第 57 卷 第 5 期 2008 年 5 月
1000-3290/2008/57(05)/3249-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57,No.5,May,2008

二维圆柱形光子晶体的完全禁带研究

程旭攀† 曹全喜
(西安电子科技大学技术物理学院,西安 710071)
(2007 年 8 月 30 日收到;2007 年 10 月 17 日收到修改稿)

用平面波展开法研究了二维圆柱形光子晶体的完全禁带与填充比、介电常数比之间的关系. 研究发现,并非介电常数比越大,完全禁带宽度就越大,而是有一个峰值.

关键词:二维光子晶体, 完全禁带, 平面波展开法
PACC:7820P, 4270Q

1. 引　言

光子晶体是由具有不同介电常数的材料按照某种空间有序排列的、其周期可与光波长相比拟的人工微结构[1]. 介质周期结构,即所谓光子晶体,可以存在光子禁带. 光子晶体的出现展示了许多重要的应用前景,如新型激光器、新型波导、新型滤波器和光子晶体光纤等. 这些应用都是基于较宽的光子晶体禁带的存在,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具有重要意义.

由于三维光子晶体在工艺制造上的困难,相对而言,二维光子晶体既存在众多应用,又在工艺上比较容易实现,所以二维光子晶体禁带的研究仍有很大的实用价值. 目前大多数研究都是针对某种材料改变其周期结构,如棋盘格子复式晶格[2]、利用各向异性材料碲的改进正方晶格[3]及椭圆介质柱[4]、GaAs 的正方介质柱三角晶格[5]、MPC 正方格子[6]等. 对于完全禁带与介电常数比变化的关系报道较少,一般认为介电常数比越大,禁带宽度就越大. 但经过研究发现,实际上不是这样,而是存在一个峰值. 本文采用平面波展开法计算了不同介电常数材料构成的二维圆柱光子晶体的带隙结构. 计算表明,对于三角空气柱结构,介电常数比为 19∶1,填充比(r/a)为 0.49 时,取得最大完全禁带宽度 $\Delta\omega = 0.128\omega_e$($\omega_e = 2\pi c/a$, a 为晶格常数, c 为光速),中心频率为 $\omega_{mid} = 0.446\omega_e$,禁带宽度与禁带的中心频率之比达到了 28.8%. 对于其他结构的光子晶体,同样存在类似的结果.

2. 理论分析

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[7]. 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

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}, \tag{1}$$

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} + J. \tag{2}$$

考虑无源情况(设 $J = 0$),并假定时间因子为 $e^{-i\omega t}$,则 Maxwell 方程组变为

$$\nabla \times E = i\omega\mu_0 H, \tag{3}$$

$$\nabla \times H = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(r)E. \tag{4}$$

在 H 极化的情况下,电场和磁场分量为

$$H(r;t) = (0,0,H_Z(r\mid\omega))\exp(-i\omega t), \tag{5}$$

$$E(r;t) = (E_x(r\mid\omega),E_y(r\mid\omega),0)\exp(-i\omega t), \tag{6}$$

其中 $r = xe_x + ye_y$.

Maxwell 旋度方程非零场分量方程为

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_Z, \tag{7}$$

$$\frac{\partial H_Z}{\partial x} = i\omega D_y = i\omega\frac{\varepsilon(r)E_y}{c^2\mu_0}, \tag{8}$$

$$\frac{\partial H_Z}{\partial y} = i\omega D_x = -i\omega\frac{\varepsilon(r)E_x}{c^2\mu_0}, \tag{9}$$

† E-mail:cxp5014@sohu.com

消去 E_x 和 E_y，可以得到关于 H_Z 的方程

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{\varepsilon(r)}\frac{\partial H_z}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{1}{\varepsilon(r)}\frac{\partial H_z}{\partial y}\right]+\frac{\omega^2}{c^2}H_Z=0. \tag{10}$$

