

文章编号: 1001-3806(2010)02-0243-04

2 维各向异性正方介质柱的带隙研究

李开才, 闫珂柱*

(曲阜师范大学 物理工程学院, 曲阜 273165)

摘要: 因各向同性介质组成的正方晶格方形介质柱不能产生绝对带隙, 而三角晶格正方介质柱可以产生很小的带隙, 为了得到更大带隙, 引入各向异性介质来代替各向同性介质, 由于各向异性介质在不同方向上的介电常数不同, 可以产生较大的绝对带隙, 利用平面波展开法分别计算了正方晶格各向异性介质柱产生的绝对带隙宽度为 $0.03095\omega_c$ (ω_c 为中心频率), 三角晶格各向异性正方介质柱产生的完全禁带宽度为 $0.03831\omega_c$, 是各向同性介质所产生带宽的 3.6 倍。这一结果对光子晶体带隙的研究是很有帮助的。

关键词: 材料; 光电子学; 完全禁带; 平面波展开法; 各向异性; 各向同性

中图分类号: O734 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1001-3806.2010.02.027

The research of band gap of 2-D anisotropic dielectric cylinders

LI Kai-cai, YAN Ke-zhu

(College of Physics and Engineering, Qufu Normal University, Qufu 273165, China)

Abstract: The square lattice of isotropic dielectric cylinders in air can not bring about the absolute band gap and the triangular lattice of dielectric cylinders can produce small absolute band gap. In order to get the bigger band gap, the anisotropic material is used instead of the isotropic material, for it can bring about big absolute band gap because of the dielectric constants of the anisotropic material are different in some directions. Based on plane wave method, calculation results show that the width of the absolute band gap for the square lattice is $0.03095\omega_c$. For the triangular lattice the width is $0.03831\omega_c$, which is 3.6 times wider than the absolute band gap produced by the isotropic dielectric cylinders. It is very useful for research of the band gap of photonic crystal.

Key words: materials; optoelectronics; absolute band gap; plane wave expansion method; anisotropic; isotropic

引言

光子晶体是周期性的介质或金属结构。电磁波在光子晶体内部传输的特性类似于电子在晶体的运动特性。对于某些频率范围, 光子晶体反射所有方向上电磁波的所有偏振态, 晶体就被称为有一个完整的光子禁带。频率处在禁带范围内所有模式的光及电磁波都不能在其中传播。光子晶体禁带的这一特点具有广阔的应用前景。目前, 光子晶体在光通讯、光子纤维、通讯天线等方面已经取得了突破性的进展。在不久的将来, 光子晶体的成果必将对信息通讯业产生重大影响。光子晶体的许多应用是基于光子禁带的存在与大小, 因此在理论上研究禁带的性质, 设计出具有尽可能大的禁带的光子晶体材料具有重要的意义。

人们对 2 维^[1-3] 和 3 维光子晶体^[4-7] 做了许多研

究, 虽然 3 维光子晶体带隙结构在应用中具有更大的潜力, 但是这些禁带的构造在可见光及红外频率范围内仍然是很困难的。相比较而言, 在这一频率范围内, 2 维光子晶体很容易构造光子禁带^[8]。同时 2 维光子晶体也有许多重要的应用, 如激光二极管反馈镜、光子纤维等。所以, 研究 2 维光子晶体的禁带有很大的实用价值。

计算 2 维光子晶体禁带的常用方法有平面波展开法^[5-6,9]、时域有限差分法^[3,10-12] (finite difference time domain, FDTD)、多重散射法^[13-14] 等等。用平面波展开方法的研究表明, 在背景为空气的 2 维正方排列光子晶体的情况下绝对带隙是不存在的, 三角晶格正方介质柱能够产生较小的带隙, 而引入各向异性介质后能够产生较大带隙, 由于各向异性介质在不同方向上的介电常数不同, 且偏振的本征频率与介电常数成反比例关系, 这就为模拟寻找大禁带提供了方便。作者用平面波展开法研究了各向异性介质正方晶格介质柱和三角晶格介质柱的禁带, 通过优化算出最大带宽分别为 $0.03095\omega_c$ 和 $0.03831\omega_c$ (ω_c 为中心频率)。

