

正方空气柱结构二维三角晶格光子晶体及其禁带特征

张瑞娟 尹海清 文景 曹文斌

北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083

摘要 基于平面波展开法比较研究了空气圆柱三角晶格光子晶体和正方介质柱三角晶格光子晶体的禁带特征, 提出了正方空气柱三角晶格光子晶体结构, 并分析了相对介电常数对其禁带宽度的影响. 结果表明: 空气圆柱三角晶格光子晶体要比由同种介质材料构成的正方介质柱三角晶格光子晶体的完全禁带要大得多; 对于正方空气柱三角晶格光子晶体, 当相对介电常数 $\epsilon_r > 12.0$ 时将出现双禁带, 且当 $\epsilon_r = 19.0$ 时两条禁带均达到最大值.

关键词 二维光子晶体; 三角晶格; 光子禁带; 平面波展开法

分类号 O 734

Two-dimensional photonic crystal with triangular lattice structure of air cubes and its characteristics of band gap

ZHANG Ruijuan, YIN Haiqing, WEN Jing, CAO Wenbin

School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

ABSTRACT Band gap characteristics of the photonic crystals with triangular lattice of air cylinders and triangular lattice of dielectric cubes were comparatively studied by means of plane wave method. 2D photonic crystal with triangular lattice of air cubes was put forward and the influence of dielectric constant on the band gap width was analyzed. The results show that the band gap width of photonic crystal with triangular lattice of air cylinders is much wider than that of photonic crystal with triangular lattice of dielectric cubes when the photonic crystals are made of the same material. For photonic crystal with triangular lattice of air cubes, theoretical calculations show that two complete photonic band gaps occur and the relative dielectric constant more than 12.0 for the appearance of two gaps. The two band gap width reaches its maximal value when the relative dielectric constant is 19.0.

KEY WORDS 2-dimensional photonic crystal; triangular lattice; photonic band gap; plane wave expansion method

1987年, Yablonovitch^[1]在讨论如何抑制自发辐射和 John^[2]在讨论光子局域时各自独立地提出了光子晶体的概念. 光子晶体是指具有光子禁带的由介电材料构成的周期结构材料. 根据周期结构排列的维数, 可以将光子晶体分为一维、二维和三维光子晶体. 其中三维光子晶体虽应用前景最为广泛, 但实现其在可见光和红外波段下的制备仍是十分困难的. 相较而言, 二维光子晶体不但存在着众多的应用^[3-9], 而且相对容易制备, 所以研究二维光子晶体更具实用价值.

目前研究最多的二维光子晶体是等边三角晶格结构和四方晶格结构. 其中等边三角晶格结构属于 C_{6v} 群, 其与四方晶格结构相比具有更大的完全禁带宽度^[10-12]. 文献报道的等边三角晶格光子晶体典型代表主要有两种: 一种是空气圆柱三角晶格^[13], 当相对介电常数为 11.4, 圆柱半径与晶格常数比值为 0.45 时, 该结构将产生完全禁带; 另一种是正方介质柱三角晶格光子晶体^[14], 当相对介电常数为 11.4, 正方形边长与晶格常数比为 0.547 时, 该结构完全禁带宽度将达到最大值. 本文基于平面波展开法比较研究这两种结构的禁带特征, 并提出一种新型三角格点光子晶体结构.

1 空气圆柱与正方介质柱三角晶格光子晶体禁带特征的比较

图 1 为空气圆柱三角晶格和正方介质柱三角晶

收稿日期: 2006-09-30 修回日期: 2006-11-12

基金项目: 国家重点基础研究发展计划 (No. 2004CB719802); 北京科技新星项目 (No. 2003B12); 教育部博士点基金资助项目 (No. 2005042560501)

作者简介: 张瑞娟 (1983-), 女, 硕士研究生; 曹文斌 (1970-), 男, 教授, 博士

格光子晶体的结构示意图. 图 1 中灰色部分为相对介电常数为 ϵ_r 的高介电材料, 白色部分为空气. 图

1(a)、(b)右下角为局部放大示意图, 圆柱半径 r 、正方形边长 L 和晶格常数 a 分别如图中所标示.

