

基元配置对二维光子晶体不同能带之间带隙的调节和优化^{*}

许振龙^{1)2)†} 吴福根²⁾

1) (湄洲湾职业技术学院, 莆田 351254)

2) (广东工业大学实验教学部, 广州 510090)

(2008 年 8 月 21 日收到, 2008 年 12 月 16 日收到修改稿)

介绍一种方法来调节和优化二维光子晶体不同能带之间的带隙. 在单胞中任意位置增加一个基元, 可以调节不同能带之间的带隙. 而且固定两个基元的最佳位置, 调节两个基元柱体边长, 可以找到一个合适的配置, 使各自的带隙相对带宽达到更大值. 同时结果也表明双基元情况下, 不同能带之间带隙优化对系统对称性要求不同, 频率越高处的带隙优化要求系统对称性越低.

关键词: 光子晶体, 带隙, 配置, 对称性

PACC: 4270Q, 7820P, 7115A

1. 引言

光子晶体是电介质材料周期性排列的人工复合的功能材料^[1,2]. 当电磁波在介电常量受到周期性调制的复合介质中传播时, 会产生光子带隙. 光子晶体的应用主要基于光子带隙的存在与宽度^[3-5]. 产生光子带隙的瓶颈之一是光子晶体布里渊区高对称点出现的简并态, 改变光子晶体的对称性使简并态分立从而得到光子带隙是科学家们的共识, 因而科学家们设计各种光子晶体结构对光子带隙进行优化. 基于这个理念, 有多种方法被用于改变光子晶体对称性, 如在二维晶格单胞的中心插入一个小柱体^[6], 降低散射体的对称性^[7], 采用不同的晶格结构^[8], 使标准的晶格发生形变^[9]等.

然而, 先前的研究主要是最低带隙的调节和优化, 受到 Nojima 等人^[10] 研究工作的启发, 本文介绍一种方法用于调节并优化多条能带之间的带隙. 我们在单个基元的单胞中增加一个基元, 并调节两个基元配置, 使不同能带之间带隙的相对带宽得到优化. 为了便于比较, 我们还研究了单个基元单胞的

情况.

2. 模型和方法

对于二维光子晶体, 当电磁波沿垂直于光子晶体轴向传播时, 电磁场分解为 E 和 H 两种偏振模式的线性叠加, 它们的电场矢量分别平行和垂直于柱体的轴向. 本文中仅考虑 E 偏振模式. 考虑到当散射体对称性与晶格的对称性相同时能产生最大的完全光子带隙^[11], 而且由于 E 偏振的带隙容易出现在高介电常数的介质孤立分布的结构中^[12], 我们研究的模型二维方形晶格的光子晶体如图 1(a), 由无限多 $\epsilon_a = 15.0$ 方形介质柱体置于空气($\epsilon_b = 1.0$)基体中, 单胞中任意位置增加一个介质柱体基元后结构模型如图 1(b).

本文所有能带结构用平面波展开法^[13-16] 计算, 使用 1681 个平面波, 计算误差小于 0.8%. 并采用相对带宽^[10] Q_{ij} (又称宽高比^[17]) 来评价带隙的品质, 相对带宽 $Q_{ij} \equiv \Delta\omega_{ij}/\omega_{ij}$, $\Delta\omega_{ij} = \omega_j - \omega_i$ 是带隙绝对宽度, $\omega_{ij} = \omega_j + \omega_i$ 是带隙中间频率.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10674032)和广东省自然科学基金(批准号: 2021480)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhenlongxu@sohu.com

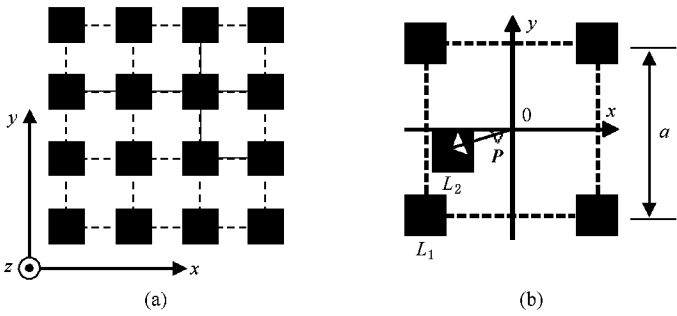


图 1 (a)二维方形晶格结构的光子晶体模型;(b)单胞中任意位置增加一个基元后的光子晶体模型(P 表示第二个基元的位移, a 是晶格常数)

