

文章编号: 1001-3806(2010)05-0653-04

2 维复式正方晶格结构的完全带隙研究

刘 军, 闫珂柱*, 赵永林, 李开才

(曲阜师范大学 物理工程学院, 曲阜 273165)

摘要: 为了获得较大的完全带隙, 采用平面波展开法对 2 维光子晶体的带隙结构进行计算, 通过栅格结构连接方形硅介质柱对正方晶格的带隙结构进行优化。在适当调整介质柱宽度和栅格宽度后, 所构成的复式结构获得了较大的完全带隙。结果表明, 在正方晶格结构的情况下, 只有方形硅介质柱且其宽度为 $0.5a$ (a 为晶格常数) 时, 仅存在 TE 模的带隙; 只有同周期硅介质栅格结构且栅格宽度为 $0.22a$ 时, 仅存在 TM 模的带隙; 复式结构的情况下, 适当调整介质柱宽度 w 和栅格宽度 d , 在 $w = 0.5a$ 和 $d = 0.05a$ 时, 可以获得较大的完全带隙, 其宽度为 $0.0417\omega_c$ (ω_c 为中心频率); 在 w 不变时, 随着 d 的变化, 在 $0.04a \sim 0.11a$ 出现完全带隙; 在 d 不变时, 随着 w 的变化, 在 $0.42a \sim 0.76a$ 出现完全带隙; 在 $4 \sim 36$ 的范围内调整介电常数, 在 $8.41 \sim 36$ 之间能够出现不同宽度的完全带隙。这些结果对 2 维光子晶体的制作和应用是很有帮助的。

关键词: 光电子学; 完全带隙; 平面波展开法; 复式晶格结构

中图分类号: O734 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1001-3806.2010.05.021

Research of complete band gap of 2-D compound square lattice structure

LIU Jun, YAN Ke-zhu, ZHAO Yong-lin, LI Kai-cai

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

Abstract: With the method of plane wave expansion, the band gap structures of 2-D photonic crystal were calculated. Connecting square dielectric cylinder of silicon with the grid structure, the band gap structure of square lattice was optimized to gain bigger full band gap. After adjusting the media at the appropriate width of dielectric cylinder of silicon and the width of grid, a larger complete band gap was obtained in the compound structure of square lattice. The results show that in case of square lattice structure, only the TE mode band gap is found in the square dielectric cylinder in $0.5a$ width (a is the lattice constant), only the band gap of TM mode is formed in the structure of the same periodic grid in $0.22a$ width. In the case of compound structure, adjusting the width of w and d appropriately, when media column width is $0.5a$ and the grid width is $0.05a$, a larger complete band gap in $0.0417\omega_c$ could be obtained (ω_c is center frequency). In the case of w constant, full band gap can be formed with the grid width of $0.04a \sim 0.11a$; in the case of the grid width d unchanged, full band gap can be found with the dielectric pillar width of $0.42a \sim 0.76a$; adjusting the dielectric constant within $4 \sim 36$, it can find different full band gaps are found with the dielectric constant of $8.41 \sim 36$. The results are very useful to the production and application of two-dimension photonic crystal.

Key words: optoelectronics; complete band gap; plane wave expansion method; compound lattice structure

引 言

光子晶体^[1-2]早在 20 世纪 80 年代就已被提出, 经历了 20 多年的发展, 已经成为光电子学科一个发展迅猛的重要研究领域。它是电介质材料周期性排列形成的人工微结构。电磁波在光子晶体内部的传输特性类似于电子在晶体中的运动特性。由于在不同介质界面

处介质对电磁波的布拉格散射, 电磁波将受到调制而形成能带结构, 并导致在带与带之间光子带隙的出现。光子带隙可分为两种: 一种是不完全带隙, 带隙只出现在某些特定的方向上; 另一种是完全带隙或绝对带隙, 即在各方向上都有带隙存在。如果光子落在绝对带隙内, 则此频率的光在该光子晶体中沿任何方向都不能传播, 这便形成了光子禁带。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。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。在光电子学

