

二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区及带隙计算*

刘 威† 刘盛纲

(电子科技大学物理电子学院 THz 实验室, 成都 610054)

(2006 年 7 月 18 日收到 2006 年 10 月 25 日收到修改稿)

二维单斜点阵光子晶体在光学聚焦器件及光子晶体波导中有重要的应用价值, 详细讨论了二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区及带隙计算, 并与常规方法计算得出的二维正三角形晶格光子晶体的带隙结构进行了比较, 最后讨论了临界条件下二维单斜点阵光子晶体的带隙结构, 证明了本方法的有效性.

关键词: 二维单斜点阵光子晶体, 第一布里渊区, 平面波展开法, 带隙结构

PACC: 4270Q, 7820P

1. 引 言

1987 年, Yablonovitch^[1]和 John^[2]各自独立地提出了光子晶体的概念. 光子晶体作为一种新型材料引起了学术界的广泛关注. 科学家们已经在二维光子晶体方面做了大量的工作. 但是到目前为止, 大量研究工作都集中在方形晶格和正三角形晶格的二维光子晶体上^[3-6]. 2005 年, Yoshifumi^[7]提出了一种基于二维单斜点阵结构的光子晶体光学聚焦器件, 同时, 我们也知道, 单斜点阵的倾斜角度变化对光子晶体的带隙结构及传输系数影响很大. 通过改变单斜点阵的倾斜角度, 可以改变基于二维单斜点阵晶格结构的光子晶体波导的弯折角度, 从而可以制造出各种锐角、直角、钝角的光子晶体波导. 郝^[8]讨论了二维单斜点阵金属光子晶体带隙结构, 但只讨论了斜方格这一特殊情况. 本文将对二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区及用平面波展开法计算带隙做详细讨论.

2. 二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区

任意倾斜角二维单斜点阵光子晶体如图 1 所示. 其晶格基矢为

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a\mathbf{e}_x, \\ \mathbf{a}_2 &= (b\cos\theta)\mathbf{e}_x + (b\sin\theta)\mathbf{e}_y, \end{aligned} \quad (1)$$

倒格基矢

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}\mathbf{e}_x - \frac{2\pi}{a}\text{ctg}\theta\mathbf{e}_y, \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{b\sin\theta}\mathbf{e}_y, \end{aligned} \quad (2)$$

倒格矢

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{//} &= h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 \\ &= \frac{2\pi}{a}h_1\mathbf{e}_x + \left(\frac{2\pi}{b\sin\theta}h_2 - \frac{2\pi}{a}\text{ctg}\theta h_1\right)\mathbf{e}_y, \end{aligned} \quad (3)$$

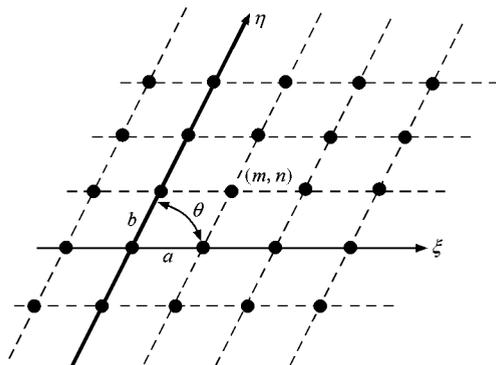


图 1 任意倾斜角二维单斜点阵光子晶体

其中 h_1, h_2 为整数. 布里渊区边界方程

$$\mathbf{G}_{//} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{G}_{//}}{2}\right) = 0, \quad (4)$$

其中 \mathbf{k} 为波矢. 根据第一布里渊区的定义, 满足(4)式的 \mathbf{k} 围成的最小封闭区域即为第一布里渊区. 令 $R = b/a$, 由(4)式易得

* 国家自然科学基金重大项目(批准号: 10390160)资助的课题.

† E-mail: dwliu212220@163.com

当 $R = 1 ; R > 1 , \cos\theta < 1/R$ 或 $R < 1 , \cos\theta < R$ 时 二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区为六边形 如图 2 所示.

