

三维光子晶体典型结构完全禁带的最佳参数 理论分析*

刘 欢† 姚建铨 李恩邦 温午麒 张 强 王 鹏

(天津大学精仪学院激光与光电子研究所, 天津 300072)

(教育部光电信息技术科学重点实验室, 天津 300072)

(南开大学、天津大学联合研究院, 天津 300072)

(2005 年 2 月 28 日收到, 2005 年 4 月 28 日收到修改稿)

基于平面波展开法, 理论分析了晶格结构、填充率、介电常数比等因素对 fcc, diamond, woodpile 三种三维光子晶体典型结构完全禁带的影响. 三种结构中, fcc 结构由于高对称性导致的能级简并, 只适用于密堆积排列的反蛋白石结构; diamond 结构非常容易产生高带隙率的完全禁带, 并且可以通过调节多项参数得到所需的完全禁带; woodpile 结构参数调节范围比较宽, 为实验制备带来方便. 对于不同的三维光子晶体结构, 随着介电常数比的增大, 完全禁带的宽度和带隙率也会随着增大. 还发现了一些以前未引起注意的现象.

关键词: 三维光子晶体, 完全禁带, 介电常数比, 带隙率, 平面波展开法

PACC: 4270Q, 7820P, 7115B

1. 引 言

作为一种新的物理概念, 光子晶体的诞生是在 1987 年^[1,2]. 光子晶体是一种介电常数空间周期性变化、晶格常数可与光波长相比、具有光子带隙, 能控制光子传播状态的新型人工材料. 正是凭借这些独特的性能, 光子晶体在光子晶体光纤^[3]、光子晶体激光器^[4]、高发射率小型微波天线^[5]、超棱镜^[6]、非线性光子晶体器件^[7]等众多领域得到广泛的应用.

光子晶体的最根本特征是具有光子禁带, 即电磁场只在某些特定的频率区间才存在, 而在其他频率区间的电磁波是被禁止的, 因此具有完全禁带的三维光子晶体是最具有应用潜力的. 一维、二维光子晶体结构相对简单, 目前的理论计算和制作工艺已比较成熟^[8-10], 而现阶段实验室制备具有完全禁带的三维光子晶体, 尤其是可见光和近红外波段的光子晶体仍面临很大困难.

相对而言, 由于 Maxwell 方程组在线性介质上可以得到确切的解, 所以三维光子晶体各种结构的理论计算就容易很多. 平面波展开法是提出最早, 应

用最广的方法, 应用布洛赫定理, 对某一入射方向 k 以平面波的形式展开电磁场, 将 Maxwell 方程化成一个本征方程, 求出 k 对应的一组频率本征值^[11,12]. 这种方法的优点是简便直观, 没有事先引入假设条件, 计算出的频带结构精确有效^[12]. 本文基于平面波展开法, 在理论上计算了 fcc, diamond, woodpile 三种三维光子晶体典型结构的禁带大小和位置, 分析了对光子禁带产生影响的各种因素, 为以后的实验制备和应用研究提供了良好的指导方向及理论依据.

2. 三维光子晶体典型结构完全禁带的理论计算与最佳参数

光子晶体的带隙越宽, 其性能越好. 一般而言, 光子禁带会受到晶体的晶格结构及两种介质的填充率、介电常数比的影响. 对于晶格结构, 完全禁带更容易出现在具有近球形第一布里渊区的结构中, 因此二维六角结构和三维面心结构能得到较大的带隙^[13,14]. 周期排列的两种介质的介电常数差越大, 布拉格散射越强烈, 就越有可能出现光子禁带.

* 教育部南开大学、天津大学科技合作基金项目、国家自然科学基金(批准号: 60278001)资助的课题.

† E-mail: maggielh@163.com

2.1. 背景材料为低介电材料(空气)时晶格结构、填充率、介电常数比三种光子晶体结构完全禁带的影响

2.1.1. 不同晶格结构下,填充率对三维光子晶体完全禁带的影响

由已有的研究得知,降低光子晶体的对称性,可以增大光子晶体的带隙^[9,15].球形构成的 fcc 结构具

有很高的对称性,对称性引起的能级简并使它难于产生完全禁带.为了消除对称性,在 fcc 结构的晶胞内引入两个球形粒子构成 diamond 结构,能产生很宽的完全禁带.woodpile 结构具有面心四方对称性,它可以看成是 fcc 结构沿垂直方向伸长后的结构.图 1(a)(b)(c)^[16]分别表示 fcc,diamond,woodpile 结构.