作者简介: 刘 军(1981-), 男, 硕士研究生, 主要从事光子晶体和电磁场理论研究方面的工作。

* 通讯联系人。E-mail: yankezhu@126.com

收稿日期: 2009-11-10; 收到修改稿日期: 2009-12-18

领域里,最具有应用潜力的是可见光和红外波段的3维绝对带隙的光子晶体,但是受到微细加工技术的限制,制作这种精细结构仍然是很困难的。相对于3维光子晶体,2维光子晶体的制作技术已经相当成熟,在这一频率范围内,2维光子晶体很容易构造光子禁带^[3]。一般情况下,光子晶体的带隙越宽,其性能就越好,所以,研究大带隙2维光子晶体的结构仍具有很大的实际意义,相关研究也已取得了许多成果。对于2维的光子晶体,当电磁波沿垂直于晶体柱体轴向传播时,电磁场可分解为E和H两种本征偏振模式的线性叠加,它们的电场矢量分别平行和垂直于柱体的轴向。只有两种模式的光子能带都具有带隙而且彼此重叠时,2维光子晶体才具有绝对带隙。所以在设计光子晶体中,有时寻找完全禁带的设计是必须的。在计算光子晶体带隙的方法中,有几种方法较为常用,例如平面波展开法^[4-6]、时域有限差分法^[7-10]、多重散射法^[11-12]等等。本文中采用平面波展开法对2维光子晶体的能带进行计算。采用栅格结构连接硅介质方形柱体对正方晶格结构的2维光子晶体进行了优化。通过调整栅格宽度和方形介质柱体宽度,找到了一组可以获得较大带隙2维光子晶体结构的最佳参量。在改变介电常数的大小,完全带隙的宽度呈现出一定的变化规律,对较大完全带隙材料的选取提供了参考。对获得较大完全带隙的光子晶体的制作而言,这些结果具有很好的指导意义。

1 理论分析与计算方法

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 表示时间。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, $\mathbf{K}=k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$, k_x, k_y 为 \mathbf{K} 在x方向,y方向的分量值, $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ 代表 \mathbf{E} 在x方向,y方向上的分量值。 $\mathbf{G}=h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2$, h_1, h_2 为整数, \mathbf{G} 为倒格矢, \mathbf{G}' 与 \mathbf{G} 的物理

意义相同,只是取值不同, c 为光速, ω 为频率, A 为振幅。 $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{S} (a_2^{(2)}, -a_1^{(2)})$, $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{S} (-a_2^{(1)}, a_1^{(1)})$,其中, S 为元胞面积, $a_j^{(i)}$ 为 $a^{(i)}$ 的第j个分量。

同理,在E偏振情况下,可得到如下本征方程:

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

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

式中, C 是个变换值, f 是填充率, ε 和 ε_b 分别为介质和背景材料的介电常数, \mathbf{R} 为正格矢, J_1 是Bessel函数。将(5)式代入(3)式和(4)式就可以得到E极化和H极化的本征频率 ω 。

2 2维光子晶体结构设计

在计算光子晶体能带结构中,平面波展开法直接应用结构的周期性,将Maxwell方程从实空间变换到离散Fourier空间,将能带计算简化成代数本征问题进行求解。本文中采用平面波展开法对2维光子晶体的能带进行计算。

以空气为背景材料其介电常数为1,由相互平行而沿轴向无限伸展的方形硅介质柱构成2维正方形的周期性阵列。图1中黑色部分为硅介质其介电常数为

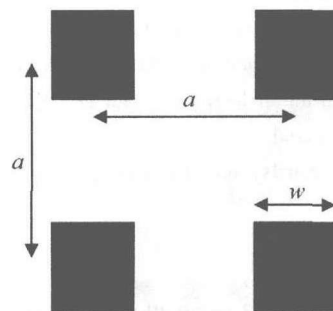


Fig. 1 The square lattice structure of square dielectric cylinder of silicon 12.069,相邻两柱的中心距 a 为晶格常量, w 是方形硅介质柱宽度,图1中硅介质柱的宽度为 $w=0.5a$ 。在图2中,纵坐标为归一化频率,横坐标的 X, M 和 Γ 是正方格子结构的第1布里渊区的各对称点。星号所在虚线代表TE模,三角形所在虚线代表TM模。从图中可以看出, $w=0.5a$ 时,在 a/λ 为0.28和0.47处(λ 是波长),TE模存在两个大带隙;但是对于TM模, $a/\lambda < 1.00$ 时不存在带隙。

图3为由硅介质栅格组成的正方晶格结构, a 为

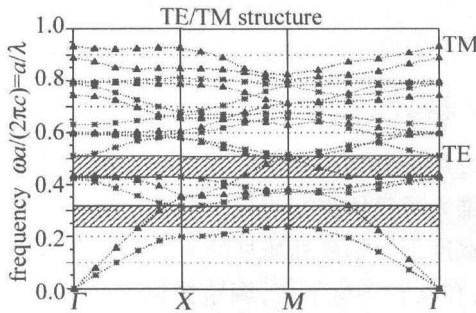


Fig. 2 The band-gap image of square dielectric cylinder width of $w = 0.5a$

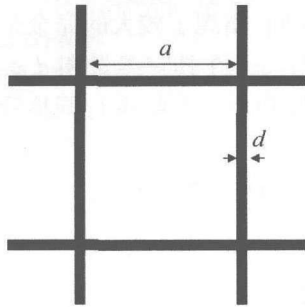


Fig. 3 The grid structure of dielectric silicon in air

栅格结构的晶格常数,其与图 1 方形硅介质柱的正方晶格结构是同周期的; d 为栅格宽度,当 $d = 0.22a$ 时其带隙图像如图 4 所示。在图 4 中纵坐标为归一化频率,

