

# 二维棋盘格子复式晶格的完全光子带隙研究<sup>\*</sup>

汪静丽 陈鹤鸣<sup>†</sup>

(南京邮电大学光电工程学院光纤通信研究所,南京 210003)

(2006 年 4 月 18 日收到,2006 年 6 月 26 日收到修改稿)

设计了一种棋盘格子复式晶格的二维光子晶体.在二维正方形格子中,把截面为正方形的柱子旋转 45°,同时在每个原胞中心引入一个圆形截面的柱子构成的光子晶体结构.用平面波展开计算棋盘格子复式晶格的完全光子带隙.结果表明,棋盘格子复式晶格的完全光子带隙的  $\Delta\omega/\omega$  比值几乎是普通棋盘格子的 5 倍,完全光子带隙的个数也增加.与其他复式结构相比较,发现其最佳的  $\Delta\omega/\omega$  比值是一类粗锐复合结构光子晶体的 2.1 倍.

关键词:二维光子晶体,复式晶格,完全光子带隙

PACC:4270Q,7820

## 1. 引言

近年来光子晶体引起了人们的广泛关注<sup>[1-4]</sup>,所谓光子晶体就是一种电介质在另一种电介质中的周期排列,从而形成了介电常数的周期性调制.光子晶体最重要的一个特征就是存在光子带隙.尽管三维光子带隙结构具有重要的应用潜力,但是在可见光或者红外线区域制作具有光子带隙的三维光子晶体仍然是一个无法克服的困难.相反地,人们已经在这一区域成功制造了具有光子带隙的二维光子晶体<sup>[5,6]</sup>.而且二维光子晶体也具有重要的应用,例如在激光二极管中的反馈反射镜<sup>[7]</sup>,偏振分光镜<sup>[8]</sup>,微谐振腔,品质优良的滤波器,高效率发光二极管,集成光路等.

为了获得比较理想的二维光子晶体带隙结构,人们希望它的 E 偏振和 H 偏振的光子带隙能相互重叠,即产生完全带隙.因为在完全带隙里面引入缺陷态后产生的传导模<sup>[9,10]</sup>,对于实际应用具有重要价值.要在二维光子晶体中获得完全带隙,就要提高晶体中能带的简并<sup>[11]</sup>,打破光子晶体的对称性<sup>[12,13]</sup>,一般可以通过在晶体原胞内引入多种原子构成复式结构<sup>[13,14]</sup>,或者是利用材料介电函数的各向异性来降低晶体结构的对称性等来实现<sup>[15,16]</sup>.

文献<sup>[13]</sup>提出了棋盘格子结构,文献<sup>[17]</sup>提出

复式晶胞结构.本文提出一种棋盘格子复式晶格结构.首先应用平面波展开法对棋盘格子结构光子晶体的完全带隙进行了分析,然后对本文所提出的棋盘格子复式晶格结构的完全带隙进行了计算,结果表明,棋盘格子复式晶格的完全带隙的  $\Delta\omega/\omega$  比值几乎是普通棋盘格子的 5 倍,完全带隙的个数也增加.而且与一类粗锐复合结构光子晶体相比较,本文提出的棋盘格子复式晶格结构的完全带隙最佳的  $\Delta\omega/\omega$  比值是一类粗锐复合结构光子晶体<sup>[14]</sup>的 2.1 倍.

## 2. 模型建立与理论分析

首先简单介绍棋盘格子结构<sup>[13]</sup>,它由截面为正方形的柱子(既可以是空气柱也可以是介质柱)绕着正方形中心的轴旋转 45°构成,如图 1 所示.这种结构的特点是它的填充比  $f$  与格子常数  $a$  和柱子的对角线  $b$  有关<sup>[6]</sup>,即  $f = b^2/(2a^2)$  (在图 1(a)所示的介质柱的情况下)或  $f = 1 - b^2/(2a^2)$  (在图 1(b)所示的空气柱的情况下).对于紧凑条件  $b = a$ ,或者  $f = 0.5$  时,图 1(a)和 1(b)所示的两种结构相同.本文提出的棋盘格子复式晶格结构如图 2 所示,在棋盘格子结构的每个原胞中心引入一个圆形截面的柱子构成复式晶格.

