第 53 卷 第 6 期 2004 年 6 月
1000-3290/2004/53(06)/1845-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.53,No.6,June,2004
©2004 Chin.Phys.Soc.

不同晶格光子晶体异质结的界面传导模*

刘江涛[1)] 周云松[1)†] 王福合[1)] 顾本源[2)]

[1)](首都师范大学物理系,北京 100037)

[2)](中国科学院物理研究所,北京 100080)

(2003 年 9 月 9 日收到;2003 年 10 月 24 日收到修改稿)

利用平面波展开方法与超原胞方法研究了两种不同晶格的光子晶体异质结的界面态. 这两种异质结都是在纯电介质背景上放置空气散射子. 一种异质结由正方形格子上放置正方形散射子和三角形格子上放置六角形散射子组成(SSTH 异质结). 另一种由长方格子上放置长方形散射子和三角形格子上放置圆形散射子组成(RRTC 异质结). 对于 SSTH 异质结,当沿着界面作晶格的横向拉开或者侧向滑移,都可产生界面态. 而对于 RRTC 异质结,无需从界面做晶格拉开或者侧向滑移就可产生界面传导模,这个结果有别于其他纯电介质光子晶体异质结的性质.

关键词:光子晶体,异质结,传导模,超原胞

PACC:4270,7340,7125

1. 引 言

由于在二维光子晶体(PC)中便于制造线缺陷,从而产生光波传导模,这个很有实际意义的性质引起了人们的广泛关注[1—4]. 在二维 PC 中去除一排散射子或者造成晶格的局部畸变都可能产生传导模. 另有一种界面结构也可以产生传导模,那就是光子晶体异质结[5—7]. 异质结由两块不同的半无限大二维 PC 组成,其界面处的畸变性可能造成局域电磁模,如果这些局域模正好处于光子带隙(PBG)之中,那就可以作为界面传导模,用于传导光信息. Li 等[5]研究了正方格子圆形散射子异质结(SCSC 异质结),界面两边只有填充因子不同. 结果表明,必须将两个子晶格沿着界面横向拉开或者纵向滑移才能在偏振带隙中产生传导模. 如果传导模能够出现在绝对 PBG 中则是更为理想的结果. 这种 SCSC 异质结没有绝对 PBG 的原因可能是由于界面两边不同的填充系数造成了两个子晶体的绝对 PBG 出现在不同的位置,交叠部分很小或者没有,那么整个异质结系统的绝对 PBG 可能因之消失. 为了弥补这个不足,我们曾设想了一种镜面对称异质结[6],界面两边的 PC 完全相同,只有散射子的旋转角方向不同,大小相等. 这样的结构使得界面两边的两个 PC 具有相同的能带结构,因此绝对 PBG 完全交叠,使得整个异质结具有尽量大的绝对 PBG,同时也产生了一个界面. 我们具体计算的结构是长方(正方)晶格上放置长方(正方)散射子的异质结(RRRR 异质结和 SSSS 异质结). 研究结果的确如我们所愿,传导模出现在绝对 PBG 中. 与 SCSC 异质结相同的情况是,仍然需要沿界面拉开或者滑移,否则没有局域模. 我们相信,增加界面处的畸变性有利于产生局域模. 鉴于磁性光子晶体具有更宽的绝对 PBG[8—10],我们也在纯电介质光子晶体中引入磁性材料,形成磁性光子晶体异质结[7]. 结果发现,不需要沿界面做任何拉开或者滑移,就可在绝对 PBG 中出现传导模. 这样的异质结更有利于实际制作.

现在我们回过头来,看看是否能够在不引入磁性材料和不做界面处移动,直接在纯电介质光子晶体异质结中发现传导模. 为此我们又计算了正方格子六角形散射子光子晶体镜面对称异质结(SHSH 异质结). 虽然也在绝对 PBG 中发现传导模,但是仍需沿界面拉开或滑移,没有新的突破. 所以我们的目光转到了不同结构纯电介质光子晶体异质结,这正是本文所要做的工作. 我们研究两种不同晶格的异质结的界面态. 这两种异质结都是在纯电介质背景上放置空气散射子. 一种异质结由正方形格子上放置正方形散射子和三角形格子上放置六角形散射

* 国家重点基础研究发展计划(批准号:001CB61040)和北京市自然科学基金(批准号:1032003)资助的课题.