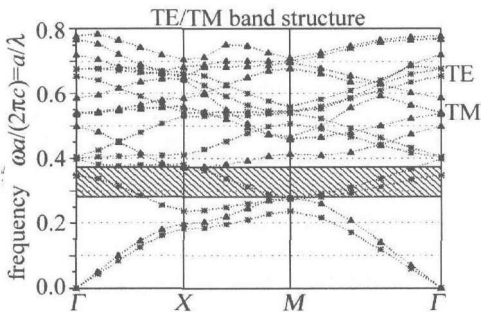


Fig. 4 The band gap image of the grid width of $d = 0.22a$

横坐标的是正方格子结构的第 1 布里渊区的各对称点。星号所在虚线代表 TE 模,三角形所在虚线代表 TM 模。从图 4 中可以看出,对 TM 模在 $a/\lambda = 0.33$ 处存在一条较大带隙,但是不存在 TE 模。

孤立的高介电常数区域有利于 E 偏振带隙的产生,互连的网格结构有助于 H 偏振带隙的产生。这说明图 1 中方形硅介质柱的正方晶格结构,在其硅介质柱宽度为 $w = 0.5a$ 时,不存在 H 偏振带隙是因为硅介质方形柱体是孤立的,而图 3 中硅介质正方栅格结构,在其宽度 $d = 0.05a$ 时,不存在 E 偏振的原因是所有高介电常数区域是相互连接的。为了设计具有较宽的绝对带隙的 2 维光子晶体,用栅格结构把同周期的介质柱连接起来,其相应的结构图像见图 5 和图 6。调整栅格宽度,使得介质柱之间既有联系又保持一定的独立。如果栅格的宽度适当,就可以得到具有较大绝对带隙的 2 维光子晶体结构。

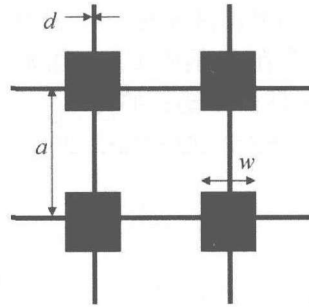


Fig. 5 The lattice structure of compound in air

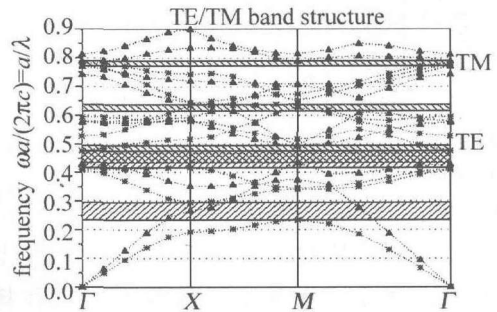


Fig. 6 The image of the band gap of the compound lattice structure of $w = 0.5a, d = 0.05a$

3 计算结果和分析

用平面波展开法进行计算,在硅介质正方形柱体宽度 $w = 0.5a$, 栅格宽度 $d = 0.05a$ 得到了较大的 2 维光子晶体绝对带隙。计算所得的能带结构如图 6 所示,绝对带隙宽度用归一化频率表示为 $\Delta\omega = 0.0417\omega_0$ 。这个结果比各向异性正方晶格结构方形硅介质柱的最大绝对带隙要大。完全带隙宽度与栅格宽度 d 的变化关系如图 7 所示。

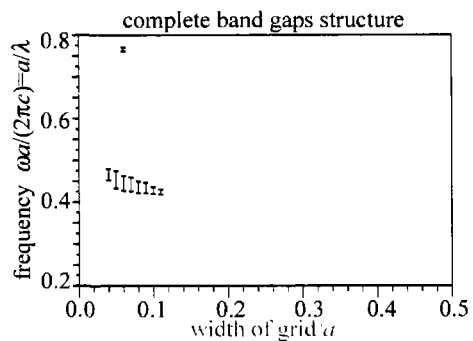


Fig. 7 The image of the complete band gap with the width of grid changing

在图 7 中,横坐标代表栅格宽度 d 的数值,纵坐标代表归一化频率。图中竖直线段代表各个频率段的完全带隙宽度。从图 7 可以看出,在硅介质柱宽度 w 和其它参量不变的情况下,改变硅介质栅格宽度 d 的大小,完全带隙出现了不同的宽度。在 $0.01a \sim 0.5a$ 的范围内调整栅格宽度,其它参量保持不变时,只在 $0.04a \sim 0.11a$ 的范围内出现不同宽度的完全带隙。这说明栅格宽度对 2 维光子晶体的绝对带隙的大小起重要作用。带隙宽度对栅格宽度的变化非常敏感,如果宽度太大,高介电常数区域缺乏相对独立性,导致 E

