

介质柱型二维 Triangular 格子光子晶体的禁带特性*

杨毅彪¹⁾ 王拴锋^{1)†} 李秀杰²⁾ 王云才¹⁾ 梁 伟²⁾

1) (太原理工大学理学院物理系, 太原 030024)

2) (太原理工大学材料科学与工程学院, 太原 030024)

(2009 年 7 月 20 日收到; 2009 年 11 月 26 日收到修改稿)

采用平面波展开法数值计算了空气背景中由圆形、正六边形和正方形介质柱构造的二维三角晶格光子晶体禁带结构, 并研究了介质方柱旋转角度、介质折射率和填充比对完全光子禁带宽度的影响. 结果表明, 在低频区, 介质方柱旋转 17° 时, 出现最大完全光子禁带, 且最大禁带宽度随介质折射率的变化较为稳定. 在高频区, 介质方柱旋转 30° 时, 完全光子禁带宽度最大; 且介质材料折射率 $n = 2.2$ 时即出现完全光子禁带, $n = 2.6$ 时, 完全光子禁带达到最大.

关键词: 光子晶体, 光子禁带, 平面波展开法, 三角格子

PACC: 7820P, 4270Q

1. 引 言

光子晶体是由不同介电常数的介质材料在空间按一定的周期排列形成的人工晶体. 光子晶体的光子带结构中存在与半导体能带结构中的能隙相似的光子带隙, 频率在光子带隙内的光子不能在光子晶体中传播. 这种特性使光子晶体具有极大的理论研究价值和潜在的应用前景^[1-4].

Triangular 格子是一种六角密排结构, 有些文献也称之为 Hexagonal 格子^[5]. 由于结构上的优势, Triangular 格子是加工制作二维光子晶体的首选晶格结构^[6,7]. 目前 Triangular 格子结构已在光子晶体发光二极管^[8]、光子晶体无阈值激光器^[9]和光子晶体光纤^[10,11]中得到应用. 已有的研究表明, 空气圆柱在介质背景中的 Triangular 格子结构具有较大的完全光子带隙^[5,12-14]. Bostan 等^[15]和 Ma 等^[16]发现正六边形空气柱在介质背景中的 Triangular 格子结构也可以产生完全光子禁带. 冯尚申等^[17]在正方形 GaAs 介质柱 Triangular 格子结构中发现了光子禁带, 最大禁带宽度为 $\Delta_{\max} = 0.0136(\omega a/2\pi c)$, 其中 ω 为电磁波的角频率, a 为光子晶体晶格常数,

c 为光速. 也有文献^[18-20]用 Triangular 格子复式结构降低对称性来增加完全光子禁带的宽度, 但这样的结构会在实验制备光子晶体时带来许多困难. 故在简单结构的介质柱型二维 Triangular 格子中发现更宽的完全光子禁带还是很有意义的.

本文选取不同折射率介质材料并通过对介质柱进行旋转, 构造出新型 Triangular 光子晶体结构. 发现旋转一定角度的正方形介质柱构造的三角格子光子晶体产生完全光子禁带时对应介质折射率的最低阈值降到 $n = 2.2$, 因此可以实现用较低折射率的材料构造具有完全光子禁带的 Triangular 格子光子晶体.

2. 二维 Triangular 格子光子晶体模型

本文采用平面波展开法研究光子晶体禁带特性. 光在光子晶体内的传播可以用麦克斯韦方程来描述. 针对磁场可以得到 \mathbf{H} 场的定态波动方程

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

结合 Bloch 定理, 可得出倒格子空间 \mathbf{H} 场的本征方程

* 山西省国际科技合作基金 (批准号: 2007081019) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wsfl98503@sohu.com

$$-\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \eta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{\mathbf{k},\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{\mathbf{k},\mathbf{G}}. \quad (2)$$

对于本文讨论的二维情况,由(2)分解可得 H 偏振(TE 模)只有 z 分量时 \mathbf{H} 场的对称矩阵本征值方程

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \eta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} H_{z,\mathbf{k},\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} H_{z,\mathbf{k},\mathbf{G}}. \quad (3)$$

TM 模的 \mathbf{E} 场的本征值方程也可同理给出. 由于 \mathbf{G} 可取无穷多个倒格矢, 上式代表无穷多个方程. 规定光子晶体中两种介质的介电常数, 通过数值计算可求出电磁场的能带结构.