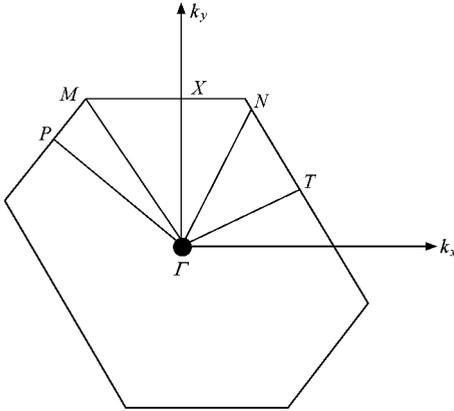


图 2 $R = 1 ; R > 1 , \cos\theta < 1/R$ 或 $R < 1 , \cos\theta < R$ 时二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区

波矢沿 $\Gamma \rightarrow T \rightarrow N \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma \rightarrow P \rightarrow M$ 方向变化就可以得到光子晶体的全带隙结构图. 其中 Γ, T, N, X, M, P 的波矢分别表示如下:

$$k_{\Gamma} = (0, 0); k_T = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \frac{1 - R\cos\theta}{R\sin\theta} \right);$$

$$k_N = \left(\frac{\pi}{a} \left(1 - \frac{1 - R\cos\theta}{R\sin\theta} \text{ctg}\theta \right), \frac{\pi}{aR\sin\theta} \right);$$

$$k_X = \left(0, \frac{\pi}{aR\sin\theta} \right);$$

$$k_M = \left(\frac{\pi}{a} \left(\frac{1 - R\cos\theta}{R\sin\theta} \text{ctg}\theta - 1 \right), \frac{\pi}{aR\sin\theta} \right);$$

$$k_P = \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \text{ctg}\theta \right).$$

当 $R > 1 , \cos\theta > 1/R$ 时 二维单斜点阵光子晶体第一布里渊区为平行四边形 如图 3 所示. 波矢沿 $\Gamma \rightarrow T \rightarrow N \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma \rightarrow P \rightarrow M$ 方向变化就可以得到光子晶体的全带隙结构图. 其中 Γ, T, N, X, M, P 的波矢分别表示如下:

$$k_{\Gamma} = (0, 0), k_T = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \frac{1 - R\cos\theta}{R\sin\theta} \right),$$

$$k_N = \left(\frac{\pi(R - \cos\theta)}{aR\sin^2\theta}, \frac{\pi}{aR\sin\theta} \right),$$

$$k_X = \left(0, \frac{\pi}{aR\sin\theta} \right),$$

$$k_M = \left(-\frac{\pi}{a} \left(\frac{2 - 3R\cos\theta + R^2}{R^2\sin^2\theta} \right), \frac{\pi}{aR\sin\theta} \right),$$

$$k_P = \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \frac{R\cos\theta - 1}{R\sin\theta} \right).$$

当 $R < 1 , \cos\theta > R$ 时 二维单斜点阵光子晶体

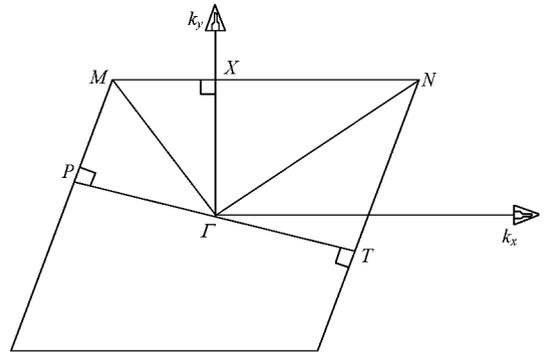


图 3 $R > 1 , \cos\theta > 1/R$ 时 二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区

第一布里渊区如图 4 所示. 波矢沿 $\Gamma \rightarrow T \rightarrow N \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma \rightarrow P \rightarrow M$ 方向变化就可以得到光子晶体的全带隙结构. Γ, T, N, X, M, P 点对应的波矢分别如下:

$$k_{\Gamma} = (0, 0), k_T = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \frac{1 - R\cos\theta}{R\sin\theta} \right),$$

$$k_N = \left(\frac{\pi}{a} \frac{(2R\cos\theta - 1)(R - \cos\theta)}{R\sin^2\theta}, \frac{\pi}{a} \frac{2R^2 - 2R\cos\theta + 1}{R\sin\theta} \right),$$

$$k_X = \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \text{ctg}\theta \right),$$

$$k_M = \left(\frac{\pi}{a} \frac{R\cos 2\theta - \cos\theta}{R\sin^2\theta}, \frac{\pi}{a} \frac{2R\cos\theta - 1}{R\sin\theta} \right),$$

$$k_P = \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \frac{R\cos\theta - 1}{R\sin\theta} \right).$$

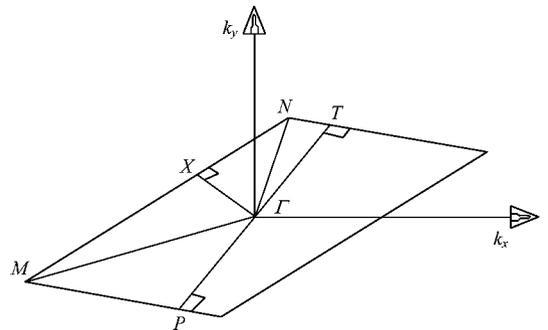


图 4 $R < 1 , \cos\theta > R$ 时 二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区

