# 大小周期正方格子复合结构的光子带隙特性\*

曾 隽 潘杰勇 董建文 汪河洲<sup>+</sup>

(中山大学光电材料与技术国家重点实验室,广州 510275) (2005年9月18日收到,2005年10月30日收到修改稿)

把具有宽完全带隙的粗锐复合的周期常数为 a 的二维正方格子再与周期常数为 a<sub>2</sub> 的大周期简单正方格子复 合 发现大周期正方格子起缺陷作用.并发现当 a<sub>2</sub> < 5a 时,缺陷态明显地随入射角度变化.此变化随 a<sub>2</sub> 的增大而 减少.用 FDTD 方法计算了其透射和反射谱 结果表明缺陷峰透射率与 a<sub>2</sub> 的大小成反比.另外还发现:缺陷峰结构 与大周期正方格子的圆柱直径的关系曲线与 a<sub>2</sub> 关系不大.通过调节大周期正方格子的圆柱的直径,可获得单缺陷 峰、多缺陷峰、单一偏振(TE 模)单缺陷峰或 TM 模和 TE 模重叠或分开的缺陷峰等.可适应不同的应用的所需.

关键词:光子晶体,光子能隙,复式结构,缺陷态 PACC:4270Q,7820P

## 1.引 言

光子晶体<sup>[12]</sup>是具有光子带隙的新型材料,频率 处在光子带隙内的电磁波不能在光子晶体中传播. 具有宽的完全带隙的光子晶体具有广泛用途<sup>[3,4]</sup>, 因此,其设计与制作受到普遍关注.其中,二维光子 晶体的制作可采用微电子工艺,并可与电子电路一 起集成,因而引起人们广泛重视.人们提出了很多增 宽二维光子晶体完全带隙的方法<sup>[5-9]</sup>,同时,也研究 了光子晶体的缺陷态<sup>[10-14]</sup>.在一个具有完全带隙的 理想光子晶体中引入点缺陷,那么在完全带隙中将 会出现一个或者多个缺陷模<sup>[12-14]</sup>,这使光子晶体具 有更广泛的用途<sup>[15-17]</sup>.过去人们主要是通过改变原 周期结构中某个或某些的介电体的大小或去除某个 介电体来形成缺陷.

另外,复式光子晶体结构是产生完全带隙的有 效方法.其中粗锐组合的二维复式结构光子晶体的 宽完全带隙已引起人们的重视<sup>[7,11,18]</sup>.

本文选取具有宽完全带隙的粗锐组合二维复式 正方格子结构光子晶体 与周期常数大的简单正方格 子结构再复合 结果在原粗锐组合二维复式正方格子 结构光子晶体的宽完全带隙内出现缺陷峰.研究了其 依赖大周期常数等参数的许多有意义的性质.

### 2.结构及其带隙特性

二维粗锐正方格子复合结构示于图 1(a),图中 深色部分对应硅,介电常数  $\varepsilon_1 = 12.096^{61}$ (波长 1.55µm的对应值);其余部分对应空气(空气介电常 数  $\varepsilon_2 = 1.0$ ).周期常数为 a.本文采用平面波展开 法<sup>191</sup>研究其带隙特性,并用 N-Order 算法<sup>201</sup>加以验 证.计算了不同介质圆柱半径 r 和锐结构宽度 d 与 完全带隙宽度的关系,发现当 r = 0.32a, d = 0.05a时 结构具有很宽的完全带隙,该结构对应的频带 图如图 1(b)所示.图 1(b)和图 3 的纵坐标和图 1(b) 横坐标为归一化频率,归一化频率的定义是角频率 ( $\omega$ )乘周期常数(a)除以 2 $\pi c$  (c为光速),即归一化 频率为( $\omega a/2\pi c$ ).图 1(b)和图 4 中横坐标的 X,M 和 $\Gamma$ 是正方格子结构的第一布里渊区的各对称点.

在本文中,我们研究的是标准二维光子晶体结构,而非光子晶体薄片,即认为沿介质柱方向具有无限长度.因此我们在数值模拟计算中利用二维FDTD 计算其透射和反射谱图.计算结果见图 1(c)所示, 其中实线、虚线、点线和点划线分别表示反射谱 (TE)透射谱(TE)反射谱(TM)和透射谱(TM).

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号:10274108),国家重点基础研究发展规划(973)项目(批准号:2004CB719804),国家高技术研究发展计划(863) 项目(批准号:2003AA311022)和广东省自然科学基金资助的课题。

<sup>†</sup> 通讯联系人 "E-mail:stswhz@zsu.edu.cn



图 1 (a)粗锐复合二维正方格子 (b)当黑色部分为硅,介电常数  $\epsilon_1 = 12.096$ ,其余部分为空气,锐结构尺寸为 d = 0.05a 圆柱半径为 r = 0.32a时,计算得的频带图(实线为 TE 模,虚线为 TM 模),网格区域为完全带隙 (c)对应的 透射谱和反射谱

以上述二维粗锐正方格子复合结构(r = 0.32*a*,*d*=0.05*a*)为基本结构,再复合进另一套周期常数大的介质圆柱的简单正方格子结构,设此周

期常数大的介质圆柱的简单正方格子结构的周期常数  $a_2 = 3a$ , 5a 和 7a, 其介质圆柱的半径  $r_2 = 0.32a$ , 即为图 2 所示的结构.



