文章编号:1001-5078(2009)09-0969-05

·光学材料器件与薄膜。

二维正方柱结构光子晶体禁带的研究

王媛媛¹,宋 健²,黄益强¹,李田赫¹,张振宇¹,何晓东¹ (1. 吉林大学通信工程学院,吉林 长春 130012;2. 吉林大学电子科学与工程学院,吉林 长春 130012)

摘 要:利用平面波展开法通过计算机模拟仿真对二维正方排列介质方柱和空气方柱结构以 及三角排列介质方柱和空气方柱结构进行了禁带研究。研究发现:这四种二维光子晶体结构 都存在完全禁带。介质方柱结构具有较大的 TM 禁带,而空气方柱结构具有较大的 TE 禁带。 当介质方柱宽度增大时,禁带中心频率均向低频移动,而当空气方柱宽度增加时,禁带中心频 率均向高频移动。当增大材料折射率时,禁带中心频率均向低频移动。对于空气方柱结构,应 该选取高折射率材料,以提高完全禁带的带隙率。

关键词:光子晶体;二维光子晶体;平面波展开法;禁带结构;完全禁带中图分类号:0431 文献标识码:A

Research of band gap of two-dimensional photonic crystal with square rods

WANG Yuan-yuan¹, SONG Jian², HUANG Yi-qiang¹, LI Tian-he¹, ZHANG Zhen-yu¹, HE Xiao-dong¹

(1. Department of Communication Engineering, Jilin University, Changchun 130012, China;

2. Electronic Science and Engineering College, Jilin University, Changchun 130012, China)

Abstract: The band gap of square dielectric rods of two-dimensional photonic crystal in square lattice and the band gap of square air rods of two-dimensional photonic crystal in triangular lattice by computer simulation were studied with the plane wave method. Results show that: there is complete band gap in the four structures of two-dimensional photonic crystal. There is big TM band gap in square dielectric rods, and big TE band gap in square air rods. The mid-dle frequencies of the band gap will reduce with the increase of the width of the square dielectric rods, but the middle frequencies of the band gap will increase with the increase of the width of the square air rods. When increasing the material refractive index, the middle frequencies of the band gap will reduce. To the square air rods, we should choose the high refractive index material to enhance the band gap radio of the complete band gap.

Key words: photonic crystal; two-dimensional photonic crystal; plane wave method; band gap; complete band gap

1 引 言

光子晶体^[1-2]是 1987 年由 Yablonovich 和 John 分别提出来的,是一种周期性调整介电常数的结构。 它可以产生命名为光子禁带(PBGs)的光谱区,在光 子禁带中光不能传播,在某种意义上,这类似于半导 体中的电带隙。由于其独特的特性,光子晶体在光 通信上有重要用途。例如可以用它制作光子晶体微 谐振腔^[3]、光子晶体光开关^[4]、光子晶体滤波器等, 这些器件对光集成起到举足轻重的作用。 三维光子晶体虽然具有更广泛的应用潜力,但 是其制作上还是困难重重。二维光子晶体相对制作 简单,已有不少应用实例,因此研究二维光子晶体仍 有很大应用价值。而光子晶体禁带^[5-11]是许多应

基金项目:吉林科技发展计划项目(No. 20050524);长春市国际 合作科技计划项目(No. 2007114)资助。

作者简介:王媛媛(1984 -),女,研究生,主要研究方向为光子 晶体及光子晶体器件的理论研究与性能分析以及光子晶体在光通信 中的应用。

收稿日期:2009-04-01;修订日期:2009-05-27

用研究的基础,对完全禁带的研究更是禁带研究的 重点。根据研究,降低对称性能增大带隙,这为产生 完全禁带提供了可能。降低对称性的一般方法有: 采用各向异性材料,改变晶胞或组员形状。本文将 通过改变组员形状的方法,对二维正方排列介质方 柱和空气方柱结构以及三角排列介质方柱和空气方 柱结构进行禁带研究。研究表明,这四种结构均存 在完全禁带。

2 理论分析

光子晶体禁带的计算常用的方法有传输矩阵 法、平面波展开法、时域有限差分法等,不同的方法 各有优缺点。平面波展开法将电磁场在倒格矢空间 以平面波的形式展开,将麦克斯韦方程化成一个本 征方程,求解该方程的本征值便得到传播的光子的 本征频率和电磁波在光子晶体中传播的色散关系, 从而得到能带结构和透射反射系数,我们将利用该 方法通过计算机模拟仿真进行带隙计算。