作者简介: 李开才 (1985-), 男, 硕士研究生, 主要从事光子晶体和电磁场理论的研究工作。

* 通讯联系人。E-mail: yankezhu@126.com

收稿日期: 2009-02-23; 收到修改稿日期: 2009-08-19

1 理论分析与计算方法

1.1 各向同性介质

平面波展开法是光子晶体能带研究中应用比较多的一种方法,光在光子晶体中的传播可以用 Maxwell 方程来描述。在介质中,Maxwell 方程组中的旋度方程为:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} \quad (2)$$

式中, \mathbf{E} 为电场强度, \mathbf{B} 为磁感应强度, \mathbf{H} 为磁场强度, \mathbf{D} 为电位移, \mathbf{J} 为传导电流密度, t 为时间。

考虑无源情况(设 $\mathbf{J} = 0$),在 H 极化的情况下,可得到本征方程:

$$\sum_{\mathbf{G}}^n (\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{K} + \mathbf{G}') \mathbf{K}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') A(\mathbf{K} | \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} A(\mathbf{K} | \mathbf{G}) \quad (3)$$

式中, A 为振幅, $\mathbf{K} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$, k_x, k_y 代表 x 方向和 y 方向上不同的量值, $\mathbf{G}(h) = h_1 b_1 + h_2 b_2$, $\mathbf{G}(h)$ 为倒格矢, \mathbf{G}' 与 \mathbf{G} 的物理意义相同,只是取值不同, h_1, h_2 为整数, $b_1 = \frac{2\pi}{S}(a_2^{(2)}, -a_1^{(2)})$, $b_2 = \frac{2\pi}{S}(-a_2^{(1)}, a_1^{(1)})$,其中, $a_j^{(i)}$ 是 $a^{(i)}$ 的第 j 个分量, S 为元胞的面积。同理,在 E 偏振情况下,可得到如下本征方程:

$$\sum_{\mathbf{G}}^n (\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{K} + \mathbf{G}') C(\mathbf{K} | \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} C(\mathbf{K} | \mathbf{G}) \quad (4)$$

$$\mathbf{K}(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_b} + \left(\frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right)f, (\mathbf{G} = 0) \\ f\left(\frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right) \frac{2J_1(\mathbf{G}\mathbf{R})}{\mathbf{G}\mathbf{R}}, (\mathbf{G} \neq 0) \end{cases} \quad (5)$$

式中, C 为变换值, f 是填充率, ε 为介质的介电常数, ε_b 为背景材料的介电常数, $J_1(x)$ 是 Bessel 函数, c 为光速, ω 为本征频率。将(5)式代入(3)式和(4)式就可以得到 E 极化和 H 极化本征频率 ω 。

1.2 各向异性介质

设置 z 方向为介质柱的轴方向,2 维周期结构在 $x-y$ 平面上。假设介质 Te 的正常光介质常数在 $x-y$ 平面内,即 $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_o = 23.04$,沿轴方向为非正常光的介质常数 $\varepsilon_z = \varepsilon_e = 38.44$ 。其中, $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ 分别代表 3 维空间 x, y, z 方向的介电常数, ε_o 代表寻常光的介电常数, ε_e 代表非寻常光的介电常数。在 H 极化的情况下,用平面展开法可得本征方程为:

$$\sum_{\mathbf{G}'_{//}} (\mathbf{K}_{//} + \mathbf{G}'_{//}) \cdot (\mathbf{K}_{//}' + \mathbf{G}'_{//}') \mathbf{K}(\mathbf{G}_{//} - \mathbf{G}'_{//}') A(\mathbf{K}_{//} | \mathbf{G}'_{//}') = (\omega^2/c_0^2) A(\mathbf{K}_{//} | \mathbf{G}_{//}) \quad (6)$$

式中, $\mathbf{K}_{//} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$, $\mathbf{G}_{//}(h) = h_1 b_1 + h_2 b_2$, $b_1 =$

$$\frac{2\pi}{S}(a, 0), b_2 = \frac{2\pi}{S}(0, a)。$$

同理,在 E 极化的情况下,可得本征方程为:

$$\sum_{\mathbf{G}'_{//}} |\mathbf{K}_{//} + \mathbf{G}'_{//}| \mathbf{K}(\mathbf{G}_{//} - \mathbf{G}'_{//}') |\mathbf{K}_{//} + \mathbf{G}'_{//}' C(\mathbf{K}_{//} | \mathbf{G}'_{//}') = \frac{\omega^2}{c_0^2} C(\mathbf{K}_{//} | \mathbf{G}_{//}) \quad (7)$$