进行数值模拟的时候,采用平面波方法(plane

<sup>\*</sup> 江苏省高技术研究计划项目(批准号:BG2005039)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人.

Wave Method ,PWM)<sup>[18]</sup>。由电磁场理论,在介电常数呈周期性分布的介质中,磁场服从 Maxwell 方程,可以表示为

$$\nabla \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

且有横向条件

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0. \quad (2)$$

在光子晶体中,假设介质是无穷周期性介质,利用 Bloch 理论,可以把模式展开为一系列无穷平面波的和

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}_i, \lambda} h(\mathbf{G}_i, \lambda) \hat{\epsilon}_\lambda e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_i) \cdot \mathbf{r}}, \quad (3)$$

式中  $\lambda = 1, 2, \mathbf{k}$  是真空中波矢,  $\mathbf{G}$  是倒格矢。使用傅里叶变换,介电函数可以写成

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}_i} \epsilon(\mathbf{G}_i) e^{i\mathbf{G}_i \cdot \mathbf{r}}. \quad (4)$$

利用(2)(3)和(4)式(1)式可以化为

$$\sum_{\mathbf{G}'} | \mathbf{k} + \mathbf{G} || \mathbf{k} + \mathbf{G}' | \epsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \times \begin{bmatrix} \hat{e}_2 \cdot \hat{e}'_2 & -\hat{e}_2 \cdot \hat{e}'_1 \\ -\hat{e}_1 \cdot \hat{e}'_2 & \hat{e}_1 \cdot \hat{e}'_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h'_1(\mathbf{G}') \\ h'_2(\mathbf{G}') \end{bmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{bmatrix} h_1(\mathbf{G}) \\ h_2(\mathbf{G}) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

这是一个标准的本征方程问题。如果用了  $N$  个平面波,就得到了  $2N$  个线性方程。

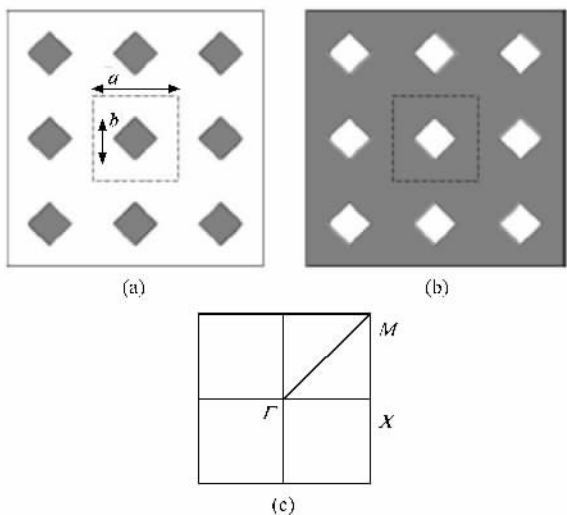


图1 棋盘格子 (a)介质柱在空气中;(b)空气柱在介质中,其中虚线标出了单位原胞,  $a$  是单位原胞的长度,  $b$  是柱子的对角线长度;(c)布里渊区域,  $\Gamma, X, M$  是它的对称点

对于二维光子晶体,通常假设介电常数在  $(\hat{x}, \hat{y})$  平面内是周期性分布的,而在  $\hat{z}$  方向是均匀的  $\epsilon = \epsilon(x, y)$ 。考虑到在平面内传播时  $K_z = 0$ , 镜

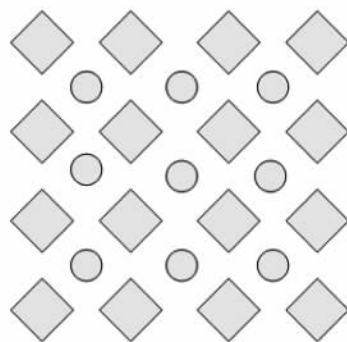


图2 棋盘格子复式晶格结构,格子常数为  $a$ ,正方形截面的对角线长度为  $b$ ,引入的圆柱截面的半径为  $R$

向对称使电磁场简化为两种模式:TE 模和 TM 模。于是式(5)就可以化为如下两种形式:

TM:

$$\sum_{\mathbf{G}'} | \mathbf{k} + \mathbf{G} || \mathbf{k} + \mathbf{G}' | \epsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') h_1(\mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} h_1(\mathbf{G}), \quad (6)$$

TE:

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \epsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') h_2(\mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} h_2(\mathbf{G}), \quad (7)$$

求解上述两个方程的关键是要求出  $\epsilon(\mathbf{G})$ ,对于图1结构可以采用如下形式:

$$\begin{aligned} \epsilon_{0,0} &= \epsilon f + (1 - f) \quad \mathbf{G} = 0, \\ \epsilon_{G_x, G_y} &= 4(\epsilon - 1) \frac{\cos(G_y b/2) - \cos(G_x b/2)}{a^2(G_x^2 - G_y^2)}, \\ \epsilon_{G_x \neq G_y} &= (\epsilon - 1)b \frac{\sin(G_x b/2)}{a^2 G_x} \quad \mathbf{G} \neq 0. \end{aligned} \quad (8)$$

对于图2结构,其  $\epsilon(\mathbf{G})$  形式如下:

$$\begin{aligned} \epsilon_{0,0} &= \epsilon f + (1 - f) \quad \mathbf{G} = 0, \\ \epsilon_{G_x, G_y} &= (\epsilon - 1) \left[ 4 \frac{\cos(G_y b/2) - \cos(G_x b/2)}{a^2(G_x^2 - G_y^2)} + \frac{2\pi}{s} G^{-1} R J_1(GR) \cos \frac{a(G_x + G_y)}{2} \right], \\ \epsilon_{G_x = -G_y} &= (\epsilon - 1) \left[ b \frac{\sin(G_x b/2)}{a^2 G_x} + \frac{2\pi}{a^2} G^{-1} R J_1(GR) \right] \\ &\quad (G_y = -G_x), \\ \epsilon_{G_x, G_x} &= (\epsilon - 1) \left[ b \frac{\sin(G_x b/2)}{a^2 G_x} + \frac{2\pi}{a^2} G^{-1} R J_1(GR) \cos(a G_x) \right] \\ &\quad (G_y = G_x), \mathbf{G} \neq 0, \end{aligned} \quad (9)$$