† E-mail:263zys@263.net;电话:010-68902348.

子组成(SSTH 异质结). 另一种由长方格子上放置长方形散射子和三角形格子上放置圆形散射子组成(RRTC 异质结). 计算方法是平面波展开方法加超原胞方法. 结果表明,RRTC 异质结无需从界面做晶格拉开或者侧向滑移就可产生界面传导模.

本文介绍 RRTC 异质结的模型和计算结果;介绍 SSTH 异质结的模型和计算结果;将两种异质结的结果进行对比、讨论并给出结论.

2. RRTC 异质结

图 1 是 RRTC 异质结的示意图. 阴影部分是介电常数为 ε 的电介质,空白部分为真空. y 轴是界面,左右两边的 PC 是半无限大的. 左边的长方形空气散射子长边和短边分别为 l_b 和 l_a,长方形晶格的长边和短边分别为 L_y 和 L_x,θ 是旋转角. 右边三角形晶格的边长等于 L_y. 图 1 中粗黑线所包围的矩形是一个超原胞,它在界面两边各取了相同数量的散射子(或说相同数量的原胞). 在实际计算中,一共取 $N=12$ 个(两边各选取 6 个)散射子组成超原胞.

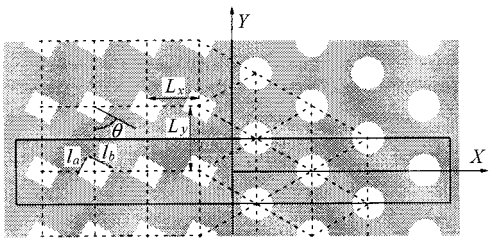

图 1 RRTC 异质结示意图(阴影部分为电介质,空白部分为空气散射子,Y 轴是界面,实线矩形框为超原胞示意图)

电磁波中磁场满足的方程为[11—13]

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

我们采用平面波展开法[11—17]求解(1)式. 具体计算中采用的平面波个数为 $M=79\times19=1501$. 考虑到文献[5—7]在计算其他异质结时,一般采用 $N=8$,$M=65\times19=1235$. 我们也用这组参数对 RRTC 异质结和 SSTH 异质结做了计算,发现用两组参数得到的 PBG 宽度的相对误差小于 2%.

鉴于文献[5—7,15]中都将介电常数取为 $\varepsilon=12.96$,本文也取这个值. 其他参数选取如下:$l_a/l_b=0.84$,$L_x/L_y=0.8$,$\theta=28°$,左右两边填充率分别为 $f_1=0.688$,$f_2=0.843$. 这样选取的原因是能够保证界面左、右两边的原型 PC 都具有最大的绝对 PBG[15],它们分别为 $\Delta\omega_1=0.053(2\pi c/L_y)$ 和 $\Delta\omega_2=0.094(2\pi c/L_y)$. 同时注意到这两个 PBG 的中心位置几乎重合[15],即 $\omega_{g1}=0.480(2\pi c/L_y)$,$\omega_{g2}=0.481(2\pi c/L_y)$. 这可以保证 RRTC 异质结的 PBG 尽量大.

计算结果如图 2. 实线、虚线分别表示 TE 模(电场平行于 xy 平面)和 TM 模(电场垂直于 xy 平面)的色散关系,两条平行线给出了绝对 PBG 的范围,实心点线和圆圈线分别表示 TE,TM 局域模(位于带隙中的部分称为传导模). 本文中其他图线,若无特殊规定,都将按此解释其意义. 可以看出,绝对 PBG 位于(0.445,0.509)$(2\pi c/L_y)$,带宽 $\Delta\omega=0.064(2\pi c/L_y)$,带宽与中心位置比 $\omega_R=13.4\%$. 在绝对 PBG 中有一条 TM 传导模和两条 TE 传导模出现,这个结果正是我们所期盼的. 因为它与其他的纯电介质光子晶体异质结不同(已经研究过的 SCSC 异质结、SHSH 异质结、RRRR 异质结和 SSSS 异质结),在没有做任何晶格移动的情况下就产生了界面传导模. 这个原因可以归结为 RRTC 异质结的结构特点,它在界面两边的子晶体具有不同类型的布拉菲格子,加大了界面处的畸变程度.

