

正入射时二维空气孔结构正方形和三角形光子晶体的带隙结构

周利斌^{1,2}, 忽满利², 陈 幸²

1. 陕西科技大学理学院, 西安 710021

2. 西北大学物理学系, 西安 710069

摘要 利用平面波展开法推导出光在光子晶体中传播时的本征方程及其矩阵表达形式, 数值求解了圆形空气孔结构的正方形光子晶体和三角形结构光子晶体的色散曲线, 给出了不同空气孔结构下的色散曲线。计算分析发现, 在 $\langle 11 \rangle$ 方向上, 二维正方形结构的光子晶体 E 波的第一带隙与 H 波的第一带隙完全分开。在 $\langle 10 \rangle$ 方向上, E 波的第一带隙比 H 波略窄, 两者的变化趋势也不尽相同。对 E 波来说, 第一带隙随着空气孔径的增大而增宽; 但对 H 波来说, 第一带隙先增宽再变窄。与正方形结构光子晶体不同的是, 二维三角形结构光子晶体在 $\langle 11 \rangle$ 方向的第一带隙边缘位置并不在 $M(1, 1)$ 点, 而是出现在 $(0.5, 0.5)$ 点, 其中心频率比 $\langle 10 \rangle$ 方向的小, 但其带隙宽度较正方形结构的大。在 $\langle 10 \rangle$ 方向上, E 波的第一带隙比 H 波的略宽, 且两者的变化趋势完全相反。对 E 波来说, 第一带隙先增宽再变窄; 但对 H 波来说, 第一带隙随着空气孔径的增大而增宽。

关键词 光子晶体; 带结构; 平面波展开法; 空气孔型结构

中图分类号 O431

文献标识码 A

文章编号 1000-7857(2010)04-0055-04

Band Structure of 2D Air-hole-type Square and Triangular Photonic Crystal Under Vertical Incidence

ZHOU Libin^{1,2}, HU Manli², CHEN Xing²

1. College of Science, Shaanxi University of Science & Technology, Xi'an 710021, China

2. Department of Physics, Northwest University, Xi'an 710069, China

Abstract The eigenmatrix for the propagation of light in a photonic crystal is obtained by the plane-wave expansion method. Dispersion curves of photonic crystals of two dimensional square and triangular lattices composed of circular air cylinders are calculated numerically under vertical incidence, together with the dispersion curves of two dimensional photonic crystals with different radii of holes. It is shown that the first band gap of E wave of the two dimensional square lattice divides in direction $\langle 11 \rangle$, and so does that of H wave; in direction $\langle 10 \rangle$, the first band gap of E wave is a little smaller than that of H wave and becomes wider with the increase of the radius of the hole; on the other hand, that of H wave becomes wider first then decreases. The edge of the first band gap in direction $\langle 11 \rangle$ of two dimensional triangular lattice, different from that of the square lattice, is at point $(0.5, 0.5)$ instead of at point $(1, 1)$; the center frequency is smaller than that in direction $\langle 10 \rangle$ and the band gap is larger than that of the square lattice. In direction $\langle 10 \rangle$, the first band gap of E wave is a little wider than that of H wave, and their variation trends are completely different: the first band gap of E wave becomes wider with the increase of the radius of the hole at the first and then decreases, but that of H wave is getting wider all the time.

Keywords photonic crystal; band structure; plane-wave expansion method; air-hole-type

0 引言

光子晶体是一种人工晶体^[1], 由不同介电系数的材料按

一定结构周期性排列而成。只要满足某些特定条件(如晶格类型、介电常数比、散射元的形状、填充比等), 就会具有类似

收稿日期: 2009-11-20

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(60337030); 西北大学研究生创新基金项目(07YJC01); 陕西科技大学校级自选项目(ZX08-30)