光子晶体的基本方程为:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r})\right) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}(\vec{r}) \qquad (1)$$
$$(\vec{k} + \vec{G}) \times \left[\sum_{G'} \eta_{GG'}(\vec{k} + \vec{G'})\right] \times \vec{H}_{G'} + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}_G = 0$$

式(2)是傅里叶空间中的光子晶体基本方程的 形式。式中 $\eta_{GC'} = \eta(\vec{G} - \vec{G}')$,而以倒格矢为自变量 的 $\eta \in \eta(\vec{r})$ 的傅里叶变换:

$$\eta(\vec{G}) = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \eta(\vec{r})$$
(3)

而介电常数倒数从原空间变换到倒格矢空间有 下列式子:

$$\eta(\vec{G}) = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \eta(\vec{r})$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_b} \delta_{G,0} + (\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{C}\cdot\vec{r}} S(\vec{r})$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_b} \delta_{G,0} + \eta_0(\vec{G})$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_a} f + \frac{1}{\varepsilon_b} (1-f), \vec{G} = 0\\ (\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b}) f \frac{2J(G\rho)}{G\rho}, \vec{G} \neq 0 \end{cases}$$
(4)

这里 f 也就是光子晶体的填充比。式(2)的形式是 矢量式,必须将其转化成标量形式才可以进行计算。 对任意矢量 $\vec{s} \in xy$ 平面,选定三个方向矢量 $\vec{e}_1(\vec{s})$, $\vec{e}_2(\vec{s}), \vec{e}_3(\vec{s}), 关系为: \vec{e}_1(\vec{s}), \vec{e}_2(\vec{s}) 与 \vec{s} 垂 直,$ $\vec{e}_3(\vec{s}) 与 \vec{s}$ 平行, $\vec{e}_1(\vec{s})$ 平行于 z 轴, $\vec{e}_2(\vec{s}), \vec{e}_3(\vec{s})$

在
$$xy$$
 平面内。这样, $\vec{H}(\vec{r})$ 可以表达为:

$$\vec{H}(\vec{r}) = e^{-i\omega_n(\vec{k})t} \sum_{\vec{C}} \sum_{\lambda=1}^{2} h_{n,\lambda} (\vec{k} + \vec{G}) \vec{e}_{\lambda} (\vec{k} + \vec{G})$$

$$e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{\tau}}$$
(5)

其中, $\vec{e}_1(\vec{k} + \vec{G})$, $\vec{e}_2(\vec{k} + \vec{G})$, $\vec{k} + \vec{G}$ 为一组互相垂直的矢量系。式(5)代入式(2),有下列关系式: $\sum_{\vec{k}} |\vec{k} + \vec{G}| |\vec{k} + \vec{G}'| \eta_{cc'}$

$$\begin{bmatrix} \vec{e}_{2}(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{e}_{2}(\vec{k}+\vec{G}') & -\vec{e}_{2}(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{e}_{1}(\vec{k}+\vec{G}') \\ -\vec{e}_{1}(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{e}_{2}(\vec{k}+\vec{G}') & \vec{e}_{1}(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{e}_{1}(\vec{k}+\vec{G}') \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} h_{n,1}(\vec{k}+\vec{G}) & \vec{e}_{1}(\vec{k}+\vec{G}') \\ h_{n,2}(\vec{k}+\vec{G}') \end{bmatrix} = \frac{\omega_{n}^{2}(\vec{k})}{c^{2}} \begin{bmatrix} h_{n,1}(\vec{k}+\vec{G}) \\ h_{n,2}(\vec{k}+\vec{G}) \end{bmatrix}$$
(6)

对于 TM 模

$$\sum_{G'} |\vec{k} + \vec{G}| |\vec{k} + \vec{G'}| \eta (\vec{G} - \vec{G'}) h_{G',2} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_{G',2}$$
(7)

对于 TE 模:

$$\sum_{G'} |\vec{k} + \vec{G}| |\vec{k} + \vec{G}'| \eta (\vec{G} - \vec{G}') h_{G',1} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_{G',1}$$
(8)