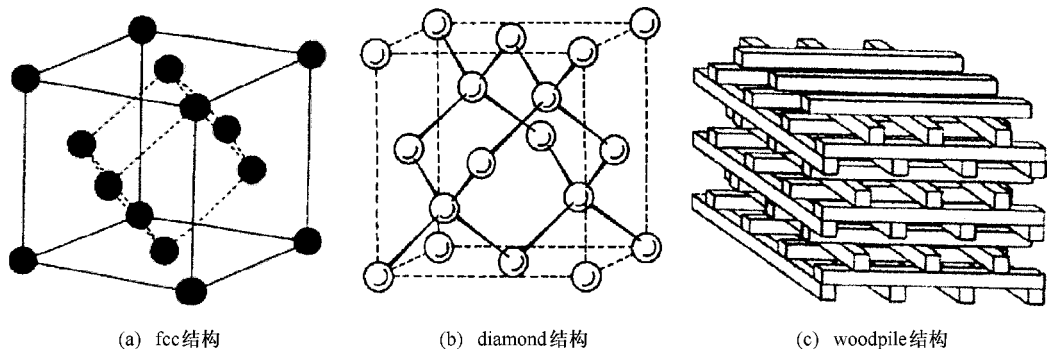


图 1 三种三维光子晶体典型结构示意图

利用平面波展开法,我们首先计算了三种光子晶体典型结构在不同填充率下的最大带隙率.计算中,选用高介电材料 Si($\epsilon = 11.7$)作为小球和“木柴条(log)的介电材料,设定 fcc 和 diamond 结构的周期常数为 a ($= 1 \mu\text{m}$),woodpile 结构沿宽度方向的周期常数为 a ,沿高度方向的周期常数为 $1.22a$.图 2,图 3 的横轴数值有的是小球半径(r)、log 宽度、或 log 高度与 a 的比值,有的是折射率差.纵轴数值都是光子禁带归一化频率,图中的竖线都代表完全禁带的宽度和位置.图 2 和图 3 所示的是随着小球半径和 log 宽度的变化,diamond 结构和 woodpile 结构带隙宽度和位置的变化.

通过计算我们发现,由于 fcc 结构的高对称性造成的能级简并,无论怎样变化小球半径,即改变填充率,都没有完全禁带出现.根据扫描结果,图 2 中,当小球半径在 $0.215a$ — $0.25a$ 之间变化时,diamond 结构均存在 10% 以上的带隙率;图 3 中,固定了 log 的长度和高度(log 长度 = $1.25a$,log 高度 = $0.305a$),当 log 宽度在 $0.13a$ — $0.45a$ 之间变化时,woodpile 结构均存在 10% 以上的带隙率.两图中的最大带隙率及相应参数可参见表 1.

同时,我们还发现,两图中光子禁带对应的归一化频率随着填充率的增大,不断减小,这是因为在介电常数为 ϵ 的介质中,电磁波的频率可表示为

$$\omega(k) = ck/\epsilon^{1/2}, \quad (1)$$

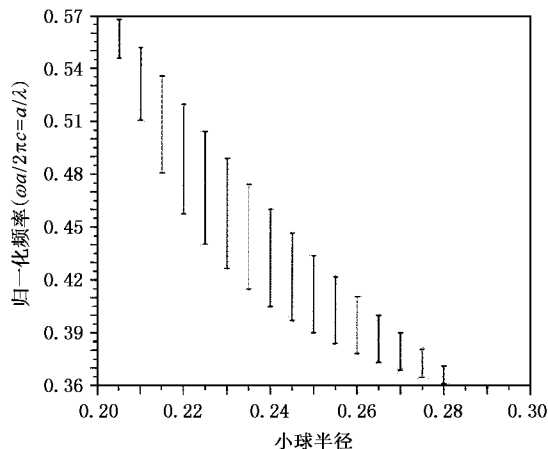


图 2 diamond 结构光子禁带的归一化频率与小球半径的关系图

其中, c 为真空中的光速; k 为波矢量^[17].随着介质小球半径和 Si 条(Si-log)宽度的增大,diamond 结构和 woodpile 结构的平均介电常数 ϵ 增大,光子频率 ω 不断减小.

两图比较,woodpile 结构在 log 宽度变化比较大的范围内都可以出现完全禁带,而 diamond 结构的小球半径变化范围相对就比较小,而且最大带隙率也比 woodpile 结构的小.因此利用层层叠加法制作具有完全禁带的 woodpile 结构光子晶体是目前在制备三维光子晶体的工艺中比较常用的方法之一.国外的文献中也有不少此方面的报道^[16,18-20].

