

# 利用复式晶胞实现二维正方形布拉菲 格子光子晶体的完全带隙

仇高新<sup>1)</sup> 林芳蕾<sup>1)</sup> 李永平<sup>1,2)†</sup>

<sup>1)</sup> 中国科学技术大学物理系, 合肥 230026)

<sup>2)</sup> 中国科学技术大学结构分析开放实验室, 合肥 230026)

(2002 年 5 月 21 日收到, 2002 年 7 月 28 日收到修改稿)

利用较为简单的正方形布拉菲格子, 采用复式晶胞实现了简单晶胞所不能实现的二维光子晶体的完全带隙, 并用优化算法对复式晶胞的结构参数进行了讨论, 得到了具有完全的、带隙宽度尽量大的二维光子带隙材料结构。

关键词: 光子晶体, 正方形布拉菲格子, 复式晶胞, 二维完全光子带隙

PACC: 4270Q, 7820

## 1. 引 言

近年来, 电磁波在空间折射率呈周期性变化的介质材料(即光子晶体)中的行为越来越受到重视。光子在光子晶体中的行为规律与电子在固体中的某些行为规律类似, 即具有光子的能带和能隙结构<sup>[1-3]</sup>。频率处在光子晶体禁带区域中的电磁波在任何方向上都无法在光子晶体中传播, 这样适当的结构就能实现对光传播的控制。这使它在实际应用中具有重要的意义, 如滤波器、频率稳定器、温度传感器、光子开关等。最具有吸引力的是光子晶体材料, 可以用它来制作超小型的光学元件, 在制作集成光路的元件及光传输处理器件等方面存在巨大的潜在应用价值<sup>[4-7]</sup>。

与三维光子晶体相比, 二维光子晶体无论是在理论研究还是实际制作方面都相对容易得多<sup>[8,9]</sup>。在研究二维光子晶体时, 电磁波可以分解为  $E$  极化和  $H$  极化。对于任何一种极化模式, 光子晶体如果使某些频段的电磁波在任何方向上都无法在光子晶体中传播, 则该频率就处于光子晶体的带隙之中。一个完全的光子带隙就是无论对于  $E$  极化还是  $H$  极化该处都存在带隙, 并且二者的带隙重合。

光子晶体的潜在用途中最重要的就是如何有效

地利用它的能带结构, 所以制作具有完全的、带隙宽度尽量大的光子带隙材料在应用上是一个很重要的研究课题<sup>[10-13]</sup>。

众所周知, 对于二维正方形布拉菲格子的光子晶体, 不论所取结构是空气中的介质柱还是介质中的空气柱, 都不存在完全的光子带隙。但是这种结构简单的二维光子晶体相对较容易制作, 所以如何利用这样较为简单的结构实现完全带隙将会是一个有意义的课题。由于  $E$  极化的带隙容易出现在高介电常数的介质孤立分布的结构中(如处在空气中的介质柱的光子晶体), 而  $H$  极化容易出现在介质较为连续分布的结构中(如介质中空气柱的光子晶体), 所以为了得到具有完全带隙的二维光子晶体, 就可以把这两套晶格套接起来, 用复式的晶胞来实现<sup>[10,12]</sup>。

## 2. 计算结果举例

对于这种正方形布拉菲格子复式晶胞结构的光子晶体, 有哪些主要因素影响它们的完全带隙呢? 本文将分析这个问题。在本文的计算中所取介质是 GaAs, 相对介电常数为  $\epsilon = 11.4$ 。计算的方法是标准平面波展开法。

通过分别计算  $E$  极化与  $H$  极化的色散曲线, 可

† 通讯联系人, E-mail: liyp@ustc.edu.cn.

以发现,它们的带隙位置和大小很不相同,为了尽量使它们各自的带隙有最大程度的重合,在一定程度上降低这个复式格子的对称性、周期性,就有可能做到这一点<sup>[14]</sup>.

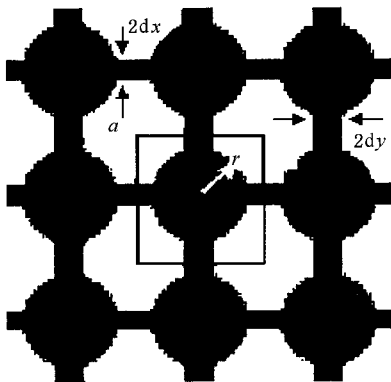
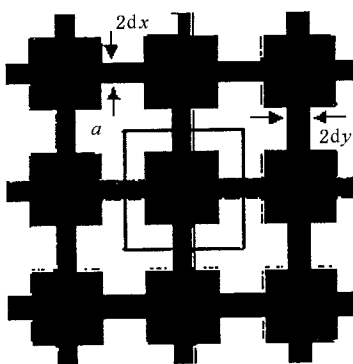