在解本征方程时注意到 Fourier 系数 $\mathbf{K}(\mathbf{G}_{//})$ 在计算 E 极化和 H 极化光子禁带时起核心的作用,由于在晶胞内介电常数具有不同的值,设正方介质柱的介电常数为 $\varepsilon_{e,o}$,介质柱外的介电常数为 ε_b ($\varepsilon_b = 1$),令:

$$\frac{1}{\varepsilon_{e,o}(\mathbf{X}_{//})} = \frac{1}{\varepsilon_b} + \left[\frac{1}{\varepsilon_{e,o}} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right] \sum_a s(\mathbf{X}_{//} - \mathbf{X}'_{//}') \quad (8)$$

式中, a 是晶格常数, s 是为表示 $\varepsilon_{e,o}$ 而引入的函数, \mathbf{X}

是个参考量, $s(\mathbf{X}_{//}) = \begin{cases} 1, (\mathbf{X}_{//} \text{在介质柱内}) \\ 0, (\mathbf{X}_{//} \text{不在介质柱内}) \end{cases}$ 。

Fourier 变换系数:

$$\mathbf{K}_{o,e}(\mathbf{G}_{//}) = \frac{1}{S} \int_S d^2 \mathbf{X}_{//} \exp(-i\mathbf{G}_{//} \cdot \mathbf{X}_{//}) \frac{1}{\varepsilon_{o,e}(\mathbf{X}_{//})} = \frac{1}{\varepsilon_b} \delta_{\mathbf{G}_{//},0} + \left[\frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right] \frac{1}{S} \cdot \int d^2 \mathbf{X}_{//} \exp(-i\mathbf{G}_{//} \cdot \mathbf{X}_{//}) s(\mathbf{X}_{//}) \quad (9)$$

式中的第 2 项积分为 $x-y$ 全平面, δ 为无穷微小分量,得到:

$$\mathbf{K}_{o,e}(\mathbf{G}_{//}) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_{o,e}} f + \frac{1}{\varepsilon_b} (1-f), (\mathbf{G}_{//} = 0) \\ \left[\frac{1}{\varepsilon_{o,e}} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right] \frac{1}{S} \int d^2 \mathbf{X}_{//} \exp(-i\mathbf{G}_{//} \cdot \mathbf{X}_{//}) \frac{1}{\varepsilon_{o,e}(\mathbf{X}_{//})}, (\mathbf{G}_{//} \neq 0) \end{cases} \quad (10)$$

式中, f 为填充率,即介质柱占整个晶胞的百分比, $f = S_1/S = w^2/a^2$, S_1 为介质柱的面积, w 为介质柱宽度,则可得到:

$$\mathbf{K}_{o,e}(\mathbf{G}_{//}) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_{o,e}} f + \frac{1}{\varepsilon_b} (1-f), (\mathbf{G}_{//} = 0) \\ \left[\frac{1}{\varepsilon_{o,e}} - \frac{1}{\varepsilon_b}\right] f \frac{2J_1(\mathbf{G}_{//})}{\mathbf{G}_{//}}, (\mathbf{G}_{//} \neq 0) \end{cases} \quad (11)$$

式中, $J_1(\mathbf{G}_{//})$ 为 Bessel 函数,将(11)式代入(1)式和(2)式,即可求出 E 极化与 H 极化本征频率 ω 。

2 计算结果与分析

2.1 正方晶格

图 1 中黑色部分为硅介质其介电常数为 12.096,

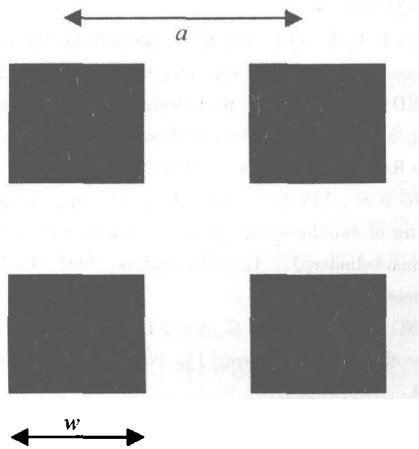


Fig. 1 Square lattice

背景材料空气的介电常数为 1。图 2 介质柱为正方排列时,用平面波展开法计算了 $w = 0.46a$ 时,正方晶格介质柱 Si 不存在绝对带隙。由于在一定范围内改变各向同性介质的介电常数可增大带隙,但通过实验使介电常数在 4 ~ 40 范围内变化仍无绝对带隙产生。当引入各向异性介质 Te 后,由于各向异性介质在不同方向上介电常数不同,所以产生了较大的绝对带隙,当 $w = 0.46a$ 时,最大带隙宽度为 $0.03095\omega_e$, 见图 3。