将 $\frac{1}{\varepsilon(r)}$ 和 $H_Z(r|\omega)$ 按平面波展开为

$$\frac{1}{\varepsilon(r)}=\sum_G K(G)\exp(\mathrm{i}G\cdot r), \tag{11}$$

$$H_Z(r\mid\omega)=\sum_G A(K\mid G)\exp(\mathrm{i}(K+G)\cdot r), \tag{12}$$

其中

$$K=k_x e_x+k_y e_y, G(h)=h_1 b_1+h_2 b_2. \tag{13}$$

$G(h)$ 为倒格矢，h_1，h_2 为整数，

$$b_1=\frac{2\pi}{S_c}(a_2^{(2)},-a_1^{(2)}),$$

$$b_2=\frac{2\pi}{S_c}(-a_2^{(1)},a_1^{(1)}), \tag{14}$$

这里，$a_j^{(i)}$ 是 a^i 的第 j 个分量，S_c 是元胞的面积. 将(11)，(12)代入(10)式可得到关于 $A(K|G)$ 的本征方程

$$\sum_G (K+G)\cdot(K+G')K(G-G')A(K\mid G')=\frac{\omega^2}{c^2}A(K\mid G), \tag{15}$$

同理，在 E 偏振情况下，可得到如下本征方程

$$\sum_G (K+G)\cdot K(G-G')(K+G')C(K\mid G')=\frac{\omega^2}{c^2}C(K\mid G), \tag{16}$$

$$K(G)=\begin{cases}\frac{1}{\varepsilon_b}+\left(\frac{1}{\varepsilon_a}-\frac{1}{\varepsilon_b}\right)f, & G=0,\\ f\left(\frac{1}{\varepsilon_a}-\frac{1}{\varepsilon_b}\right)\frac{2J_1(GR)}{GR}, & G\neq 0.\end{cases} \tag{17}$$

这里 f 是填充率，$J_1(x)$ 是 Bessel 函数. 将(17)式代入(15)，(16)式就可以求得 E 极化和 H 极化本征频率 ω.

3. 数值结果与讨论

3.1. 正四边形介质柱

正四边形晶格光子晶体以空气为背景，介质柱互相平行且沿轴向无限延伸构成二维周期结构. 材料介电常数从 8 变化到 40，同时改变填充比，寻找最大禁带宽度. 利用平面波展开法进行数值模拟计算，对于出现的多重带隙，我们只考虑最大的带隙，以下讨论都如此. 所得结果如图 1 所示. 随着填充比增加，峰值从低介电常数向高介电常数移动，图中 4 个峰值对应填充比从左到右分别为 0.37，0.38，0.39，0.40，其中填充比 $r/a=0.39$，介电常数为 18 时，有最大完全禁带，带宽为 $2\times0.014=0.028\omega_e$，中心频率为 $0.443\omega_e$，相对带隙率为 6.32%. 在介电常数大于 14，才有禁带出现. 同时我们固定介电常数为 18（可以用 CuO 替代，$\varepsilon=18.1$），改变填充比 $r/a=0.3—0.45$，做一系列计算，结果见图 2，在 $r/a=0.39$ 时同样出现最大禁带 $0.028\omega_e$.

