

用平面波展开法计算二维方形光子晶体的带隙结构*

寸焕尧 谭仁兵 王荣丽 柏 晗 张 茜 胡家光 张 晋†

(云南大学物理系, 昆明 650091)

摘要: 用平面波展开法计算二维正方晶格光子晶体的带隙结构, 对二维光子晶体的电磁波理论及周期介质中的 Bloch 波解进行了详细的推导, 得出 TE 模和 TM 模下无缺陷时光子晶体的色散曲线, 并设计了低频区域内具有较大带隙宽度的两种二维光子晶体的空间周期结构. 经过大量的计算, 发现硅中的空气柱型光子晶体在红外波段 TE 模和 TM 模存在重叠的绝对光子带隙, 并分别研究了空气中的硅介质柱和硅中的空气柱的 TM 模带隙宽度随空气柱半径和填充比变化的规律.

关键词: 二维光子晶体; 正方格子; 带隙结构; 平面波展开法

PACC: 4270Q; 7820P

中图分类号: TN302

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)S0-0064-04

1 引言

光子晶体的概念分别由 Yablonovitch^[1] 和 John^[2] 于 1987 年提出, 它是折射率在空间周期性变化的介电材料. 光子在光子晶体中传播时, 由于布拉格散射会受到调制而形成能带结构, 称为光子能带或光子带隙, 它使得某一频率范围内的电磁波不能在有完全带隙的光子晶体中的任何方向进行传播. 这一重要特性使光子晶体在光通信^[3]、光波导器件^[4]、零阈值激光器和光滤波器^[5] 等方面具有广阔的应用前景. 近年来, 光子晶体作为新型光子器件和未来集成光路的物理基础倍受各国科学家的关注.

光子晶体按能隙空间分布的周期性变化方向的数目分为一维、二维和三维光子晶体. 由于二维光子晶体相对于三维光子晶体较容易制备^[6], 其用途又比一维光子晶体广泛得多, 而且在未来光子技术中有极其重要的应用, 因此, 研究二维光子晶体有重要的实际意义. 光子晶体的应用是基于它存在禁带这一特性, 所以在理论上研究光子禁带结构和性能, 可为其制备工艺参数的选择提供依据和参考数据, 并可按人的意愿设计有选择性能隙的光子晶体.

目前, 用于计算光子晶体带隙结构理论计算的方法有平面波展开法(PWM)^[7,8]、有限时域差分法(FDTD)^[9]、转移矩阵法(TMM)^[10]、格林函数法^[11]和多重散射法^[12,13]等. 本文采用平面波展开法对红外和可见光波段范围的二维正方晶格光子晶体带隙结构进行计算, 得出了介质柱型和空气柱型两种结

构分别在 TE 模和 TM 模的色散曲线, 为制备光波长在红外和可见光波段具有光子带隙的二维光子晶体提供了新的设计方案.

2 二维光子晶体的电磁波理论

二维正方晶格的光子晶体, 特别是空气中的介质柱和介质中的空气柱, 是所有光子晶体中最容易制作的^[14]. 本文以介质柱型光子晶体为例进行能带计算, 将介电常数 ϵ_a 和 ϵ_b 互换得到空气柱型光子晶体的能带, 其模型如图 1 所示.

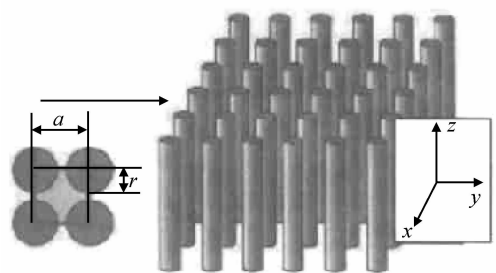


图 1 二维正方格子光子晶体示意图

Fig.1 Model of 2D square lattice photonic crystal

设 z 轴方向为介质柱的轴方向, 二维周期结构在 xy 平面上. 晶胞的晶格常数为 a , 半径为 r , 硅介质柱和空气柱的介电常数分别为 $\epsilon_a = 11.9$ 和 $\epsilon_b = 1$.

