



论文

不同形状介质柱体结构二维三角晶格光子晶体的完全带隙

冯帅*, 杨玉平, 兰楚文, 白珍珍, 王义全

中央民族大学理学院, 北京 100081

* E-mail: fengshuai75@163.com

收稿日期: 2009-12-03; 接受日期: 2010-06-13

国家自然科学基金(批准号: 10904176)、国家重点基础研究发展计划(编号: 2006CB921702)、国家民族事务委员会科研项目(编号: 09ZY012)和国家大学生创新性实验计划(编号: NMOE200911002)资助项目

摘要 利用时域有限差分方法, 理论研究了二维三角晶格光子晶体的完全带隙. 通过计算由各种形状介质柱排列在空气中组成的三角晶格光子晶体的能带结构, 发现对于空心三角形介质柱排列在空气中组成的晶体结构, 存在一个宽度为 $0.098 (2\pi c/a)$ 的完全禁带, 该宽度达到了禁带中心频率的 19.8%. 并且系统讨论了不同结构参数对于完全禁带宽度的影响.

关键词 光子晶体, 完全带隙, 三角晶格

PACS: 42.70.Qs, 78.20.Ci, 42.25.Fx

自从 Yablonovitch^[1]和 John^[2]开创性地提出光子晶体概念以来, 光子晶体已经引起了人们的关注和广泛的研究. 光子晶体是由不同种类的介质或金属周期性排列而组成的一种人造晶体, 其晶格常数与波长在同一量级. 光子晶体的一个显著特点是一定频率范围内的电磁波被禁止在其中传播, 我们称之为光子带隙. 宽光子带隙是光子晶体许多实际应用的基础, 诸如光波导, 光子晶体缺陷模激光器等. 尽管三维光子晶体可以提供更多潜在的应用, 但是二维光子晶体由于其更容易制作, 而且可运用于许多光电器件, 而使人们对其进行着深入细致的研究. 对于二维光子晶体, 电磁波可以分解为 TM 极化模和 TE 极化模. 如果光子带隙在两种偏振模式中均存在且互有重叠的部分, 则形成了一个完全光子带隙.

人们已经尝试设计了很多种具有宽完全带隙的

光子晶体结构^[3-14]. 已有结果表明, 对于正方晶格光子晶体, 空气柱排列在介质背景中和介质柱排列在空气背景两种结构中皆存在完全光子带隙; 同时, 对于介质背景中的空气柱组成的三角晶格光子晶体, 尤其是圆形空气孔结构存在完全光子带隙. Cassagne 等人^[3]已经证明空气圆孔排列在介质背景中组成的三角晶格结构和介质柱排列在空气背景中组成的石墨结构都可以产生宽完全光子带隙. Qiu 等人^[4]发现对于矩形晶格结构, 椭圆柱相比圆形柱能够得到更大的光子带隙. Wang 等人^[5]研究了由五种不同形状(包括六边形, 圆形, 椭圆形, 正方形和矩形)柱体组成的二维光子晶体晶格结构, 发现在蜂窝状晶格结构中, 六边形柱体能够产生最大的带隙. 对于由介质柱排列在空气背景中组成的二维三角晶格光子晶体结构, 能否存在宽完全带隙吸引了很多人的关注. 本

文研究表明, 对于三角形锲柱排列在空气背景中构成的三角晶格光子晶体, 能够产生一个完全光子带隙.

1 数值模拟和讨论

我们研究了由圆形锲柱排列在空气中构成的二维三角晶格光子晶体, 其结构如图 1(a), 其中锲的相对介电常数为 18, 锲柱的半径 $r=0.33a$ (其中 a 是光子晶体的晶格常数), 相应的占空比为 $f=0.17$. 图 2 给出了利用时域有限差分方法^[15,16]理论计算得到的上述光子晶体结构 TM 极化模(实心点线)和 TE 极化模(空心点线)的能带结构. 我们可以看出, 在第一个和第二个 TM 极化模能带之间存在一个大的光子带隙. 同时, 在高频 TM 能带之间也出现两个大的光子带隙. 尽管在第一个和第二个 TE 极化模能带之间存在一个小的光子带隙, 但是两种不同偏振模的带隙位置没有重叠, 因此不存在完全光子带隙.