根据具体的折射率分布求解本征方程便可得到 其本征值以及本征矢的值,从而确定光子晶体的禁 带结构。

3 正方柱结构二维光子晶体的禁带分析

本文主要对正方排列介质方柱和空气方柱结构 以及三角排列介质方柱和空气方柱结构进行禁带研 究,将通过方柱宽度和材料折射率对禁带的影响两 方面进行。其结构图如图1所示,其中(a)为二维 正方排列介质方柱结构,(b)为二维三角排列介质 方柱结构,(c)为二维正方排列空气方柱结构,(d) 为二维三角排列空气方柱结构。对于正方排列,水 平方向和垂直方向晶格周期都为*a*;对于三角排列,

水平方向晶格周期为 $\frac{a}{2}$,垂直方向晶格周期为 $\frac{a\sqrt{3}}{2}$ 。



3.1 二维正方排列介质方柱结构的禁带分析

根据研究,正方排列介质圆柱只存在 TM 禁带, 没有 TE 禁带。这是因为圆柱间没有可以容纳 D 场 线的连续通路,而 D 场线必须连续,因此它们被迫 穿过空气区而导致无法形成 TE 禁带。如果介质柱 间产生连续通路,则会产生 TE 禁带。下面我们将 对正方排列介质方柱结构分别进行方柱宽度和介质 材料折射率的扫描,来研究其禁带结构。

3.1.1 介质方柱宽度对禁带的影响

介质方柱折射率为3.24,二维光子晶体置于空 气中时,禁带随正方柱宽度的变化如图 2(a) 所示。 其中黑色代表完全禁带,较深色代表 TE 禁带,浅色 代表 TM 禁带。从图中可以看到,这种结构存在完 全禁带。当介质方柱的宽度不断增大时,TE 和 TM 禁带及完全禁带的中心频率都向低频移动,这是因 为介质方柱宽度的增大使二维光子晶体有效介电常 数增大,从而使归一化频率减小。完全禁带存在于 介质方柱宽度为0.55 a~0.74 a之间。介质方柱宽 度为0.69 a 时完全禁带带宽最大,为0.033。为了 更直观地反映完全禁带的大小,我们引入带隙率的 概念, 它定义为带隙的频宽与带隙中心频率的比值, 这样对于每一个柱宽度值我们都可以得到一个带隙 率值。当介质柱宽度为 0.69 a 时,其中心频率为 0.661,带隙率为4.99%。从图中还可以看到,这种 结构也存在较大的 TM 禁带。最大的一条 TM 禁带 存在于介质柱宽度为0.16 a~0.7 a之间,禁带带宽 先增大后减小,当正方柱宽度增大到 0.31 a 时有最 大带隙率,TM 禁带带宽为 0.136,中心频率为 0.386,带隙率为35.23%。



图2 正方排列介质方柱宽度和介质方柱折射率对禁带的影响 3.1.2 介质方柱折射率对禁带的影响

其他参数不变,取介质方柱宽度为0.6 a,介质 方柱折射率对禁带的影响如图2(b)所示。从图中 可以看到,随着介质柱折射率的增加,TE,TM 禁带 和完全禁带的中心频率都向低频移动,这也是因为 介质柱折射率的增大使光子晶体有效介电常数增 大,从而使归一化频率减小。TM 禁带带宽先增大, 但当介质柱折射率增大到一定程度,TM 禁带带宽 几乎保持不变,由于中心频率仍不断减小,所以带隙 率逐渐增大。完全禁带存在于介质柱折射率为 3.02~4.34 范围内,随着介质柱折射率的增大,完 全禁带绝对带宽先增大后减小,当折射率为 3.98 时 有最大带隙率,为 5.29%。

相比于正方排列介质圆柱结构,这种结构在柱 间产生连续通路,从而形成 TE 禁带,并且产生了完 全禁带。

3.2 二维三角排列介质方柱的禁带分析

3.2.1 介质方柱宽度对禁带的影响

介质方柱的介电常数为 11.4, 二维光子晶体置 于空气中, 介质柱宽度的一半表示为 Radius, 介质方 柱宽度对禁带的影响如图 3(a)所示, 完全禁带、TE 禁带和 TM 禁带见标注。图中表明, 该结构形成了 较大的 TM 禁带, 并且产生了一条较窄的完全禁带。 随着介质柱宽度的增大, 禁带中心频率均向低频移 动。在介质方柱宽度为 0.1 a ~ 0.76 a 范围内存在 一条较大的 TM 禁带, 该禁带带宽先增大后减小, 在 正方柱宽度为 0.258 a 时达到最大值, 为 0.198, 中 心频率为 0.437, 带隙率为 45.3%。完全禁带存在 于正方柱宽度为 0.46 a ~ 0.66 a 之间, 当宽度为 0.54 a 禁带带宽为 0.016, 中心频率为 0.441, 相对 带隙宽度为 3.63%。