3. 二维单斜点阵光子晶体的带隙结构

为了验证上述结论的正确性, 首先考虑一种特殊情况, 即 $a = b = 403 \text{ nm}, \theta = 60^\circ$. 这时二维单斜点阵光子晶体等同于讨论较多的正三角形晶格二维光

子晶体. 图 5 (a) (b) 分别为用图 2 所示的布里渊区和传统方法计算得出的 TE 模的带隙结构图. 其中 $r = 114 \text{ nm}$ 为光子晶体中空气柱半径, $\epsilon_r = 11.9$ 为光

子晶体材料的相对介电常数. 从图 5 可以看出, 用两种方法计算得出了相同的结果. 在 $0.2066 < \omega a / 2\pi c < 0.2691$, $0.5784 < \omega a / 2\pi c < 0.6109$ 存在光子带隙.

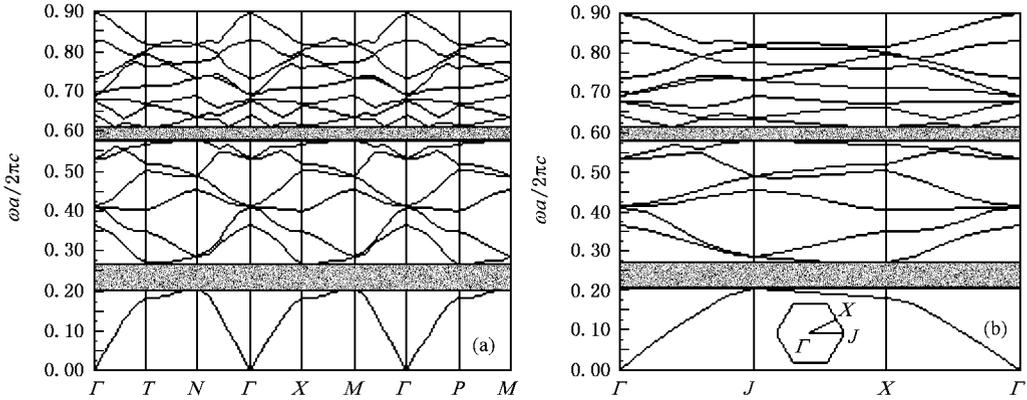


图 5 二维正三角形晶格光子晶体 TE 模带隙结构图 (a) 用图 2 所示布里渊区计算的结果 (b) 用常用方法计算的结果

由上面的分析我们还知道, $R > 1$, $\cos\theta = 1/R$; $R < 1$, $\cos\theta = R$ 时为临界条件, 在这一条件下, 第一布里渊区既可以用六边形又可以用平行四边形表示. 当 $R > 1$ 时, 在临界条件下, 二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区同时满足图 2、图 3 两种情况; 当 $R < 1$ 时, 在临界条件下, 第一布里渊区同时满足图 2、图 4 两种情况. 图 6 (a) (b) 为 $a = 400 \text{ nm}$, $R = 2$, $r =$

170 nm , $\theta = 60^\circ$, $\epsilon_r = 11.9$ 时, 分别用图 2、图 3 所示的布里渊区计算得出的 TE 模的带隙结构图, 从图中可以看出, 在 $0.3202 < \omega a / 2\pi c < 0.3234$ 之间存在光子带隙; 图 7 (a) (b) 为 $a = 400 \text{ nm}$, $R = 0.5$, $r = 85 \text{ nm}$, $\theta = 60^\circ$, $\epsilon_r = 11.9$ 时, 分别用图 2、图 4 所示布里渊区计算得出的 TE 模的带隙结构图, 光子带隙出现在 $0.6403 < \omega a / 2\pi c < 0.6469$ 之间.

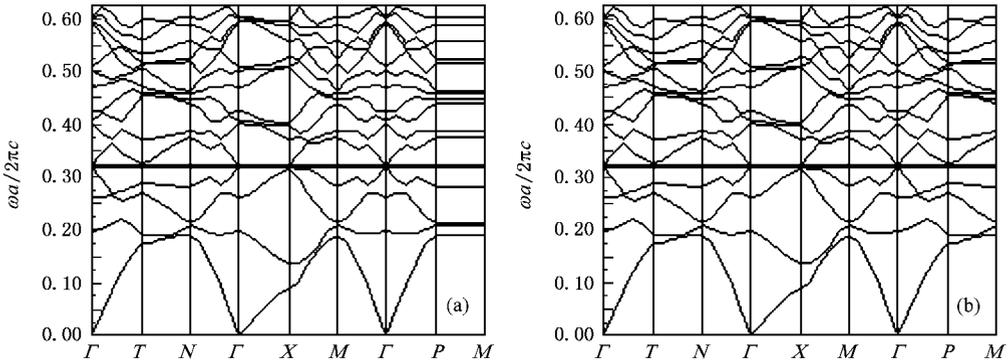


图 6 $R > 1$, $\cos\theta = 1/R$ 时, 光子晶体 TE 模带隙结构图 (a) 用图 2 所示布里渊区计算的结果 (b) 用图 3 所示布里渊区计算的结果