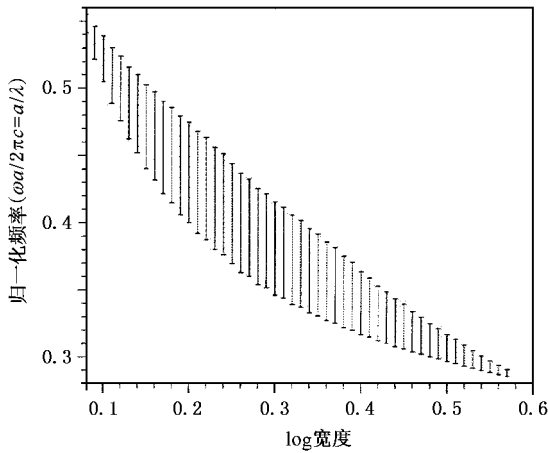


图3 woodpile 结构光子禁带的归一化频率与 log 宽度的关系图

表1 Si 两种晶格结构最大带隙率及其他参数的对比

晶格类型	填充率	带隙宽度 (a/λ)	带隙中心 频率 (a/λ)	最大带 隙率/%
diamond	$r/a = 0.23$	0.4265—0.4891	0.4578	13.67
woodpile	log 宽度/ $a = 0.26$	0.3627—0.4369	0.3998	18.56

2.1.2. 不同晶格结构下,优化介电常数比对晶体完全禁带的影响

我们选择上述两种结构在产生最大带隙率时的参数设置,分别改变小球、log 的介电材料与背景材料的折射率差,计算晶体完全禁带,分析介电常数比对晶体完全禁带的影响.图4和图5分别表示 diamond 结构和 woodpile 结构完全禁带随折射率差的变化情况,横轴表示小球或 log 的介电材料与背景材料的折射率差.由于背景材料是空气($n = 1$),因此当 $n_{\text{小球或log}} - n_{\text{背景}} = 3$ 时表示小球或 log 的介电材料为 Ge($n = 4, \epsilon = 16$).从图4和图5中看出,随着折射率差不断增大,完全禁带宽度和带隙率都不断增大,并在小球或 log 的介电材料为 Ge 时取得最大值.

2.2. 背景材料为高介电材料时晶格结构、填充率、介电常数比对三种光子晶体结构完全禁带的影响

我们首先计算了在高介电材料 Si 中,由空气小球形成 fcc 结构的带隙情况.图6(a)所示的是空气小球半径和带隙之间的关系.当 $r < 0.35a$,即空气小球无重叠排列时, fcc 结构没有完全禁带;当 r 在 $0.35a - 0.36a$ 之间变化,即空气小球密堆积排列时,才产生完全禁带. r 取值范围非常小,且带隙率

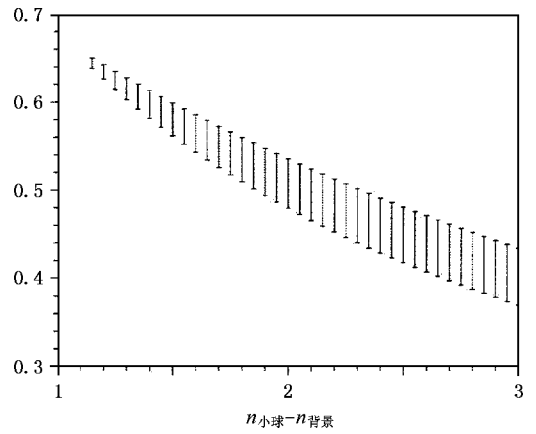


图4 diamond 结构光子禁带的归一化频率与小球介质折射率的关系图

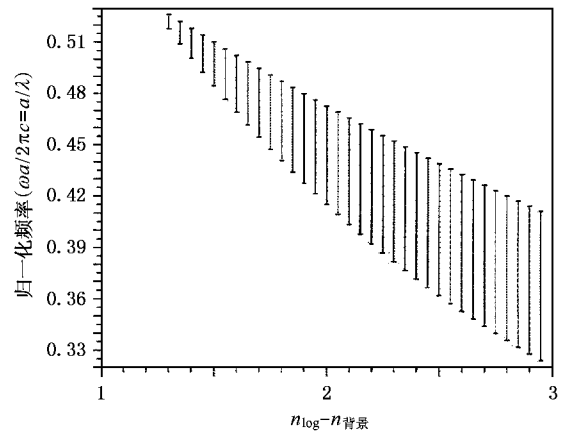


图5 woodpile 结构光子禁带的归一化频率与 log 介质折射率的关系图

也较低,此时最大带隙率仅为 3.86%.这个结果和文献[21]的报道是一致的.研究人员在实验室制备三维光子晶体时常选用的方法之一是自组合法.该方法成本低廉,工艺简单,易于产生密堆积型的 fcc 反蛋白石结构,目前已有不少相关报道^[21-23].另外,激光全息干涉法是近年来一种有潜力的微加工技术,此法也易于制备出 fcc 结构的光子晶体,用它们作为模板,可以制备出具有高折射率比值的完全禁带结构^[24-26].因此, fcc 结构虽然难于产生完全禁带,但由于在实验中比较容易实现,目前仍是实验室制作中采用的主要结构之一.