保持柱体的占空比不变, 将柱体的形状由实心圆形改变为空心圆形, 其结构如图 1(b), 其中空心圆柱的内半径为 $0.16a$, 外半径为 $0.282a$. 这种光子晶体能带结构的计算结果如图 2(b)所示, 从中可以看出最低两个 TM 能带之间的光子带隙很窄, 而在较高的几个 TM 能带之间出现了较宽的光子带隙. 最低的两个 TE 模能带位置几乎没有改变, 而更高频能带的位置明显受到了圆柱形状改变的影响.

将介质柱体的形状由圆形改变为正六边形, 其组成的光子晶体结构如图 3 所示. 对于同样的填充比 $f=0.17$, 对应的实心六边形柱体边长为 $0.256a$, 而对于空心六边形的内层空心圆半径为 $0.16a$ 时, 外层六边形的边长改变为 $0.31a$. 由上述两种六边形柱体组

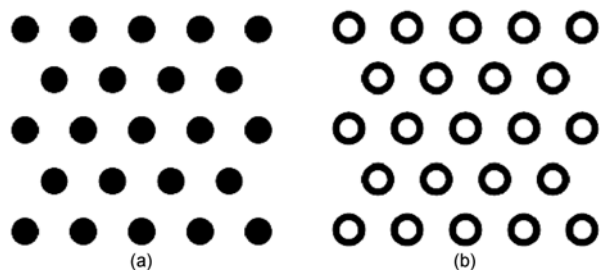


图 1 由(a)和(b)圆形锲柱排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体的结构示意图
(a) 实心; (b) 空心

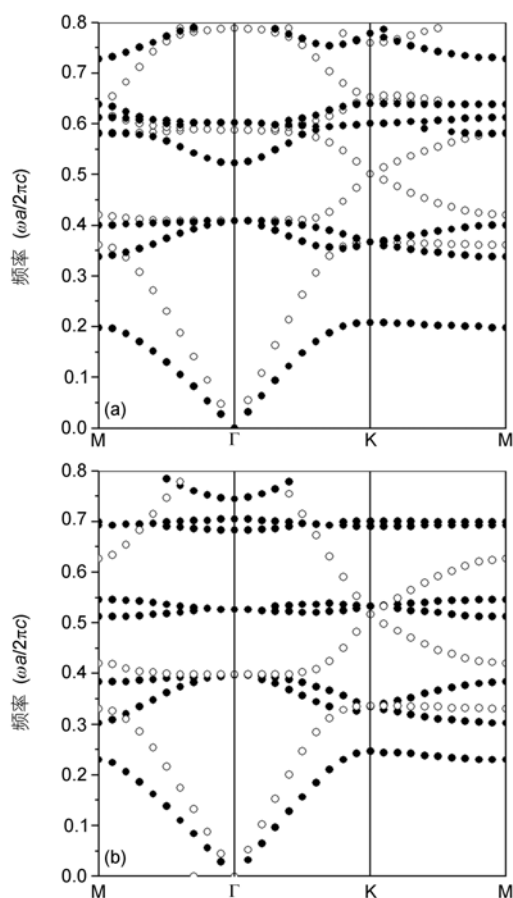


图 2 由(a)和(b)圆形锲柱组成的二维三角晶格光子晶体 TM 模(实心点线)和 TE 模(空心点线)的能带结构
(a) 实心; (b) 空心

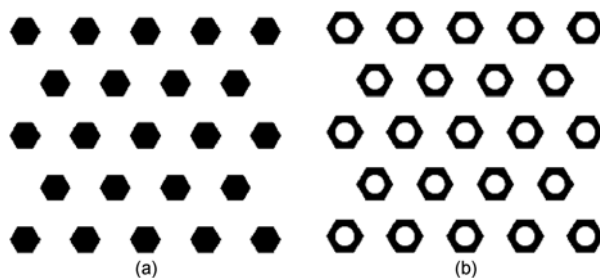


图 3 由(a)和(b)六边形锲柱排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体的结构示意图
(a) 实心; (b) 空心

成的三角晶格光子晶体的能带结构如图 4 所示. 比较图 2 和 4, 发现最低的几个 TM 模和 TE 模能带位置并没有随着柱体形状由圆形改变为六边形而变化, 也没有明显的完全光子带隙存在.