3. 结果和分析

3.1. 单基元情况

为了比较,我们先计算单个基元单胞产生的带隙的相对带宽 Q_{ij} . 我们把基元的边长 L_1 从 0 调到 $1.0a$ (最大可能值), 并观察多条能带之间的带隙相对带宽. 计算结果如图 2, 带隙在不同范围逐渐展开. 其中, 1—2 能带之间的带隙在较大范围 ($0.13a \leq L_1 \leq 0.76a$) 内展开, 当 $L_1 = 0.32a$ 时 Q_{12} 达到最大值 0.440. 3—4 能带之间的带隙在最后打开, 展开范围为 $0.36a \leq L_1 \leq 0.73a$, 当 $L_1 = 0.50a$ 时, Q_{34} 达到最大值 0.212. 4—5 能带之间的带隙在范围 $0.28a \leq L_1 \leq 0.38a$ 内展开, 当 $L_1 = 0.33a$ 时, Q_{45} 达到最大值 0.055. 值得关注的是 2—3, 5—6 之间的带隙一直无法打开.

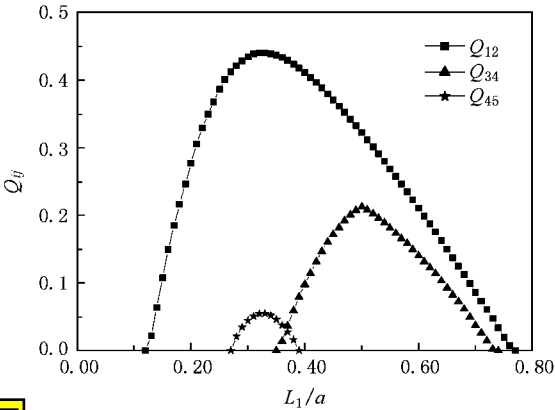


图 2 单基元情况下不同能带之间的带隙相对带宽 Q_{ij} 与单个基元边长 L_1 之间的关系图

3.2. 双基元情况

我们研究单个基元的单胞中任意位置中增加一个基元时的各带隙相对带宽 Q_{ij} . 两个方形基元柱体的边长为 $L_1 = 0.20a, L_2 = 0.20a$. 图 3 表示的是 Q_{ij} 的等高线, 等高线上各点是第二个基元中心所在位置的点, 这四个图与带隙的对应关系分别为 (a) 对应 1—2 带隙 (Q_{12}), (b) 对应 2—3 带隙 (Q_{23}), (c) 对应 4—5 带隙 (Q_{45}), 和 (d) 对应 5—6 带隙 (Q_{56}). 3—4 带隙无法打开 ($Q_{34} = 0$). 在图的四个角上的深黑色方形表示第一个基元的四分之一, 邻近的灰色区域为第一个基元和第二个基元将存在重叠的区域. 在最黑区域带隙相对带宽 Q_{ij} 为 0, 越亮的地方 Q_{ij} 越大.

首先, 我们来看图 3(a) 1—2 能带之间带隙相对带宽 Q_{12} 等高线, 相对带宽 Q_{12} 一系列最大值为 0.247, 最大值出现在第二个基元和第一个基元最靠近的位置. 当第二个基元逐渐远离第一个基元, Q_{12} 逐渐减小, 最后在单胞的中心消失. 我们尝试调节两个方形基元柱体的边长而不改变它们得到最大 Q_{12} 时的相邻状态, 试图得到更大的 Q_{12} . 分别给定第一个基元边长 $L_1 = 0.20a$ 和 $0.40a$, 调节第二个基元边长, 结果在图 4 中表示, 当 $L_1 = 0.20a, L_2 = 0$ 时, Q_{12} 达到最大值 0.258. 当 $L_1 = 0.40a, L_2 = 0$ 时, Q_{12} 达到最大值 0.422. 尽管我们做了更多调节工作, 1—2 能带之间的带隙 Q_{12} 仍无法超过只有一个基元时的情况. 如果从基元边长调节的情况分析, 可以发现当第一个基元边长较大, 而第二个基元边长较小时, Q_{12} 更大, 也可以说增加的基元使得 Q_{12} 更难得到优化. 而且在两个基元邻近时才可以得到较大带隙, 换句话说, 如果两个基元合成一个基元或者说只是增