介质柱排列而成的二维三角晶格光子晶体在实空间中如图 1 所示. 为了消除三角格子高对称性

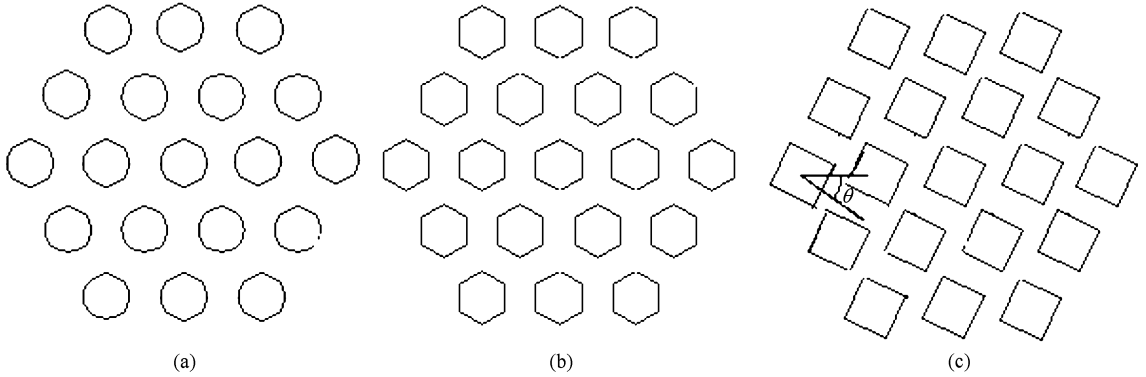


图 1 二维 Triangular 格子光子晶体结构 (a) 介质圆柱, (b) 介质六边形柱, (c) 介质方柱

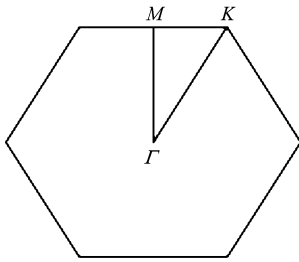


图 2 Triangular 格子的简约布里渊区

三角晶格简约布里渊区的高对称点定义了计算介质柱构造的三角晶格能带结构时要沿之进行的 \mathbf{k} 空间的边界, 而计算区域外其他 \mathbf{k} 空间的点的能带结构可以根据布里渊区的对称性得到. 由于目前半导体材料的工艺比较成熟, 我们首先选用的介质为半导体材料, 在微米波段, 取 Ge 的介电常数为 16.00, 折射率为 4.00.

引起的能带简并, 增加完全禁带的宽度, 除了圆柱散射子外我们还选用了正六边形柱和正四边形柱来构造三角格子. 两介质柱的中心距 a 为晶格常数, d 表示圆柱直径或正六边形相互平行的对边距或正方柱的边长. 图 2 中的六边形区域为这种二维三角晶格的简约布里渊区, 图中右上方的直角三角区域为计算区域. 图 2 中简约布里渊区高对称点在 \mathbf{k} 空间的位置为

$$\Gamma = \frac{2\pi}{a} [0, 0],$$

$$M = \frac{2\pi}{a} [1, 0],$$

$$K = \frac{2\pi}{a} \left[\frac{3}{4}, \frac{\sqrt{3}}{4} \right].$$

3. 数值计算结果和讨论

对于空气背景中 Ge 介质柱(圆柱、正六边形柱和正方柱)构造的二维三角格子, 用平面波展开法模拟计算了不同填充比时 TE 模和 TM 模的禁带结构. 研究发现, Ge 介质圆柱和正六边形介质柱构造的二维三角格子光子晶体中均未出现完全光子禁带, 如图 3 和图 4 所示. 图中实线包围区域表示 TM 模禁带, 虚线包围区域表示 TE 模禁带, 二者没有重叠的区域, 故不存在完全光子禁带. 但在正方形 Ge 介质柱构造的二维三角格子光子晶体中, 在低频区第二条 TM 模禁带完全包围了第二条 TE 模禁带, 如图 5 所示. 当 $d = 0.47a - 0.67a$ (填充比 $f = 0.255 - 0.518$) 时存在稳定的完全光子禁带. 当 $d = 0.59a$ (填充比 $f = 0.402$) 时, 完全光子禁带最大,

