gen<sup>2</sup>, WANG Gang<sup>3</sup>

(1. Department of Physics, Lianyungang Teacher's College, Lianyungang 222006, China; 2. Institute of Applied Physics, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China; 3. Department of Telecommunication Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212003, China)

**Abstract:** The band gap structure of face-centered cubic lattice of 3-D photonic crystal with sphere scatter was studied with the plane wave expansion method. The energy bands of the air sphere in medium and the medium sphere in air with different parameters were calculated. The results obviously prove that the wholly band gap of air sphere in medium will never exist at any parameter, and the wholly band gap of medium sphere in air will exist when suitable parameters are chosen. The relation between the width of band gap and the air sphere's radius is similar to that of the substrate's dielectric constant, while the relation between the band gap's center position and the radius of air sphere is dissimilar to that of the dielectric constant of the substrate. The conclusion extends and renews the relative fields.

**Key words:** optoelectronics; face-centered cubic lattice 3-D photonic crystal; plane wave expansion method; band structure; band gap

## 引言

近年来, 介质周期结构中的电磁波行为引起人们广泛的研究, 介质周期结构, 即所谓光子晶体<sup>[1,2]</sup>, 可以存在光子禁带(在该频率区域光子晶体将禁止任何光或电磁波的传播)。3维光子晶体是介电常数在3个方向上被周期性调制的介电材料, 典型的结构就是金刚石结构和面心立方的反蛋白石结构, 这两种结构在

介电常数比达到一定大小后会出现完全禁带, 具有完全带隙的3维光子晶体是在光带隙频率范围内任意方向入射的光都将被完全反射, 光子晶体的出现展示了许多重要的应用前景, 如高效率激光器、光电子器件、新型波导等, 这些应用都是基于光子晶体的禁带特征, 3维光子晶体具有更广泛的应用潜力。目前研究光子晶体能带结构方法主要有: 平面波展开法(plane wave expansion method, PWM)<sup>[3-5]</sup>、有限时域差分法<sup>[6]</sup>、转移(传输)矩阵法<sup>[7]</sup>、多重散射法<sup>[8]</sup>等。平面波展开法是提出最早应用最广的方法之一, 它是应用布洛赫定理, 对某一入射方向波矢 $k$ , 以平面波的形式展开电磁场, 将Maxwell方程化成一个本征方程, 求出 $k$ 对应的一组频率本征值。这种方法的特点是简便直观, 不需事先引入假设条件, 计算出的频带结构精确有效。最近LIU等人用平面波展开法对典型结构的3维光子晶体

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60771041); 江苏省教育厅2008年度高校“青蓝工程”中青年学术带头人培养对象资助项目

作者简介: 汤炳书(1963-), 男, 教授, 主要从事计算凝聚态物理研究。

E-mail: tbs6363@163.com

收稿日期: 2008-10-08; 收到修改稿日期: 2008-11-10

完全禁带出现最佳参量作了理论分析<sup>[3]</sup>,特别是对金刚石结构与脚手架结构做了详细研究得到一些有意义的结果,但对面心立方结构(face-centered cubic, FCC)较略,且有一些结论有待商榷。作者同样基于平面波展开法,数值研究了面心立方晶格结构球形散射体3维光子晶体的禁带宽度和位置,分析了对光子禁带产生影响的各种因素,得到一些有意义的结论,推广与补充了相关文献中<sup>[3]</sup>的研究,为实验制备和应用研究提供良好的指导方向及理论依据。

## 1 数值模型

建立如图1所示的数值研究模型。图1左边是面

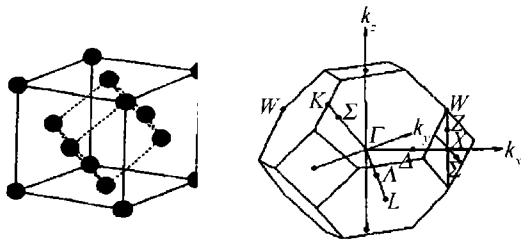


Fig. 1 3-D photonic crystal lattice with FCC structure

心立方晶格球形3维光子晶体,基质介电常数为 $\epsilon_1$ ,散射球体介电常数为 $\epsilon_2$ ,晶格常数为 $a$ 。图1右边是对应晶格结构的第1布里渊区。为了不失一般性,在数据处理作图时,纵轴采用归一化频率( $\omega a/(2\pi c) = a/\lambda$ )单位,程序设计时有关涉及长度方面的量都以晶格常数 $a = 1\mu\text{m}$ 为基准,长度以 $a$ 为单位。式中, $\omega, \lambda$ 分别指入射平面波角频率、波长, $c$ 是光速。

## 2 数值结果与讨论

### 2.1 介质中的空气球 FCC 能带结构

用平面波方法所编程序计算介质中的空气球面心立方晶格3维光子晶体用混合模式,计算结果发现,空气球半径太小或太大都没有完全禁带产生,只有选择适当基质介电常数与球半径才可得到能带结构,见图2,