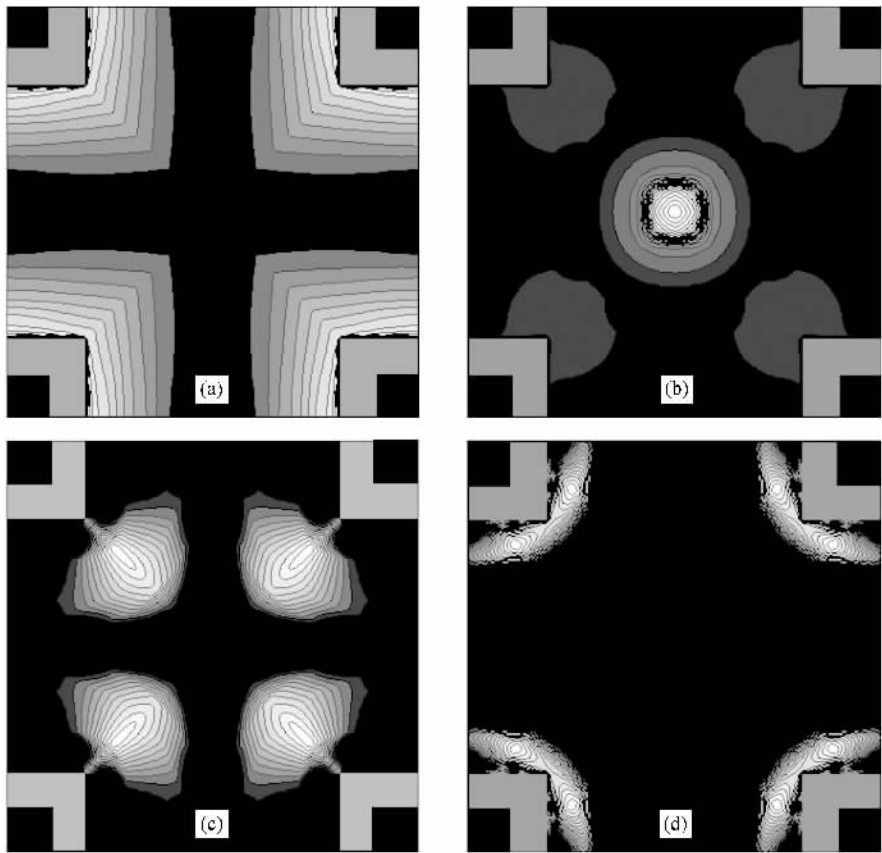


图 3 相对带宽 Q_{ij} 的等高线图(等高线上各点是第二个基元中心所在) (a) Q_{12} ;(b) Q_{23} ;(c) Q_{45} ;(d) Q_{56}

大了单个基元的填充率会得到较大带隙.进一步,我们从系统的点群对称性对 Q_{12} 影响方面分析,如果只有一个基元,晶体的点群对称操作属于 C_{4v} 点群,具有 8 个对称操作,增加的基元导致系统对称性降低.以上结果表明高对称性更有利于在 1—2 能带之间带隙增大.

图 3(b)表示的是 2—3 能带之间带隙相对带宽 Q_{23} 的等高线.与 Q_{12} 相反,当第二个基元逐渐远离第一个基元时, Q_{23} 值增大并在单胞中心达到最大值 0.404.同样,为了得到一个更大的 Q_{23} ,我们保持第二个基元在中心位置不变,结构模型如图 5(a).分别给定第一个基元边长 $L_1 = 0.20a$ 和 $0.40a$,观察 Q_{23} 随第二个基元边长 L_2 的变化,计算结果如图 5(b)所示.当 $L_1 = 0.20a, L_2 = 0.23a$ 时, Q_{23} 为 0.418.当 $L_1 = 0.40a, L_2 = 0.34a$ 时, Q_{23} 为 0.299.当单胞中只有一个基元时,无论如何调节基元大小,2—3 能带之间带隙无法打开.双基元情况下,如果第二个基

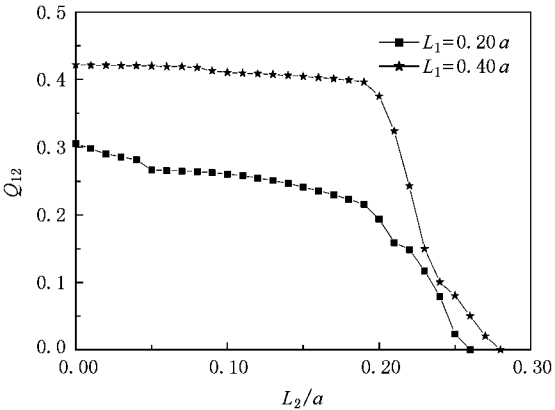


图 4 分别给定 $L_1 = 0.20a$ 和 $0.40a$ 时,相对带宽 Q_{12} 和 L_2 的关系图

元放置在单胞的中心位置,很容易地得到较大带隙,也可以说双基元情况下,系统的这种点群对称性有利于 2—3 能带得到一个大的带隙.此时系统的点群对称操作还是属于 C_{4v} 点群,具有 8 个对称操作.