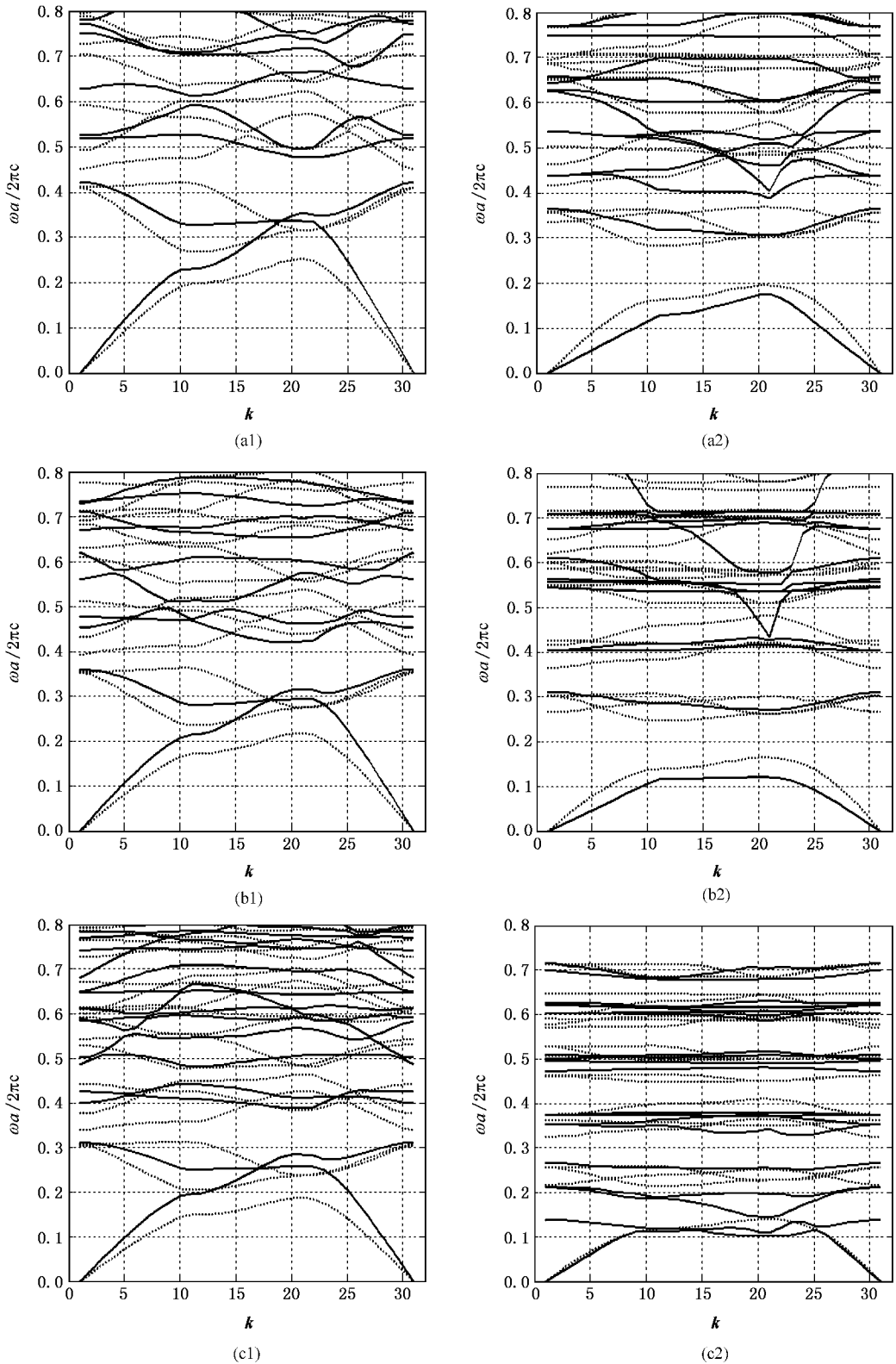


图3 棋盘格子与棋盘格子复式晶格结构的光子带隙,其中(a1)(b1)(c1)是棋盘格子的带隙图,参数分别为(a1) $\epsilon = 8.9$ ,  $f = 0.45$  (b1) $\epsilon = 12$ ,  $f = 0.45$  (c1) $\epsilon = 16$ ,  $f = 0.45$ . (a2) (b2) (c2)是棋盘格子复式晶格结构的带隙图,参数分别为:(a2) $\epsilon = 8.9$ ,  $f = 0.45$ ,  $R = 0.85b$  (b2) $\epsilon = 12$ ,  $f = 0.45$ ,  $R = 0.865b$  (c2) $\epsilon = 16$ ,  $f = 0.45$ ,  $R = 0.89b$ . 其中虚线(实线)代表TM(TE)模式

其中  $G_x$  和  $G_y$  分别是  $G$  沿着  $\hat{x}$  和  $\hat{y}$  方向的分量,在式(8)和(9)中  $G = |G|$ .

### 3. 仿真结果及讨论

棋盘格子的一个重要特征是:对介质柱重叠的结构( $b > a, f > 0.5$ )与介质柱没有重叠的结构( $b < a$ ,且与前一种情况具有相同的  $f$  值)是等同的.本文仅仅讨论介质柱没有重叠的情况 [ $f < 0.5$ ,图1(a)或者空气柱 [ $f > 0.5$ ,图1(b)].对于特殊情况在  $f = 0.5$  时,图1中介质柱和空气柱的情况是等同的,这一紧凑条件使得介质柱和空气柱互换时格子都保持不变.