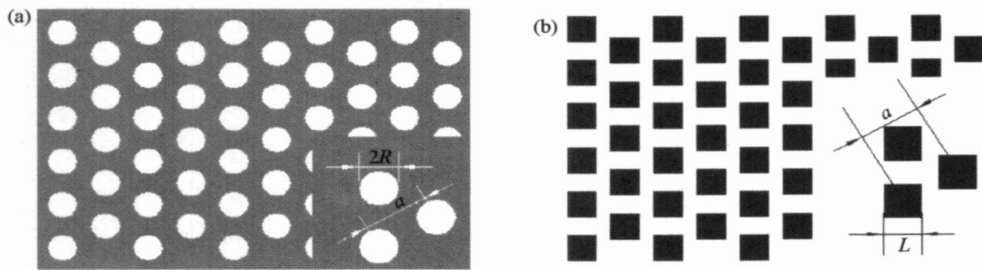


图 1 空气圆柱(a)和正方介质柱(b)三角晶格光子晶体结构

Fig. 1 Photonic crystals with triangular lattice of air cylinders (a) and dielectric cubes (b)

采用平面波展开法计算两种三角晶格光子晶体的禁带特征, 利用 MIT 的 mpb 软件进行计算. 计算过程中, 选用最常见的半导体材料 Ge ($\epsilon_r = 16.0$) 和空气 ($\epsilon_r = 1.0$) 作为光子晶体的介质材料. 固定材料介电常数, 分别通过改变结构中空气柱半径 R 和正方介质柱边长 L , 得到不同尺寸下光子晶体能带图.

柱三角晶格光子晶体, 当介电常数比为 16.0, 半径与晶格常数比为 0.48 时, 其完全禁带出现在 3~4 能带之间, 且其频率范围为 0.394 6~0.487 2; 对于正方介质柱三角晶格光子晶体, 介电常数比为 16.0, 边长与晶格常数比为 0.610 时, 其完全禁带出现在 5~6 能带之间, 且其频率范围为 0.373 3~0.387 1.

图 2 是这两种结构的能带结构图, 图中灰色长方形区域表示完全禁带. 由图 2 可知, 对于空气圆

根据计算结果, 得到两种结构光子晶体最大完全禁带特征及对应结构参数的关系, 如表 1 所示.

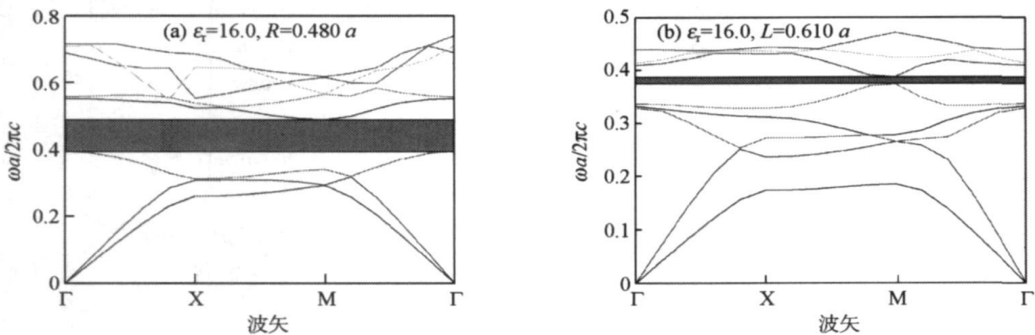


图 2 空气圆柱(a)和正方介质柱(b)三角晶格光子晶体能带图

Fig. 2 Band structures of photonic crystals with triangular lattice of air cylinders (a) and dielectric cubes (b)

表 1 两种结构光子晶体最大完全禁带特征及对应结构参数的关系 ($\epsilon_r = 16.0$)

Table 1 Maximal band gap of complete forbidden band and corresponding structural parameters of two structures

类型	$2R/a$ 或 L/a	禁带位置	中心频率	禁带范围
圆形空气柱	0.976	3,4 能带间	0.4707	0.4118~0.5292
正方介质柱	0.544	5,6 能带间	0.4523	0.4444~0.4601

由表 1 知: 空气圆柱三角晶格具有较宽的完全禁带, 其禁带宽度为 0.117 4; 而正方介质柱三角晶格光子晶体的完全禁带较窄, 其禁带宽度为 0.015 7. 所以, 对于三角晶格光子晶体, 为了获得较宽的完全禁带, 设计中应采用空气圆柱.

体——正方空气柱三角晶格光子晶体, 其结构示意图如图 3 所示. 与前文类似, 正方形边长、晶格常数分别用 L 和 a 表示.

