

旋转对二维正方晶格介质柱内空结构 光子晶体禁带的影响*

赵明明[†] 吕燕伍 余家新 庞许倩

(北京交通大学物理系, 北京 100044)

(2007 年 6 月 13 日收到, 2007 年 7 月 8 日收到修改稿)

采用平面波展开的方法计算了三种旋转操作下二维正方晶格各向异性材料(Te)介质柱内空结构光子晶体 TE, TM 模式能带. 讨论了三种旋转操作对 TE, TM 模式带隙及完全光子禁带的影响. 发现 TM 模式高频带隙与结构的旋转对称性有着密切的关系. 而 TE 模式的带隙不仅受到晶体旋转对称性的影响同时也受到介质在 x - y 平面分布情况的影响.

关键词: 二维光子晶体, 内空结构, 旋转操作, 光子带隙

PACC: 7115A, 7320A, 7530G

1. 引言

光子晶体^[1]是一种由不同折射率介质周期性排列而成的人工结构. 它的一个重要特性是具有光子带隙. 频率落在光子带隙中的电磁波被禁止传播. 利用这种性质, 近年来光子晶体在实际应用如光子晶体光纤, 低阈值激光发射器, 光子晶体滤波器等上取得了很大的进展^[2-5].

降低光子晶体的结构对称性能够取得更宽的完全光子禁带(TE 模式带隙与 TM 模式带隙重合). 为了破坏光子晶体结构的对称性, 可以使用各种不同的方法, 如改变散射子的形状^[6], 使单个晶胞内包含多个散射子^[7], 使用各项异性介质或铁磁性介质代替各向同性介电材料^[8,9]等等. Pan 等人^[10]提出了一种二维正方晶格各向异性材料(Te)介质柱内空结构光子晶体, 指出此种结构可以同时得到低频和高频(归一化频率)两个完全光子禁带.

对 Pan 等人提出的这种四方介质柱内空结构光子晶体作旋转操作, 包括单独旋转介质包层、单独旋转内空、以及介质和内空一起旋转. 旋转具有内空的四方介质柱要比旋转无内空介质柱对光子晶体结构有更为复杂的影响. 具有内空的四方介质柱的三种

旋转操作不仅影响到晶体结构的旋转对称性亦改变 x - y 平面的介质分布状况. 本文采用平面波展开法^[11]研究了这三种旋转操作对二维正方晶格各向异性材料(Te)介质柱内空结构光子晶体 TE, TM 模式带隙以及完全光子禁带的影响. Te 材料具有较高的折射率并且有较大的寻常与反常折射率差异. 这些性质都有利于光子禁带的产生, 方便我们讨论结构对称性破坏与介质形变对光子禁带产生的影响.

2. 计算公式及模型

计算模型如图 1 所示, 介质柱外的空白部分为介电常数为 ϵ_0 的电介质背景, 介质柱内为介电常数为 ϵ_r 的电介质填充, 介质柱采用了各向异性材料, 寻常与反常介电常数分别为 ϵ_0, ϵ_e . 内空边长以及介质柱边长分别为 d_1, d_2 . 晶格常数为 a . 如图 1 所示为 x - y 平面.

光子晶体中的电磁分布满足麦克斯韦方程组, 并且从麦克斯韦方程组化简得

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

其中 $\epsilon(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 分别是与位置有关的介电常数和磁场强度, ω 为圆频率, c 是光速. 由于二维光子晶

* 国家自然科学基金(批准号 60376014)资助的课题.