假设光子晶体是无源、无损、非磁性、无缺陷、线

* 国家自然科学基金(批准号:60261004,60361001,10664006)和云南省自然科学基金(批准号:2002E0008M)资助项目

† 通信作者. Email: zhangjin@vip. km169. net

2005-12-16 收到

性的不变系统,构成光子晶体的介质是低损耗和各向同性的,在介质中没有自由电荷和自由电流,并忽略介电常数对频率的依赖关系.电磁波沿垂直于棒轴的平面即 xy 平面正入射,将入射电磁波分解为 TE 模(H 偏振)和 TM 模(E 偏振).

若电场和磁场为简谐模式,其他任何模式可通过傅里叶变换为简谐模式的叠加.电磁波在宏观电介质中传播服从 Maxwell 方程组.经计算可得电磁波的传播满足下列方程

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

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

(1)和(2)式分别为描述磁场强度 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 和电场强度 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 的光子运动本征方程,本征值为 ω^2/c^2 .通过求解方程,可求出光子的能带结构,即 $\omega_{\mathbf{k}n}-k$ 的关系.由于光子晶体的介电常数在空间周期性变化,该方程可以通过傅里叶级数展开进行求解.首先考虑电磁波的磁场分量平行于圆柱轴的情况,即 TE 模.此时 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 可以写成

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = H_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = [0, 0, H_z(\mathbf{r})]e^{-i\omega t} \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = [E_x(\mathbf{r}), E_y(\mathbf{r}), 0]e^{-i\omega t} \quad (4)$$

其中 \mathbf{r} 为 x 和 y 方向的矢量, $\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y$. 利用(3)和(4)式,结合 Maxwell 方程计算,有

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_z}{\partial y} &= -i\omega\epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0 E_x \\ \frac{\partial H_z}{\partial x} &= i\omega\epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0 E_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= i\omega\mu_0\mu H_z \end{aligned} \quad (5)$$

由以上方程消去 E_x 和 E_y , 可得关于 H_z 的表达式

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \times \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \times \frac{\partial H_z}{\partial y} \right] = -\frac{\omega^2}{c^2} H_z \quad (6)$$

把周期势 $\epsilon^{-1}(\mathbf{r})$ 展开成关于 \mathbf{G} 的傅里叶级数

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} P(\mathbf{G})e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (7)$$

傅里叶系数

$$P(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_c} \int_{A_c} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \times \frac{1}{\epsilon(x, y)} dx dy \quad (8)$$

式中 $\mathbf{G} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2$ 是晶格的二维倒格矢; $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ 为倒格子基矢; h_1, h_2 为任意整数.由周期性结构可知, $H_z(\mathbf{r})$ 可按布洛赫波展开

$$H_z(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{k}, \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \quad (9)$$

其中 $\mathbf{k} = k_1\mathbf{e}_x + k_2\mathbf{e}_y$ 为被限制在第一 Brillouin 区的波矢量,如图 2 所示.

将(7)和(9)式代入(6)式,可得

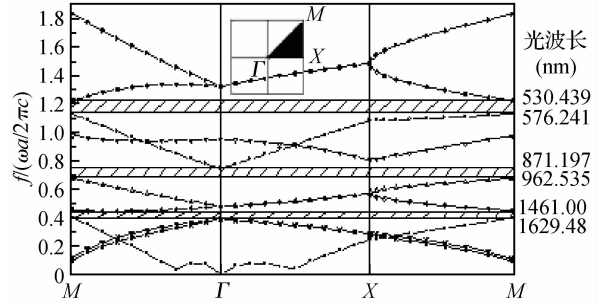


图 2 硅介质柱型方形光子晶体的光子带结构 $\epsilon_a = 11.9, \epsilon_b = 1, r = 255\text{nm}, a = 650\text{nm}, f = 0.484$, TM 模

Fig. 2 Band structure of silicon dielectric columns square lattice photonic crystal for the case of TM polarization $\epsilon_a = 11.9, \epsilon_b = 1, r = 255\text{nm}, a = 650\text{nm}, f = 0.484$

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') P(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \times A(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} A(\mathbf{k}, \mathbf{G}) \quad (10)$$

(10)式使得 H 偏振的电磁波在光子晶体中的传播问题变成了求解一个对称矩阵的本征值和本征函数问题^[15].