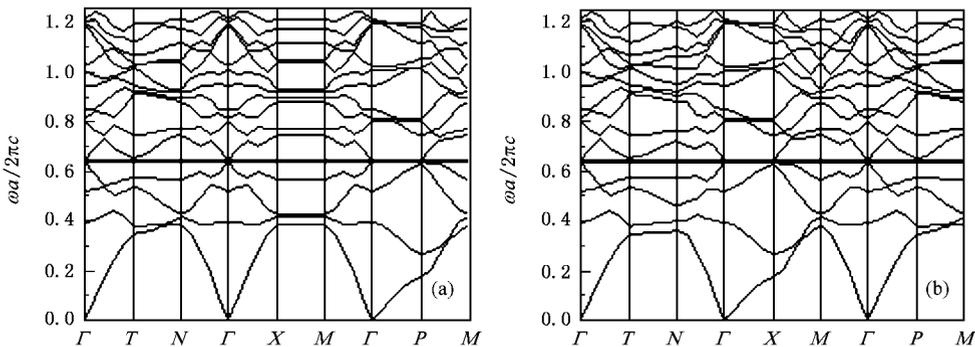


图 7 $R < 1$, $\cos\theta = R$ 时, 光子晶体 TE 模带隙结构图 (a) 用图 2 所示布里渊区计算的结果 (b) 用图 4 所示布里渊区计算的结果

4. 结 论

本文详细地讨论了二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区及带隙计算方法,并与传统的带隙计算方法进行了比较.当二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区为六边形时,我们讨论了一种特殊情况,即 $a = b$, $\theta = 60^\circ$.从图 5 可以看出,其计算结果跟传统方法计算得出的结果符合得很好.当二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区为图 3、图 4 所示的平

行四边形时,为了验证方法的有效性,我们考虑临界条件,即 $R > 1$, $\cos\theta = 1/R$ 或 $R < 1$, $\cos\theta = R$.在这种临界条件下,二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区既可以用六边形又可以用平行四边形表示.图 6、图 7 为在临界条件下用平面波展开法计算得出的带隙结构图,从图中我们可以看出,在临界条件下,用两种布里渊区计算得出的结果是一致的.因此上面讨论的二维单斜点阵光子晶体的第一布里渊区及带隙结构计算方法是有效的.

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
 [2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
 [3] 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]
 [4] 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]
 [5] Natalia M, Ning C Z 2005 *App. Phys. Lett.* **87** 161113
 [6] Xie L Y, Zhang Y J, Peng X Z, Chen X F, Xie S Z 2003 *Semiconductor Optoelectronics* **24** 392
 [7] Yoshifumi O, Yasuhisa O, Yukio I 2005 *J. Lightw. Technol.* **23** 4374
 [8] Hao B L, Liu P K, Tang C J 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1862 (in Chinese) [郝保良、刘濮鲲、唐昌建 2006 物理学报 **55** 1862]

Calculation of photonic band gap and first Brillouin zone for two-dimensional monoclinic lattice photonic crystal *

Liu Di-Wei[†] Liu Sheng-Gang

(THz Laboratory, School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054 China)

(Received 18 July 2006 ; revised manuscript received 25 October 2006)

Abstract

Two-dimensional (2D) monoclinic lattice photonic crystal has potential application for light focusing device and photonic crystal waveguides. In this article, the first Brillouin zone (BZ) and the method of calculating the photonic band gaps of two-dimensional monoclinic lattice photonic crystal are discussed. The photonic band gap (PBG) structure of triangular lattice photonic crystal calculated by the method described in this article agrees well with that from the conventional method. Furthermore, the calculated PBG structure of 2D monoclinic lattice in critical conditions are consistent with either hexagon or rectangle BZ, which shows that the method described here is valid.

Keywords : two-dimensional monoclinic lattice photonic crystal, the first Brillouin zone, plane wave expansion method, photonic band gap

PACC : 4270Q, 7820P

* Project supported by the Major Program of the National Natural Science Foundation (Grant No. 10390160).

[†] E-mail : dlwliu212220@163.com