[†] E-mail: 05121774@bjtu.edu.cn

体的空间周期性,利用平面波展开的方法展开 $\epsilon(\mathbf{r})^{-1}$ 和 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 得

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} \epsilon(\mathbf{G})^{-1} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\lambda=1,2} h_{\mathbf{G},\lambda} e_{\lambda} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (3)$$

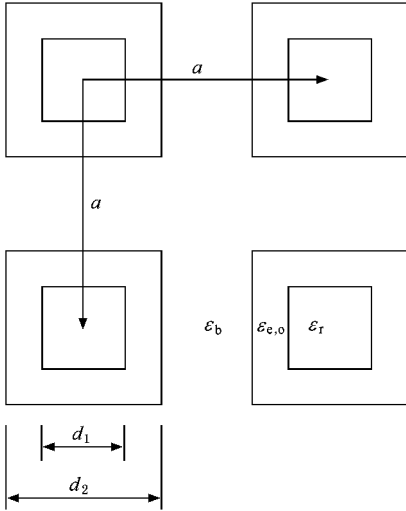


图 1 正方晶格正方介质柱正方内空结构示意图

其中

$$\epsilon(\mathbf{G})^{-1} = \frac{1}{S_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (4)$$

$e_{\lambda}(\lambda=1,2)$ 是与 $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ 垂直的正交基矢, \mathbf{G} 是晶格倒格矢, \mathbf{k} 为波矢。(4)式积分区间在一个晶格单胞内, S_{cell} 表示一个单胞的面积. 将(2)和(3)式代入(1)式,可以得到

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

通过(5)式可以得到频率 ω 与波矢 \mathbf{k} 的关系,即色散关系. 对于有内空结构的 $\epsilon(\mathbf{r})$,可以表示为

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_b + (\epsilon_{e,0} - \epsilon_b) P_{\text{shell}}(\mathbf{r}) + (\epsilon_r - \epsilon_b) P_{\text{rod}}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

其中

$$P_{\text{shell}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & r \in \text{介质外壳}, \\ 0 & r \notin \text{介质外壳}, \end{cases}$$

$$P_{\text{rod}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & r \in \text{介质填充}, \\ 0 & r \notin \text{介质填充}. \end{cases}$$

将(6)式代入(4)式得

$$\epsilon(\mathbf{G})^{-1} = \epsilon_b^{-1} \delta_{\mathbf{G},0}$$

$$+ (\epsilon_r^{-1} - \epsilon_b^{-1}) f_{\text{rod}} \text{Si}\left(\frac{\mathbf{G}'_{x1} d_1}{2}\right) \text{Si}\left(\frac{\mathbf{G}'_{y1} d_1}{2}\right) + (\epsilon_{e,0}^{-1} - \epsilon_b^{-1}) f_{\text{shell}} \left[\text{Si}\left(\frac{\mathbf{G}'_{x2} d_2}{2}\right) \text{Si}\left(\frac{\mathbf{G}'_{y2} d_2}{2}\right) - \text{Si}\left(\frac{\mathbf{G}'_{x1} d_1}{2}\right) \text{Si}\left(\frac{\mathbf{G}'_{y1} d_1}{2}\right) \right], \quad (7)$$

其中

$$\text{Si}(x) = \frac{\sin(x)}{x},$$

$$\mathbf{G}'_{x\lambda} = G_x \cos(\theta_{\lambda}) + G_y \sin(\theta_{\lambda}),$$

$$\mathbf{G}'_{y\lambda} = -G_x \sin(\theta_{\lambda}) + G_y \cos(\theta_{\lambda}), \lambda = 1, 2,$$

θ_1, θ_2 分别为内空与介质包层相对晶格基矢转过的角度. $f_{\text{rod}} = \frac{d_1^2}{S_{\text{cell}}}$, $f_{\text{shell}} = \frac{d_2^2}{S_{\text{cell}}}$ 分别为内空和四方介质柱面积与单胞面积的比值.