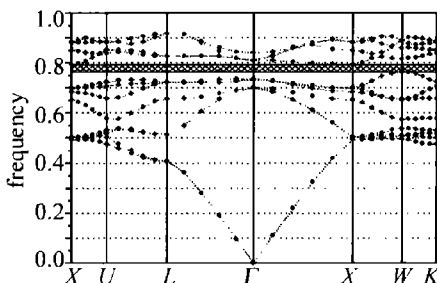


Fig. 2 Band gap with FCC structure of air sphere in substrate

其 $\epsilon_1 = 11.9, \epsilon_2 = 1$ 时,介电常数对应的物质是硅,散射空气球所用半径 $r = 0.35a$ ,纵轴是频率轴,单位是归一化频率( $\omega a/(2\pi c) = a/\lambda$ ),从图中可以看出,完全禁带存在频率 $0.792 \sim 0.763$ 之间,见图中阴影部分所示,这一结论与参考文献<sup>[3]</sup>中有一致之处又有不

同,一致的是参考文献<sup>[3]</sup>中图6a也是禁带出现在空气球半径 $r = 0.35a$ 处,不同的是本文中的计算表明,在 $r = 0.35a$ 左右小范围内存在禁带,而参考文献<sup>[3]</sup>的图6a中则显示只在 $r = 0.35a$ 处有禁带。

2.1.1 空气球半径对能带结构的影响 让参量 $\epsilon_1 = 11.9, \epsilon_2 = 1$ ,空气球半径 $r$ 取 $0.34a \sim 0.36a$ 之间不同的离散值进行数值计算可以得到一系列像图2一样的能带结构图,读出各半径时带隙的上、下边频率值,就可算出禁带宽度、带隙中心位置,具体结果见表1。再增加计算点作出禁带宽度、带隙中心位置与空气球半径的关系,见图3。从表1和图3a可以很清晰地看

Table 1 Comparison of parameters in band structure for different air sphere diameters( $\epsilon_1 = 11.9$ )

radius/ $a$	band's width/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )	band's center ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )	upper side band/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )	low side band/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )
0.34	0.010	0.728	0.733	0.723
0.35	0.029	0.777	0.792	0.763
0.36	0.031	0.863	0.853	0.821

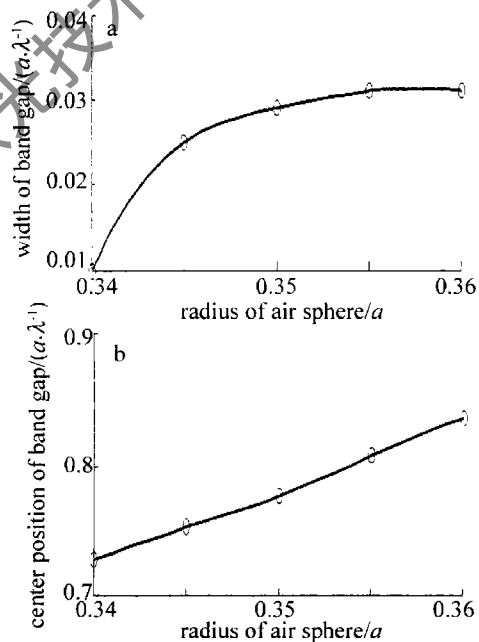


Fig. 3 Forbidden band's width and center for different sphere of air diameters

出带宽与半径的关系,空气球半径越大带隙宽度越宽,但在这区间内并不都是成正比,在大于 $0.35a$ 后出现平坦特性。从表1和图3b看出带隙中心位置与空气球半径关系近线性上升关系,空心球半径越大,禁带中心越向高频方向移动。图1、图2中的大写希腊字母是简约布里渊区的高对称点。

2.1.2 基质介电常数对能带结构的影响 让 $\epsilon_2 = 1$ ,散射体是空气球,半径 $r = 0.35a$ ,基质的介电常数 $\epsilon_1$ 取 $10.9 \sim 15.9$ 之间不同的值进行数值计算可以仍得到一系列像图2一样的能带结构图,同样读出各半径

时带隙的上、下边频率值,就可算出禁带宽度、带隙中心位置,具体结果见表2。再增加计算点作出禁带宽度、带隙中心位置与基质介电常数的关系,见图4。

Table 2 Comparison of parameters in band structure for different dielectric constants in substrate ( $r = 0.35a, \epsilon_2 = 1$ )

dielectric constants $\epsilon_1$	band's width/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )	band's center/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )	upper side band/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )	low side band/ ( $a \cdot \lambda^{-1}$ )
10.9	0.020	0.807	0.817	0.797
11.9	0.029	0.777	0.792	0.763
15.9	0.040	0.686	0.707	0.666