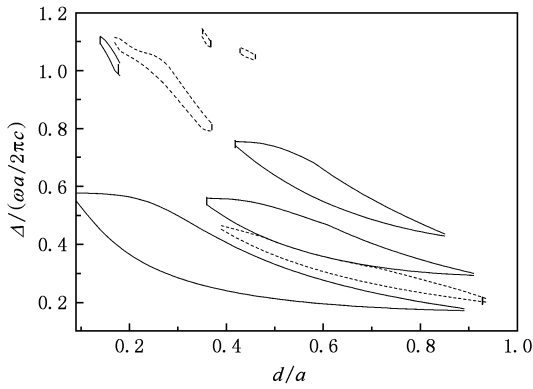


图3 Ge 介质圆柱在空气背景中构造的三角格子光子晶体 TM/TE 模禁带

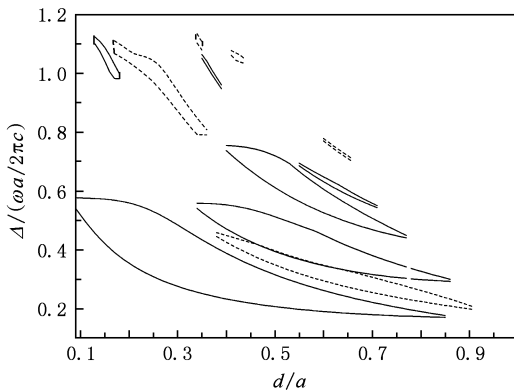


图4 Ge 正六边形介质柱在空气背景中构造的三角格子光子晶体的 TM/TE 模禁带

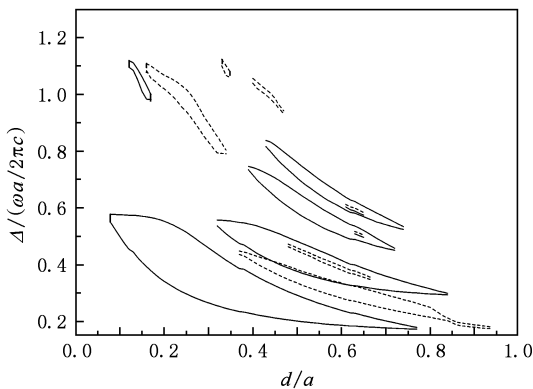


图5 正方形 Ge 介质柱在空气背景中构造的三角格子光子晶体的 TM/TE 模禁带

$\Delta_{\max} = 0.013 (\omega a/2\pi c)$. 另外第三条和第四条 TM 模禁带也分别包围了第三条和第四条 TE 模禁带, 有完全光子禁带产生, 但由于出现光子禁带时填充比的变化范围较小, 且带宽小于 $0.010 (\omega a/2\pi c)$, 可忽略.

进一步对正方形介质柱进行旋转, 发现改变该结构基点的对称性可以产生更宽的完全光子禁带. 对于 Ge 介质柱在不同旋转角度构成的光子晶体, 用平面波展开法依次计算不同填充比时 TE 模和 TM 模的禁带结构, 得到了不同旋转角度所对应出现最大完全带隙的位置和宽度. 图 6 所示为 Ge 介质柱在旋转 0° — 45° 角时最大完全光子禁带宽度的变化曲线. 由图 6 可以看出, 对于 Ge 介质正方形柱构造的 Triangular 格子光子晶体, 当 Ge 介质柱顺时针旋转 17° 时, 光子禁带宽度最大, $\Delta_{\max} = 0.026 (\omega a/2\pi c)$, 此时 $d = 0.69a$ (填充比 $f = 0.476$).