3. 结果与讨论

计算中介质柱包层采用了各向异性材料 Te. Te 材料在 3.5—14 μm 波长范围内具有如下参数: $\epsilon_0 = 23.04$, $\epsilon_e = 38.44$. 我们设定电介质背景以及介质内空填充均为空气,则 $\epsilon_b = \epsilon_r = 1$. 经仔细选择,设定 Te 柱系数 $d_1 = 0.49a$, $d_2 = 0.7a$. 此参数下,内空旋转对光子晶体 x - y 平面介质分布影响最大,旋转对光子禁带的影响显著,能同时产生多个完全光子禁带. 图 2 为不加入旋转操作时的能带结构图. 左右小插图分别为晶体结构示意图和晶格第一布里渊区示意图. 实线和虚线分别代表了 TM, TE 模式能带. 用 ω_e 表示归一化频率 $\omega a/2\pi c$. 图 2 显示,频率在 0.4—0.7 ω_e 之间 TM 模能带平缓,形成多个 TM 带隙. TE 模的 1, 2 能带之间形成 TE 模带隙(记为 E1, 图 2 阴影部分),频率位于 0.261—0.329 ω_e , 带隙率 ($\Delta\omega/\omega_0$, ω_0 为带隙中心频率) 23.3%. 然而在这较宽的 TE 带隙中 TM 模的 4, 5 能带闭合,没有 TM 带隙,所以得不到完全光子禁带.

下面讨论三种旋转操作对能带的影响. 旋转操作 A, 保持外壳不动,只旋转内空;操作 B, 保持内空不动,只旋转介质外壳. 操作 C, 保持外壳和内空的相对位置不动,一起旋转. 由旋转对称性,我们只考虑旋转角度 0°—45°. 图 3—5 给出了这三种旋转操作下 TE, TM 模式的带隙变化示意图,图中阴影部分代表 TM 模式带隙变化,斜线区域为 TE 模式带隙变化.

从图 3 中,我们看到内空旋转使 TM 模式带隙

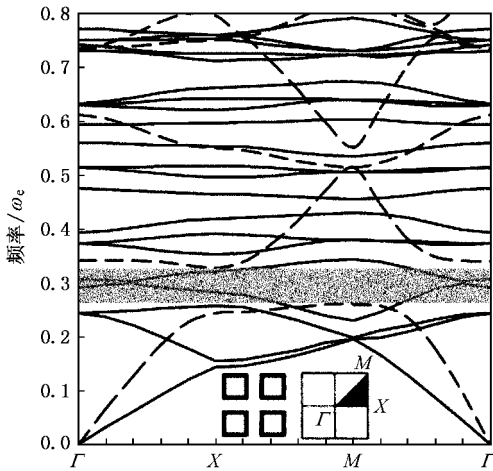


图2 无旋转操作时的能带结构图 实线表示 TM 模式能带,虚线表示 TE 模式能带

变化很大. 随着角度增大, 在 $0.3\omega_e$ 处 TM 模式的 4, 5 能带开始错开, 形成带隙, 记为 M4. 随着旋转角度的加大, M4 一直变大. 角度旋过 45° 时, M4 落在 $0.283\text{—}0.338\omega_e$, 带隙率 17.8%. 同时, TE 模式的低频带隙 E1 逐渐减小, 并在角度旋过 4° 时在高频产生一个比较窄的带隙 E6, 但是 E6 迅速消失. E1 与 M4 的重合部分以及 E6 与 TM 模式的高频带隙重合部分, 形成了完全光子禁带.

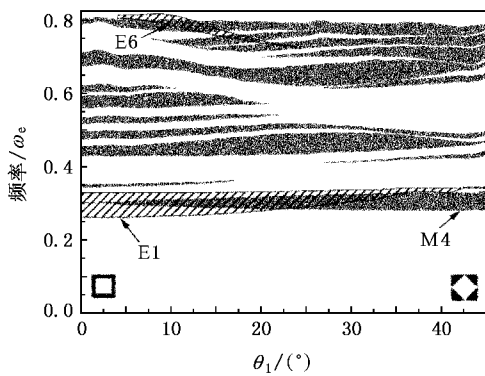


图3 保持介质外壳不动 ($\theta_2 = 0^\circ$) 只旋转内空时 TE, TM 模式带隙变化图

图4 显示, 外壳的旋转同样使 TM 模式带隙剧烈变化, 在 $0.3\omega_e$ 处形成它的最低频带隙 M4. 此时 M4 随着旋转角度的加大先增大后减小, 呈现左右对称. 旋过角度 22° 时有最大带隙率 19.7%, 频率落在 $0.276\text{—}0.336\omega_e$. 对于 TE 模式, 它的 E1 带隙不断减小并在角度旋过 33° 时带隙消失. TE 模式的高频部分, 分别在 $15^\circ, 28^\circ, 21^\circ$ 时产生带隙 E2, E5, E6. 这些 TE 模式高频带隙与 TM 模式的高频带隙的重合部

