

由介质球构成的三维光子晶体能带结构的平面波研究*

董慧媛^{1)†} 刘 楣¹⁾ 吴宗汉¹⁾ 汪 静²⁾ 王振林³⁾

¹⁾ 东南大学物理系, 南京 210096)

²⁾ 东南大学生物医学系, 南京 210096)

³⁾ 南京大学固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

(2004 年 9 月 27 日收到, 2004 年 11 月 10 日收到修改稿)

采用平面波展开方法计算由介质球构成的面心立方三维光子晶体的能带结构及透射性质. 选用合适的平面波个数研究了 SiO_2 蛋白石结构光子晶体的能带及透射性质, 并采用转移矩阵方法计算了电磁波沿 $[111]$ 方向的传输特性, 两种方法得到的结果相符合. 还研究了反蛋白石结构光子晶体的全带隙. 最后, 研究了壳层介质球构成的面心立方结构光子晶体的能带特性. 发现在高介电球外面包裹适当厚度的低介电常数介质壳层所构成的光子晶体, 可以增大 L 点相对带隙宽度 50%, 并证明了其优化内外半径比值约为 0.69.

关键词: 光子晶体, 光子能带, 平面波展开方法, Core-Shell 结构

PACC: 4270Q, 7820P, 7125P, 7115B

1. 引 言

各种特定结构的三维光子晶体的能带及其传输特性研究具有极其重要的应用前景和基础研究价值^[1-3]. 平面波展开方法是研究光子晶体能带结构的有效方法之一^[4-7]. 对于由介质球构成的光子晶体, 考虑到周期性排列的球形介质电场的非连续性, 用磁场强度矢量 (H) 平面波方法比用电场强度矢量 (E) 方法的收敛性更好. 但对复杂结构, 在用平面波方法研究三维光子晶体的能带结构时必须在展开项中保留足够多的平面波个数 (N), 以保证频率本征值解的收敛性^[6,7].

光子晶体带隙宽度主要取决于维度、对称性、介质填充率、介电常数比等参数. 构成光子晶体材料的介电常数对比度越高, 出现宽带隙和完全带隙的可能性越大. 因此可以通过提高介电常数比来实现宽带隙和全带隙的光子晶体. 反蛋白石结构是一个很好的能获得全方位光子带隙的三维光子晶体模型. 最近, 采用平面波方法和 KKR 方法^[8,9] 已证明反蛋白石结构在足够高的介电常数比的情况下可以得到

全方位光子带隙.

本文应用平面波展开法数值研究了由介质球构成的面心立方 (fcc) 结构三维光子晶体的能带及传输特性. 首先选用合适的平面波个数 ($N = 1639$) 研究了蛋白石光子晶体的能带结构, 并用转移矩阵法研究了其沿 L (即密勒指数 $[111]$ 方向) 的传输特性, 发现二者符合得很好. 然后研究了平面波的收敛性对反蛋白石结构光子晶体全带隙的影响, 在应用足够多的平面波个数 ($N > 2637$) 计算时, 可以得到稳定的能带结构, 其全带隙相对宽度稳定值大于 1.55%. 最后研究了 fcc 排列壳层 (Core-Shell) 介质球构成的光子晶体能带结构. 发现采用 Core-Shell 结构虽然对形成完全带隙没有作用, 但能大大增加沿 L 方向的方向带隙. 我们计算了 L 方向带隙的相对带宽与壳层内外半径之比, 内外介电常数之比的依赖关系, 发现在内核的介电常数大于包裹层介电常数的情况下, 通过改变壳层球的内外半径之比, 可以使得沿 L 对称点方向的相对带隙增宽, 在 $R_2/R_1 \approx 0.69$ 时, 相对带宽被加强了 50% 左右; 而当内核的介电常数小于外包层的介电常数时, 相对带宽被减弱. 这与用 KKR 方法得到的结果相符合. 我们还

* 国家自然科学基金 (批准号: 10174011, 10274008) 和江苏省自然科学基金 (批准号: BK2001002) 资助的课题.

† E-mail: dong.huiyuan@163.com

发现最佳壳层内外径比值虽随介电比略有变化,但其值近似为 0.69.