当电磁波的电场方向平行于圆柱轴,即考虑 TM 模时,同理可得方程:

$$\sum_{\mathbf{G}'} P(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}| \times |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \times B(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} B(\mathbf{k}, \mathbf{G}) \quad (11)$$

正方格子的傅里叶系数可表示为

$$P(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_a} f + \frac{1}{\epsilon_b} (1-f), & \mathbf{G} = 0 \\ \left[\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b} \right] \times f \times \frac{2J_1(r|\mathbf{G}|)}{r|\mathbf{G}|}, & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (12)$$

其中 $J_1(x)$ 为一阶贝塞尔函数,把(12)式代入(10)和(11)式,取 $J_1(x)$ 的前两项进行计算,可得当 $\mathbf{G} - \mathbf{G}' \neq 0$ 时,

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b} \right) f \times \left[1 - \frac{1}{2^3} r^2 |\mathbf{G} - \mathbf{G}'|^2 \right] \times A(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} A(\mathbf{k}, \mathbf{G}) \quad (13)$$

$$\sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{k} + \mathbf{G}| \times |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b} \right) f \times \left[1 - \frac{1}{2^3} r^2 |\mathbf{G} - \mathbf{G}'|^2 \right] \times B(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} B(\mathbf{k}, \mathbf{G}) \quad (14)$$

式中 f 为电介质圆柱或空气圆孔占整个晶胞的百

对比,即填充比 $f = S_1/A_c = \pi r^2/a^2$ (a 为晶格常数); \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.分别把(13),(14)式按 G' 展开,求解所得方程,即可得 ωk 的关系.

3 计算结果和讨论

本文选用硅和空气作为介质材料构筑空气中的硅介质柱和硅中的空气柱两种光子晶体计算模型,如图 1 所示.对于给定的波矢 k ,可获得无穷多个解,每一个解用一个模量常数 n 来表示,相应的本征频率为 ω_{kn} .为简化计算,本文选取的模数为 9,计算点数为 10.

3.1 介质柱型光子晶体

首先,考虑硅介质柱型光子晶体.当选取晶格常数 $a = 650\text{nm}$, $r = 255\text{nm}$, $f = 0.484$ 时,光子晶体有三个带隙,中心频率分别为 0.4219, 0.7107 和 1.1767 ($2\pi c/a$),带隙对应的中心波长分别为 1545.24, 916.866 和 553.34nm,前两个带隙处于红外波段,第三个带隙处于可见光波段,如图 2 所示.其中纵坐标采用标度化的无量纲频率,横坐标为标度化的 Bloch 波矢.图中阴影部分为带隙,带隙的宽度随着频率的增大而增大.带隙宽度与介质柱半径 r 和填充比 f 有很大关系.由于改变 r 比晶格常数 a 的变化对光子带隙位置的改变影响更大^[11],所以,本文在固定参数 $\epsilon_a = 11.9$, $\epsilon_b = 1$, $a = 650\text{nm}$ 不变的情况下,计算并分析了 r 在 115~355nm 范围变化时, TM 模带隙宽度随 r/a 和 f 变化的关系.对空气中不同半径 r 的硅介质柱型光子晶体带隙结构的研究表明:在固定参数 $\epsilon_a = 11.9$, $\epsilon_b = 1$, $a = 650\text{nm}$ 不变的情况下,当 $115\text{nm} \leq r \leq 194\text{nm}$, 即 $0.177 \leq r/a \leq 0.299$ 时,带隙宽度随 r/a 的增大而减小;当 $194\text{nm} < r < 210\text{nm}$ 时,不存在带隙;而当 $255\text{nm} \leq r \leq 355\text{nm}$, 即 $0.385 \leq r/a \leq 0.546$ 时,带隙宽度随 r/a 的减小而减小.