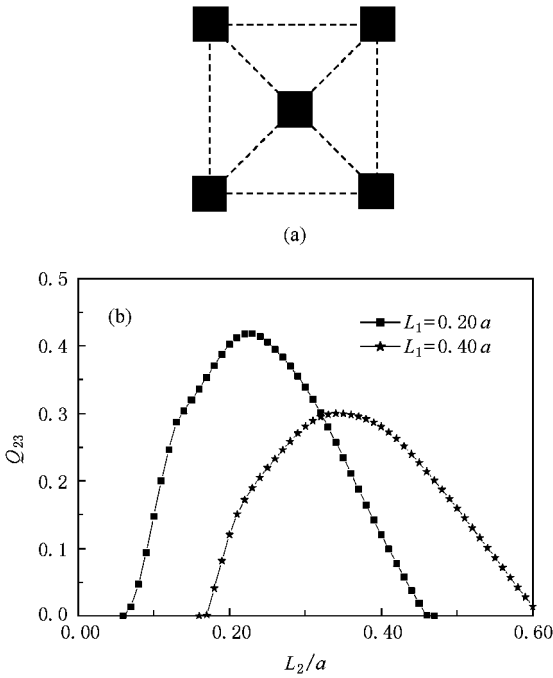


图 5 (a)相对带宽 Q_{23} 最大时光子晶体模型 ($L_1 = 0.20a, L_2 = 0.20a$) ;(b)分别给定 $L_1 = 0.20a$ 和 $0.40a$ 时,相对带宽 Q_{23} 和 L_2 的关系图

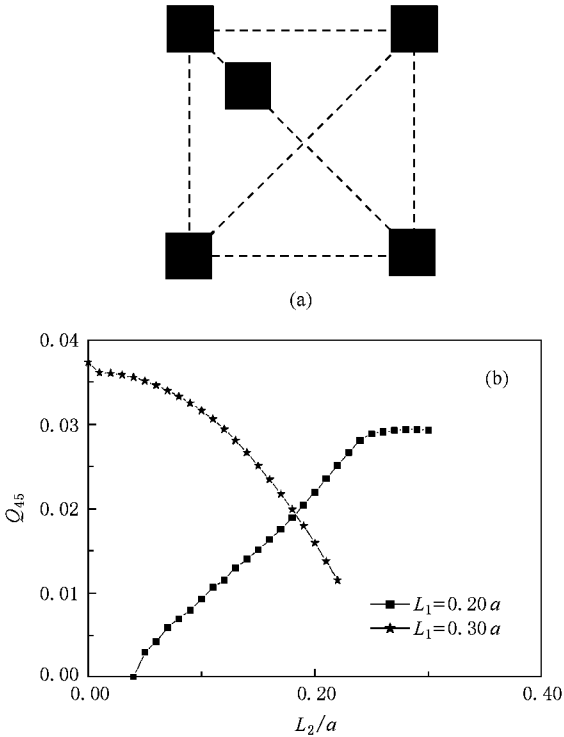


图 6 (a)相对带宽 Q_{45} 最大时光子晶体模型 ($L_1 = 0.20a, L_2 = 0.20a$) ;(b)分别给定 $L_1 = 0.20a$ 和 $0.30a$ 时,相对带宽 Q_{45} 和 L_2 的关系图