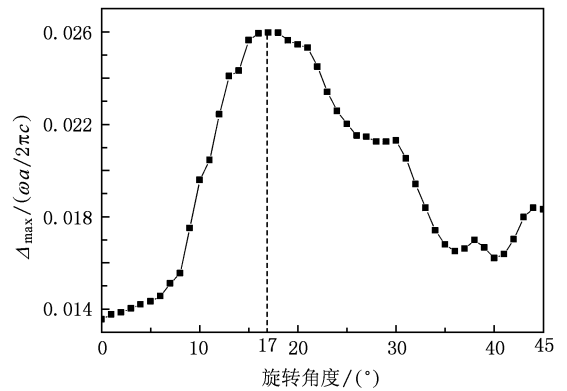


图6 Ge 正方形介质柱在空气背景中构造的三角格子光子晶体的最大完全光子禁带宽度随介质柱不同旋转角度的变化曲线

针对正方形柱 Triangular 格子结构, 进一步选取多种折射率的介质柱材料, 分别计算了在不同的旋转角度和填充比时 TE 模和 TM 模的禁带结构. 发现正方形介质柱材料的折射率 $n \geq 3.2$ 时, 在低频区 (频率小于 $0.500 (\omega a/2\pi c)$) 开始出现完全光子禁带; 并且都在顺时针旋转 17° 时, 完全光子禁带宽度最大. 图 7 所示为低频区最大光子禁带宽度随介质折射率的变化曲线. 介质折射率变化对完全光子禁带宽度的影响非常小, 最大完全光子禁带宽度稳定在 $\Delta = 0.026 (\omega a/2\pi c)$ 附近.

当介质柱材料的折射率低于 3.2 时, 虽然低频区的完全光子禁带消失, 但在高频区 (频率大于 $0.500 (\omega a/2\pi c)$) 还有光子带隙存在. 正方形介质柱材料的折射率 $n = 2.2$ — 4.0 时, 在高频区存在完全光子禁带, 并且都在介质柱的顺时针旋转 30° 时, 完全光子禁带宽度最大. 图 8 给出高频区最大完全光子禁带宽度随介质折射率的变化曲线, 可以看出最大禁带宽度随介质折射率的增大先增大后减小. 介质材料的折射率 $n = 2.60$ 时, 完全光子禁带最大, $\Delta_{\max} = 0.065 (\omega a/2\pi c)$.

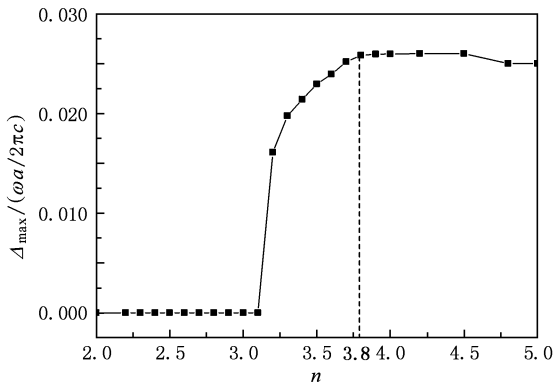


图7 正方形介质柱构成的 Triangular 格子光子晶体在低频区最大光子禁带宽度随介质折射率的变化曲线

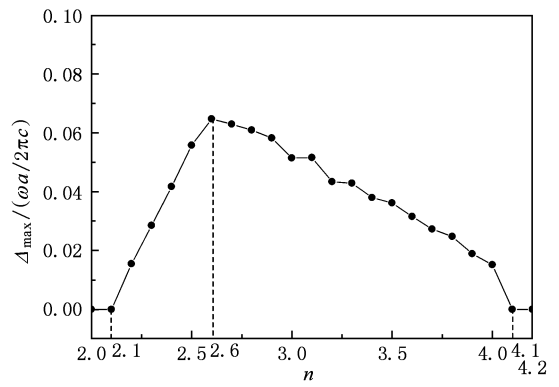


图8 正方形介质柱构成的 Triangular 格子光子晶体在高频区最大光子禁带宽度随介质折射率的变化曲线

4. 结 论

对于空气背景下 Ge 介质柱构造的二维 Triangular 格子光子晶体结构,介质圆柱和正六边柱构造的光子晶体中未出现完全光子禁带,而介质方柱构造的光子晶体有完全光子禁带出现.且介质方柱在不同的旋转角度(0° — 45°)都发现了完全光子禁带,在低频区,介质柱顺时针旋转 17° 时,完全光子禁带最宽, $\Delta_{\max} = 0.026(\omega a/2\pi c)$. 出现光子禁带