偏振带隙消失;如果栅格宽度太小,高介电常数区域缺乏联系,就不会存在 H 偏振带隙。图 8 为光子晶体带隙随正方形介质柱体宽度 w 的变化关系。

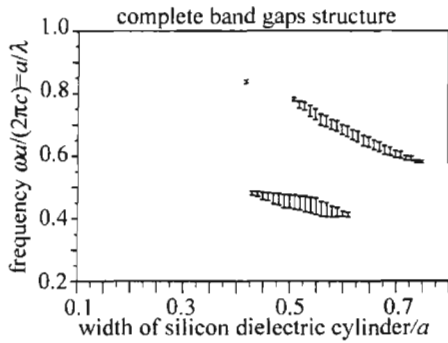


Fig. 8 The image of the complete band gap with the width of silicon dielectric cylinder changing

图 8 中,横坐标代表的是硅介质柱宽度 w 的数值,纵坐标代表的是归一化频率。图中竖直线段代表各个频率段的完全带隙。在栅格宽度 d 和其它参量不变的情况下, w 在 $0.1a \sim 1a$ 的范围内连续变化,只有 $0.42a \sim 0.76a$ 的范围存在完全带隙。在 $0.48a \sim 0.52a$ 的范围内完全带隙的宽度变化不大,这说明在制作这种光子晶体时,对硅介质柱宽度的精度要求不高。由于栅格宽度 d 不变,其高介电常数区域之间的联系性是一定的;调整硅介质柱宽度 w 的大小,导致高介电常数区域的独立性的变化,从而影响复式结构的完全带隙。其完全带隙变化规律如图 9 所示。

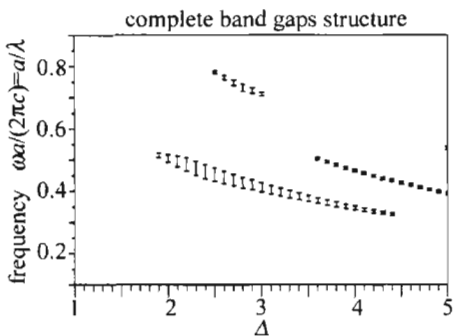


Fig. 9 The image of the complete band gap with the $w = 0.5a$, $d = 0.05a$ with the Δ changing

在图 9 中可以看出,横坐标 Δ 为介质与背景材料的折射率差;纵坐标代表的是归一化频率。图中竖直线段代表各个频率段的完全带隙。在 $w = 0.5a$, $d = 0.05a$ 时,只调整介电常数的大小,介质柱与栅格的复式结构产生了不同的完全带隙宽度。介电常数在 $4 \sim 36$ 的范围内,复式结构的完全带隙呈现一定规律。随着 Δ 在 $1.9 \sim 5$ 的变化,即介电常数在 $8.41 \sim 36$ 的范围内变化会出现不同宽度的完全带隙。由于介电常数

的改变会影响光子晶体的对称性,这才会使得完全带隙出现不同的宽度。这对光子晶体制备具有参考价值。

4 结论

通过用栅格结构连接同周期的方形硅质柱对正方形结构 2 维光子晶体进行优化。采用平面波展开法对不同栅格宽度下方形硅介质柱的完全带隙进行计算。结果表明,在其它参量不变,调整栅格宽度 d 的大小,随着 d 的变化产生了不同宽度的完全带隙。当 $d = 0.05a$, $w = 0.5a$ 时,出现了较大的完全带隙,其带隙宽度是 $\Delta\omega = 0.0417\omega_c$;在其它参量和 d 不变的情况下,分别对 w 的宽度和介电常数进行调整后,完全带隙出现了不同的变化规律。这一结果对以后的大带隙光子晶体的制备和应用具有参考价值。

参考文献

- [1] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric super lattices[J]. Phys Rev Lett,1987,58(23):2486-2489.
- [2] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. Phys Rev Lett,1987,58(20):2059-2062.
- [3] 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.
- [4] HO K M, CHAN C T, SOUKOULIS C M, et al. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures[J]. Phys Rev Lett,1990,65(25):3152-3155.
- [5] LEUNG K M, LIU Y F. Full vector wave calculation of photonic band structures in-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] CHAN C T, YU Q L, HO K M, et al. Order-N spectral method for electromagnetic waves[J]. Phys Rev,1995, B51(23):16635-16642.
- [8] 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.
- [9] RONG Ch C, YAN K Zh, XIE Y M, et al. The distribution of the electric field in two-dimension photonic crystals[J]. Laser Technology,2008,32(1):76-79 (in Chinese).
- [10] 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).
- [11] 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.
- [12] LEUNG K M, QIU Y. Multiple-scattering calculation of the two-dimensional photonic band structure[J]. Phys Rev,1993, B48(11):7767-7771.