

二维三角格子光子晶体的带隙结构

谭仁兵 张 晋 张 茜 郭俊梅^a

(云南大学物理系 昆明市 650091)

^a(贵研铂业股份有限公司 昆明市 650221)

摘 要 用平面波展开法对二维光子晶体的电磁波理论及周期排列的电介质中电磁波的 Bloch 波解进行了详细的推导, 计算出以 GaAs 为背景的空气柱构成的二维三角格子光子晶体的能带结构, 研究了 H 偏振和 E 偏振带隙宽度随填充比 f 的变化。计算结果表明, 当 $f = 0.8$ 时, H 偏振和 E 偏振出现重叠的最大绝对光子带隙, 带隙位于 $0.458\omega - 0.529\omega$ ($\omega = 2\pi c/a$, a 为晶格常数, c 为光速), 带隙宽度为 0.071ω , 相应的带隙波长范围为 $472.6 - 545.9\text{nm}$, 处于可见光波段。

关键词 光子晶体, 平面波展开法, 三角格子, 光子能带结构。

中图分类号: O572.31 文献标识码: A 文章编号: 1004-8138(2006)06-1259-06

1 引言

光子晶体的概念是 Yablonovitch^[1]和 John^[2]于 1987 年分别提出的, 它是一种具有周期性介电函数分布的新材料。像半导体一样, 这种周期性材料的能谱具有能隙结构, 称为光子能带或光子带隙。振动频率在光子带隙内的电磁波沿光子晶体的任何方向都不能传播。

光子带隙的存在, 使得光子晶体在激光器、光波导器件、光滤波器等方面具有广阔的应用前景。同时, 光子有着电子所没有的优势——速度更快, 没有相互作用等, 光子晶体被认为是未来的光半导体, 对光通讯、微波通讯、光电子集成等领域将产生重大影响。因此, 在理论上计算光子能带, 研究能带结构的变化规律具有重要的实际意义。

一般来说, 光子晶体的带隙越宽, 其性能越好。目前, 计算光子晶体能带结构的理论方法有平面波展开法(PWM)^[3,4]、有限时域差分法(FDTD)^[5]、转移矩阵法(TMM)^[6]、多重散射法^[7,8]等, 其中平面波展开法提出最早, 应用最广。研究表明, 三角晶格比正方晶格更容易出现带隙^[9,10]。Pilihal 和 Maradudin 研究了在固定结构参数不变的条件下, 三角格子光子晶体能带随介电常数的变化^[3]。本文应用平面波展开法计算了二维 GaAs 基三角晶格圆柱形光子晶体带隙结构, 研究了在固定介电常数的条件下, 光子晶体带隙宽度随填充比 f 的变化, 并设计出一种在远红外波段具有绝对光子带隙的光子晶体结构。

2 平面波展开法的计算过程

晶胞模型如图 1 所示, 晶胞的晶格常数为 a , 圆柱半径为 r_0 。设轴 x_3 方向为介质柱的轴方向, 二

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10664006, 60261004), 北京市传感器重点实验室开放课题(66062022)

联系人, 电话: (0871) 5033709; 手机: (0) 13099430365; Email: zhangjin@ynu.edu.cn

作者简介: 谭仁兵(1981—), 重庆市人, 云南大学物理系硕士研究生。

收稿日期: 2006-09-27; 接受日期: 2006-10-19

维周期结构在 x_1x_2 平面上。光子晶体介质柱在 x_1x_2 平面呈等边三角行排列, 介质柱轴平行于 x_3 方向。这种结构在 x_1x_2 方向具有一定的周期性, 沿着 x_3 方向是同性的。假设光子晶体介质柱的介电常数为 ϵ_c , 基体的介电常数为 ϵ_0 。图 2 为光子晶体的第一 Brilluin 区。对于二维光子晶体, 入射电磁波可分解为 H 偏振和 E 偏振, 即磁场平行于介质柱的 TE 模和电场平行于介质柱的 TM 模。



图 1 二维三角格子光子晶体结构 (a) 及三角格子的第一 Brilluin 区 (b)

由 Maxwell 方程组可以得到电磁波在光子晶体中的传播方程:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon(x)} \nabla \times E \right] = \frac{\omega^2}{c^2} E \quad (1)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon(x)} \nabla \times H \right] = \frac{\omega^2}{c^2} H \quad (2)$$

(1) 式和 (2) 式分别是描述电场强度 E 和磁场强度 H 的传播方程。这两个方程都类似于量子力学中的薛定谔方程, 利用其中任何一个都可以确定电磁波在光子晶体中的传播。