为了便于进行比较,在对普通的棋盘格子和棋盘格子复式晶格结构进行仿真时采用相同的参数.考虑介质柱在空气中的情况,采用了289个平面波,介质柱选择以下三种材料: $\epsilon = 8.9$ 的氧化铝, $\epsilon = 12$ 的砷化镓和  $\epsilon = 16$ 的锗.图3给出了仿真结果,图3(a1)(b1)和(c1)分别表示介电常数为  $\epsilon = 8.9$ 的氧化铝、介电常数为  $\epsilon = 12$ 的砷化镓和介电常数为  $\epsilon = 16$ 的锗在  $f = 0.45$  时的棋盘格子带隙图:从图3(a1)可看出,此时存在3个TM带隙和2个TE带隙,相应的完全带隙宽度与带隙中心频率的比为  $\Delta\omega/\omega = 7.17\%$ ;在图3(b1)中,存在3个TM带隙和5个TE带隙,第二个TM带隙与第一个TE带隙有重合,存在完全光子带隙,相应的  $\Delta\omega/\omega = 7.86\%$ ;在图3(c1)中,存在2个完全光子带隙:第一个完全光子带隙的  $\Delta\omega/\omega = 7.72\%$ ,第二个完全光子带隙其比值为  $2.53\%$ .比较上面的结果可以看出,随着介电常数的增大,相应的带隙宽度与带隙中心频率的比值会随之增大,而且完全带隙的个数会增多.

棋盘格子复式晶格结构的带隙图如图3(a2), (b2)和(c2)所示.图3(a2)中,取  $\epsilon = 8.9, f = 0.45$ ,原胞中心引入的圆柱的半径  $R = 0.85b$ ,从图中可以看到此时存在2个完全带隙,第一个完全光子带隙

相应的带隙宽度与带隙中心频率的比值为  $\Delta\omega/\omega = 36.14\%$ ,第二个完全光子带隙的  $\Delta\omega/\omega = 4.71\%$ .与图3(a1)进行比较,在相同参数的情况下,由于中心圆柱的引入使相应的带隙宽度与带隙中心频率的比值大幅度增加了,棋盘格子复式晶格结构的  $\Delta\omega/\omega$  值几乎是棋盘格子的5倍,而且完全带隙的个数增加.图3(b2)取  $\epsilon = 12, f = 0.45, R = 0.865b$ ,此时也存在两个完全带隙,第一个完全带隙的  $\Delta\omega/\omega = 38.97\%$ ,第二个完全带隙的  $\Delta\omega/\omega = 15.37\%$ .与图3(a2)比较,可以看出尽管随着介电常数的增加第一个完全带隙  $\Delta\omega/\omega$  的值提高不大,但是第二个完全带隙  $\Delta\omega/\omega$  的比值却增大较多.图3(c2)取  $\epsilon = 16, f = 0.45, R = 0.89b$ ,如图所示此时存在四个完全光子带隙,与图(c1)进行比较,发现尽管改进结构第一个完全带隙  $\Delta\omega/\omega$  的比值仅是普通棋盘格子结构的2.5倍,但是完全带隙的个数却达到了4个.

仿真结果表明,在参数完全相同的情况下,本文提出的棋盘格子复式晶格结构,带隙宽度与带隙中心频率的比值最大可提高5倍,完全带隙的个数最多可增加2倍,同时使完全带隙出现的位置向低频处移动.与其他复式结构进行比较:比如文献[14]提出的一类粗锐复合结构光子晶体,他们研究结果表明二维复式正方格子的粗锐尺寸选择恰当时其完全带隙的带宽可大于18%,而本文中的棋盘格子复式晶格结构其完全带隙的带宽最大的达到了38.97%.

### 4. 结 论

提出了一种棋盘格子复式晶格的二维光子晶体的新结构,计算机仿真结果表明,与普通棋盘格子相比较,这种结构更加容易产生完全带隙,并且可以在介电常数比较小的情况下获得比较理想的相对带隙宽度,这对于二维光子晶体的设计和制作具有重要意义.