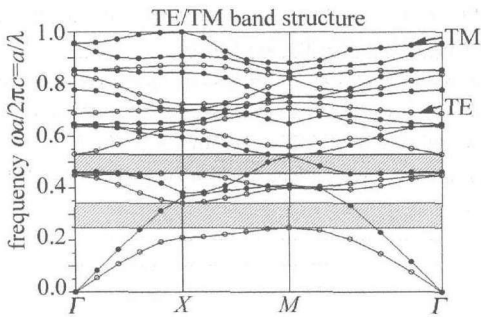


Fig. 2 The band gap of the isotropic dielectric cylinder

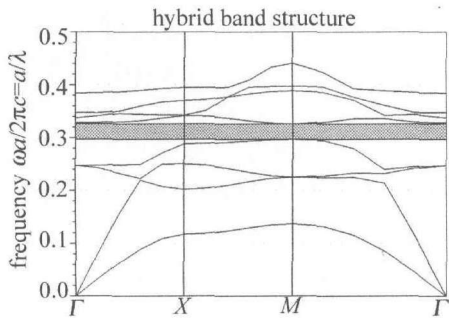


Fig. 3 The band gap of the anisotropic dielectric cylinder

2.2 三角晶格

当介质柱三角排列时(见图 4),用平面波展开法计算其带隙宽度。对于各向同性介质其介电常数在一定范围内变化时,带隙宽度随其增大而增大。由图 5 可看出,取 $w = 0.46a$, 当介质与背景材料的折射率差 Δ 在 3.2 ~ 5.4 之间变化时,介电常数在 17.64 ~ 40.96

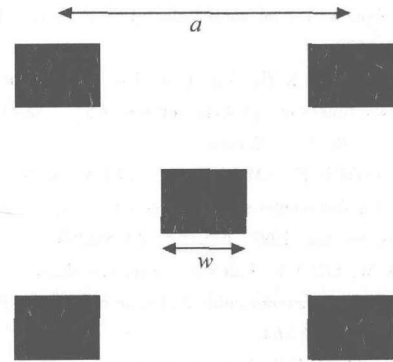


Fig. 4 Triangular lattice

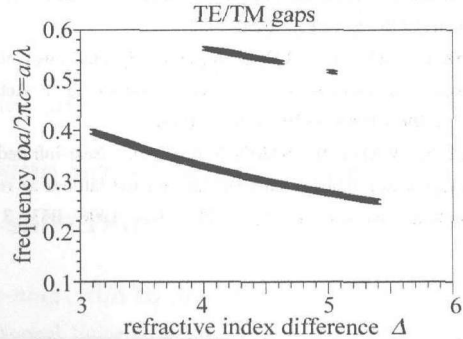


Fig. 5 The band gap of the isotropic dielectric cylinder

之间变化存在绝对带隙,并且介电常数在 25 ~ 31.36 之间时,存在两条绝对带隙但带隙宽度非常小,最大带隙宽度仅为 $0.01055\omega_e$ 。当介质为各向异性介质 Te, $w = 0.46a$ 时,通过计算得到最大带隙宽度达到了 $0.03831\omega_e$, 宽度是各向同性介质的 3.6 倍(见图 6)。

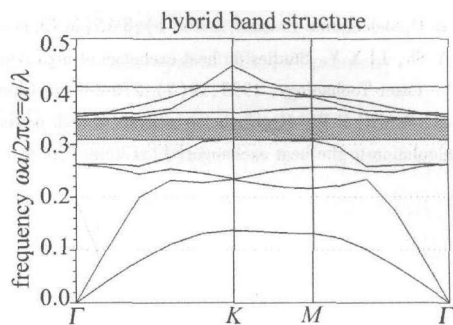


Fig. 6 The band gap of anisotropic dielectric cylinder

3 结论

由于各向同性材料各个方向的介电常数相同,使能带位置的调节受到限制。而各向异性材料在不同方向上具有不同的介电常数,这使得能带的位置可以方便地上下调节,以得到较大的完全禁带。最大带隙可达 $0.03831\omega_e$, 比各向同性介质形成的带隙大得多,而且更容易产生绝对带隙。