作者简介: 周利斌, 助教, 研究方向为信息光学和光电子学等, 电子信箱: zhouzhulibin@sohu.com

半导体中电子禁带的“光子禁带”结构。利用这种特性,人们期望制作出“光子器件”代替电子器件,实现器件的集成和大规模集成化,最终实现“光计算机”。正因为如此,自1987年Yablonovitch和John提出光子晶体概念^[2]以来,人们对光子晶体进行了大量研究^[3-7]。

若要利用光子晶体的带隙特性设计和制作具有一定功能的光子晶体器件,需要在光子晶体中有目的地引入缺陷。这不仅要求对有缺陷结构的光子晶体的特性进行研究,还要对正入射和斜入射情况下光子晶体的带隙结构和色散特性进行研究。目前,关于光子晶体特性理论的研究已有大量报道,但对斜入射情况下二维空气孔结构正方形和三角形光子晶体的带隙结构和色散特性研究报道较少,而这对于设计和制作光子晶体功能器件及其光耦合具有非常重要的指导意义和应用价值。

本文建立了理论模型,利用平面波展开法推导出了本征方程及其矩阵型式;研究了二维正方形和三角形光子晶体的色散关系以及介质参数对色散关系的影响,推导出的光子晶体中光传播的本征方程具有通用性,且其矩阵形式更适合编程计算,可以通过求解本征方程研究色散特性。

1 本征方程及其矩阵形式

1.1 平面波展开法的本征方程矩阵形式

由布洛赫定理^[8]可知,周期性介质中传播的波 $E(\mathbf{r})$ 和 $H(\mathbf{r})$ 也应具有周期性,且可以用第一布里渊区的波矢 $\mathbf{k}$ 和带指标 n 展开为如下形式^[9]:

$$E(\mathbf{r}) = E_{kn}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} E_{kn}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (1)$$

$$H(\mathbf{r}) = H_{kn}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} H_{kn}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

相对介电常数的倒数,亦可作傅里叶展开:

$$\varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \kappa(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

由式(1)~式(3)以及麦克斯韦方程组,经过整理化简后可以得到如下形式的两个本征方程组:

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}') (\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times \{ (\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times E_{kn}(\mathbf{G}') \} = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} E_{kn}(\mathbf{G}) \quad (4)$$

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}') (\mathbf{k}+\mathbf{G}) \times \{ (\mathbf{k}+\mathbf{G}') \times H_{kn}(\mathbf{G}') \} = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} H_{kn}(\mathbf{G}) \quad (5)$$

其中, κ 为 $\varepsilon_r^{-1}(\mathbf{r})$ 傅里叶级数的展开系数, $\mathbf{k}$ 为波矢, $\mathbf{G}$ 和 $\mathbf{G}'$ 为光子晶体的倒格矢, ω 为对应光波的圆频率。对应地,满足式(4)的解称为E波,满足式(5)的解称为H波。

1.2 本征方程的矩阵表达形式

式(4)和式(5)是矢量积形式,不适于求解方程的本征值。为了求解方便,需要得到其矩阵形式。设本征方程可化为以下矩阵形式:

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \mathbf{M} E_{kn}(\mathbf{G}') = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} E_{kn}(\mathbf{G}) \quad (6)$$

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \mathbf{P} H_{kn}(\mathbf{G}') = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} H_{kn}(\mathbf{G}) \quad (7)$$

将式(4)和式(5)的各矢量按分量展开并做矢量积运算后,分别与式(6)和式(7)对比,可以得到矩阵 $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{P}$ 的各个单元表达式。通过对比各单元表达式的形式,还可进一步将 $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{P}$ 简化为更规则的矩阵表达式:

$$\mathbf{M} = (\mathbf{k}+\mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k}+\mathbf{G}') \mathbf{I} - (\mathbf{k}+\mathbf{G}') (\mathbf{k}+\mathbf{G}')^T \quad (8)$$

$$\mathbf{P} = (\mathbf{k}+\mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k}+\mathbf{G}) \mathbf{I} - (\mathbf{k}+\mathbf{G}') (\mathbf{k}+\mathbf{G})^T \quad (9)$$