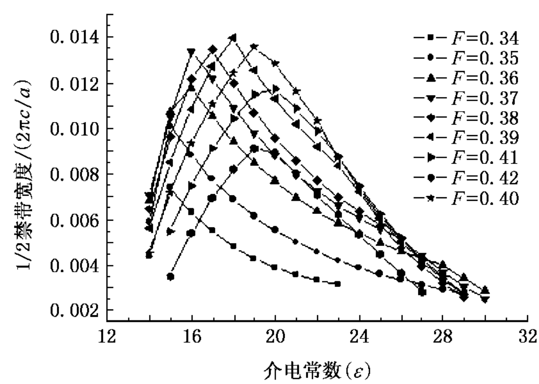

图 1 正四边形介质柱光子晶体带隙与参数关系图

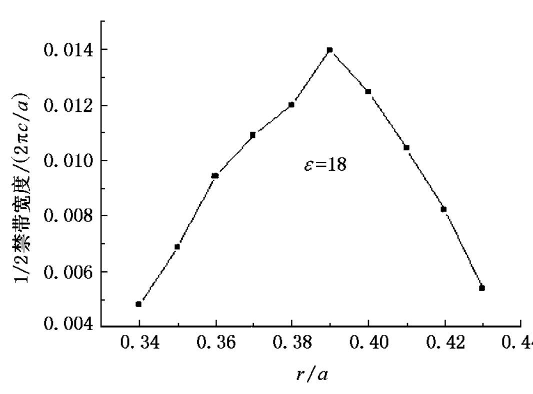

图 2 固定介电常数为 18 变化 (r/a) 的能带变化图

3.2. 三角形空气柱

三角晶格光子晶体以介质为背景，圆柱空气孔互相平行且沿轴向无限伸展构成二维周期阵列，即我们分别在不同介质材料(介电常数从 8—40)上钻孔，使空气柱($\varepsilon=1$)呈二维周期排列. 利用平面波展开法进行数值模拟计算，所得结果如图 3 所示.

由于三角晶格的光子晶体在填充比($f=r/a$)较大时才出现完全禁带,因此,我们从 0.45 开始逐渐增加到 0.495,步长为 0.005,同时在每一个填充比下,改变介电常数从 8 到 40,步长为 1.

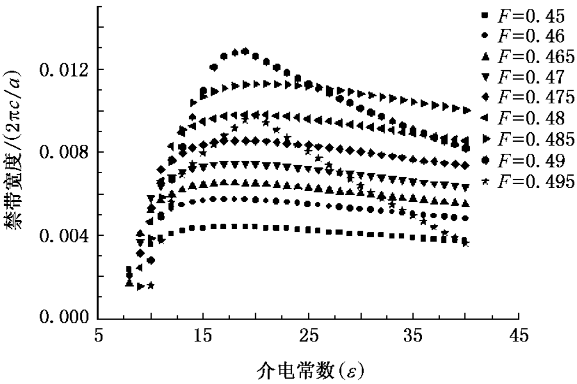

图 3　三角形空气柱光子晶体带隙与参数关系图

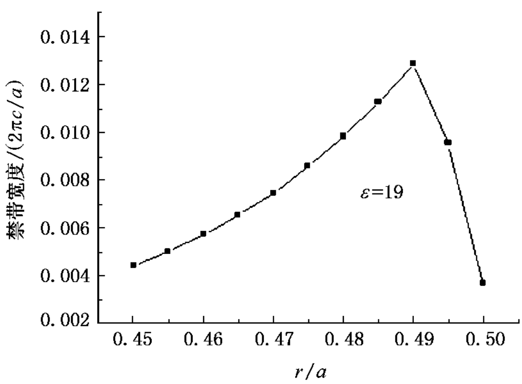

图 4　固定介电常数为 19 改变 (r/a) 的能带变化图

从填充比看,r/a 大于 0.45 时才有大的带隙,从 0.45 到 0.49 带隙增加,当填充比为 0.495 时,带隙反而减小. 介电常数在 15—25 时,$r/a=0.49$ 对应得带隙最大,其中介电常数为 19 时取得峰值为 $0.128\omega_e$,中心频率 $0.446\omega_e$,带隙率达到 28.8%. 在介电常数大于 8 时即出现了完全禁带. 采用 ZnO,$\varepsilon=19$,改变填充比(见图 4),同样在 $r/a=0.49$ 时取得峰值.

3.3. 蜂窝形介质柱

结构与正四边形介质柱类似,只是排列形状为蜂窝状(正六边形),计算条件相同,所得结果如图 5 所示.

相对而言,蜂窝状光子晶体在填充比较小时就出现完全禁带,因此设置填充比从 0.21 开始逐步增大到 0.38,步长为 0.01,介质柱的介电常数变化从 8 到 40,步长为 1.