图 3 三角排列介质方柱宽度和介质方柱折射率对禁带的影响

3.2.2 介质方柱折射率对禁带的影响

其他参数不变,取介质柱宽度为0.54 a,介质柱 折射率对禁带的影响如图3(b)所示。其中黑色部 分为完全禁带。从图中看到,随着介质柱折射率的 增大,各个禁带均向低频方向移动。TM 禁带带宽 随着正方柱折射率的增大,带宽有所增大,但当折射 率增大到3.5,禁带宽度则基本保持不变,但中心频 率逐渐减小,故带隙率逐渐增大。该结构的完全禁 带存在于折射率为3.2~4.4 范围内,宽度较窄。

无论是正方排列还是三角排列,介质方柱结构 都产生了完全禁带,所以介质柱形状对完全禁带也 有很大影响,正方介质柱结构是设计完全禁带光子 晶体时一种重要结构。

3.3 二维正方排列空气方柱的禁带分析

3.3.1 空气方柱宽度对禁带的影响

材料折射率为3.24,空气方柱折射率为1,禁带 随空气方柱宽度的变化趋势如图4(a)所示。从图 中看到,该结构存在TE和TM禁带,但不存在完全 禁带。随着空气方柱宽度的增加,TE和TM禁带的 中心频率都向高频移动,这是因为空气方柱宽度的 增大使光子晶体有效介电常数减小,从而使归一化 频率增大。TE禁带存在于空气柱宽度为0.57*a*~ 0.93*a*范围内,随着空气柱宽度的增大,TE禁带带 宽先增大后减小,当空气柱宽度为0.81*a*时禁带带 宽达到最大值0.1,中心频率为0.368,带隙率为 27.17%。TM禁带存在于空气柱宽度为0.81*a*~ 0.96*a*之间,随着空气柱宽度增加,禁带宽度存在 最大值,当空气柱宽度达到0.94*a*时禁带宽度最 大,为0.066,中心频率为0.628,带隙率为10.5%。



图 4 正方排列空气方柱的宽度和介质材料折射率对禁带的影响

3.3.2 介质材料折射率对禁带的影响

设定空气柱宽度为0.92 a,其他参数不变。介 质材料折射率对禁带的影响如图4(b)所示。从图 中看到,该结构形成了完全禁带。完全禁带存在于 材料折射率为4.06~5之间,材料折射率逐渐增大, 完全禁带中心频率逐渐向低频移动,带宽逐渐增大, 当材料折射率增大到4.3后,带宽基本保持不变,为 0.039,中心频率为0.451,带隙率为8.65%。虽然 该结构产生了较大带宽的完全禁带,但需要折射率 大的材料,实际当中高折射率材料的选择有限。从 图中可见,该结构还产生较大带宽的 TE 禁带。TE 禁带随着介质材料折射率的增大,高频边缘几乎保 持不变,而低频边缘逐渐向低频移动,因此禁带带宽 逐渐增大,中心频率向低频移动,带隙率逐渐增加。 要获得较大的 TE 禁带,也应该选取折射率高的材 料。TM 禁带在介质材料折射率为2.5 时开始出现, 中心频率向低频移动,而带宽在材料折射率增大到 2.66 后便基本保持不变,但带隙率逐渐增大。

当选用折射率大于 4.3 的材料时,该结构存在 较大的 TE 禁带,并且产生完全禁带。

3.4 二维三角排列空气方柱的禁带分析

根据前面对正方排列介质方柱、三角排列介质 方柱以及正方排列空气方柱光子晶体结构的研究, 这三种结构都产生了完全禁带。为了进一步研究方 形组员对禁带的影响,我们将对三角排列空气方柱 结构进行研究。