参 考 文 献

[1] PLIHAI M, MARADUDIN A A. Photonic band structure of two-dimensional systems: the triangular lattice[J]. Phys Rev, 1991, B44 (16): 8565-8571.
 [2] NETTI M C, HARRIS A, BAUMBERG J J, et al. Optical trirefrin-

- gence in photonic crystal waveguides[J]. *Phys Rev Lett*, 2001, 86(8):1526-1529.
- [3] RONG Ch C, YAN K Zh, XIE Y M. The distribution of the electric field in two-dimension photonic crystals [J]. *Laser Technology*, 2008, 32(1):76-79 (in Chinese).
- [4] YABLONOVITCH E, GMITTER T J, LEUNG K M. Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing nonspherical atoms [J]. *Phys Rev Lett*, 1991, 67(17): 2295-2298.
- [5] LEUNG K M, LIU Y F. Full vector wave calculation of photonic band structures in face-centered-cubic dielectric media[J]. *Phys Rev Lett*, 1990, 65(21):2646-2649.
- [6] ZHANG Z, SATPATHY S. Electromagnetic wave propagation in periodic structures: bloch wave solution of Maxwell's equations[J]. *Phys Rev Lett*, 1990, 65(21): 2650-2653.
- [7] XIE Sh Y, YANG Y P, LIN Zh X, *et al.* Spontaneous emission from a driven atom embedded in a photonic crystal [J]. *Acta Physica Sinica*, 1999, 48(8):1459-1469 (in Chinese).
- [8] INOUE K, WADA M, SAKODA K, *et al.* Near-infrared photonic band gap of two-dimensional triangular air-rod lattices as revealed by transmittance measurement [J]. *Phys Rev*, 1996, B53(3): 1010-1013.
- [9] 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.
- [10] CHAN C T, YU Q L, HO K M. Order-N spectral method for electromagnetic waves [J]. *Phys Rev*, 1995, B51(23): 16635-16642.
- [11] WARD A J, PENDRY J B. Calculating photonic Green's functions using a nonorthogonal finite-difference time-domain method [J]. *Phys Rev*, 1998, B58(11):7252-7259.
- [12] TANG B Sh, YIN G W, XU J L, *et al.* Study on the transmission spectra of two-dimension photonic crystals with layered composite medium cylinder [J]. *Laser Technology*, 2007, 31(2):127-130 (in Chinese).
- [13] WANG X D, ZHANG X G, YU Q L, *et al.* Multiple-scattering theory for electromagnetic waves [J]. *Phys Rev*, 1993, B47(8):4161-4167.
- [14] LEUNG K M, QIU Y. Multiple-scattering calculation of the two-dimensional photonic band structure [J]. *Phys Rev*, 1993, B48(11): 7767-7771.
- (上接第 242 页)
- [2] HABICH U, DU K, EHRLICHMANN D, *et al.* Development of an industrial CO₂ laser with more than 40kW output power: recent results [J]. *Proc SPIE*, 1995, 2502, 20-24.
- [3] HARRY J E. The high power CO₂ laser used in material processing [J]. *Industrial Laser Review*, 1991, 5(9):10-14.
- [4] CONG Zh. The high power CO₂ laser and industrial applications [J]. *Laser & Optoelectronic Process*, 1999(1):8-15 (in Chinese).
- [5] HAN Y Sh, LI X Y. Studies on heat exchange of high power CO₂ laser [J]. *Laser Technology*, 1995, 19(5):276-279 (in Chinese).
- [6] LU P H, WANG R W. Heat balance analysis of high power CO₂ laser and calculation to the heat exchanger [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2001, 28(9):775-778 (in Chinese).
- [7] ZUO D L, LI Sh M. Review of fast axial flow CO₂ laser [J]. *Laser Technology*, 2000, 24(1): 4-8 (in Chinese).
- [8] QIAN S W. Heat exchanger design manual [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2002:381-395 (in Chinese).
- [9] YANG Sh M, TAO W Q. Heat transfer [M]. Beijing: Higher Education Press, 2001:130-202 (in Chinese).
- [10] SHI M Zh, WANG Zh Zh. Heat exchanger theory and design [M]. Nanjing: Dongnan University Press, 2006:87-169 (in Chinese).
- [11] SHILINDEER E U, MA Q F, MA Ch F. Heat exchanger design manual [M]. Beijing: China Machine Press, 1989:157-161 (in Chinese).