3.2 空气柱型光子晶体

对于空气柱型光子晶体, $\epsilon_a = 1$, $\epsilon_b = 11.9$, $a = 550\text{nm}$, 经过大量优化计算,得到 TE 和 TM 模重叠的绝对光子带隙,如图 3(a)和(b)所示.由这两个图可知,空气柱型光子晶体在 $0.7008 \sim 0.7012 (2\pi c/a)$ 频率范围存在一个绝对光子带隙,带隙宽度 $\Delta\lambda$ 为 0.447nm,带隙对应的光波长范围介于 784.370~784.817nm 之间,其中心波长位于 784.5935nm,属于近红外波段.

由于光子带隙与填充比 f 有密切联系,本文在

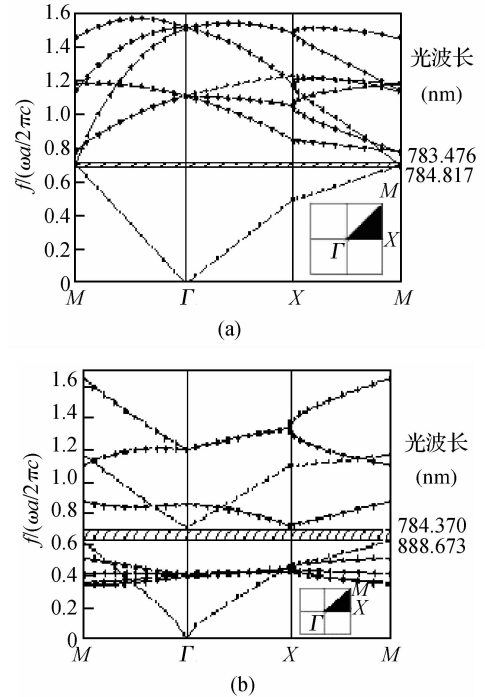


图 3 空气柱型方形光子晶体的光子带结构 (a) $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 11.9, r = 207\text{nm}, a = 550\text{nm}, f = 0.445$, TE 模; (b) $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 11.9, r = 207\text{nm}, a = 550\text{nm}, f = 0.445$, TM 模

Fig.3 Band structure of the air cylinder square lattice photonic crystal (a) Case of TE polarization $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 11.9, r = 207\text{nm}, a = 550\text{nm}, f = 0.445$; (b) Case of TM polarization $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 11.9, r = 207\text{nm}, a = 550\text{nm}, f = 0.445$

固定参数 $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 11.9, a = 550\text{nm}$ 不变的情况下,分析了填充比 $0.399 \leq f \leq 0.935$ 时光子晶体带隙的改变情况,在 TM 模入射时,当 $115\text{nm} \leq r \leq 300\text{nm}$, 即 $0.48 \leq f \leq 0.935$ 时,二维空气柱型光子晶体的带隙宽度和禁带对应的中心频率都随填充比 f 增大而单调递增.

以上给出了我们计算得到的二维方形光子晶体的几个较大的带隙和一个绝对光子带隙.由于我们在带隙计算中所用的平面波有限,而且贝塞尔函数 $J_1(x)$ 只取了前两项,同时,考虑到制作光子晶体时,由于工艺条件等原因不可避免地会使实际几何参数偏离优化设计的参数.因此,理论计算的结果与实际制作的光子晶体带隙结构会存在一定的偏差.

4 结论

本文推导了周期介质中的 Bloch 波解,用平面波展开法计算了二维硅介质柱型和空气柱型光子晶体能带结构,结果表明:对于硅介质柱型的光子晶体,虽然 TM 模存在多条带隙,但在我们选取的多组参数进行能带计算研究中,未发现绝对光子带隙.

对于空气柱型正方晶胞结构的光子晶体存在 TE 模和 TM 模相互重叠的绝对光子带隙,带隙宽度 $\Delta\lambda$ 为 0.447nm,带隙对应的中心波长位于 784.5935nm,属于近红外波段.