图6(b)所示的是 diamond 结构中空气小球半径和带隙之间的关系.我们设定该结构是在高介电材料 Si 中钻孔形成的.当 r 在 $0.27a - 0.36a$ 之间变动时,均能产生 15% 以上比较大的带隙率.当 $r =$

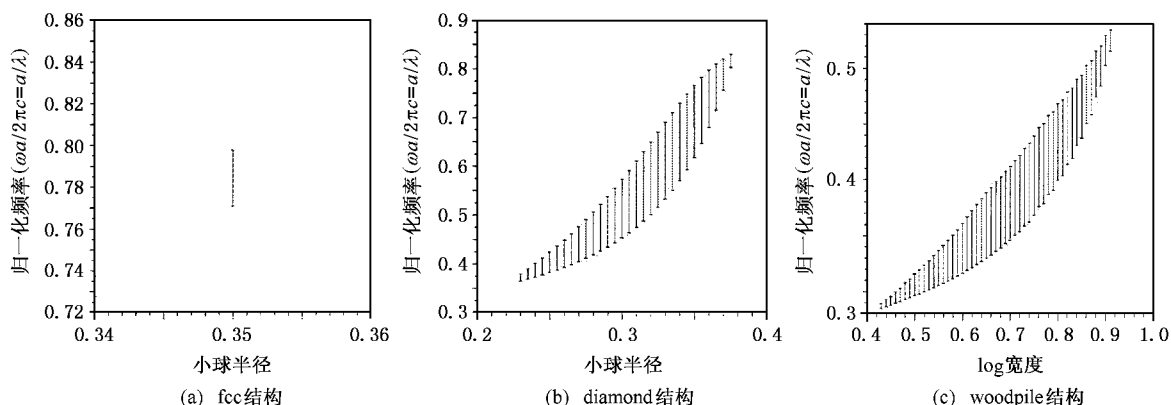


图6 三种三维光子晶体典型结构的完全禁带宽度、位置与结构填充率的关系图

0.325 a 时,最大带隙率达到 26.04%。由此可见,diamond 结构是三维光子晶体各种结构中比较容易产生完全禁带的一种结构,选择合适的填充率和介电常数比可以得到非常理想的完全禁带。1991 年,Yablonovitch 在高介电材料上钻孔得到的 diamond 结构光子晶体是具有完全禁带的三维光子晶体^[27,28]。因此精密机械加工法虽然工艺复杂、造价昂贵,但因其易于制备出具有完全禁带的 diamond 结构光子晶体,现在仍是制备三维光子晶体常用的方法之一。

图 6(c)所示的是以高介电材料 Si 为背景,低折射率材料(空气)为 log 的 woodpile 结构中,log 宽度和带隙之间的关系。我们设定该结构是通过半导体刻蚀的方法形成的。当 log 宽度在 0.63 a —0.81 a 之间变动时均可获得 15% 以上比较高的带隙率。由计算结果可知,woodpile 结构产生较理想完全禁带的填充率调节范围比 diamond fcc 结构要宽一些,这给实验室制备带来方便。

随着空气小球半径和“空气条”宽度越来越大,三种典型结构的平均介电常数不断降低,光子频率 ω 不断增大。

表 2 给出了上述三种情况下产生的最大带隙率和相应的其他参数的对比。

表 2 背景材料为高介电材料 Si 时三种晶格结构最大带隙率及其他参数的对比

晶格类型	填充率	带隙宽度 (a/λ)	带隙中心 频率(a/λ)	最大带 隙率/%
diamond	$r/a = 0.325$	0.5151—0.6693	0.5922	26.04
woodpile	log 宽度/ $a = 0.74$	0.3621—0.4326	0.3974	17.74
fcc	$r/a = 0.36$	0.7975—0.8289	0.8132	3.86

我们选择上述三种结构产生最大带隙率时的参

数设置,设定不同的背景材料,计算分析完全禁带的变化,得到和 2.1.2 节相同的结论,即两种材料的折射率差越大,完全禁带宽度和带隙率越理想。

3. 在基于双球结构的 diamond 结构中,改变单一小球的半径及介电常数,计算分析带隙的变化

diamond 结构的布拉维格子为面心立方。基元是 sphere (0,0,0) (1/4,1/4,1/4)。当改变某一小球的半径或介电常数时,此结构仍可看作 diamond 结构,布拉维格子也为面心立方,只是基元的两个位置上放置了不同的小球,对称性降低^[29]。在计算中,我们考虑到这时结构的对称性降低,因此对程序中 diamond 结构的基矢进行了修正,保证此结构的第一布里渊区具有晶格点群的全部对称性。