下面对 H 偏振和 E 偏振分别进行推导。首先考虑 H 偏振, 此时 H 和 E 可写成

$$H(x, t) = H_0(x, \omega) e^{-i\omega t} = (0, 0, H_3(x, \omega)) e^{-i\omega t} \quad (3)$$

$$E(x, t) = E_0(x, \omega) e^{-i\omega t} = (E_1(x, \omega), E_2(x, \omega), 0) e^{-i\omega t} \quad (4)$$

其中 x 为由 x_1x_2 坐标轴构成的平面上的矢量。先把 (2) 式展开, 然后把 (3) 式和 (4) 式代入, 消去 E_1 和 E_2 , 得到 H_3 的表达式

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial H_3}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial H_3}{\partial x_2} \right) = - \frac{\omega^2}{c^2} H_3 \quad (5)$$

为了解这个方程, 可把周期函数 $\epsilon^{-1}(x)$ 、 $H_3(x, \omega)$ 用傅里叶级数展开:

$$\epsilon^{-1}(x) = \sum_K K(G) e^{iG \cdot x} \quad (6)$$

$$H_3(x, \omega) = \sum_K A(K+G) e^{i(K+G) \cdot x} \quad (7)$$

其中 $K = k_1 \hat{x}_1 + k_2 \hat{x}_2$ 是被限制在第一 Brilluin 区的波矢量; $G = h_1 b_1 + h_2 b_2$ 是晶格的二维倒格矢, 式中 h_1 、 h_2 是整数; 三角格子的基本倒格矢为

$$b_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x}_1 - \frac{\sqrt{3}}{3} \hat{x}_2 \right) \quad b_2 = \frac{2\pi}{a} \left(-\frac{2\sqrt{3}}{3} \hat{x}_2 \right) \quad (8)$$

将 (6) 和 (7) 式代入 (5) 式, 得到

$$\sum_K K(G-K) (K+G) (K+G) A(K+G) = \frac{\omega^2}{c^2} A(K+G) \quad (9)$$

式 (9) 使得 H 偏振的电磁波在光子晶体中的传播问题变成求解对称矩阵的本征值和本征函数问题。

对于 E 偏振, E 和 H 的表达式可以写成

$$E(x, t) = E_0(x, \omega) e^{-i\omega t} = [0, 0, E_3(x, \omega)] e^{-i\omega t} \quad (10)$$

$$H(x, t) = H_0(x, \omega) e^{-i\omega t} = [H_1(x, \omega), H_2(x, \omega), 0] e^{-i\omega t} \quad (11)$$

把Maxwell方程的(1)式展开, 然后, 将(10)和(11)式代入, 消去 H_1 和 H_2 , 可得 E_3 的表达式

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial E_3}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial E_3}{\partial x_2} \right) = -\frac{\omega^2}{c^2} E_3 \quad (12)$$

类似上面求解(5)式的过程, 我们把 $E_3(x, \omega)$ 按布洛赫波展开

$$E_3(x, \omega) = \sum B(K+G) e^{i(K+G) \cdot x} \quad (13)$$

将(6)式和(13)式代入(12)式可得

$$\sum K(G-G')(K+G')^2 B(K+G) = \frac{\omega^2}{c^2} B(K+G) \quad (14)$$

这是一个非对称矩阵的本征方程, 为此, 我们作如下变换:

$$B(K+G) = |K+G| C(K+G) \quad (15)$$

将(15)式代入(14), 得

$$\sum K(G-G') |K+G'| |K+G| C(K+G) = \frac{\omega^2}{c^2} C(K+G) \quad (16)$$

这是一个对称矩阵的本征方程, 从而简化了求解过程.

对于图1所示的三角格子光子晶体, 其介电系数为

$$\frac{1}{\epsilon^{-1}(x)} = \frac{1}{\epsilon_0} + \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \sum_{l_1, l_2} S(x - t(l_1, l_2)) \quad (17)$$

定义 $S(x)$ 如下:

$$S(x) = \begin{cases} 1, & \text{周期柱内} \\ 0, & \text{周期柱外} \end{cases} \quad (18)$$

(6)式中的傅里叶系数 $K(G)$ 可通过下式求得

$$\begin{aligned} K(G) &= \frac{1}{A_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} \frac{1}{\epsilon(x)} e^{-iG \cdot x} dx \\ &= \frac{1}{\epsilon_0} \delta_{G,0} + \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1}{A_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} S(x) e^{-iG \cdot x} dx \end{aligned} \quad (19)$$