再以 $\mathbf{G}$ 为行指标, $\mathbf{G}'$ 为列指标,对应的 $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{P}$ 为子矩阵,这样就得到了适合计算的本征方程组矩阵表达形式。此表达式适用于所有类型的光子晶体色散关系的计算。

1.3 二维和一维光子晶体本征方程矩阵表达形式

对于二维光子晶体, $\mathbf{G}$ 只有二维分量,可取 $G_z=0$ 。若光沿横截面方向传播,则 $k_z=0$ 。这样, $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{P}$ 矩阵为如下形式:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & M_z \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & P_z \end{bmatrix}$$

x, y 分量与 z 分量相互独立开来,而且分离后 $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{P}$ 的 x, y 分量组成的矩阵 $\mathbf{M}_{2 \times 2}$ 和 $\mathbf{P}_{2 \times 2}$ 的行列式为0。由线性代数知识可知,对应的 E_x, E_y, H_x, H_y 只有0解,这样就只需解 E_z 和 H_z 分量,从而本征方程可以简化为

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}') [(k+G')_x^2 + (k+G')_y^2] E_{zkn}(\mathbf{G}') = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} E_{zkn}(\mathbf{G}) \quad (10)$$

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G}-\mathbf{G}') [(k+G')_x (k+G)_x + (k+G')_y (k+G)_y] \cdot H_{zkn}(\mathbf{G}') = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} H_{zkn}(\mathbf{G}) \quad (11)$$

对于一维光子晶体, $\mathbf{G}$ 只有一维分量,可取 $G_x \neq 0$ 和 $k_z=0$,即得到与二维光子晶体沿横截面传播时类似的形式。因此, E_z 波对应的是TE偏振光, H_z 波对应的是TH偏振光^[10]。

2 光子晶体色散曲线计算

得到电磁波在光子晶体中传播时的本征方程和相对介电常数的各展开系数,就可以计算光子晶体的色散曲线。下面将计算一种一维光子晶体在不同波矢方向时的色散曲线,以及正方形空气孔结构和三角形空气孔结构二维光子晶体正入射时,部分特殊方向上的色散曲线。

2.1 介质参数的展开系数计算

对于常见的圆孔型二维晶体,若取孔的半径为 r_a ,孔的相对介电常数为 ε_a ,基底的相对介电常数为 ε_b ,展开系数具有以下形式^[11]:

$$\kappa(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{f}{\varepsilon_a} + \frac{1-f}{\varepsilon_b} & (\mathbf{G}=0) \\ 2f \left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) \frac{J_1(Gr_a)}{Gr_a} & (\mathbf{G} \neq 0) \end{cases} \quad (12)$$