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. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(23):2486
- [3] Yamamoto Y, Machida S, Richardson R H. Photon number squeezed states in semiconductor lasers. *Science*, 1992, 255:1219
- [4] Mekis A, Chen J C, Kurland I, et al. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides. *Phys Rev Lett*, 1996, 77(18):3787
- [5] John S, Wang J. Quantum optics of localized light in a photonic band gap. *Phys Rev B*, 1991, 43(16):12772
- [6] Zhou Mei, Chen Xiaoshuang, Xu Jing, et al. Fabrication and photonic band gap property of the two-dimensional square lattice based on silicon. *Acta Physica Sinica*, 2004, 53(10):3583(in Chinese)[周梅,陈效双,徐靖,等.硅基二维光子晶体的制备和光子带隙特性. *物理学报*, 2004, 53(10):3583]
- [7] Plihal M, Maradudin A A. Photonic band structure of two-dimensional systems: the triangular lattice. *Phys Rev B*, 1991, 44(16):8565
- [8] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys Rev Lett*, 1990, 65(25):3152
- [9] Huang Yongzhen, Chen Qin, Guo Weihua, et al. Application of Padé approximation in simulating photonic crystals. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2005, 26(7):1281
- [10] Pendry J B, Mackinnon A. Calculation of photon dispersion relations. *Phys Rev Lett*, 1992, 69(19):2772
- [11] Sakoda K, Shiroma H. Numerical method for localized defect modes in photonic lattices. *Phys Rev B*, 1997, 56(8):4830
- [12] Wang X, Zhang X G, Yu Q, et al. Multiple-scattering theory for electromagnetic waves. *Phys Rev B*, 1993, 47(8):4161
- [13] Leung K M, Qiu Y. Multiple-scattering calculation of the two-dimensional photonic band structure. *Phys Rev B*, 1993, 48(11):7767
- [14] Fang Yuntuan, Shen Tinggen, Tan Xilin. Absolute photonic band gaps of 2-D cubic compound lattice. *Laser Technology*, 2004, 28(4):344(in Chinese)[方云团,沈廷根,谭锡林.二维正方复式晶格的完全光子带隙. *激光技术*, 2004, 28(4):344]
- [15] Jin Chongjun, Qin Bai, Yang Sen, et al. Two dimensional photonic band structure: triangular non-bravais lattice. *Acta Optica Sinica*, 1997, 17(4):409(in Chinese)[金崇君,秦柏,杨森,等.三角形复式晶格的光子带结构研究. *光学学报*, 1997, 17(4):409]

Calculation of Band Gap Structures of 2D Square Lattice Photonic Crystals Using Plan Wave Expansion Method*

Cun Huanyao, Tan Renbing, Wang Rongli, Bai Han, Zhang Xi, Hu Jiaguang, and Zhang Jin[†]

(Department of Physics, Yunnan University, Kunming 650091, China)

Abstract: The band gap structures of two-dimensional (2D) square lattice photonic crystals are calculated using the plan wave expansion method. It gives a detail deduction for the electromagnetic wave theory of 2D photonic crystals and Bloch wave solutions in stratified periodic dielectric. Both TE and TM modes are considered in photonic crystals with no defects consisted of dielectric air cylinders and dielectric columns in air background. We get different dispersion curves, and designed two kinds of 2D photonic crystal periodical structures with band gaps in low-frequency ranges. It is found that the periodic dielectric constructed from air cylinders in Si matrix can generate an absolute photonic band gap in the infrared range for both TE and TM modes. The dependences of air cylinders or silicon rods radius and filling factors in the two kinds of photonic crystals are also studied in TM mode.

Key words: 2D photonic crystal; square lattice; band gap structure; plan wave expansion method

PACC: 4270Q; 7820P

Article ID: 0253-4177(2006)S0-0064-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60261004, 6036101, 10664006) and the Natural Science Foundation of Yunnan Province (No. 2002 E0008M)

[†] Corresponding author. Email: zhangjin@vip.km169.net

Received 16 December 2005