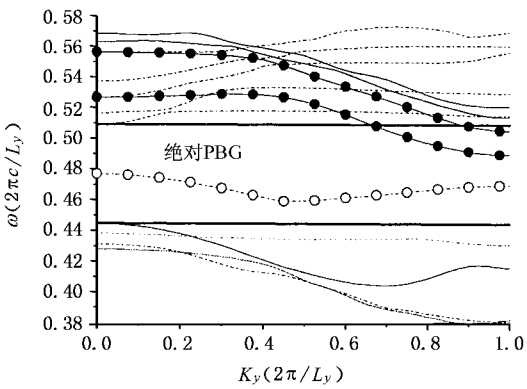

图 2 RRTC 异质结的能带结构(实线、虚线分别表示 TE 模(电场平行于 xy 平面)和 TM 模(电场垂直于 xy 平面)的色散关系,两条平行线给出了绝对 PBG 的范围,实心点线和圆圈线分别表示 TE,TM 局域模)

下面对 RRTC 异质结做进一步研究,通过移动格子调节绝对带隙和传导模. 首先将图 1 中的界面左(右)边所有空气散射子沿着 x 轴整体向左(右)移动一段距离 $|\mathrm{d}x|/2$,即所谓的拉开 $\mathrm{d}x$ 距离. 随着 $\mathrm{d}x$ 增大,局域模逐渐多了起来. 当取 $\mathrm{d}x=0.45L_y$ 时,得到了比较理想的结果,如图 3 所示. 绝对 PBG 在(0.445,0.510)$(2\pi c/L_y)$,带宽略微增加到 $\Delta\omega=$

$0.065(2\pi c/L_y)$. 主要改进在于新增了两条 TE 传导模,同时 TM 传导模也多了一条.

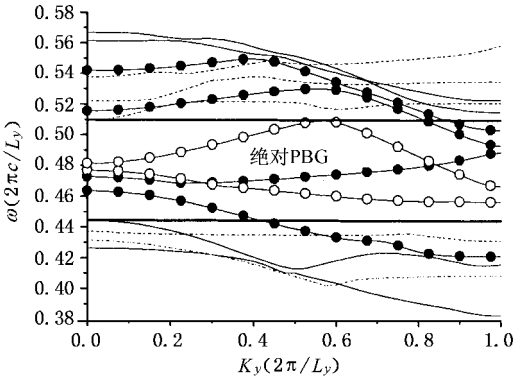

图 3　RRTC 异质结横向拉开,$dx = 0.45L_y$ 时的能带图

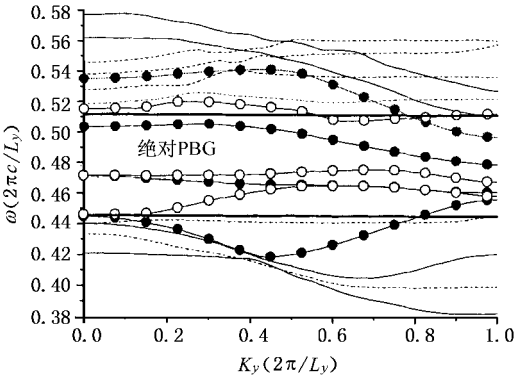

图 4　RRTC 异质结横向拉开,$dx = 0.50L_y$ 同时侧向滑移 $dy = 0.35L_y$ 时的能带图

另有一种操作是将左(右)边的散射子沿着界面(y 轴)整体向上(下)移动 $|dy|/2$,即侧向滑移 dy. 通常侧向滑移和横向拉开都是独立进行,现在同时作这两种操作,当选 $dx = 0.50L_y$,$dy = 0.35L_y$ 时,也可得到很好的结果,如图 4 所示. 坐落于(0.446, 0.512)$(2\pi c/L_y)$的绝对带隙内有四条 TE 传导模,三条 TM 传导模.