其中,填充因子 $f = \pi r_a^2 / v_0^{(2)}$, $v_0^{(2)}$ 为二维光子晶体的原胞体(面)积, J_1 为一阶贝塞尔函数。

2.2 二维正方晶体的色散曲线

若取基底的折射率为 $n=3.24$ (InP/Ga·InAsP),空气孔的

折射率为 1, 晶格周期长度为 100, 空气孔的半径为 35, 由式 (10)~(12), 取 441 个展开项, 计算可得正入射 (波矢垂直于轴

向) 时的色散曲线 (图 1)。其中, $\omega=2\pi c/a$, c 为真空中的光速, a 为晶格周期, 单位均取国际单位制。

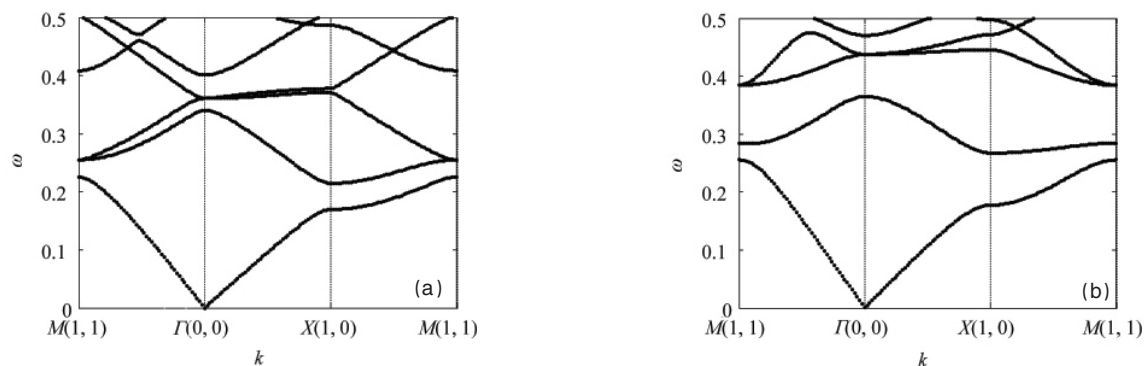


图 1 正方形结构 E 波 (a) 和 H 波 (b) 色散曲线

Fig. 1 Dispersion curve of square PC of E wave (a) and H wave (b)

当空气孔的半径变化时, 会对光子晶体的色散曲线产生影响, 图 2 给出了 $\langle 10 \rangle$ 方向 E 波和 H 波带隙边缘随空气孔半径的变化关系。

在二维正方形光子晶体中, H 波的第一带隙比 E 波略宽。对 E 波来说, 第一带隙随着空气孔径的增大而增宽; 但对 H 波来说, 第一带隙先增宽再变窄。

2.3 二维三角晶体的色散曲线

对于三角形结构光子晶体, 若取正格子基矢的方向角分别为 -60° 和 60° , 倒格子基矢的方向角则分别为 -30° 和 30° 。

同样, 可以计算出正入射时 E 波和 H 波的色散曲线 (图 3)。

同样, 当空气孔的半径变化时会对光子晶体的色散曲线产生影响, 图 4 给出了 $\langle 10 \rangle$ 方向 E 波和 H 波带隙边缘随空气孔半径的变化关系。

在二维三角形光子晶体中, 第一带隙也随着空气孔径的增大而增宽, 而且带隙明显宽于正方形光子晶体。与正方形不同的是, E 波的第一禁带比 H 波的稍微宽一点。对 H 波来说, 第一禁带随着空气孔径的增大而增宽, 但 E 波的先增宽再变窄。第一带隙的下边缘不是在 M 点而是在 M 点与 Γ 点的中间。

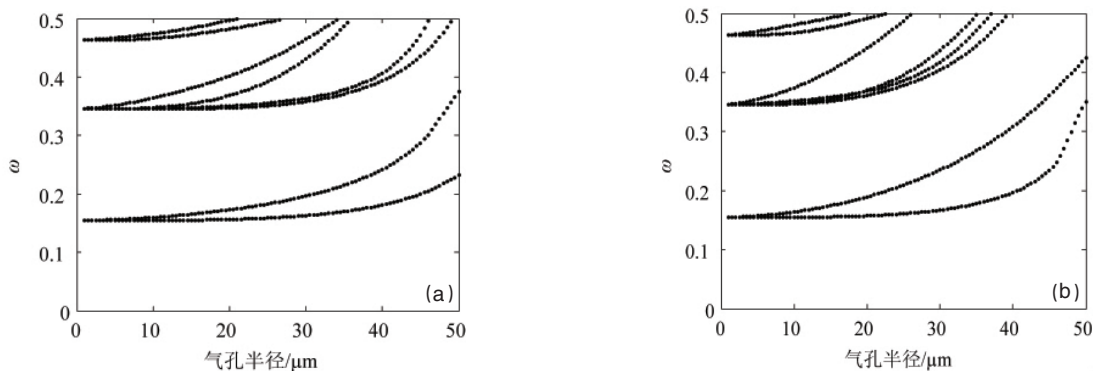


图 2 孔半径对 $\langle 10 \rangle$ 方向 E 波 (a) 和 H 波 (b) 带隙的影响

Fig. 2 Radius affect on band gap E wave (a) and H wave (b) in direction $\langle 10 \rangle$