3.1. 单一小球的不同半径对带隙的影响

在基于双球结构的 diamond 结构中,固定两个小球和背景材料的介电常数,以及其中一个小球的半径,改变另一个小球的半径,观察带隙变化。

图 7(a)所示的是单一空气小球半径与带隙之间的关系。设定背景材料为 Si,固定一个空气小球的半径为 0.325 a ,改变另一个空气小球的半径,当其半径等于 0.32 a ,即接近固定小球的半径时,出现最大带隙率 25.99%。小球半径在 0.325 a 附近的 0.30 a 到 0.35 a 之间浮动,都可以获得比较高的带隙率。

图 7(b)所示的是单一介质小球半径与带隙之间的关系。设定两个小球的介电常数均为 11.7,背景为空气,固定一个小球的半径为 0.23 a ,改变另一

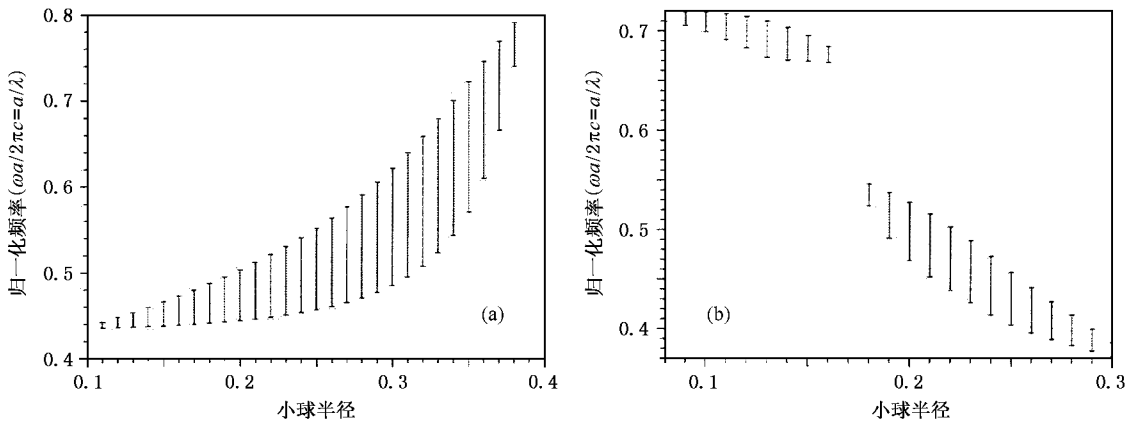


图 7 diamond 结构光子禁带的归一化频率与某一小球半径的关系图 (a) 表示在高介电材料 Si 中, 固定一个空气小球半径, 改变另一个空气小球半径 (b) 表示设定两个小球的 $\epsilon = 11.7$, 固定一个小球半径, 改变另一个小球半径, 背景材料为空气

个球的半径观察其带隙的变化. 从图 7(b) 中看到半径在 $0.05 a - 0.3 a$ 之间变化, 产生了 2 段带隙. 当半径在 $0.09 a$ 到 $0.16 a$ 之间变化时, diamond 结构在 band5 和 band6 之间产生完全禁带, 最大带隙率仅为 5.32% . 当半径为 $0.17 a$ 时, band5 和 band6 之间的带隙消失. 继续增大小球半径, 带隙开始在 band2 和 band3 之间产生, 当两个小球半径相同时, 带隙率达到最大值 13.67% , 小球半径在 $0.21 a - 0.25 a$ 之间变化, 均可以获得接近最大带隙率的完全禁带.

通过以上两图的比较, 由空气小球形成的 diamond 结构带隙宽度和最大带隙率都要比由介质小球形成的 diamond 结构大得多. 图 7(a) 的带隙一直是在 band2 和 band3 之间产生, 而图 7(b) 的带隙随着半径的增大, 在半径为 $0.18 a$ 时突然从高频带

跳到了低频带. 两图的相似点是当一球半径在另一固定球半径周围小幅度变化时, 带隙率仍然接近于最大带隙率, 变化幅度不大, 这样也就降低了精密机械加工或者是自组装的精度要求, 为实验制备带来方便.

3.2. 单一小球的不同介电常数对带隙的影响

我们再来分析另外一种情况, 固定填充率及背景和其中一个小球的 ϵ , 改变另一个小球的 ϵ , 从图 8(a) 和 (b) 看出带隙是随另一个小球的 ϵ 变化而变化的, 两图中横轴都表示单一小球的介电材料折射率与背景材料折射率的差值. 我们分两种情况来研究.