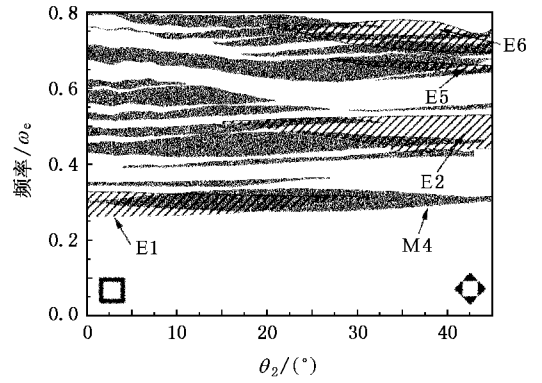


图4 保持内空不动 ($\theta_1 = 0^\circ$) 只旋转介质外壳时 TE, TM 模式带隙变化图

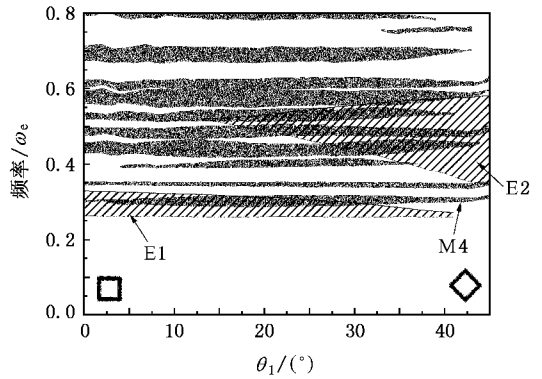


图5 内空外壳相对位置不变同时旋转时 ($\theta_1 = \theta_2$) TE, TM 模式带隙变化图

分, 在较高频形成了多个完全光子禁带. 图5 显示, 在内空外壳一起同时旋转时, TM 模式高频带隙基本保持不变. M4 带隙宽度先增后减, 在 19° 有最大带隙率 10.3%, 频率落在 $0.285\text{—}0.316\omega_e$. TE 模式 E1 带隙逐渐减小并在 42° 时为 0. 同时在转过 13° 时产生 E2 带隙, 随旋转角度增加不断变大. 在 45° 时达到最大, 此时 E2 处于 $0.348\text{—}0.591\omega_e$, 带隙率达到了 51.75%. E1 与 M4 重合部分, E2 带隙与多个 TM 带隙重合部分, 形成多个完全光子禁带.

比较图3 和图4, 我们注意到两者 TM 模式 $0.4\omega_e$ 以上较高频带隙变化情况基本一样. 这显示了 TM 模式高频带隙与结构的旋转对称性有着密切的关系. 内空与介质包层单独旋转对结构的总体旋转对称性的影响是一致的, 故两种旋转操作下 TM 高频带隙的变化表现出一致性. 同样, 内空外壳同时旋转并不改变结构总体的旋转对称性, 所以 TM 的高频带隙基本保持不变, 如图5 所示. TM 模最低频带隙 M4, 在三种操作下表现各不相同. 由于低频模式

能量趋向于分布在介质当中,故三种操作对 $x-y$ 平面介质分布改变的不同使 M4 带隙的变化亦有不同.