2. 三维光子晶体能带结构的平面波计算方法

平面波法是一种计算三维光子晶体能带结构的有效方法.光子晶体中电磁波的传播由 Maxwell 方程组描述:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times E(\mathbf{r}, t)] &= -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2}, \\ \nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times H(\mathbf{r}, t) \right] &= -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 H(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \quad (1) \end{aligned}$$

其中,相对介电函数 $\epsilon(\mathbf{r})$ 是空间位置的函数.假设光子晶体为非磁性介质,因此磁导率 $\mu(\mathbf{r})=1$.假设以上方程组具有波动形式的解

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= E(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \\ H(\mathbf{r}, t) &= H(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \end{aligned}$$

则方程(1)可写为

$$\begin{aligned} \theta_E E(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times E(\mathbf{r})] = \frac{\omega^2}{c^2} E(\mathbf{r}), \\ \theta_H H(\mathbf{r}, t) &= \nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times H(\mathbf{r}) \right] = \frac{\epsilon^2}{c^2} H(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2)$$

容易证明, θ_E 不是厄密算符,其本征值不正交,而 θ_H 是厄密算符.因此,在本文中可以通过方程(2)中

磁场(H)波动方程来求电磁场的解.

由于在周期性介质中,介电函数满足 $\epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = \epsilon(\mathbf{r})$ ($i=1, 2, 3$),我们将介电函数的倒数 $f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})}$ 及电磁波的 H 分量在倒格子空间作傅里叶变换

$$f(\mathbf{r}) = \sum_G f(G) e^{iG \cdot \mathbf{r}},$$

$$H(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \alpha(\mathbf{k}, \lambda) h(\mathbf{k}, \lambda) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}},$$

其中 $\alpha(\mathbf{k}, \lambda)$ 表示波矢为 \mathbf{k} 的 H 分量平面波的两个偏振方向, $h(\mathbf{k}, \lambda)$ 是对应 $\alpha(\mathbf{k}, \lambda)$ 方向的振幅,并且有 $\mathbf{k} \cdot \alpha(\mathbf{k}, \lambda) = 0$.作傅里叶变换后,方程(2)中第二个公式经过化简后得到一系列线性方程

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda', G'} \theta^K(\lambda, G, \lambda', G') h(K + G', \lambda') \\ = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 h(K + G, \lambda), \end{aligned} \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} \theta^K(\lambda, G, \lambda', G') \\ = [(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \times \alpha(\mathbf{K} + \mathbf{G}, \lambda)] \\ \times [(\mathbf{K} + \mathbf{G}') \times \alpha(\mathbf{K} + \mathbf{G}', \lambda')] (G - G'). \end{aligned}$$

对于给定的 \mathbf{k} 和 N 个倒格矢 \mathbf{G} , 可以通过求解方程组(3)式,得到 \mathbf{K} 和 ω 的关系,最终求得三维光子晶体的能带结构.

对于 fcc 结构的光子晶体, $f(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ 具有如下的特殊形式:

$$f(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_b} + \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b} \right) P_f, & \mathbf{G} = 0, \\ 3P_f \left(\frac{1}{\epsilon_b} - \frac{1}{\epsilon_a} \right) \frac{1}{(GR)^3} [GR \cos(GR) - \sin(GR)], & \mathbf{G} \neq 0, \end{cases}$$

其中 ϵ_a 是介质球的介电常数, ϵ_b 是背景的介电常数, R 为介质球半径, P_f 表示光子晶体中介质的填充因子,是表示光子晶体材料结构的一个重要参数.