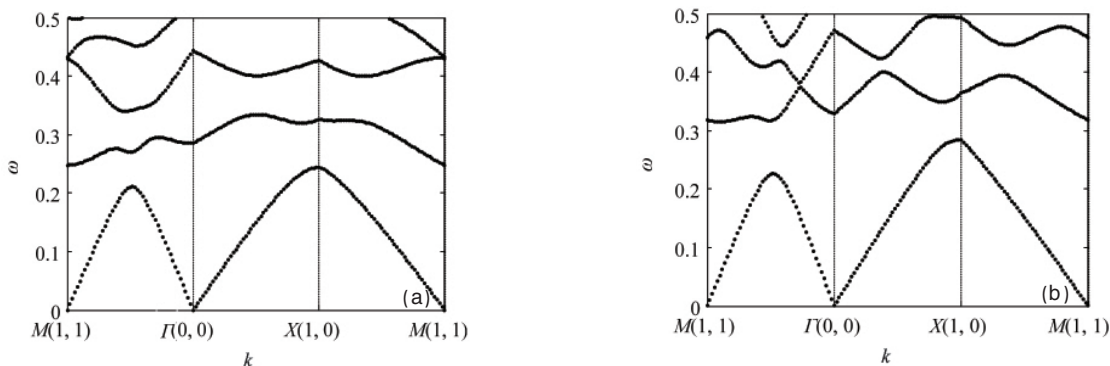


图 3 三角形结构 E 波 (a) 和 H 波 (b) 色散曲线

Fig. 3 Dispersion curve of triangle PC of E wave (a) and H wave (b)

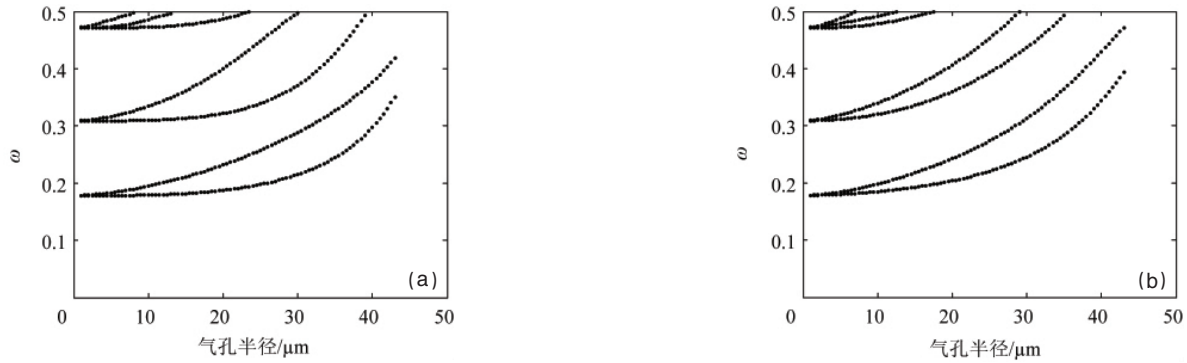


图 4 孔半径对<10>方向 E 波 (a) 和 H 波 (b) 带隙的影响

Fig. 4 Radius affect on band gap of E wave (a) and H wave (b) in direction <10>

3 结论

由于本文推导过程中均使用三维矢量, 推导出的光子晶体本征方程矩阵形式对各种类型的光子晶体均适用, 并且具有计算简单、计算速度快的特点, 便于提高计算程序的适用性。