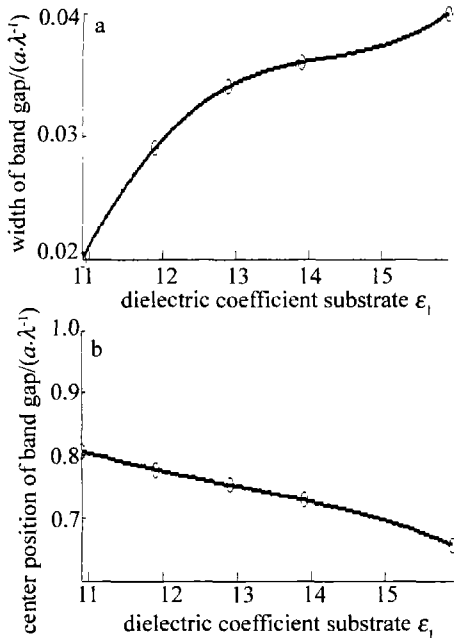


Fig. 4 Forbidden band's width and center of substrate for different dielectric constants

从表2和图4a可以很清晰地看出带宽与基质介电常数之间的关系,基质介电常数越大带隙宽度越宽,这区间内计算结果表明并没有表现出线性关系。从表2和图4b看出带隙中心位置与基质介电常数呈线性下降关系,基质介电常数越大,禁带中心越向低频方向移动。

## 2.2 空气中的介质球 FCC 能带结构

如果让参量  $\epsilon_1 = 1, \epsilon_2, r$  取不同数值就是空气中的介质球面心立方晶格3维光子晶体模型,同样也可计算得到一系列能带结构图,图5是  $\epsilon_2 = 11.9, r = 0.35a$  时的能带结构,从图中没有发现完全禁带产生,分别变化  $\epsilon_2$  和  $r$ ,可得到类似的能带结构图都完全没有禁带产生。这是由于球形构成的面心立方结构具有很高的对称性,对称性引起的能级简并使它难于产生完全禁带,由已有的研究得知,降低光子晶体的对称性,可以增大光子晶体的带隙<sup>[5]</sup>,为了消除对称性,在FCC结构的晶胞内引入两个球形粒子构成金刚石结构,能产生很宽的完全禁带<sup>[3]</sup>,限于篇幅相关问题另文讨论。

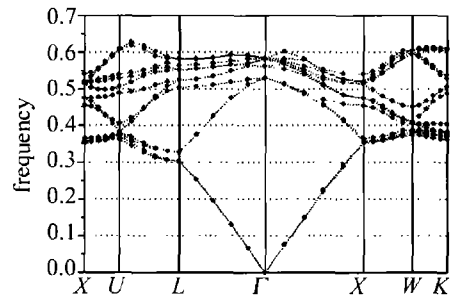


Fig. 5 Band with FCC structure of sphere in air

## 3 结论

用平面波展开方法数值研究面心立方晶格3维光子晶体的能带结构。详细计算了空气中的介质球与介质中的空气球2种情况在结构参量、电磁参量不同时完全带隙结构,具体结论如下:(1)空气中的介质球情形时,不管参量如何选择都没有完全禁带产生。(2)介质中的空气球情形时,适当选取基质介电常数、固定调节空气球的半径发现禁带宽度在半径,小于  $r = 0.35a$  小范围内与该半径成正比增加,在大于  $r = 0.35a$  小范围内则呈现出饱和的非线性特性,禁带中心位置坐标随空气球半径增加线性增大。当适当选取空气球半径,固定调节基质介电常数发现,在禁带宽度在介电常数  $\epsilon_1 = 11.9$  附近表现出与空气球半径关系的结论相似,即禁带宽度在介电常数小于  $\epsilon_1 = 11.9$  小范围内与该介电常数成正比增加在大于  $\epsilon_1 = 11.9$  小范围内呈现出饱和的非线性特性,禁带位置中心坐标则与空气球半径关系的结论相反即禁带中心位置坐标随基质介电常数增加线性减小。

## 参 考 文 献

- [1] YABLONOVICH E. Inhibited spontaneous emission in sole-state physics and electronics [J]. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(20):2059-2062.
- [2] FLORIAN F, NOBUYUKI T, TAKUO T. Three-dimensional fabrication of metallic nanostructures over large areas by two-photon polymerization [J]. *Optics Express*, 2006, 14(2):800-809.
- [3] LIU H, YAO J Q, LI E B, *et al.* Theoretical analysis of optimum parameters for complete forbidden bands of three-dimensional photonic crystals with typical lattice structures [J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, 55(1):230-237 (in Chinese).
- [4] TANG B Sh, SHEN T G. Numerical simulation research of effect in two-dimensional adulteration photonic crystal [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2006, 18(4):562-564 (in Chinese).
- [5] ZUANG F, HE S L, HE J P, *et al.* Large complete band gap of a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic elliptic cylinders [J]. *Acta Physica Sinica*, 2002, 51(2):355-361 (in Chinese).
- [6] TANG B Sh, YIN G S, XU J L. Study on the transmission spectra of two-dimensional photonic crystals with layered composite medium cylinder [J]. *Laser Technology*, 2007, 31(2):127-130 (in Chinese).
- [7] PENDRY J B. Photonic band structures [J]. *Journal of Modern Optics*, 1994, 41(2):209-229.
- [8] TANG B Sh, LI Zh H, LIU L L, *et al.* Numerical research of 2-D photonic crystal heterostructures with order-N method [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2006, 33(8):9-13 (in Chinese).