由电磁场边值关系,TE 模式的电场分量在 $x-y$ 平面上必须连续,所以电场线在连接两个介质柱时必须穿过介质柱之间的空气.这样, $x-y$ 平面内介质柱相对位置的改变将极大地影响到 TE 模式能带^[12].如图 5 所示,当两介质柱由于旋转不断接近时,E1 的上沿 TE 模第二能带的最低频率不断下降,E2 的下沿 TE 模第二能带最高频不断下降,E2 的上沿 TE 模第三能带最低频不断上升,使得 E1 不断变窄,同时在旋过 13° 时产生 E2 带隙.比较图 4 和图 5,在改变介质柱相对位置的同时,操作 B 同时降低了晶体结构的旋转对称性.这样图 4 除了如图 5 一样得到 E1, E2 带隙外在高频得到了 E5, E6 带隙.这说明,TE 模式的带隙不仅受到介质在 $x-y$ 平面分布的影响同时也受到晶体旋转对称性的影响.再比较图 3 和图 4,虽然操作 A 与操作 B 在对晶体结构旋转对称性的影响一致,却并没有得到如图 4 类似的 TE 模式的高频带隙,它只在 TE 高频产生了一个很窄而且迅速消失的带隙 E6. 于是我们有结论,降低

晶体结构旋转对称性虽然有助于 TE 高频带隙的产生,但它并不是一个决定因素.为了在高频产生如图 4 类似多而宽的 TE 带隙,同样需要适当调整介质在 $x-y$ 平面的分布.

4. 结 论

采用平面波展开的方法计算了三种旋转操作下二维正方晶格各向异性材料 Te 介质柱内空结构光子晶体 TE, TM 模式能带.讨论了三种旋转操作对 TE, TM 模式带隙及完全光子禁带的影响.研究发现, TM 模式高频带隙与结构的旋转对称性有着密切的关系,而它的低频带隙取决于介质 $x-y$ 平面的分布情况.旋转操作对于具有内空结构的光子晶体 TE 模式能带的影响相对于 TM 模式更为复杂.降低晶体结构旋转对称性虽然有助于 TE 模式高频带隙的产生但它并不是一个决定因素.当介质外壳单独旋转时,它不但降低了晶体结构旋转对称性同时使介质柱间的相对位置发生改变,这时 TE 模式的高频产生一系列较宽的带隙.

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [2] Viktorovitch P, Drouard E, Garrigues M, Leclercq J L, Letartre X, Romeo P R 2007 *C. R. Physique* **8** 253
- [3] Ozbay E, Bulu I, Aydin K, Caglayan H, Guven K 2004 *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications* **2** 87
- [4] Benisty H, Lourtioz J M, Checoury X, Combrie S, Chelnokov A 2006 *Proceedings of the IEEE* **94** 997
- [5] 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]
- [6] Wang R Z, Wang X H 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 4307
- [7] Wang X H, Gu B Y, Li Z Y, Yang G Z 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11417
- [8] Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2574
- [9] Che M, Zhou Y S, Wang F H, Gu B Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4770 (in Chinese) [车 明、周云松、王福合、顾本源 2005 物理学报 **54** 4770]
- [10] Pan T, Zhuang F, Li Z Y 2004 *Solid State Communications* **129** 501
- [11] Li Z Y, Wang J, Gu B Y 1998 *Phys. Rev. B* **58** 3721
- [12] Joannopoulos D, Mead R D, Winn J N 1995 *Photonic Crystals: Modeling the Flow of Light* (Princeton: Princeton University Press) p60

Effect of rotation on photonic band gap of two-dimensional square lattice photonic crystal with hollow rod^{*}

Zhao Ming-Ming[†] Li Yan-Wu Yu Jia-Xin Pang Xu-Qian
(Department of Physics , Beijing Jiaotong University , Beijing 100044 , China)
(Received 13 June 2007 ; revised manuscript received 8 July 2007)

Abstract

The plane-wave expansion method is used to calculate TE and TM mode band gaps for two-dimensional square lattice photonic crystal with hollow anisotropic tellurium(Te) rods under three different rotation operations. The effect of rotation on TE and TM mode band gaps and absolute band gap is investigated. The calculated results show that the high order band gaps of TM mode have a close relationship with structure rotation symmetry , and the rotation symmetry and the distribution of Te in x - y plane together influence TE mode band gaps.

Keywords : 2D photonic crystal , hollow structure , rotation operation , photonic band gap

PACC : 7115A , 7320A , 7530G

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 60376014).

[†] E-mail 05121774@bjtu.edu.cn