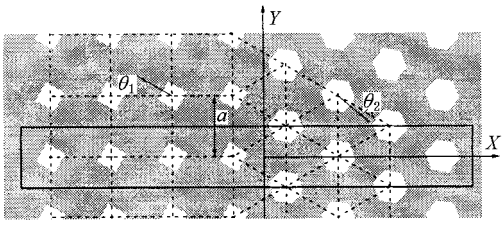

图 5　SSTH 异质结示意图

3. SSTH 异质结

SSTH 异质结的结构如图 5 所示,θ_1 和 θ_2 分别是左右两边 PC 的旋转角,其他图形及符号的意义和图 1 一致. 参照文献[15]可知,左边原型 PC 最大绝对 PBG 出现在 $\omega_{g1} = 0.425(2\pi c/a)$,带宽 $\Delta\omega_1 = 0.063(2\pi c/a)$,计算所用的参数为 $\theta_1 = 30°$,填充因子 $f_1 = 0.680$. 右边原型 PC 最大绝对 PBG 出现在 $\omega_{g2} = 0.449(2\pi c/a)$,带宽 $\Delta\omega_2 = 0.106(2\pi c/a)$,对应参数 $\theta_2 = 24°$,$f_2 = 0.805$. 这两个带隙的中心位置相差较远,通过调节 f_2,可以使二者的中心位置重合. 图 6 显示了 ω_{g2} 随 f_2 的变化. 其中两条实心点线分别是 $\Delta\omega_2$ 的上、下边界,两条水平虚线是 $\Delta\omega_1$ 的上、下界. 在我们所画的范围内,ω_{g2} 随着 f_2 单调上升. 在 $f_2 = 0.769$ 处,ω_{g2} 与 ω_{g1} 相交. 因此我们在计算中取这个值.

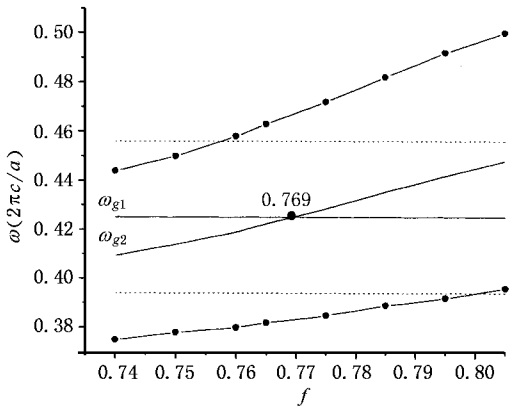

图 6　PBG 随填充因子的变化(两条实心点线表示三角格子六角形散射子原型 PC 绝对 PBG. 虚线是正方格子正方形散射子原型 PC 最大绝对 PBG,二者的中心位置相交于 $f = 0.769$)

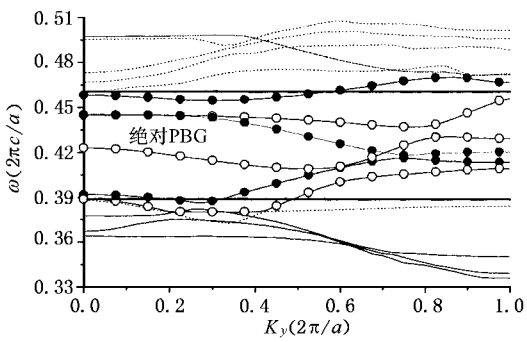

图 7　SSTH 异质结作横向拉开 $dx = 0.50\ a$ 时的能带图

可惜这个异质结没有局域模,只能靠晶格移动来产生了. 图 7 是当横向拉开 $dx = 0.50a$ 时的能带图. 绝对带隙出现在(0.389,0.461)($2\pi c/a$),带宽 $\Delta\omega = 0.072(2\pi c/a)$. 有三个 TE 传导模和三个 TM 传导模. 纵向错开也有传导模,这里不再介绍.