上式中的积分遍及整个 $x_1 \times x_2$ 平面, 考虑到(18)式的定义, 三角格子的傅里叶系数可表示为

$$K(G) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_0} f + \frac{1}{\epsilon_0} (1-f), & G=0 \\ \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1}{A_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} S(x) e^{-iG \cdot x} dx, & G \neq 0 \end{cases} \quad (20)$$

式中 f 为填充因子, 即介质柱或空气圆孔占整个晶胞的百分比, 对于三角格子

$$f = S_r/S_a = (2\pi/\sqrt{3}) r^2/a^2 \quad (21)$$

对(20)式中的积分项运用极坐标, 可得

$$I = \int_{\text{cell}} S(x) e^{-iG \cdot x} dx = \iint_{\text{cell}} |G|^{-1} |\cos\theta| r dr d\theta = 2 \frac{\pi r^2}{r|G|} J_1(rG) \quad (22)$$

故(20)式可以表示为

$$K(G) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_0} f + \frac{1}{\epsilon_0} (1-f), & G=0 \\ \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) f \frac{2J_1(rG)}{r|G|}, & G \neq 0 \end{cases} \quad (23)$$

其中 J_1 为一阶贝赛尔函数。

上述(9)和(16)式中的 $\sum$ 是对无限多个倒格矢求和, 本文用 N 个倒格矢的和来代替, 则以上两式分别变成含有 $N \times N$ 个矩阵元的本征值方程, 其本征值就是 H 偏振和 E 偏振的本征频率。

3 数值计算结果和讨论

本文选用相对介电常数为 11.4 的半导体材料 GaAs 为背景, 将空气圆柱在 GaAs 介质中以三角格子作周期性排列构成二维光子晶体, 该光子晶体的晶格常数 $a = 250\text{nm}$, 其晶格结构如图 1 所示。

在分析 GaAs 介质中的空气圆柱三角格子二维光子晶体带隙结构随结构参数的变化关系之前, 我们首先用文献[11]中测量的 H 偏振能量投射谱的实验数据(填充因子 f 在 0.25—0.3 之间)检验自编程序的正确性。我们选 $f = 0.275$, 计算得到二维光子晶体的 H 偏振能带结构, 如图 2 所示, 其第一带隙位于 $0.2096—0.26623\omega$, 这一结果与文献[9]测量的二维光子晶体 ΓX 和 ΓJ 方向的透射谱符合得很好, 这说明我们的计算方法和程序是正确的。

为了分析光子晶体的能带随结构参数的关联, 我们研究在固定介电常数不变的情况下, 光子晶体第一带隙宽度随填充比 f 的变化曲线。图 3(a)和(b) (横坐标为填充因子, 纵坐标为带隙宽度) 分别给出 H 偏振和 E 偏振随 f 的变化关系。由图 3 可见, H 偏振在 $f = 0.7$ 时出现最大带隙, 带隙位于 $0.304—0.491\omega$, 带隙波长范围为 $509.2—822.4\text{nm}$, E 偏振在 $f = 0.85$ 时出现三个带隙, 其中第一带隙为最大带隙, 带隙位于 $0.499—0.608\omega$, 带隙对应的波长范围为 $411.2—501.0\text{nm}$ 。

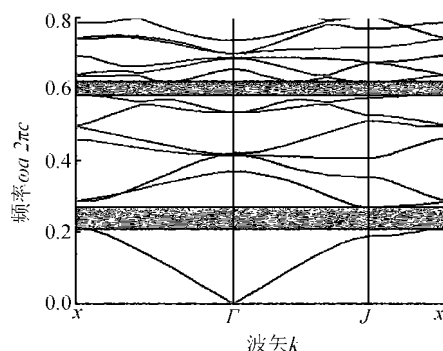


图 2 H 偏振光子能带结构
($\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 11.4, f = 0.275$)