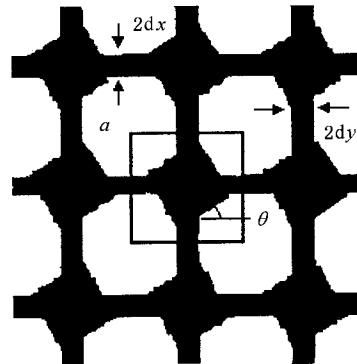
图1 由空气中的介质圆柱和介质网格组成的复式晶胞的二维光子晶体

首先对这样的复式格子加以计算,是由介质圆柱和介质网格(即空气方形柱)套在一起组成,晶胞的范围由图1方框标出.圆柱的半径为 $r$ ,网格中介质带在 $x$ 方向和 $y$ 方向的宽度分别为 $2dx$ 和 $2dy$ (如图1所示).利用优化方法来寻求这三个结构参数 $r, dx, dy$ 取何值时使第一完全带隙最大化.本文的优化结果是当 $r = 0.317a$ ( $a$ 为晶胞常数), $dx = 0.026a, dy = 0.031a$ 时第一完全带隙具有最大值为 $0.0711c/a$ .其位置位于色散曲线的第五到第六个带之间.这种结构比完全对称结构(即 $dx = dy$ )的带隙( $0.0685c/a$ )要大.

为了进一步寻求优化增大完全光子带隙的条件和方法,我们尝试了其他的几种复式格子,详细计算了它们带隙的大小和位置,并加以比较.



(a) 介质柱的边与网格平行



(b) 方形介质柱旋转  $\theta$  角

图2 由方形介质柱和网格组成的复式晶胞的二维光子晶体

例如我们把原来复式格子中间的介质圆柱分别换成正方形介质柱和椭圆形介质柱 $90^\circ$ 或 $180^\circ$ 旋转对称的几何体.当格子中间是正方形介质柱(边长为 $l$ )时,在如图2所示,这种方形横边的方向和介质网格的方向之间的夹角为零度时,在 $l = 0.275a, dx = dy = 0.027a$ 时,得到第一个完全带隙最大值为 $0.0593c/a$ .在这种情况下,样品的完全带隙要比圆形的介质柱有所减小,但是可以利用方形柱只有 $90^\circ$ 旋转对称性的性质,改变 $\theta$ 角,寻求出现更大完全带隙的情况.实验数据表明,旋转对该带隙的影响并不大,带隙的最大值出现在 $\theta = \pm 0.130\pi$ 处,带隙的最小值出现在 $\theta = \pm 0.600\pi$ 处,最大值和最小值分别为 $0.0602c/a$ 和 $0.0466c/a$ .从图3可以看出带隙随旋转角度的变化是沿 $\theta = 0$ 对称的.

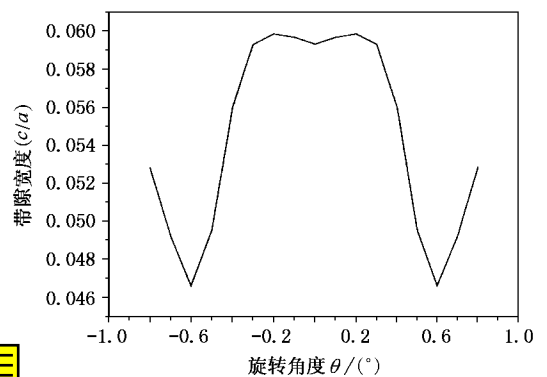


图3 由正方形介质柱和介质网格组成的复式晶胞光子晶体的第一完全带隙与介质柱旋转角  $\theta$  的关系

当格子中间为椭圆柱时,如图4所示,这种椭圆长轴方向和介质网格方向之间的夹角为零度时,当

椭圆长半轴为  $0.302a$  ,短半轴为  $0.322a$  , $dx = 0.019a$  , $dy = 0.029a$  时 ,带隙最大值为  $0.0746c/a$  . 这种情况下样品的完全带隙比圆形介质柱的情形有所增大 . 同样可以类比矩形介质柱的情况 ,改变椭圆长轴方向和介质网格方向之间的夹角 ,通过优化计算的数据表明 ,完全带隙的最大值出现在椭圆长半轴为  $0.302a$  ,短半轴为  $0.316a$  , $dx = 0.024a$  , $dy = 0.029a$  , $\theta = -0.043\pi$  处 ,最大值较  $\theta = 0$  时的变化很小 ,其值为  $0.0752c/a$  .

图 5 给出在角度为零情况下各种晶胞完全带隙取最大值时的色散曲线 . 可以看出 ,不同的复式晶胞对色散曲线的影响尤其是较低频率的带结构影响不是很大 . 它们在完全带隙的大小上也略有差异 ,见图 5 .