图 2 二维粗锐正方格子复合结构再与另一套大周期常数的简单正方格子复合的结构 (a) $a_2 = 3a$ , (b) $a_2 = 5a$ , (c) $a_2 = 7a$ 



图 3 缺陷峰与大周期常数正方格子的圆柱体大小的相关曲线 (a)a2=3a,(b)a2=5a,(c)a2=7a

把具有宽完全带隙的粗锐复合的周期常数为 a 的二维正方格子再与周期常数为 a<sub>2</sub> 的大周期简单 正方格子复合后,发现大周期正方格子起缺陷作用, 即在原粗锐复合结构的很宽的完全带隙内出现缺陷 峰,这些缺陷峰的波长和缺陷峰的数量与大周期常 数的正方格子的圆柱体大小相关.图 3 给出缺陷峰 与大周期常数正方格子的圆柱体大小的相关曲线 图.从图3看出,不管大周期正方格子的周期是大还 是小,缺陷峰结构与大周期正方格子的圆柱直径的 关系曲线图都相似.即缺陷峰结构与大周期正方格 子的圆柱直径的关系曲线与 a,基本不相关.

结果显示缺陷带的数量与介质圆柱半径 r<sub>2</sub> 有 直接关系 ,r<sub>2</sub> 越大 ,则出现的缺陷带就越多.通过调 节大周期正方格子的圆柱的直径 ,可获得单缺陷峰、 多缺陷峰、单一偏振(TE模)的单缺陷峰,或TM模和TE模重叠( $r_2 = 0.376a$ )或分开的缺陷峰等.可适应不同的应用的所需.如图3所示,当 $r_2$ 为0.19a至0.25a时,有1条缺陷峰TE<sub>1</sub>;当 $r_2$ 为0.25a至0.28a时,有2条缺陷峰:TE<sub>1</sub>和TM<sub>1</sub>;当 $r_2$ 为0.28a至0.32a时,有3条缺陷峰:TE<sub>1</sub>和TM<sub>1</sub>;当 $r_2$ 为0.28a为0.32a至0.35a时,有4条缺陷带:TE<sub>1</sub>,TM<sub>1</sub>和TE<sub>2</sub>;而当 $r_2$  和 TM<sub>2</sub> 注  $r_2 = 0.376a$  时 ,有 4 条缺陷带 :TM<sub>1</sub> ,TM<sub>2</sub> , TE<sub>2</sub> 和 TE<sub>3</sub> ;其中 TM<sub>2</sub> 和 TE<sub>2</sub> 重叠.

另外,还发现当 *a*<sub>2</sub> 较小时 (如 *a*<sub>2</sub> < 5*a*),在宽 完全带隙内出现不平的缺陷态,即随入射方向变化 较大,如图 4(a)所示.当 *a*<sub>2</sub> > 5 *a* 时,缺陷态逐渐变 平,与入射方向的关系越来越小,具有近零色散的性 质,如图 4(b)所示.



图 4 (a)当  $a_2 = 3a$ ,在其宽完全带隙内出现不平的(即与方向有关的)缺陷峰,其中选  $r_2 = 0.377a$ ;(b)当  $a_2 = 7a$ ,在其宽完全带隙内出现比较平的(即与方向关系小的)缺陷峰,其中选  $r_2 = 0.376a$ 

我们用 FDTD 方法计算了这种粗锐复合的周期 常数为 a 的二维正方格子再与周期常数为  $a_2$  的大 周期简单正方格子复合后的结构的透射谱和反射 谱.结果见图 5 所示.其中实线:TM 反射谱,虚线: TM 透射谱,点线:TE 反射谱,点划线:TE 透射谱. 图 5 是  $a_2 = 7a$  的结果.当  $a_2$  变小时,缺陷峰的透射 率迅速增大;当  $a_2$  变大时,缺陷峰的透射率变小.即 结果表明缺陷峰的透射率与  $a_2$  的大小成反比.