3. 由 SiO_2 介质球构成的蛋白石光子晶体的能带特性

首先,用平面波方法研究了蛋白石光子晶体的能带结构.蛋白石结构是 SiO_2 按面心立方排列而成的. SiO_2 介电常数为 2.1025 ($n=1.45$), 空气的介电常数为 1.0, 取晶格常数为 282nm. 考虑到介质球按

照密堆积方式排列,因此填充因子为 $P_f = 74\%$.考虑到平面波收敛性对结果的影响^[6,7],为了保证计算的截断误差较小,我们选用平面波个数 $N = 1639$.计算得到的蛋白石光子晶体的能带结构如图 1(a)所示.图中横坐标表示布里渊区的高对称点,纵坐标表示电磁波的约化频率.从图中能带结构可以看到,由于 SiO_2 与空气的介电常数对比小,以及 fcc 结构的高对称性,导致在 X 点和 W 点能量出现简并的现象,使得蛋白石光子晶体没有全带隙存在.而在 L 点的能带结构表明,约化频率为 0.64—0.68 之间存在一个方向带隙,即在晶体中沿 $[111]$ 方向传播的该

频率的电磁波被禁止传播.

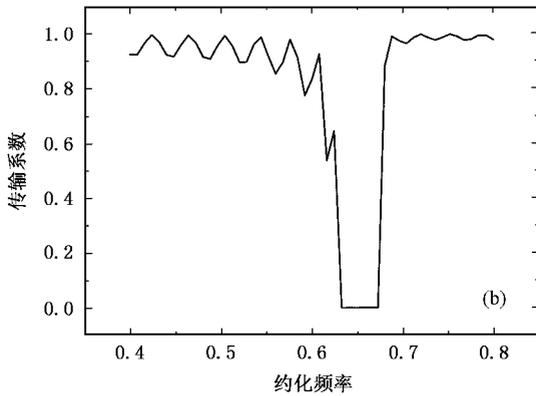
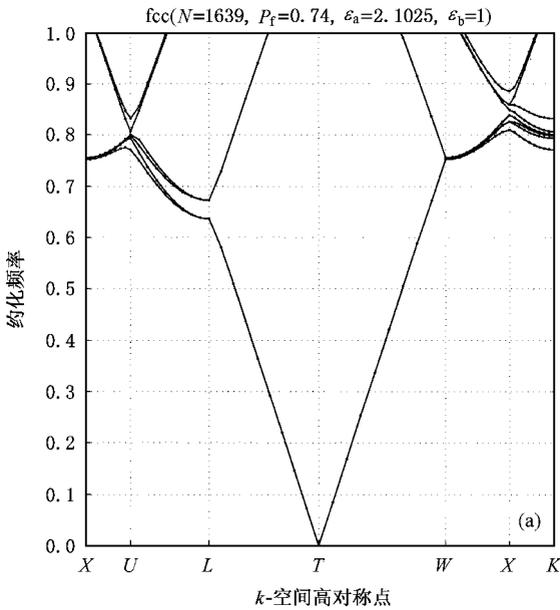


图 1 (a)由 SiO₂ 介质球构成的蛋白石光子晶体的能带结构; (b)电磁波沿 [111] 方向入射蛋白石光子晶体的透射系数与频率的关系

我们进一步采用转移矩阵法计算了沿 [111] 方向入射的电磁波在该光子晶体中的透射系数与频率的关系,如图 1(b)所示.样品是由 20 层沿 (111) 面的介质球叠加而成.从图 1(b)中可以看出,约化频率在 0.4—0.6 范围内,电磁波的透射系数呈振荡分布,这是由于层与层间的干涉引起的.当频率增加到 0.63—0.67 时透射系数迅速衰减为零,这是由于在这个频率范围内该晶体存在一个光子带隙,从而使沿 [111] 方向对应 0.63—0.67 频率的电磁波被禁止传播.这个频率范围与图 1(a)中用平面波法得到的能带结果基本符合.当频率进一步增大时,传输系数

又恢复至 1.0 附近.

4. 反蛋白石光子晶体的全带隙研究

我们采用平面波展开方法还计算了反蛋白石光子晶体能带结构.采用的模型是以 SiO₂ 介质球按 fcc 排列的晶体结构为模板,在原本空气的部分注入高介电物质,然后把 SiO₂ 介质球腐蚀掉,这样得到的即为反蛋白石结构.我们选取的高介电物质的介电常数 $\epsilon_b = 10$,空气球的介电常数 $\epsilon_a = 1.0$,填充因子 $P_f = 0.74$ (对应于空气球密堆情形).