第一种情况是由空气小球和介质小球在高介电材料 Si 中形成 diamond 结构, 选择两个小球半径均

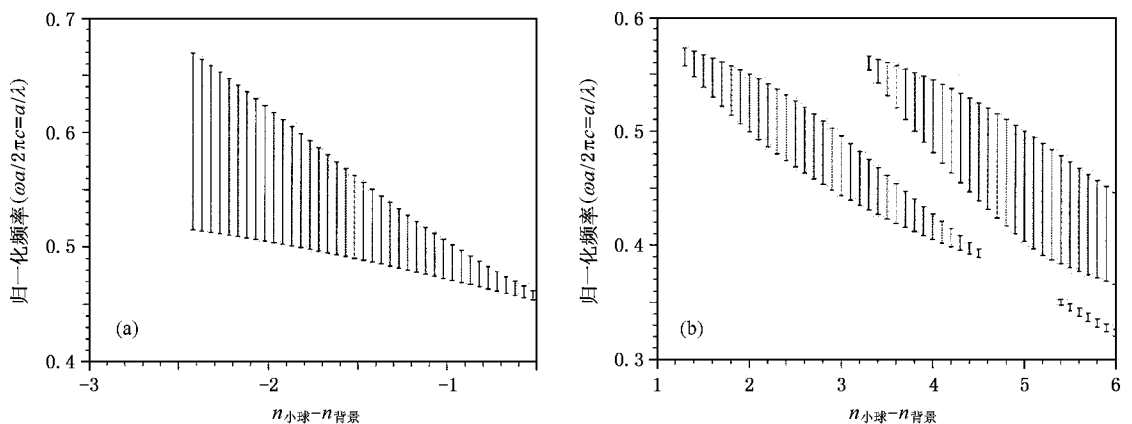


图 8 diamond 结构光子禁带的归一化频率与某一小球介电常数的关系图 (a) 表示在高介电材料 Si 中, 固定一个小球为空气小球, 改变另一个小球的 ϵ (b) 表示固定一个小球的 $\epsilon = 11.7$, 改变另一个小球的 ϵ , 背景材料为空气

为 $0.325a$, 固定一个小球为空气小球, 增大另一个小球的 ϵ . 从图 8(a) 看到 diamond 结构的光子禁带宽度几乎成线性减小, 当小球的 ϵ 增加到 8.53 时, 光子禁带关闭.

第二种情况是由不同介质的小球在空气中堆积形成 diamond 结构, 固定两个小球的半径为 $0.2165a$, 这时的填充率达到小球无重叠排列时的最大值 34%, 设定一个小球的 $\epsilon = 11.7$, 变化另一个小球的 ϵ , 可以观察到如图 8(b) 所示的有趣现象. 当小球的 $\epsilon = 5.29$ 时, diamond 结构在 band2 和 band3 之间开始出现完全禁带, 当 $\epsilon = 12.96$ 时, 最大带隙率为 11.70%. 当 $\epsilon = 18.49$ 时, 在 band5 和 band6 之间开始出现第二带隙. 当 ϵ 在 18.49 至 30.25 之间变化时, 在 band2 和 band3 及 band5 和 band6 之间将同时存在两个完全禁带. 继续增大小球的 ϵ 会发现 band2 和 band3 之间的带隙逐渐消失, band5 和 band6 之间的带隙不断增大, 在 $\epsilon = 38.44$ 时, 最大带隙率为 22.69%. 当 ϵ 增大到 40.96 时, band2 和 band3 之间出现了很小的假带隙, 它们会随着增大计算分辨率而消失. 根据以上计算结果, 我们在以后的实验中可以根据选择某一小球的介电常数来得到需要的带隙范围.

4. 改变 woodpile 结构中“木柴条”的长度和高度, 计算分析带隙的变化

我们首先改变 woodpile 结构中 log 的长度, 观察带隙的变化. 不管 woodpile 结构是由“空气条”在高介电材料 Si 中堆积而成, 还是由高介电材料 Si-log

在空气中堆积而成, 计算结果表明 log 长度的变化对带隙几乎没有影响. 因为改变 log 长度, 其实并不改变 woodpile 结构的填充率, 所以当 log 长度大于 $1a$ 变化时, 带隙宽度和位置没有变化.

我们改变 woodpile 结构中的另一个参数——log 高度 (h) 观察带隙的变化. 首先固定每根 log 的长度为 $1.25a$, 宽度为 $0.26a$, 沿 log 高度方向的周期 (period_h) 为 $1.22a$. 改变 h , period_h 不会改变, 也就是说 h 与 period_h 之间不再满足 $\text{period}_h = 4h$ 的关系. 当 $h > 0.305a$ 或 $h < 0.305a$ 时, 对应每一原胞内的四层 log 之间有重叠的部分或不再互相接触而是在各个 log 之间填充了高或低的背景材料. 这样改变 log 高度就可以改变 woodpile 结构的填充率, 带隙也会随之变化.