[1] Liu H, Yao J Q, Li E B 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2286 (in Chinese) [刘欢、姚建铨、李恩邦 2006 物理学报 **55** 2286]

[2] Liu H, Yao J Q, Li E B, Wen W Q, Zhang Q, Wang P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 230 (in Chinese) [刘欢、姚建铨、李恩邦、温午麒、张强、王鹏 2006 物理学报 **55** 230]

[3] Xu J P, Wang L G, Yang Y P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2765 (in Chinese) [许静平、王立刚、羊亚平 2006 物理学报 **55** 2765]

[4] Gu P F, Chen H X, Qin X Y, Liu X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 773 (in Chinese) [顾培夫、陈海星、秦小芸、刘旭 2005 物理学报 **54** 773]

- [ 5 ] Inoue K , Wada M , Sakoda K , Yamanaka A , Hayashi M , Haus J W 1994 *Jpn . Appl . Phys .* **33** L1463
- [ 6 ] Grüning U , Lehmann V , Ottow S , Busch K 1996 *Appl . Phys . Lett .* **68** 747
- [ 7 ] Bullock D L , Shih C , Margulies R S 1993 *Opt . Soc . Am . B* **10** 399
- [ 8 ] Li M Y , Gu P F 2005 *Acta Phys . Sin .* **54** 2358 ( in Chinese ) [ 李明宇、顾培夫 2005 物理学报 **54** 2358 ]
- [ 9 ] Che M , Zhou Y S , Wang F H , Gu B Y 2005 *Acta Phys . Sin .* **54** 2096 ( in Chinese ) [ 车 明、周云松、王福合、顾本源 2005 物理学报 **54** 2096 ]
- [ 10 ] Liu J T , Zhou Y S , Wang F H , Gu B Y 2004 *Acta Phys . Sin .* **53** 1845 ( in Chinese ) [ 刘江涛、周云松、王福合、顾本源 2004 物理学报 **53** 1845 ]
- [ 11 ] Pierre R V , Michel P 1992 *Phys . Rev . B* **46** 4973
- [ 12 ] Anderson C M , Giapis K P 1996 *Phys . Rev . Lett .* **77** ( 14 ) 2949
- [ 13 ] Agio M , Andreani L C 2000 *Phys . Rev . B* **61** 15519
- [ 14 ] Pan J Y , Liang G Q , Mao W D , Wang H Z 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 729 ( in Chinese ) [ 潘杰勇、梁冠全、毛卫东、汪河洲 2006 物理学报 **55** 729 ]
- [ 15 ] Li Z Y , Gu B Y , Yang G Z 1998 *Phys . Rev . Lett .* **81** 2574
- [ 16 ] Zhuang F , He S L , He J P , Feng S S 2002 *Acta Phys . Sin .* **51** 355 ( in Chinese ) [ 庄 飞、何赛灵、何江平、冯尚申 2002 物理学报 **51** 355 ]
- [ 17 ] Qiu G X , Lin F L , Li Y P 2003 *Acta Phys . Sin .* **52** 600 ( in Chinese ) [ 仇高新、林芳蕾、李永平 2003 物理学报 **52** 600 ]
- [ 18 ] Guo S P , Albin S 2003 *Opt . Exp .* **11** 167

## Study of complete photonic band gap in two-dimensional chessboard of non-Bravais lattice<sup>\*</sup>

Wang Jing-Li    Chen He-Ming<sup>†</sup>

( College of Optoelectrical Engineering , Nanjing University of Posts & Telecommunications , Nanjing 210003 , China )

( Received 18 April 2006 ; revised manuscript received 26 June 2006 )

### Abstract

A two-dimensional chessboard of non-Bravais lattice is designed in this paper : the square columns in photonic structure of a two-dimensional square lattice are rotated by  $45^\circ$  , and a cylinder is introduced into the center of each lattice unit cell . The complete photonic band gap in two-dimensional chessboard of non-Bravais lattice is calculated by the plane wave expansion method . The result shows that a gap width to midgap frequency ratio  $\Delta\omega/\omega$  of chessboard non-Bravais lattice is almost 5 times that of the ordinary chessboard lattice , and the number of complete photonic band gaps is increased . Compared with other compound lattices , the optimal  $\Delta\omega/\omega$  of chessboard non-Bravais lattice is 2.1 times that of a kind of compound lattices .

**Keywords :** two-dimensional photonic crystal , non-bravais lattice , complete photonic band gap

**PACC :** 4270Q , 7820

\* Project supported by the Jiangsu Province High Technology Research Plan Program ( Grant No. BG2005039 ) .

† Corresponding author .