我们选用 1639 个平面波来计算反蛋白石光子晶体能带结构,如图 2 所示.从图中可以看出,第 8, 9 两能级之间是否存在完全带隙主要取决于其在 X 点和 W 点频率的相对位置.此时 X 点的第 9 能级的约化频率 $\omega_{X9} = 0.927$,W 点第 8 能级的约化频率 $\omega_{W8} = 0.919$.可以看出在 8, 9 能级间已存在完全带隙.我们定义 X, W 点的相对带宽 $\Delta\omega_{W8, X9} = 2|\omega_{X9} - \omega_{W8}|/|\omega_{X9} + \omega_{W8}|$,则相对带宽 $\Delta\omega_{W8, X9} = 0.84\%$.当继续增大平面波个数直至 2891 时,得到相对带宽 $\Delta\omega_{W8, X9}$ 值趋于饱和,其相对带宽稳定值大约 1.55%.

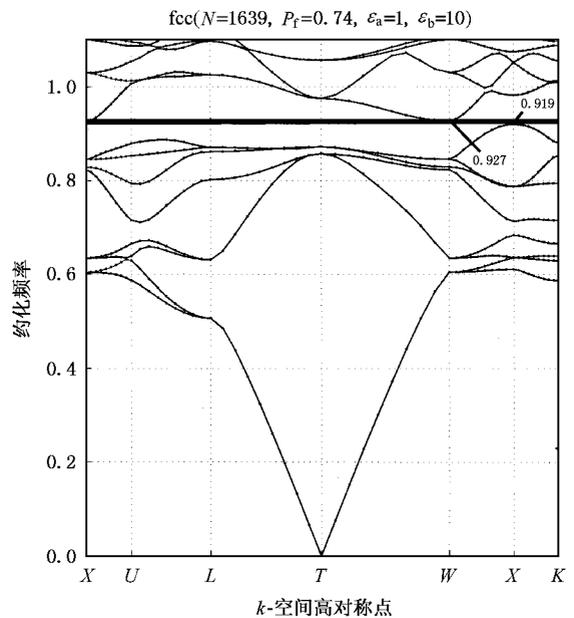


图 2 反蛋白石光子晶体的能带结构, $\epsilon_b = 10, \epsilon_a = 1.0, P_f = 0.74$.计算中采用的截断近似平面波数 $N = 1639$

5. 由壳层介质球构成的蛋白石光子晶体的能带特性

具有壳层结构的复合介质球是胶体材料领域的研究热点. 我们将 SiO_2 介质球用壳层复合介质球来代替, 在空气中按 fcc 密堆形成光子晶体. 定义壳层 (Core-Shell) 结构的外半径为 R_1 、介电常数为 ϵ_1 , 内

$$f(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_b} + \left(\frac{1}{\epsilon_1} - \frac{1}{\epsilon_b}\right) P_{11} + \left(\frac{1}{\epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_1}\right) P_{12} & G = 0, \\ 3P_{11} \left(\frac{1}{\epsilon_b} - \frac{1}{\epsilon_1}\right) \frac{1}{(GR_1)^3} [GR_1 \cos(GR_1) - \sin(GR_1)] \\ + 3P_{12} \left(\frac{1}{\epsilon_1} - \frac{1}{\epsilon_2}\right) \frac{1}{(GR_2)^3} [GR_2 \cos(GR_2) - \sin(GR_2)] & G \neq 0, \end{cases}$$

式中 $P_{11} = V_{R1}/V_{\text{cell}} = 0.74$, $P_{12} = V_{R2}/V_{\text{cell}}$.