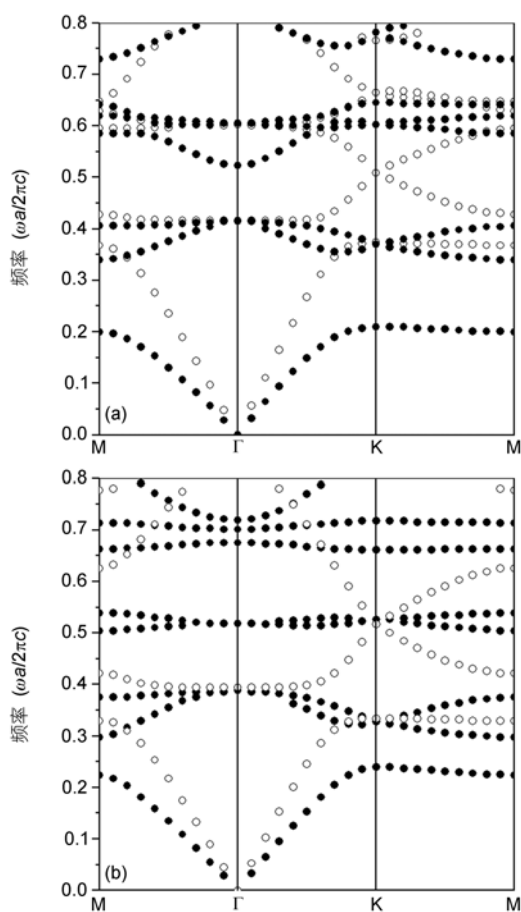


图 4 由(a)和(b)六边形锺柱组成的二维三角晶格光子晶体 TM 模(实点线)和 TE 模(空心点线)的能带结构
(a) 实心; (b) 空心

为了更大程度地减小柱体形状的对称性, 利用正方形柱体构成三角晶格光子晶体. 对于介质柱占空比 $f=0.17$, 相应的实心正方形柱体边长为 $l=0.412a$, 而当空心正方形的内圆半径为 $0.16a$ 时, 外层边长为 $0.5a$, 以上两种结构的正方形柱体的边长沿光子晶体的 ΓX 方向, 如图 5 所示. 图 6 给出了以上两种光子晶体能带结构的计算结果. 从图 6(a)中可以看到在第三个 TM 极化模能带和第二个 TE 极化模能带之间出现了一个窄的完全光子带隙, 该带隙的频率范围从 $0.41 \sim 0.48$ ($2\pi c/a$), 为带隙中心频率的 1.9%. 同时, 另一个完全光子带隙出现在第三和第四个 TE 能带之间, 该带隙的频率范围在 $0.5 \sim 0.508$ ($2\pi c/a$) 之间, 为带隙中心频率的 1.6%. 图 6(b)表明, 当正方形柱体从实心结构变为空心结构后, 出现了更多的 TM 光子带隙, 但是在第一个和第二个 TM 能带之间的光子带隙较

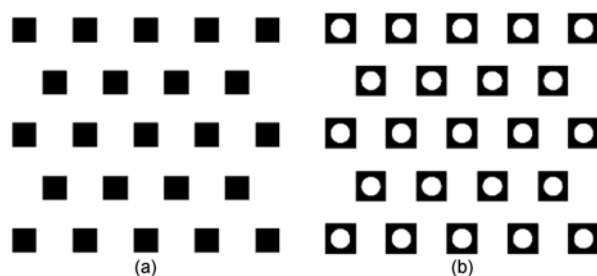


图 5 由实心(a)和空心(b)正方形锺柱排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体的结构示意图