图 5 大小周期正方格子复合结构的透射谱和反射谱 实线: TM 反射谱, 虚线:TM 透射谱, 点线:TE 反射谱, 点划线:TE 透 射谱

### 3.结 论

本文通过平面波展开法以及 N-Order 算法进行 数值模拟 发现在具有宽完全带隙的粗锐复合二维 正方格子的基础上,复合大周期的简单正方格子结 构 发现大周期正方格子起缺陷的作用,在原粗锐 复合正方格子的宽完全带隙内出现缺陷峰,本文通 过数值模拟给出了反映缺陷谱随大周期正方格子结 构参数变化的规律和各种关系曲线,典型的规律有: (1)发现当大周期正方格子结构的周期常数较小 时,在宽完全带隙内出现不平的,随入射方向变化 的缺陷态 :当大周期正方格子结构的周期常数较大 时,这些缺陷态逐渐变平,具有随入射方向变化较 小的 近零色散性质 (2) 不管大周期正方格子的 周期是大还是小 ,缺陷峰结构与大周期正方格子的 圆柱直径的关系曲线相似.即与 a,关系不大.(3) 随着掺杂的介质圆柱半径的增大 出现 1 至 4 条缺 陷峰 ,通过调节大周期正方格子的圆柱的直径 ,可获 得单缺陷峰、多缺陷峰、单一偏振( TE 模 )单缺陷峰 或 TM 模和 TE 模重叠或分开的缺陷峰等. 可适应不 同的应用的所需.(4)缺陷峰的透射率与 a, 的大小 成反比。

- [1] Yablonovitch E 1987 Phys. Rev. Lett. 58 2059
- [2] John S 1987 Phys. Rev. Lett. 58 2486
- [3] Noda S , Chutinan A , Imada M 2000 Nature 407 608
- [4] Lin S Y , Chow E , Hietala V , Villeneuve P , Joannopoulos J 1998 Science 282 274
- [5] Li Z Y , Gu B Y , Yang G Z 1998 Phys. Rev. Lett. 81 2574
- [6] Trifonov T , Marsal L F , Rodriguez A , Pallares J , Alcubilla R 2004 Phys. Rev. B 69 235112
- [7] 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 ]
- [8] Mao W D , Dong J W , Zhong Y C , Liang G Q , Wang H Z 2005 Opt. Express. 13 2994
- [9] Zhong Y C , Zhu S A , Wang H Z 2005 Chin . Phys . Lett . 22 369
- [10] Kuzmiak V 1998 Phys. Rev. B 57 15242
- [11] Zhuang F, Xiao S S, He J P, He S L 2002 Acta Phys. Sin. 51 2167 (in Chinese ] 庄 飞、肖三水、何江平、何赛灵 2002 物理 学报 51 2167 ]

- [12] Yablonovitch E, Gmitter T J, Meade R D, Rappe A M, Brommer K D, Joannopoulos J D 1990 Phys. Rev. Lett. 67 3380
- [13] McCall S L, Platzman P M, Dalichaouch R, Smith D, Schultz S 1991 Phys. Rev. Lett. 67 2017
- [14] Gadot F, de Lustrac A, Lourtioz J M, Brillat T, Ammouche A, Akmansoy E 1999 J. Appl. Phys. 85 8499
- [15] Painter O, Lee R K Scherer A, Yariv A, O 'Brien J D, Dapkus P D, Kim I 1999 Science 284 1819
- [16] Berggren M, Dodabalapur A, Slusher R E, Bao Z, Timko A, Nalamasu O 1998 Electron. Lett. 34 90
- [17] Fan S, Villeneuve P R, Joannopoulos J D, Haus H A 1998 Phys. Rev. Lett. 80 960
- [18] Pan J Y, Liang G Q, Mao W D, Wang H Z Acta Phys. Sin, accepted (in Chinese J 潘杰勇、梁冠全、毛卫东、汪河洲、物理 学报]
- [19] Johnson S G , Joannopoulos J D 2001 Opt . Express 8 173
- [20] Chan C T , Yu Q L , Ho K M 1995 Phys. Rev. B 51 16635

# Band gap characteristics of compound structure composed of lattices with different periodic constants \*

Zeng Jun Pan Jie-Yong Dong Jian-Wen Wang He-Zhou<sup>†</sup>

(State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies, Zhongshan (Sun Yat-Sen) University, Guangzhou 510275, China) (Received 18 September 2005; revised manuscript received 30 October 2005)

#### Abstract

Our numerical simulation results show that if a compound structure is composed of a lattice with a larger periodic constant and a lattice with a small periodic constant, the lattice with larger periodic constant will play the role of defects. The frequencies of defect modes are dependent on the rod radius ( $r_2$ ) of square lattice with a larger periodic constant, and the relationship of the defect modes and  $r_2$  is almost independent of  $a_2$ . The defect mode is dependent on incidence angle when  $a_2 < 5a$ . The dependence of defect mode on incidence angle decreases with the increasing of  $a_2$ . Furthermore, by optimizing the size of the rods ( $r_2$ ) of the larger periodic lattice, single defect mode, multiple defect modes with equal or different frequency spacing, including single polarization or TE and TM overlap defect mode, can be gotten respectively. The transmissivity of the defect modes are inversely proportional to  $a_2$ .

Keywords : photonic crystal , photonic band gap , compound lattices , defect mode PACC : 4270Q , 7820P

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10274108), National "973" Project of China (Grant No. 2004CB719804), National "863" Project of China (Grant No. 2003AA311022), and the Natural Science Foundation of Guangdong Province of China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail stswhz@zsu.edu.cn