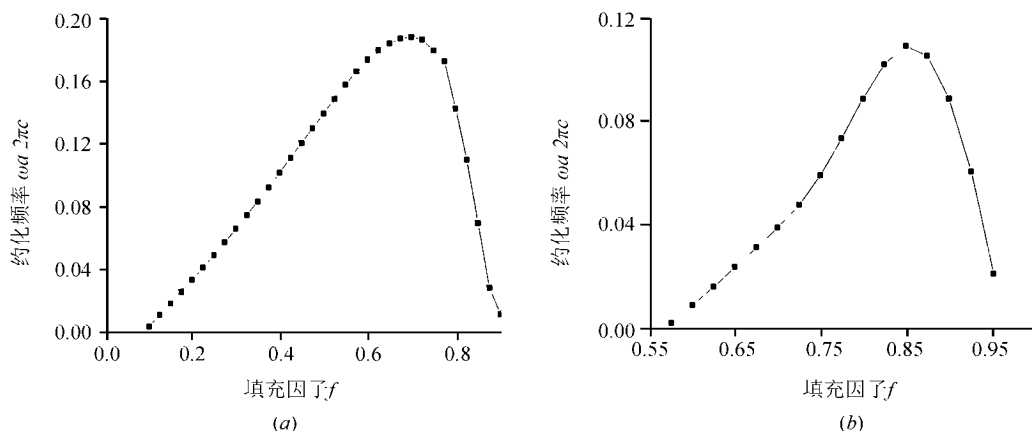


图 3 带隙宽度随 f 的变化 (a) H 偏振 (b) E 偏振

当 $f = 0.8$ 时, H 偏振和 E 偏振出现重叠的最大绝对光子带隙, 带隙位于 $0.458—0.529$, 带隙宽度为 0.071ω 。带隙波长范围为 $472.6—545.9\text{nm}$, 中心波长为 509.3nm , 处于可见光波段。图 4(a)和(b)分别是 $f = 0.8$ 时, H 偏振和 E 偏振的能带结构。

4 结论

本文用平面波展开法详细推导了二维正三角格子光子晶体的电磁波本征方程, 计算了由 GaAs

和空气柱构成的二维三角格子光子晶体的能带结构。在固定介电常数和晶格常数不变的情况下, 讨论了 H 偏振和 E 偏振带隙宽度随填充比 f 的变化。通过大量优化计算, 发现当 $f = 0.8$ 时, H 偏振和 E 偏振出现重叠的最大绝对光子带隙, 带隙位于 $0.458\omega_c - 0.529\omega_c$, 带隙宽度为 $0.071\omega_c$, 相应的带隙波长范围为 $472.6 - 545.9 \text{ nm}$, 中心波长为 509.3 nm , 处于可见光波段。由于 GaAs 是一种具有成熟刻蚀工艺的半导体材料, 因此, 本文所设计的光子晶体结构具有实际应用价值。

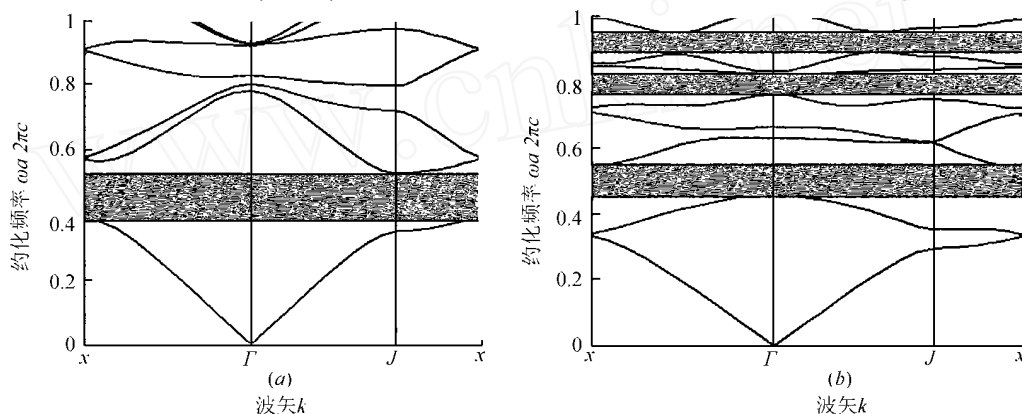


图 4 光子能带结构(a) H 偏振(b) E 偏振($\epsilon_s = 1, \epsilon_a = 11.4, f = 0.8$)