(a) 实心; (b) 空心

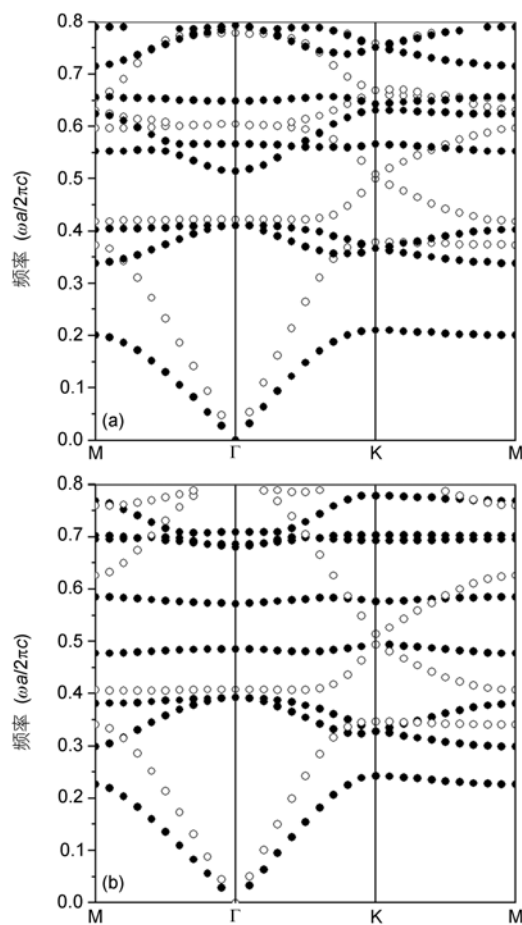


图 6 由(a)和(b)正方形锺柱组成的二维三角晶格光子晶体 TM 模(实点线)和 TE 模(空心点线)的能带结构

(a) 实心; (b) 空心

窄. 较低的两个 TE 模光子带隙几乎没有受到柱体形状改变的影响. 在第三个 TM 能带和第二个 TE 能带之间出现一个完全光子带隙, 该带隙的频率范围从

0.392~0.408 ($2\pi c/a$), 为带隙中心频率的 4%. 同时, 另一个完全光子带隙出现在第二和第三个 TE 能带之间, 其频率范围为从 0.493~0.503 ($2\pi c/a$), 为带隙中心频率的 4%. 尽管该完全带隙宽度的实际应用价值仍然较小, 但是完全带隙的宽度随着柱体形状从实心变为空心结构而有所增加.

当三角晶格光子晶体由三角形柱体组成时, 此时柱体和三角晶格格点的配位多边形具有相同的形状, 并且光子晶体的一个基元和晶格具有相同的对称性. 如图 7 所示, 实心三角形的边长为 $0.626a$, 空心三角形的外层边长为 $0.76a$, 内层的空气圆柱半径为 $0.16a$. 以上两种结构介质柱的填充率均为 0.17. 从图 8(a)中可以看出在第二个 TE 模能带和第四个 TM 模能带之间出现了一个明显的完全光子带隙, 带隙的上下边缘频率分别为 0.468 和 0.489 ($2\pi c/a$). 该完全带隙宽度为带隙中心频率的 4.4%. 当柱体的形状变为空心三角形时, 一个宽完全带隙同样出现在第二个 TE 带和第四个 TM 带之间, 该带隙的频率范围为 0.444~0.542 ($2\pi c/a$). 该宽完全带隙的频宽为 0.098 ($2\pi c/a$), 达到了带隙中心频率的 19.8%. 在完全带隙的上方, 另一个窄的完全光子带隙存在于第二个 TE 模能带和第三个 TM 模能带之间, 该带隙的频率范围为 0.385~0.4 ($2\pi c/a$), 为带隙中心频率的 3.8%.