图 3(c) 为 4—5 能带之间带隙相对带宽 Q_{45} 的等高线图,在图中最亮区域的中心 ($x = \pm 0.24a, y = \pm 0.24a$) 得到 4—5 能带之间的带隙相对带宽 Q_{45} 最大值 (0.022). 为了得到更大 Q_{45} , 我们在 $x = \pm 0.24a, y = \pm 0.24a$ 四个位置中的一个位置 (如图 6(a)) 增加第二个基元, 并调节两个基元边长结果表示在图 6 (b). 分别给定第一个基元的边长 $L_1 = 0.20a$ 和 $0.30a$, 观察 Q_{45} 随第二个基元边长 L_2 的变化. 当 $L_1 = 0.20a, L_2 = 0.30a$ 时, 得到相对带宽 Q_{45} 达到最大值 0.026. 当 $L_1 = 0.30a, L_2 = 0.037$ 为最大值. 虽然通过不断调节, 我们还是无法得到一个比单个基元情况下更大的带隙. 同时我们也注意到在双基元情况下, 比较其他位置而言, 采用在最佳位置增加一个基元的做法可以得到较大带隙, 此时系统的对称性降低, 系统的对称操作只剩下属于 C_{4v} 点群的两个对称操作.

最后, 我们研究 5—6 能带之间带隙相对带宽 Q_{56}, Q_{56} 等高线如图 3(d). 当第二个基元位于 $x = \pm 0.25a, y = \pm 0.39a$ 和 $x = \pm 0.39a, y = \pm 0.25a$ 八个位置中的任一个位置时 Q_{56} 得到最大值 0.012. 当 Q_{56} 最大时配置如图 7(a), 系统的对称操作只剩下属于 C_{4v} 点群操作的一个对称操作, 即不变操作 E .

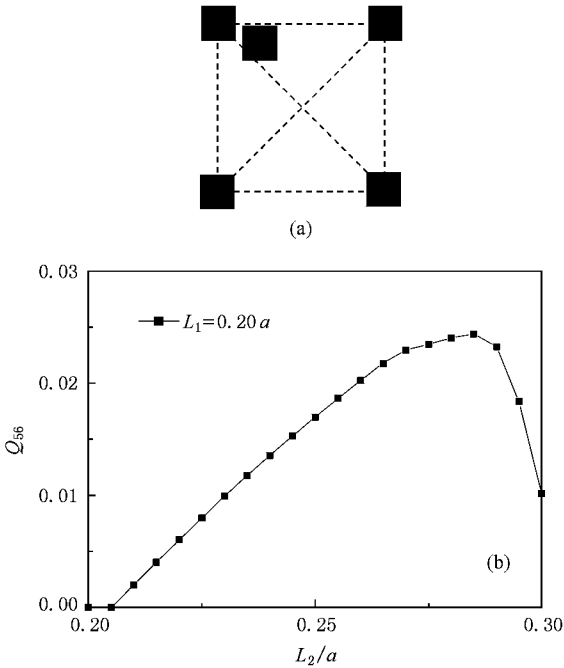


图 7 (a)相对带宽 Q_{56} 最大时光子晶体模型 ($L_1 = 0.20a, L_2 = 0.20a$) ;(b)给定 $L_1 = 0.20a$ 时, 相对带宽 Q_{56} 和 L_2 的关系图

为了得到一个更大的 Q_{56} , 我们保持两个基元如图 7

(a) 位置不变, 在给定第一个基元边长为 $L_1 = 0.20a$, 当 $L_2 = 0.28a$ 时 Q_{56} 达到最大值 0.024. 而在只有一个基元的情况下, 5—6 能带之间带隙无法打开.

以上的调节中(在单胞中任意位置增加一个基元, 且 $L_1 = 0.20a$, $L_2 = 0.20a$) 3—4 能带之间带隙无法打开. 对双基元情况下得到较大带隙时系统的对称性分析中我们得到启发, 设想通过设计一种系统来打开 3—4 能带之间带隙. 这种系统的对称性介于

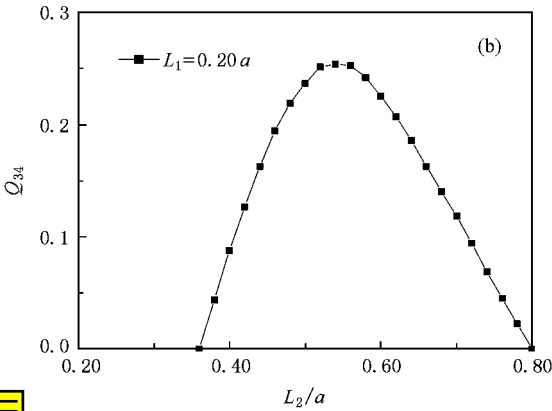
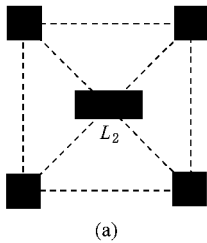