2 正方空气柱三角晶格光子晶体

为研究不同相对介电常数对该结构完全禁带的影响, 分别计算了 $\epsilon_r = 11.4$ (GaAs)、 $\epsilon_r = 11.7$ (Si)、 $\epsilon_r = 16.0$ (Ge) 等三种常见半导体材料正方空气柱三角晶格光子晶体的禁带特征, 如图 4 所示. 结果表明: 当介质材料为 GaAs 和 Si 时, 在第 3 与第 4 能带

结合上述两种结构, 提出了一种新结构光子晶

间将出现完全禁带;当介质材料为 Ge 时,该结构将

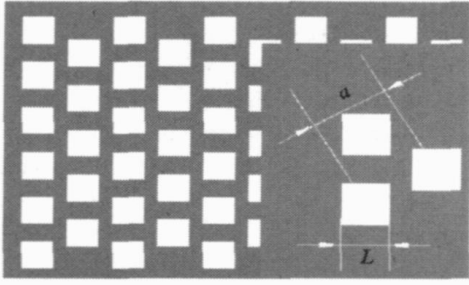


图 3 正方空气柱三角晶格光子晶体结构

Fig.3 2D photonic crystal with triangular lattice of air cubes

出现双禁带,其禁带位置分别出现在第 3 与第 4 能带之间以及第 4 与第 5 能带之间,如图 4 所示.而对于前文所述的两种结构,提高材料的相对介电常数,仍只能产生一个禁带.

本文提出的光子晶体结构相对简单,易于使用目前半导体成型技术制备,具有一定的实用价值.为此优化了上述三种常见半导体材料正方空气柱三角晶格光子晶体的完全禁带,以便为其应用提供一定的理论基础,其结果如表 2 所示.由结果可知,两种材料的介电常数比值越大,完全禁带宽度也越大.

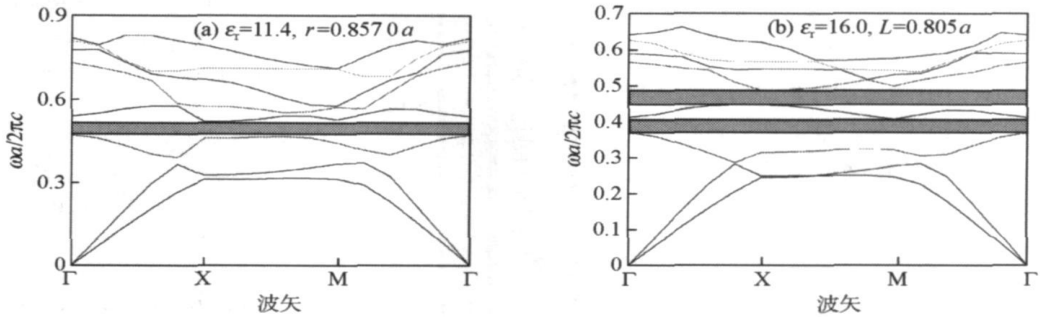


图 4 正方空气柱三角晶格光子晶体能带. (a) GaAs; (b) Ge

Fig.4 Band structures of photonic crystal with triangular lattice of air cubes: (a) GaAs; (b) Ge

表 2 正方空气柱三角晶格光子晶体最大完全禁带及其对应的结构参数

Table 2 Maximal band gap of complete forbidden band and corresponding structural parameters of photonic crystal with triangular lattice of air cubes

材料	相对介电常数, ϵ_r	L/a	禁带位置	中心频率	禁带范围
GaAs	11.4	0.857	3, 4 能带间	0.4966	0.4734~0.5198
Si	11.7	0.854	3, 4 能带间	0.4923	0.4679~0.5174
Ge	16.0	0.822	3, 4 能带间	0.3896	0.3714~0.4078
		0.805	4, 5 能带间	0.4572	0.4317~0.4827

与表 1 比较,当相对介电常数为 16.0 时,正方空气柱三角晶格光子晶体两个完全禁带之和远大于正方介质柱,但其仍小于圆形空气柱.但利于正方空气柱三角晶格光子晶体两禁带之间存在一定间隙这一特征,可考虑在今后的波导设计中采用此种结构.

本文还研究了相对介电常数对固定结构尺寸正方空气柱三角晶格光子晶体禁带特征的影响.首先设定该正方形边长 $L=0.805a$. 计算了相对介电常数在 7~23 之间变化时的完全禁带宽度,所得结果如图 5 所示.