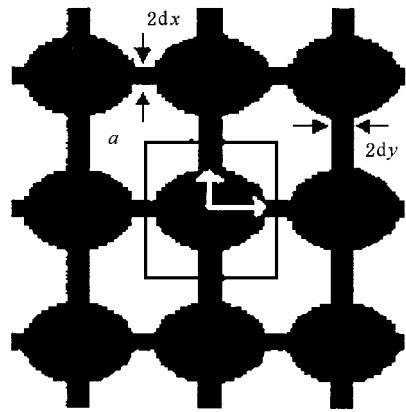


图 4 由椭圆形介质柱和介质网格组成的复式晶胞的二维光子晶体

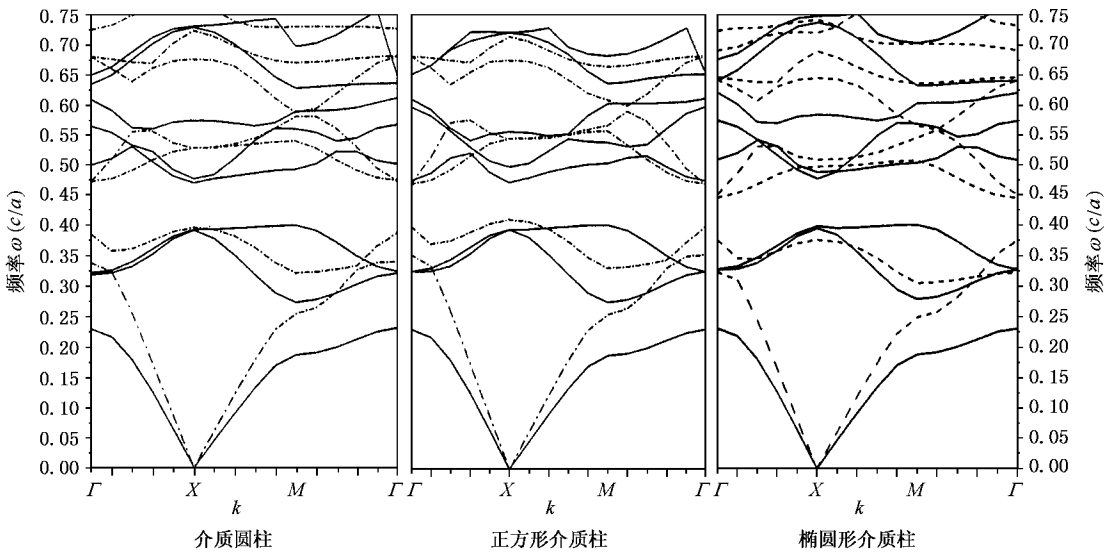


图 5 在晶胞中心介质分别采用圆柱、正方形柱和椭圆形柱时完全带隙取最大值时的色散曲线 虚线表示 H 极化 ,实线表示 E 极化

### 3. 结 论

本文研究了二维情况下正方形布拉菲格子复式

晶胞 ,并用它实现了完全的带隙 ,这与采用简单晶胞无法出现完全带隙是不同的 . 并且对不同晶胞的结构做了优化设计 ,得到了使第一完全带隙最大化的结构参数 .

[ 1 ] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059  
 [ 2 ] He Y J , Su H M , Wang H Z , Tang Q F and Dong P 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 892 [ in Chinese ] 何拥军、苏慧敏、汪河洲、唐琼芳、董 鹏 2001 物理学报 **50** 892 ]  
 [ 3 ] Wang H and Li Y P 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2172 [ in Chinese ] [ 王 辉、李永平 2001 物理学报 **50** 2172 ]  
 [ 4 ] Gu G C , Li H Q , Chen H T , Chen H and Wu X 2000 *Acta Opt. Sin.* **20** 728 [ in Chinese ] 顾国昌、李宏强、陈洪涛、陈 宏、吴

- 翔 2000 光学学报 20 728 ]
- [ 5 ] Soukoulis C M 1996 *Photonic Band Gap Materials* ( Dordrecht :Kluwer Academic )
- [ 6 ] Johnson S G 2001 *Photonic Crystals :From Theory to Practice PhD* Physics MIT
- [ 7 ] Knight J C , Briks T A and Atkin D M 1996 *Opt . Lett .* **21** 1547 , erratum 1997 **22** 484
- [ 8 ] Lin S Y , Arjavalngam G and Robertson W M 1994 *J. Mod. Opt.* **41** 385
- [ 9 ] Noda S *et al* 2001 *Science* **293** 1123
- [ 10 ] Qiu M and He S 2000 *J. Opt. Soc. Am. B* **17** 1027
- [ 11 ] Li Z Y , Gu B Y and Yang G Z 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2574
- [ 12 ] Anderson C M and Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
- [ 13 ] Cox S J *et al* *J. Appl. Math.* **59** 2108
- [ 14 ] Hillebrand R , Hergert W and Harms W 2000 *Phys. Status Solidi B* **217** 981

## Implementation of complete two-dimensional bandgap in photonic crystals of square Bravais lattice using complex unit cell

Qiu Gao-Xin<sup>1)</sup> Lin Fang-Lei<sup>1)</sup> Li Yong-Ping<sup>1 2)</sup>

<sup>1)</sup>*Department of Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China )*

<sup>2)</sup>*Structure Research Laboratory , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China )*

( Received 21 May 2002 ; revised manuscript received 28 July 2002 )

### Abstract

In two-dimensional photonic crystals of square Bravais lattice , complex unit cell was considered to achieve a complete bandgap. By adding an optimal algorithm in our calculation , the structure parameters of photonic crystals with the largest complete two-dimensional bandgap were obtained.

**Keywords** : photonic crystals , square Bravais lattice , complex unit cell , complete two-dimensional photonic bandgap

**PACC** : 4270Q , 7820