对于由 Core-Shell 复合介质球构成的光子晶体, 计算了复合介质球在不同的内外半径比, 以及不同的内外介电常数比时, L 点的相对带宽变化, 其结果用图 3 表示. 图 3(a) 中, 实线表示固定介电常数 $\epsilon_1 = 2.1024$ ($n = 1.45$), $\epsilon_2 = 4$ ($n = 2$), 即在 $\epsilon_1 < \epsilon_2$ 时 L 点的相对带宽随 R_2/R_1 变化. 虚线对应介电常数 $\epsilon_1 = 4$, $\epsilon_2 = 2.1024$, 即在 $\epsilon_1 > \epsilon_2$ 时的 L 点的相对带宽随 R_2/R_1 变化. 从图中可以看到, 当 $\epsilon_1 < \epsilon_2$, $R_2/R_1 \approx 0.69$ 时相对带宽比采用高介电常数实心介质球得到的方向带隙宽度加强了 50% 左右. 而当 $\epsilon_1 > \epsilon_2$ 时, 所得到的相对带宽不会超过由单一材料 (ϵ_1 或者 ϵ_2) 介质球所得到的相对带隙宽度. 这与采用 KKR 方法得到的结果相符合^[8]. 由此, 我们可以得出结论: 通过在高介电常数球外面包裹适当厚度的低介电常数壳层, 可以获得比采用高介电常数实心球所得到的方向带隙宽度更大, 即采用低介电的介质涂层可以增大 L 点相对带隙.

为了找出 Core-Shell 介质球在用不同介电常数涂层时, 最佳介质球内外半径比的变化, 我们固定介质球 $\epsilon_2 = 4$, 改变涂层 ϵ_1 值, 计算 L 点相对带隙宽度的变化, 确定最佳内外半径之比值. 我们将得到的最佳内外径之比值与 ϵ_1/ϵ_2 的关系曲线表示在图 3(b) 中. 可以看出随着 ϵ_1/ϵ_2 值从 0.35 增大到 0.65, 最佳内外径比值 R_2/R_1 从 0.684 变化到 0.700. 我们发现介质球最佳内外径比值虽然有微弱

半径为 R_2 ($R_1 > R_2$) 介电常数为 ϵ_2 , 研究这种复合介质球光子晶体的能带特性. 文献 [8] 采用 KKR 方法计算了这类体系的能带结构, 发现采用 Core-Shell 结构并不能形成完全带隙, 但是它能增加 L 方向的带隙的带宽.

用平面波法研究 Core-Shell 介质球光子晶体时, 其介电函数的傅里叶展开式系数可表示为

的增大, 但其值可确定在 0.69 附近.

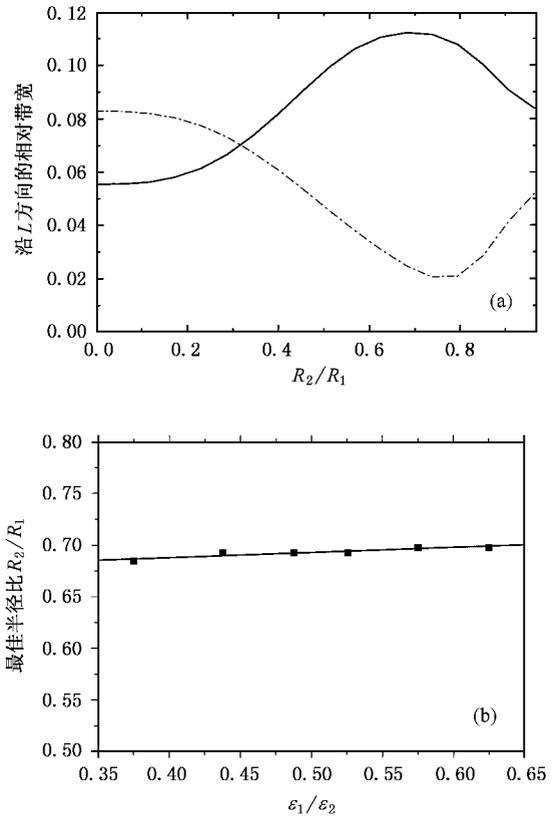


图 3 (a) 采用壳层结构复合介质球所得到的 L 对称点的相对带宽随 R_2/R_1 的变化曲线 (实线对应 $\epsilon_1 = 2.1024$ ($n = 1.45$), $\epsilon_2 = 4$ ($n = 2$) 即 $\epsilon_1 < \epsilon_2$ 时的情况, 虚线对应 $\epsilon_1 = 4$, $\epsilon_2 = 2.1024$ 即 $\epsilon_1 > \epsilon_2$ 时的情况) (b) 复合介质球的最佳内外半径比随 ϵ_1/ϵ_2 变化关系 ($\epsilon_2 = 4$)