我们设定第一种情况是 Si-log 在空气中层层叠加形成 woodpile 结构, 变化高度在 $0.1a$ 到 $0.65a$ 之间, 可以得到图 9(a) 所示的带隙变化结果. 在 log 高度 = $0.31a$ 时, 得到最大带隙率为 18.52%. log 高度在 $0.27a$ — $0.33a$ 之间变化时, 均可以获得 17.50% 以上的高带隙率. 当 $h < 0.305a$ 时, 每层 log 之间并不接触, 各层之间的空隙由空气填充. 这种假设显然在实验中并不成立, 我们只是为了便于理论计算而选择空气作为背景材料. 在实验中可以选择合适的低介电材料作为背景材料来填充. 第二种情况是通过在高介电材料 Si ($\epsilon = 11.7$) 中层层刻蚀, 形成由“空气条”堆积成的 woodpile 结构, 其他参数不变, 得到如图 9(b) 所示的变化. 当 log 高度为 $0.38a$ 时, 得到最大带隙率为 20.29%. 当“空气条”高度在 $0.31a$ — $0.40a$ 之间变化时, 均可以获得 18% 以上

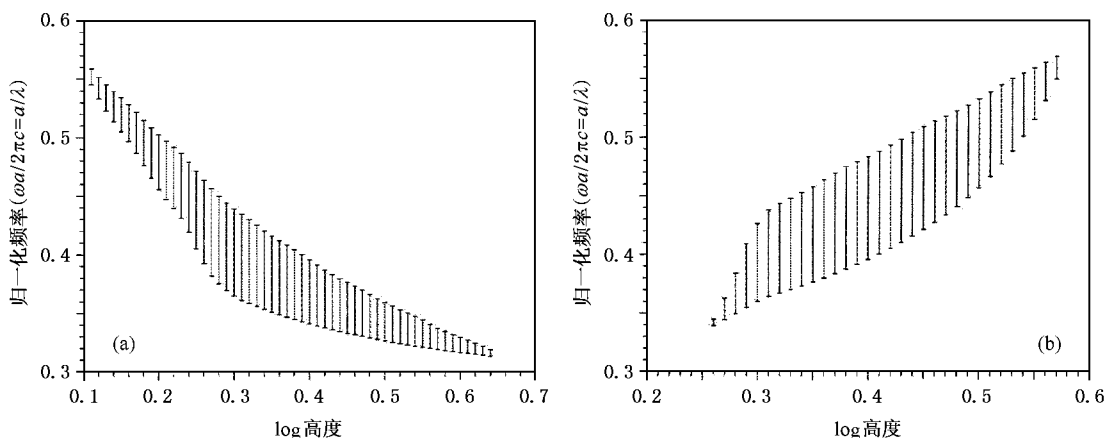


图9 woodpile 结构光子禁带的归一化频率与 log 高度的关系图 (a) 表示在空气中, 改变 Si 条的高度 (b) 表示在以高介电材料 Si 为背景的 woodpile 结构中, 改变“空气条”的高度

的高带隙率. 计算结果表明, woodpile 结构的参数在比较大的范围内调节都可获得较宽的完全禁带和较高的带隙率.

5. 结 论

综上所述, 我们分析了晶格结构、填充率、介电常数比等因素对三维光子晶体典型结构完全禁带的影响. 通过理论计算发现, fcc 结构由于高对称性引起的能级简并, 除了在背景材料为高介电材料、空气小球密堆积排列时能产生完全禁带, 其他情况下不产生完全禁带. 因此, 利用自组装法制作反蛋白石结构的三维光子晶体, 非常适合采用 fcc 结构. diamond

结构实际上是基于双球结构的 fcc 结构, 相比 fcc 结构, 它的对称性明显降低, 更容易产生完全禁带. 在高介电材料中钻孔形成的 diamond 结构比由介质小球在空气中堆积形成的 diamond 结构更容易产生完全禁带, 且禁带宽度和最大带隙率也都非常理想. woodpile 结构是由层层叠加法制作出来的, 虽然制作工艺比较复杂, 但产生的禁带宽度和最大带隙率都比较理想, 相比 diamond 结构, 填充率的调节范围更宽, 这给实验制备的精度要求带来了方便. 同时我们发现, 对于不同的三维光子晶体结构, 其完全禁带的宽度和带隙率都可通过增大介电常数比得到进一步优化. 以上理论分析的结果对今后实验室进行三维光子晶体的制备和应用研究将具有重要的指导意义.