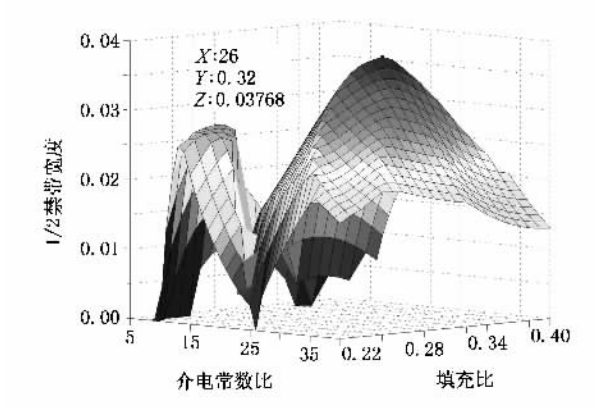

图 5　蜂窝状介质柱光子晶体带隙与参数关系图

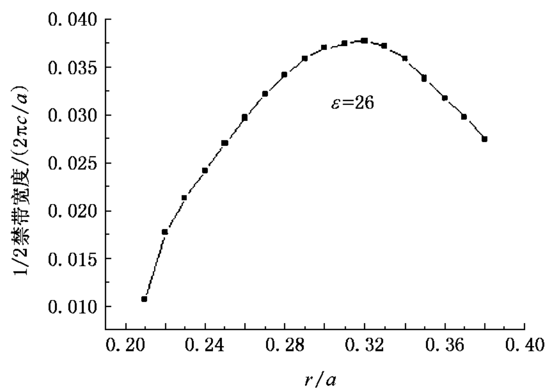

图 6　固定介电常数为 26 改变 (r/a) 的能带变化图

在填充比 r/a 较低时,在低介电常数和高介电常数处有 2 个峰值,随着 r/a 增大,高介电常数处的峰值增加,且向左移,即向低介电常数移动,同时中间的谷值也左移(如图 5 和图 7 所示),当 $r/a=0.32$,介电常数为 26 时,取得最大带隙宽度 $2\times0.0377=0.0754\omega_e$,中心带隙 $0.301\omega_e$,带隙率为 25.05%. 在介电常数大于 8 时即出现完全禁带. 固定介电常数为 26(可以采用碲),改变填充比(见图 6),同样在 $r/a=0.32$ 时取得峰值. 对于各向异性正方介质碲($\varepsilon=26$)圆柱光子晶体的研究表明由于在 z 方向与 x-y 平面上介电常数不同,可以调出较大的完全禁带[8].

综合比较这三种常见晶格结构的光子晶体,在某一填充比下完全禁带宽度并非随着介电常数比增大而总是增大,而是存在一个峰值,介电常数比高于该值,完全禁带宽度反而变小.