3.4.1 空气方柱宽度对禁带的影响

图 5(a) 所示为空气方柱宽度对禁带的影响。 空气柱宽度的一半表示为 Radius。介质材料的介电 常数为 11.4, 空气柱折射率为 1 时, 从图中看到随 着空气柱宽度的增大, 禁带中心频率均向高频移动。 该结构主要存在两条完全禁带, 低频区的一条完全 禁带对应宽度的变化范围较小, 为 0.8 *a* ~ 0.86 *a*, 带宽随空气柱宽度的增大而逐渐增大, 当空气柱宽 度为 0.84 *a* 时有最大值 0.035, 此时中心频率为 0.4775, 带隙率为 7.33%。而高频区完全禁带在宽 度为 0.74 *a* ~ 0.84 *a* 范围内变化, 带宽先增大后减 小存在最大值, 当空气柱宽度为 0.8 *a* 时禁带带宽 达到最大, 为 0.0751, 中心频率为 1.093, 此时带隙 率为 6.87%。

从图中还看到,该结构存在较大的 TE 禁带。 该禁带存在于空气柱宽度为0.338 a~0.858 a 范围 内。带宽也是随着空气柱宽度的增加,先增大后减 小,最大值为0.168 当孔半径为0.76 a,此时中心频



图 5 三角排列空气方柱宽度和介质材料折射率对禁带的影响

3.4.2 介质材料折射率对禁带的影响

当其他参数不改变,空气方柱宽度设为0.82 a, 禁带随着介质材料折射率变化的规律如图 5(b)所 示。随着介质材料折射率的增大,禁带中心频率均 向低频移动。从图中看到,该结构具有一条较大的 完全带隙,当介质材料折射率在 3.56~5 之间变化 时,这条完全禁带带宽先增大但当介质材料折射率 大于 4.168 后带宽基本不变,带隙率逐渐增大。在 高频区还存在一条宽度较大的完全禁带,在介质材 料折射率为 3.011~4.207 范围内。禁带宽度最大 值在介质材料折射率为 3.41 时,最大值为 0.078, 中心频率为 1.083,带隙率为 7.2%。

对于这种结构,我们在设计时也需要选取折射 率大的材料,如果采用折射率大于4.1的介质材料, 则将会产生带隙率大于13%的完全禁带。

4 结 论

本文利用平面波展开法进行计算机数值模拟, 通过对二维正方排列介质方柱和空气方柱结构以及 三角排列介质方柱和空气方柱结构禁带的研究,发 现这四种二维光子晶体结构都存在完全禁带。介质 方柱结构具有较大的 TM 禁带,而空气方柱结构具 有较大的 TE 禁带。当介质方柱宽度增大时,禁带 中心频率均向低频移动,而当空气方柱宽度增加时, 禁带中心频率均向高频移动。当增大材料折射率 时,禁带中心频率均向低频移动。对于空气方柱结 构,应该选取高折射率材料,以提高完全禁带的带隙 率。完全禁带的宽度对光子晶体特性有重要影响, 对于以上四种二维光子晶体结构,虽然产生的完全 禁带带宽并不大,但为我们设计完全禁带二维光子 晶体结构提供了更多选择。

参考文献:

- Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solidstate physics and electronics [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 58(20):2059 - 2061.
- John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric super-lattice [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 58 (23):2486 - 2489.
- [3] 王媛媛,何晓东,胡贵军,等.一维光子晶体微谐振腔的调谐特性与品质因子[J].光子学报,2009,38(2): 285-288.
- [4] 吴冰冰,何晓东,薛伟,等.一维非线性光子晶体全光开 关的数值研究[J].光子学报,2009,38(2):293-297.
- [5] Pendry J B. Calculating photonic band structure [J]. Phys. Condon Matter, 1996, 8:1086 - 1108.
- [6] Maradudin A A, McGurn A R. Photonic band structure of a truncated two-dimensional periodic dielectric medium [J]. Opt. Soc. Am, 1993, 10:307 - 313.
- Ho K M, Chan C T, Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structure [J]. Phys. Rev. Lett., 1990,75(12):1676-1678.
- [8] Park J Hwang, Y Lee, J Kim. Square-lattice photonic band-gap single-cell laser operating in the lowest-order whispering gallery mode [J]. Appl. Phys. Lett. ,2002,80 (21):3883-3885.
- [9] 梁华秋,冯尚申.在高频区存在巨带隙的长方晶格二 维光子晶体[J].光子学报,2005,34(5):781-784.
- [10] 梁华秋,冯尚申,周小莉.两种大带隙的长方晶格二维 光子晶体[J].激光与红外,2005,35(10):776-778.
- [11] 吴炳坚,郑浩,方明阳,等. 二维光子晶体三角形结构 带隙研究[J]. 激光与红外,2006,36(10):974-976.