6. 结 论

本文首先用平面波方法和转移矩阵法研究了由 SiO_2 介质球构成的蛋白石光子晶体的能带结构及透射性质, 并采用转移矩阵方法计算了电磁波沿 $[111]$ 方向的传输特性, 两种方法得到的结果一致. 结果表明约化频率为 0.64—0.68 之间存在一个 L 方向带隙, 即在晶体中沿 $[111]$ 方向传播的该频率的电磁波被禁止传播.

然后用平面波方法计算了 SiO_2 反蛋白石结构光子晶体的全带隙. 发现当 N 大于 1639 时, 计算得到在第 8 和第 9 能带之间的完全带隙, 其相对带宽

等于 0.84%. 当 N 大于 2637 时, 完全带隙趋于稳定值, 相对带宽值约为 1.55%.

最后, 我们研究了由 Core-Shell 复合介质球构成的光子晶体沿 L 对称点的相对带宽与 Core-Shell 的内外半径比和内外介电常数比的关系, 发现在内核介质的介电常数大于包裹层的介电常数情况下, 通过改变壳层球的内外半径之比, 可以使得沿 L 对称点的相对带隙增宽. 在 $\epsilon_1 < \epsilon_2$, $R_2/R_1 \approx 0.69$ 时, 其相对带宽比单一高介电常数介质球光子晶体加强了 50% 左右, 而当 $\epsilon_1 > \epsilon_2$ 时, 相对带宽被减弱. 同时我们发现 Core-Shell 最佳内外径比值虽然随介电比的改变有微弱变化, 但其值可确定为 0.69.

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
 [2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
 [3] Wang Z L, Chan C T, Zhang W Y, Ming N B and Sheng P 2001 *Phys. Rev. B* **64** 113108
 [4] Leung K M and Liu Y F 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2646
 [5] Ho K M, Chan C T and Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65**

3152

- [6] Sözüer H S, Haus J W and Inguva R 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13962
 [7] Wu L 2003 *Chin. Phys.* **12** 642
 [8] Moroz A and Sommers C J 1999 *Phys. Condens. Matter* **11** 997
 [9] Biswas R, Sigalas M M, Subramania G and Ho K M 1998 *Phys. Rev. B* **57** 3701

Band structures of three-dimensional photonic crystals consisting of dielectric spheres : a plane-wave approach ^{*}

Dong Hui-Yuan^{1)†} Liu Mei¹⁾ Wu Zong-Han¹⁾ Wang Jing²⁾ Wang Zhen-Lin³⁾

¹⁾ (Department of Physics , Southeast University , Nanjing 210096 , China)

²⁾ (Department of Biology and Medicine , Southeast University , Nanjing 210096 , China)

³⁾ (National Laboratory of Solid State Microstructures , Nanjing University , Nanjing 210093 , China)

(Received 27 September 2004 ; revised manuscript received 10 November 2004)

Abstract

Using the plane-wave method , we calculate the band structures and transmission characteristics of the three-dimensional fcc photonic crystals. For a SiO₂ opal photonic crystal , we calculate the energy spectrum and the transmission feature of electromagnetic waves along the [111] direction using both the plane-wave method and the transfer-matrix method , the obtained results are consistent with each other. For a full band gap studies of the inverse-opal structure , the convergence effect in the plane-wave method on the calculation is discussed. For an fcc lattice of core-shell sphere , it is shown that the relative *L*-gap width of a suitable coating of dielectric spheres of a lower dielectric material can increase by 50% as compared with that of homogeneous high - dielectric spheres. We also find that the optimum radius ratio between interior and entire spheres is 0.69.

Keywords : photonic crystal , photonic band gap , plane wave method , Core-Shell

PACC : 4270Q , 7820P , 7125P , 7115B

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10174011 and 10274008) and the Natural Science Foundation of Jiangsu , China (Grant No. BK2001002).

[†] E-mail : dong.huiyuan@163.com