对于上述空心三角形介质柱结构, 保持其填充率 $f=0.17$ 不变, 完全光子带隙的宽度与内层空气孔半径尺寸之间的关系如图 9 所示. 从图中可以看出, 尽管随着空气孔尺寸的增加或减小, 完全带隙的宽度有所降低. 然而当内层半径在从 $0.06a \sim 0.21a$ 范围内变化, 相应的外层三角形的边长从 $0.65a \sim 0.844a$ 变化时, 还是能够出现一个宽度大于 $0.04 (2\pi c/a)$ 的宽光子带隙.

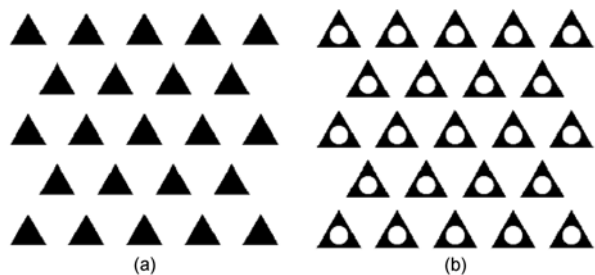


图 7 由(a)和(b)三角形形柱排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体的结构示意图
(a) 实心三角; (b) 空心三角

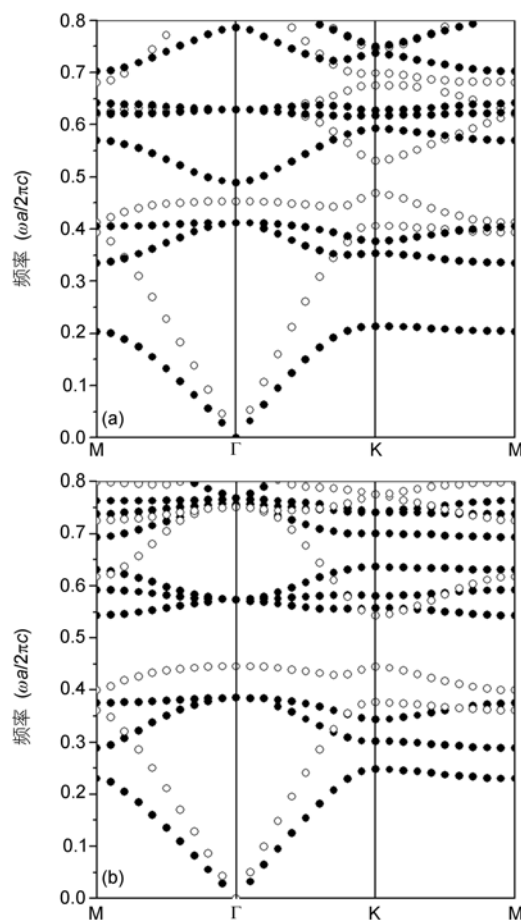


图 8 由(a)和(b)三角形形柱组成的二维三角晶格光子晶体 TM 模(实点线)和 TE 模(空心点线)的能带结构
(a) 实心三角; (b) 空心三角

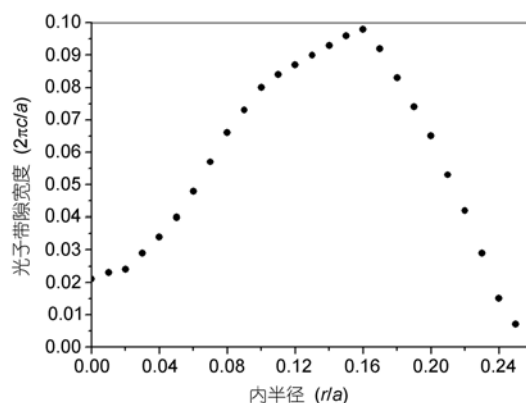


图 9 介质柱占空比为 0.17, 完全带隙宽度随空心三角形介质柱内半径的变化

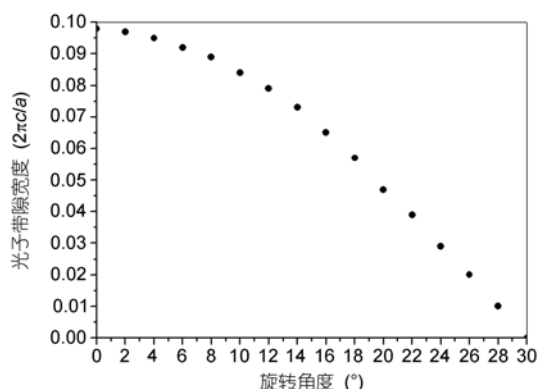


图 10 完全带隙宽度随着三角形边长方向与光子晶体 ΓK 方向之间夹角改变的变化规律

前面我们研究了对于三角形介质柱的一条边长沿着光子晶体 ΓK 方向时, 相应光子晶体的能带结构. 如果在晶格内旋转三角形介质柱, 完全带隙的宽度

同样会发生改变. 对于空心三角形介质柱结构 $l=0.76a$, $r=0.16a$, 图 10 中给出了该完全带隙的宽度随着三角形边长方向和光子晶体 ΓK 方向之间夹角的变化规律. 可以看出完全带隙的宽度随着三角形边长方向与光子晶体 ΓK 方向之间夹角的增加而变窄. 然而在角度小于 20° 范围内时, 还是可以产生一个宽度大于 $0.04(2\pi c/a)$ 的宽完全带隙. 最后, 我们用半导体材料硅柱代替锗柱, 同样得到了类似的结果.

2 结论

综上所述, 我们研究了不同形状介质柱排列在空气背景中构成的三角晶格光子晶体的能带结构. 我们发现利用空心三角形锗柱组成的二维三角晶格光子晶体, 可以产生非常宽的完全光子带隙. 这些计算结果将有助于二维光子晶体宽完全光子带隙的设计.

参考文献

- 1 Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys Rev Lett*, 1987, 58: 2059—2062
- 2 John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys Rev Lett*, 1987, 58: 2486—2489
- 3 Cassagne D, Jouanin C, Bertho D. Hexagonal photonic-band-gap structures. *Phys Rev B*, 1996, 53: 7134—7142
- 4 Qiu M, He S L. Large complete band gap in two-dimensional photonic crystals with elliptic air holes. *Phys Rev B*, 1999, 60: 10610—10612
- 5 Wang R Z, Wang X H, Gu B Y, et al. Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals. *J Appl Phys*, 2001, 90: 4307—4313