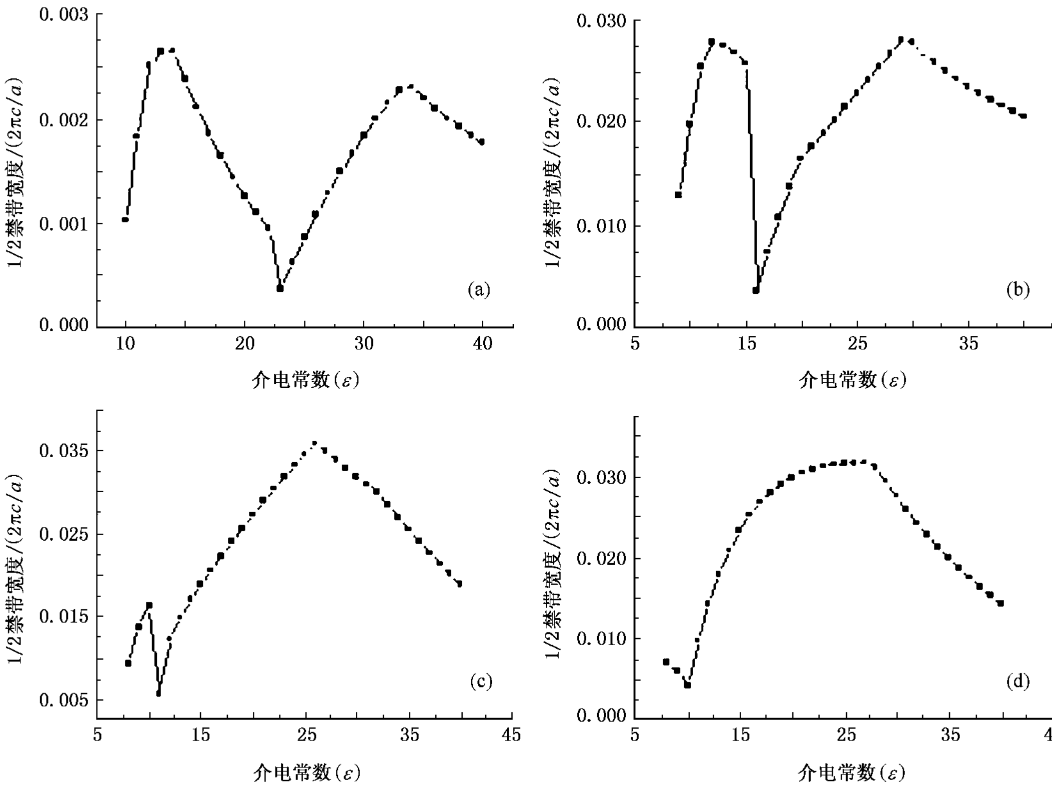

图 7 不同填充比时禁带宽度与介电常数的关系图 (a)**填充比为** 0.21;(b)**填充比为** 0.24;(c)**填充比为** 0.29;(d)**填充比为** 0.36

4. 结 论

本文研究了二维圆柱形光子晶体三种晶格结构、填充比、介电常数比三个主要结构参数与完全禁带的关系. 发现对于某一晶格的二维圆柱形光子晶体,其完全禁带并非随着介电常数比增大而增大,而是存在一个峰值. 对于正四边形介质柱光子晶体,填充比 r/a 为 0.39,介电常数比为 18 时,取得最大禁带宽度;三角空气柱光子晶体,当填充比为 0.49,介电常数比为 19 取得峰值;而对于蜂窝状介质柱光子晶体,填充比为 0.32,介电常数比为 26 时,取得最大值. 因此在光子晶体设计中,不需要一味追求高介电常数比,而要与相应的晶格参数相匹配,这样才能达到获得宽禁带的目的. 研究结果为二维圆柱形光子晶体的进一步应用奠定了理论基础.

[1] Yablonovitch E 1987 *Phys Rev Lett*. **58** 2059

[2] Chen H M, Wang J L 2007 *Acta Phys. Sin*. **56** 922 (in Chinese) [陈鹤鸣、汪静丽 2007 物理学报 **56** 922]

[3] Xiao S S, Shen L F, He S L 2002 *Acta Phys. Sin*. **51** 2858 (in Chinese) [肖三水、沈林放、何赛灵 2002 物理学报 **51** 2858]

[4] 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]

[5] Feng S S, He S L, Shen L F 2004 *Acta Phys. Sin*. **53** 1540 (in Chinese) [冯尚申、何赛灵、沈林放 2004 物理学报 **53** 1540]

[6] Che M, Gu B Y, Wang F H, Zhou Y S 2005 *Acta Phys. Sin*. **54** 4770 (in Chinese) [车 明、顾本源、王福合、周云松 2005 物理学报 **54** 4770]

[7] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett*. **65** 3125

[8] Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z 1998 *Phys. Rev. Lett*. **81** 2574

Study of complete bandgap of two-dimensional columnar photonic crystals

Cheng Xu-Pan† Cao Quan-Xi

(*School of Technical Physics*, *Xidian University*, *Xi'an* 710071, *China*)

(Received 30 August 2007; revised manuscript received 17 October 2007)

Abstract

Plane wave expansion method was employed to study the relation between the bandgap of two-dimensional columnar photonic crystals and the filling ratio and dielectric constant ratio. It is shown that the complete bandgap does not increase monatonically with the dielectric constant ratio, but has a peak value instead.

Keywords: two-dimensional photonic crystal, complete bandgap, plane-wave expansion method

PACC: 7820P, 4270Q

† E-mail: cxp5014@sohu.com