4. 结 论

用平面波展开法和超原胞方法计算了不同格子构成的光子晶体异质结. 其中 SSTH 异质结必须沿界面横向拉开或侧向平移才有传导模. 而 RRTC 异质结却可以直接在绝对带隙中产生传导模,不必移动晶格. 这个性质在纯电介质光子晶体异质结中未见报道.

[1] Mekis A, Chen J C, Kurland I, Fan S, Villeneuve P R and Joannopoulos J D 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3787

[2] Joannopoulos J D, Villeneuve P R and Fan S H 1997 *Nature* **386** 143

[3] Bozhevolnyi S I *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3008

[4] Edmond Chow *et al* 2000 *Nature* **407** 983

[5] Lin L L and Li Z Y 2001 *Phys. Rev.* B **63** 033310

[6] Zhou Y S, Gu B Y and Wang F H 2003 *Journal of Physics: Condensed Matter* **15** 4109

[7] Zhou Y S, Gu B Y and Wang F H 2004 *Eur. Phys. J.* B **37** 293

[8] Sigalas M M, Soukoulis C M, Biswas R and Ho K M 1997 *Phys. Rev.* B **56** 959

[9] Chul-Sik Kee, Jae-Eyn Kim and Hae Yong Park 2000 *Phys. Rev.* B **61** 15523

[10] Figotin A and Vitebsky I 2001 *Phys. Rev.* E 066609

[11] Ho K M, Chan C T and Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152

[12] Li Z Y, Wang J and Gu B Y 1998 *Phys. Rev.* B **58** 3721

[13] Cassagne D, Jouanin C and Bertho D 1996 *Phys. Rev.* B **3** 7134

[14] Plihal M and Maradudin A A 1991 *Phys.* B **44** 8565

[15] Wang R Z, Wang X H, Gu B Y, Li Z Y and Yang G Z 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 4307

[16] Qiu G X, Lin F L and 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]

[17] Jin C J, Qin B, Yang M and Qin R H 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2325 (in Chinese) [金崇君、秦 柏、杨 淼、秦汝虎 1997 物理学报 **46** 2325]

Guide modes at interface of photonic crystal heterostructures composed of different lattices*

Liu Jiang-Tao[1)] Zhou Yun-Song[1)†] Wang Fu-He[1)] Gu Ben-Yuan[2)]

[1)] (*Department of Physics*, *Capital Normal University*, *Beijing* 100037, *China*)

[2)] (*Institute of Physics*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100080, *China*)

(Received 9 September 2003; revised manuscript received 24 October 2003)

Abstract

We have investigated the guide modes in two kinds of two-dimensional photonic crystal heterostructures by using the plane wave expansion method combined with the supercell technique. These heterostructures consist of different air cylinders embedded into host dielectric in different lattices. Namely, One heterostucture is composed of square cylinders in square lattice and hexagon cylinders in triangular lattice (SSTH heterostucture). The other heterostucture is composed of rectangular cylinders in rectangular lattice and circle cylinders in triangular lattice(RRTC heterostucture). We find that the SSTH heterostucture may produce guide modes in absolute photonic band gap (PBG) when introducing relative longitudinal gliding or transverse displacement of the sub-lattices along the interface of the heterostructure. But the RRTC heterostucture can produce guide modes in absolute PBG without any relative longitudinal gliding or transverse displacement. This feature is quite different from other pure dielectric photonic crystals heterostructures.

Keywords: photonic crystal, heterostructure, guide modes, supercell

PACC: 4270, 7340, 7125

* Project supported by the National Key Basic Research Special Foundation of China (Grant No. 001CB61040) and by the Natural Science Foundation of Beijing, China(Grant No. 1032003).

† E-mail: 263zys@263.net; Tel: 010-68902348.