图 5 中,横坐标表示相对介电常数,纵坐标表示禁带宽度.由图知:若固定参数 $L=0.805a$,当 $\epsilon_r=8.3$ 时,出现第一个完全禁带(第 3 与第 4 能带之间),在 $\epsilon_r=16$ 之前,该禁带宽度随相对介电常数的

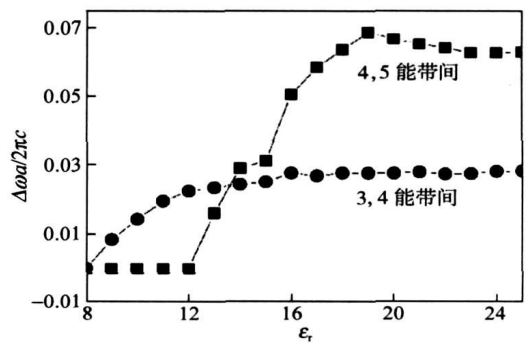


图 5 两禁带宽度随相对介电常数变化的关系

Fig.5 Dependence of two-band gap width as a function of relative dielectric constant

增加而增加,并于达到最大值后趋于平稳;当 $\epsilon_r=12.0$ 时,出现第二个完全禁带(第 4 与第 5 能带之间),该禁带宽度先随相对介电常数的增加而增加,

于 $\epsilon_r = 19.0$ 时达到最大值,其后随相对介电常数的增加而递减.由此可知:在所计算范围内,当 ϵ_r 取 19.0 时,两条禁带均达到最大值;而 ϵ_r 大于 12.0 之后,才会出现双禁带.这表明,对于尺寸一定的正方空气柱三角晶格光子晶体,还需选择合适的材料,才能使得完全禁带宽度达到最大值.

3 结论

研究了三种二维三角格点光子晶体禁带特征,结果表明空气圆柱三角晶格光子晶体要比由同种介材料构成的正方介质柱三角晶格光子晶体的完全禁带要大得多.根据这两种光子晶体结构,提出了正方空气柱三角晶格光子晶体.对于该结构的光子晶体,当相对介电常数 ϵ_r 大于 12.0 时,将出现双禁带;且在计算的范围内,当 ϵ_r 等于 19.0 时,两条禁带均达到最大值.这些结果对三角晶格光子晶体的应用具有一定的参考价值.

参 考 文 献

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(20): 2059
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(23): 2486
- [3] Netti M C, Harris A, Brumber J J. Optical birefringence in photonic crystal waveguides. *Phys Rev Lett*, 2001, 86(8): 1526
- [4] Happ T D, Kamp M, Klopff F. Bent laser cavity based on 2D photonic crystal waveguide. *Electron Lett*, 2000, 36(4): 324
- [5] Masashi N, Staoshi O, Hidenao T. Fabrication of GaAs hole array as a 2D-photonic crystal and their to photonic bandgap waveguide. *Opt Quantum Electron*, 2002, 34(1): 183
- [6] Bonnefois J J, Guida G, Priou A. A new multiple scattering method application: Simulating and infinite 2D photonic crystal by analyzing, sorting and suppressing the border effects. *Opt Commun*, 2005, 251(2): 64
- [7] Porkropivny V V. Photonic 2D crystal built from nanotubes, nanochannels, and nanowires; Review of progress in synthesis, properties, and promising application // Sizov F F, Gumenjuk-Sichevska J V, Kostyukevych Sergey A. *Proceeding of the SPIE—The International Society of Optical Engineering*. Washington: SPIE, 2003, 5065: 196.
- [8] Jaskorzynska B. Properties and applications of 1D and 2D photonic crystals // *Proceeding of 2004 6th International Conference of Transparent Optical Networks*. New York, 2004: 259
- [9] Celanovic I, Jovanovic N. 1D and 2D photonic crystals for thermophotovoltaic applications // de La Rue R M, Viktorovitch P, Sotomayor Torres C M, et al. *Proceeding of the SPIE—The International Society of Optical Engineering*. Washington: SPIE, 2004, 5450: 416
- [10] Cheryl M. Anderson, Konstantins P. Large two-dimensional photonic band gaps. *Phys Rev Lett*, 1996, 77(14): 2949
- [11] Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z. Large absolute band gaps in 2D anisotropic photonic crystals. *Phys Rev Lett*, 1998, 81(12): 257
- [12] Zhuang F, He S L, He J P. Large complete band gap of a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic elliptic cylinders. *Acta Phys Sin*, 2002, 51(2): 355
(庄飞, 何赛灵, 何江平. 大带隙的二维各向异性椭圆介质光子晶体. *物理学报*, 2002, 51(2): 355)
- [13] Joannopoulos J D, Meade R D, Winn J N. *Molding the Flow of Light*. New York: Princeton University Press, 1995.
- [14] Feng S S, Shen L F, He S L. A two-dimensional photonic crystal formed by a triangular lattice of square dielectric rods with a large absolute band gap. *Acta Phys Sin*, 2004, 53(4): 1540
(冯尚申, 沈林放, 何赛灵. 大带隙二维正方介质柱三角晶格光子晶体. *物理学报*, 2004, 53(4): 1540)