时介质材料的最低折射率阈值为 3.2,且介质材料的折射率对完全光子禁带宽度的影响很小,最大带宽稳定在 $\Delta = 0.026(\omega a/2\pi c)$ 左右;在高频区,介质柱顺时针旋转 30° 时,完全光子禁带宽度最大,但出现光子禁带的介质材料的最低阈值可以降到 2.2. 当介质柱材料的折射率为 2.6 时,光子禁带宽度最大, $\Delta_{\max} = 0.065(\omega a/2\pi c)$. 这些数值研究结果可为二维介质柱型 Triangular 格子光子晶体的实验制作和应用提供理论依据.

- [1] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [2] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [3] Takeda H, Yoshino K 2003 *Phys. Rev. B* **67** 245109
- [4] Cai X H, Zheng W H, Ma X T, Ren G, Xia J B 2005 *Chin. Phys. B* **14** 2507
- [5] Villeneuve P R, Piche M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4969
- [6] Lin P, Wataru N, Yeshaiahu F 2003 *Appl. Opt.* **42** 5450
- [7] Jin C J, Johnson N P, Chong H M 2005 *Opt. Express* **13** 2295
- [8] Ng W N, Leung C H, Lai P T 2008 *Nanotechnol.* **19** 255302
- [9] Kengo N, Shota K, Toshihiko B 2007 *Opt. Express* **15** 7506
- [10] Knight J C 2003 *Nature* **424** 847
- [11] Russell P 2003 *Science* **299** 358
- [12] Gruning U, Lehmann V, Ottow S 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 747
- [13] Meade R D, Brommer K D, Rappe A M 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 495
- [14] Joannopoulos J D, Villeneuve P R 1997 *Nature* **386** 143
- [15] Bostan C G, Ridder R M 2002 *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **54** 4921
- [16] Ma Z, Ogusa K 2009 *Opt. Commun.* **282** 1322
- [17] Feng S S, Shen L F, He S L 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1540 (in Chinese) [冯尚申、沈林放、何赛灵 2004 物理学报 **53** 1540]
- [18] Anderson C M, Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
- [19] Neff C W, Summers C J 2005 *Opt. Express* **13** 3166
- [20] Zhong K, Zhang H Y, Zhang Y P, Li X F, Wang P, Yao J S 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 7029 (in Chinese) [钟凯、张会云、张玉萍、李喜福、王鹏、姚建铨 2007 物理学报 **56** 7029]

Band gap characteristics of two-dimensional photonic crystals made of a triangular lattice of dielectric rods^{*}

Yang Yi-Biao¹⁾ Wang Shuan-Feng^{1)†} Li Xiu-Jie²⁾ Wang Yun-Cai¹⁾ Liang Wei²⁾

1) (*Department of Physics, College of Science, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

2) (*College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

(Received 20 July 2009; revised manuscript received 26 November 2009)

Abstract

Plane wave expansion method is applied to simulate the bandgap of two-dimensional photonic crystals made of a triangular lattice of dielectric rods (circular, hexagon, square cross sections) in air. Moreover, the effect on band gap of a triangular lattice of square dielectric rods in air is discussed as a function of the rotation angle, the refractive index and the filling fraction, respectively. In the low frequency region, the maximum complete photonic band gap appears when the rotation angle equals 17 degrees. the maximum complete photonic band gap can be attained steadily as the refractive index changes continuously. In the high frequency region, the maximum complete photonic band gap appears when the rotation angle equals 30 degrees. The complete photonic band gap is observed when the refractive index is greater than 2.2. The width of complete photonic band gap reaches the maximum when the dielectric refractive index is equal to 2.6.

Keywords: photonic crystals, photonic bandgap, plane wave expansion method, triangular lattice

PACC: 7820P, 4270Q

^{*} Project supported by the International Science and Technology Cooperation Foundation of Shanxi Province, China (Grant No. 2007081019).

[†] Corresponding author. E-mail: wsf198503@sohu.com