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [3] Knight J C, Broeng J, Birks T A *et al* 1998 *Science* **282** 1476
- [4] Painter O, Lee R K, Scherer A *et al* 1999 *Science* **284** 1819
- [5] Brown E R, Parker C D, Yablonovitch E 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 404
- [6] Kosaka H, Kawashima T, Tomita A *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** R10096
- [7] Ni P G, Ma B Q, Cheng B Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1925 (in Chinese) [倪培根、马博琴、程丙英 等 2003 物理学报 **52** 1925]
- [8] Wang H, Li Y P 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2172 (in Chinese) [王辉、李永平 2001 物理学报 **50** 2172]
- [9] Zhuang F, He S L, He J P *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 355 (in Chinese) [庄 飞、何赛灵、何江平等 2002 物理学报 **51** 355]
- [10] Wu L, Ye Z, He S L 2003 *Chin. Phys.* **12** 642
- [11] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152
- [12] Shen L F, He S L, Wu L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1133 (in Chinese) [沈林放、何赛灵、吴 良 2002 物理学报 **51** 1133]
- [13] Cassagne D, Jouanin C, Bertho D 1996 *Phys. Rev. B* **53** 7134
- [14] Yablonovitch E 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 283
- [15] Zhang X D, Zhang Z Q 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9847
- [16] Özbay E, Michel E, Tuttle G *et al* 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 2059
- [17] Joannopoulos J D, Meade R D, Winn J N 1995 *Photonic Crystals-Molding the Flow of Light* (Princeton NJ: Princeton University Press) p40
- [18] Lin S Y, Fleming J G, Hetherington D L *et al* 1998 *Nature* **394** 251
- [19] Johnson S G, Joannopoulos J D 2000 *App. Phys. Lett.* **77** 3490
- [20] Qi M H, Lidorikis E, Rakich P T *et al* 2004 *Nature* **429** 538
- [21] John S, Busch K 1999 *J. Lightwave Technol.* **17** 1931
- [22] Bogomolov V N, Gaponenko S V, Germanenko I N *et al* 1997 *Phys. Rev. E* **55** 7619
- [23] Wijnhoven J E G J, Willem L V 1998 *Science* **281** 802
- [24] Cambell M, Sharp D N, Harrison M T *et al* 2000 *Nature* **404** 53
- [25] Shoji S, Kawata S 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2668
- [26] Divliansky I, Mayer T S, Holliday K S *et al* 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1667
- [27] Yablonovitch E, Gmitter T J, Leung K M 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 2295
- [28] Yablonovitch E, Leung K M 1991 *Nature* **351** 278
- [29] Yan S S 2000 *Fundamentals of Solid State Physics* (Beijing: Peking University Press) p56 (in Chinese) [阎守胜 2000 固体物理基础 (北京 北京大学出版社) 第 56 页]

Theoretical analysis of optimum parameters for complete forbidden bands of three-dimensional photonic crystals with typical lattice structures^{*}

Liu Huan Yao Jian-Quan Li En-Bang Wen Wu-Qi Zhang Qiang Wang Peng

(*College of Precision Instrument and Opto-Electronics Engineering , Institute of Laser and Optoelectronics , Tianjin University , Tianjin 300072 , China*)

(*Key Laboratory of Laser and Optoelectric Information Science and Technology , Ministry of Education , Tianjin University , Tianjin 300072 , China*)

(*Cooperated Institute of Nankai University and Tianjin University , Tianjin 300072 , China*)

(Received 28 February 2005 ; revised manuscript received 28 April 2005)

Abstract

Based on plane wave expansion method , the influence of factors such as lattice structure , dielectric constant ratio and filling ratio on three-dimensional photonic crystals with fcc , diamond and woodpile structures is studied. Of these structures , the fcc structure , owing to its high symmetry , is only fit for close-packed lattice prepared by inverted-opal method. The diamond structure easily generates good complete band gaps with high band gap ratio , and also the complete forbidden band that is needed can be obtained by adjusting some parameters in the experiment. The woodpile structure can produce big band gaps in a wider parameter range than the other two structures , which offers convenience for preparing three-dimensional photonic crystals in the laboratory. For all three kinds of three-dimensional photonic crystal structures , their band gap width and band gap ratio can be improved with the increase of dielectric constant ratio. In this paper , some interesting phenomena not noticed in the former papers are also presented.

Keywords : three-dimensional photonic crystal , complete forbidden band , dielectric constant ratio , band gap ratio , plane wave expansion method

PACC : 4270Q , 7820P , 7115B

^{*} Project supported by the Science & Technology Cooperation Foundation of Nankai University and Tianjin University , the Ministry of Education and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60278001).