对于二维正方形结构光子晶体, 正入射时 E 波和 H 波在<10>方向和<11>方向都会出现带隙, 且第一带隙的宽度都随着空气孔半径的增大而增大, 甚至可能出现二维范围全方位的带隙。但 E 波的带隙和 H 波的带隙在中心位置和宽度上却有着较大的差别。这些都将为光子晶体的应用提供更好条件。

对于二维三角形结构光子晶体, 与正方形结构一样, 正入射时 E 波和 H 波在<10>方向和<11>方向也都会出现带隙, 且第一带隙的宽度都随着空气孔半径的增大而增大, 甚至可能出现二维范围全方位的带隙。但是也出现了与正方形结构明显不同的结果, 在<11>方向第一带隙下边缘出现在 M 点和 Γ 点的中间位置, 并不在 M 点处, 且带隙宽度也比对应的正方形结构的宽许多。

参考文献 (References)

- [1] 周梅, 陈效双, 徐靖, 等. 中红外波段硅基二维光子晶体的光子带隙[J]. 物理学报, 2005, 54(1): 411-415.
Zhou Mei, Chen Xiaoshuang, Xu Jing, et al. *Acta Physica Sinica*, 2005, 54(1): 411-415.
- [2] 董建文, 陈溢杭, 汪河洲. 含奇异材料的掺杂一维光子晶体色散关系和空间局域度理[J]. 物理学报, 2007, 56(1): 268-273.
Dong Jianwen, Chen Yihang, Wang Hezhou. *Acta Physica Sinica*, 2007, 56(1): 268-273.
- [3] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58(20): 2059-2062.
- [4] 耶红刚, 陈光德. 组合一维光子晶体全能反射器 [J]. 光子学报, 2005, 34(8): 1245-1249.
Ye Honggang, Chen Guangde. *Acta Photonica Sinica*, 2005, 34(8): 1245-1249.
- [5] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric super-lattices[J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58(23): 2486-2489.

- [6] 蒋美萍, 江兴方, 沈小明, 等. 一维光子晶体的偏振特性研究 [J]. 量子电子学报, 2005, 22(4): 612-616.
Jiang Meiping, Jiang Xingfang, Shen Xiaoming, et al. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2005, 22(4): 612-616.
- [7] 黄晓琴, 崔一平. 一维光子晶体非线性色特性的分析 [J]. 光子学报, 2005, 34(3): 473-476.
Huang Xiaoqin, Cui Yiping. *Acta Photonica Sinica*, 2005, 34 (3): 473-476.
- [8] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1988: 153-157.
Huang Kun, Han Ruqi. *Solid physics* [M]. Beijing: Higher Education Press, 1988: 153-157.
- [9] 李志远. 平面波转移矩阵法求光子晶体的原理[J]. 先进材料科学与技术, 2005, 7(6): 837-841.
Li Zhiyuan. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2005, 7(6): 837-841.
- [10] 徐兵社, 党随户, 韩裴德, 等. 用共轭聚合物研究二维光子晶体带隙结构[J]. 光学通信, 2006, 267(2): 362-366.
Xu Bingshe, Dang Suihu, Han Peide, et al. *Optics Communications*, 2006, 267(2): 362-366.
- [11] Broeng J, Mogilevstev D, Barkou S E, et al. Photonic crystal fibers: A new class of optical waveguides [J]. *Optical Fiber Technology*, 1999, 5, 305-330.

(责任编辑 朱宇)

《科技导报》“科技工作者建议”征稿

“科技工作者建议”栏目专门刊登科技工作者近期提出的、与科学技术相关的工作意见和建议。科技建议应着眼于科技研究、发展、应用、政策等领域的实际问题, 要求有明确、具体的内容, 方法上尽量具有可操作性。文字应简洁明了, 非特别重大的建议以 500 字左右为宜, 特别重要的建议不超过 2200 字。请注明建议人姓名、单位。欢迎国内外科技工作者及各级科协、学会投稿。栏目责任编辑: 王芷; 投稿邮箱: wangzhi@cast.org.cn。