参考文献

- [1] Yablonovitch E. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics[J]. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(20): 2059.
- [2] John S. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric[J]. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(23): 2486.
- [3] Plihal M, Maradudin A. A. Photonic Band Structure of Two-Dimensional Systems: The Triangular Lattice[J]. *Phys Rev B*, 1991, **44**(16): 8565.
- [4] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a Photonic Gap in Periodic Dielectric Structures[J]. *Phys Rev Lett*, 1990, **65**(25): 3152.
- [5] Biewirth K, Schulz N, Amdt F. Finite-Difference Analysis of Rectangular Dielectric Waveguide Structures[J]. *IEEE Trans Microwave Theory Technol*, 1986, **34**(11): 1104.
- [6] Pendry J B, Mackinnon A. Calculation of Photon Dispersion Relations[J]. *Phys Rev Lett*, 1992, **69**(19): 2772.
- [7] Wang X, Zhang X G, Yu Q *et al*. Multiple-Scattering Theory for Electromagnetic Waves[J]. *Phys Rev B*, 1993, **47**(8): 4161.
- [8] Leung K M, Qiu Y. Multiple-Scattering Calculation of the Two-Dimensional Photonic Band Structure[J]. *Phys Rev B*, 1993, **48**(11): 7767.
- [9] Anderson C M, Giap K P. Larger Two-Dimensional Photonic Band Gaps[J]. *Phys Rev Lett*, 1996, **77**(14): 2949.
- [10] Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z. Large Absolute Band Gap in 2D Anisotropic Photonic Crystals[J]. *Phys Rev Lett*, 1996, **81**(12): 2574.
- [11] Labilloy D, Benisty H, Weisbuch C *et al*. Quantitative Measurement of Transmission, Reflection, and Diffraction of Two-Dimensional Photonic Band Gap Structures at Near-Infrared Wavelengths[J]. *Phys Rev Lett*, 1997, **79**(21): 4147.

Band Gap Structures of 2D Triangular Lattice Photonic Crystals

TAN Ren-Bing ZHANG Jin ZHANG Xi GUO Jun-Mei^a

(Department of Physics, Yunnan University, Kunming 650091, P. R. China)

a(Sino-Platinum Metals Limited Company, Kunming 650221, P. R. China)

Abstract The Bloch wave solution in periodic dielectric was deduced in detail according to the electromagnetic wave theory of 2D photonic crystals, and the band gap structures of two-dimensional (2D) triangular lattice photonic crystals constructed from air rods in GaAs dielectric matrix was calculated by using plan wave expansion method. The dependences of filling factor f in the photonic crystals were studied in both H polarization and E polarization. It was found that the crystal constructed from air rods in GaAs dielectric matrix can generate an maximum absolute photonic band gap with width 0.071 in the low frequency range of 0.458—0.529 ω ($\omega = 2\pi c/a$), corresponding to the wavelength range of 472.6—545.9 nm, which belongs to visible light range.

Key words Photonic Crystal, Plan Wave Expansion Method, Triangular Lattice, Photonic Band Structure

本刊论文发表的正常周期: 2—8 个月 ——您的发明创造得到“优先权”荣誉的必要保障

缩短论文发表周期, 是尽早实现学术论文的社会效益的前提, 也是作者创造性劳动得到尊重、为其在世界上取得“优先权”荣誉的必要保障, 因为发明创造的“优先权”通常是以出版时间为准的。因此, 本刊在严格保证质量的条件下, 把尽快发表作者的论文, 视为自己的神圣职责。

来稿要符合“《光谱实验室》投稿须知”(见本刊 1994—2003 年每年第 1 期)、特别是其中第 4—7 项要求, 做到“齐、清、定”。“齐”即全稿包括表、图和照片等齐全, 符合本刊对稿件的各项要求; “清”即书写清楚, 段落分明, 便于排版和校对; “定”即做到稿件内容完整, 在排校过程中无须增删修改) 是保证论文质量不可缺少的条件。如果您希望论文早日发表(如 2—8 个月), 请务必按“须知”写稿。

如果来稿附有同行专家评语及单位推荐信, 论文还可以更快发表(0.5—2 个月)。

来稿请用 Word 或北大方正排版, 用电子邮件发到本部电子信箱[E-mail: 1) gpssys@263.net; 2) gpssys81@citiz.net; 3) gpss@chinajournal.net.cn; 4) gpssys@periodicals.net.cn]。为避免某一电子信箱的服务器发生故障而延误收稿, 建议作者向本刊几个信箱同时发送电子邮件, 并请作者发了邮件后, 打电话通知编辑部, 以便及时查询; 在尚未开通电子邮件业务的情况下, 作者也可向本刊投稿处直接邮寄纸质稿件两份。稿件邮寄地址: 北京市 81 信箱 66 分箱《光谱实验室》编辑部联络处 刘建林, 100095。

本刊收到作者来稿后, 都会及时(1—3 日)回信, 并发出“关于收到稿件的通知”。因此, 作者发送稿件后 10 日以上都没有消息, 一定要及时来电查询。

一篇论文出版, 常常需要反复沟通“作者→编辑部→审者→编辑部→作者”之间的联系, 其中与作者的联系是最重要的一环, 一旦脱节, 必然中断编辑过程。因此作者来稿时, 务必将联系人的详细地址、办公室和家中的电话、手机号码、传真号码和电子信箱等(通讯方式要尽可能全)告诉编辑部, 以便能与您及时联系。否则, 由此而耽误出版由作者自己负责。

《光谱实验室》编辑部