- 6 Joannopoulos J D, Villeneuve P R, Fan S H. Photonic crystals: Putting a new twist on light. *Nature*, 1997, 386: 143—149
- 7 Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z. Large absolute band gap in 2D anisotropic photonic crystals. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 2574—2577
- 8 Wang X H, Gu B Y, Yang G Z. Large absolute photonic band gaps created by rotating noncircular rods in two-dimensional lattices. *Phys Rev B*, 1999, 60: 11417—11421
- 9 Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys Rev Lett*, 1990, 65: 3152—3155
- 10 Joannopoulos J D, Mead R D, Winn J N. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton: Princeton University Press, 1995
- 11 Pan T, Zhuang F, Li Z Y. Absolute photonic band gaps in a two-dimensional photonic crystal with hollow anisotropic rods. *Solid State Commun*, 2004, 129: 501—506
- 12 Shen L, He S, Xiao S. Large absolute band gaps in two-dimensional photonic crystals formed by large dielectric pixels. *Phys Rev B*, 2002, 66: 165315
- 13 Joannopoulos J D, Villeneuve P R, Fan S H. Photonic crystals: Putting a new twist on light. *Nature*, 1997, 386: 143—149
- 14 Kuang W M, Hou Z L, Liu Y Y, et al. The bandgap of a photonic crystal with triangular dielectric rods in a honeycomb lattice. *J Opt A-Pure Appl Opt*, 2005, 7: 525—528
- 15 Yee K S. Numerical solutions of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans Antenna Propag*, 1966, 14: 302—307
- 16 Berenger J P. Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J Comput Phys*, 1996, 127: 363—379