图 8 (a) 在单胞中心位置引入一个长方形柱体基元后光子晶体模型 ($L_1 = 0.20a$, $L_2 = 0.40a$) ; (b) 给定 $L_1 = 0.20a$ 时, 相对带宽 Q_{34} 和 L_2 的关系图

Q_{23} 和 Q_{45} 最大时的系统的对称性之间, 也就是系统的点群对称操作属于 C_{4v} 点群, 且对称操作数介于 8 个和 2 个之间, 因此我们在单胞的中心位置引入一个长方形柱体状基元, 此时系统的点群对称操作属于 C_{4v} 点群的 4 个对称操作. 我们选择长方形的两边长比为 2.5. 保持两个基元如图 8(a) 位置不变, 在给定第一个基元边长为 $L_1 = 0.20a$, 调节 $L_2 = 0.54a$ 时 Q_{34} 达到最大值 0.254, 也可高于调节单个基元时得到的最大相对带宽值.

4. 结 论

以上研究中, 我们在单胞中任意位置增加一个基元, 可以调节不同能带之间的带隙. 而且可以固定两个基元的最佳位置, 调节两个基元柱体边长, 找到一个合适的配置, 使各自的带隙相对带宽达到更大值. 同时结果也表明双基元情况下, 不同能带之间带隙优化对系统对称性要求不同, 频率越高处的带隙优化要求系统对称性越低.

Nojima 等人^[10] 在方形晶格单胞中任意位置增加一个介电常数不同的圆柱体基元, 通过调节找到了最佳位置使不同能带之间的带隙最大. 本文采用了方形晶格单胞中增加一个介电常数相同的方柱体基元的模型, 在固定两个基元的最佳位置后, 继续调节两个基元柱体边长, 可以找到一个合适的配置, 使不同能带之间的带隙得到进一步优化. 特别是通过对系统对称性的分析, 在单胞的中心位置引入一个长方形基元柱体, 对 3—4 能带之间带隙的打开和优化是非常有效的. 这种方法将有效用于设计光子晶体多条能带之间的带隙结构.

[1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
[2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
[3] Wen X S 2006 *Theory and Technology of Photonic/Phononic Crystals* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [温熙森 2006 光子/声子晶体理论与技术(北京: 科学出版社)]
[4] Anderson C M, Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
[5] Biswas R, Sigalas M M, Ho K M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 205121
[6] Zhang X D, Zhang Z Q, Li L M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 1892
[7] 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]

[8] Zeng J, Pang J Y, Dong J W, Wang H Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2785 (in Chinese) [曾 隽、潘杰勇、董建文、汪河洲 2006 物理学报 **55** 2785]
[9] Susa N 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 3501
[10] Nojima S, Mizoi T 2005 *Phys. Rev. B* **71** 193106
[11] Wang R Z, Wang X H, Gu B Y, Yang G Z 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 4307
[12] 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]
[13] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152

- [14] Zhong K, Zhang H Y, Zhang Y P, Li X F, Wang P, Yao J Q 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]
- [15] Feng Y F, Wu F G, Zhong H L, Wu T W 2007 *Solid State Commun.* **142** 223
- [16] Cassagne D, Jouanin C, Bertho D 1995 *Appl. Phys. Lett.* **52** 2217
- [17] 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]

Photonic band gaps of two-dimensional phononic crystals tuned and optimized by modifying the configuration *

Xu Zhen-Long^{1)2)†} Wu Fu-Gen²⁾

1) (Meizhouwan Vocational Technology College, Putian 351254, China)

2) (Department of Experiment Education, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510090, China)

(Received 21 August 2008 ; revised manuscript received 16 December 2008)

Abstract

A method is introduced to tune and optimize the photonic band gaps (PBGs) of two-dimensional photonic crystals (PCs). PBGs between the bands at low frequency can be tuned by an additional atom rod at arbitrary positions. Moreover, fixing up the two atom rods at optimal positions and tuning the lengths of the two cylinders, the normalized gap widths of PBGs could be enlarged with a suitable configuration. The results also show that the setting up of large PBGs depends on different degrees of symmetry of the system in the case of two atom rods in a unit cell, the larger PBGs at higher frequency require lower symmetry.

Keywords : photonic crystal, band gap, configuration, symmetry

PACC : 4270Q, 7820P, 7115A

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674032) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 6021480)

† Corresponding author. E-mail : zhenlongxu@sohu.com