

文章编号: 0258-7025(2006)06-0770-05

波矢方向对二维光子晶体能带及应用的影响

陆晓东, 韩培德, 全宇军, 叶志成, 吴黎, 陈彦超, 赵春华

(中国科学院半导体研究所, 集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

摘要 利用平面波法分析了由介电常数为 13 和 1 的两种介质分别构成圆形柱和背景组成的三角晶格、蜂巢状晶格和正方晶格, 波矢偏离周期性平面对它们能带分布及应用的影响。波矢偏离周期性平面分量增加, 对色散曲线的影响表现在: 波矢在周期性平面内形成的带隙逐渐减小, 甚至消失; 低频端出现不存在模式区域, 并且该区域逐渐变宽; 出现新的简并能级, 原有的简并能级简并解除或消失; 能带趋于平坦化; 易于在低阶能带间形成绝对带隙等。波矢偏离周期性平面时, 对三种晶格形成带隙情况分析得到: 三角晶格和蜂巢状晶格形成的绝对带隙比正方晶格形成的绝对带隙宽, 能更有效地减小发生自发发射的概率; 三角晶格绝对带隙的宽度在泄漏模区域比蜂巢状晶格要宽, 所以三角晶格比蜂巢状晶格更适合用作反射镜等。

关键词 光电子学; 光子晶体; 光子带隙; 平面波法

中图分类号 O 737 **文献标识码** A

Influences of Wave Vector Direction on Energy Bands and Applications of Two-Dimensional Photonic Crystals

LU Xiao-dong, HAN Pei-de, QUAN Yu-jun, YE Zhi-cheng,
WU Li, CHEN Yan-chao, ZHAO Chun-hua

(State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors,
The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

Abstract The influences of the wave vectors off the periodic plane on the distribution of energy bands of triangular, honeycomb and square lattices are analyzed by plane wave method. The rods and background of these lattices are all composed of two mediums with dielectric constants equal to 13 and 1. With the increase of wave vectors off periodic plane, many changes will take place in the dispersion relation of these lattices: the band gaps of wave vectors in the periodic plane will decrease gradually and even disappear; a region, which does not exist modes, will appear in the low frequency range and it will be broaden with the increase of wave vectors off periodic plane; new degenerated energy levels appear and primarily degenerated levels will disappear; the energy bands tend to become flat; the absolute band gaps can easily form among the lowest energy bands. By the analyses of the band gaps of three lattices, some conclusions can be obtained: the width of absolute band gaps in triangular and honeycomb lattices are larger than those of square lattices, which make triangular and honeycomb lattices lower the rate of spontaneous radiation more effectively than square lattices; the width of band gaps of triangular lattices in the leaky region is larger than that of honeycomb lattices, which made triangular lattices be more appropriate to be used as reflect mirror than honeycomb lattices.

Key words optoelectronics; photonic crystal; photonic band gap; plane wave method

1 引 言

自从 Eli Yablonovitch^[1] 和 Sajeev John^[2] 提出

光子晶体的概念以来, 历经十多年的发展, 目前光子晶体已成为光电子学科中一个发展十分迅速的领域。光子晶体是由介电常数不同的材料周期性排列

收稿日期: 2005-09-22; 收到修改稿日期: 2005-12-21

基金项目: 国家自然科学基金(60477020)和国家自然科学基金重点基金(60537010)资助项目。

作者简介: 陆晓东(1977—), 男, 河北围场人, 中国科学院半导体研究所博士研究生, 主要从事光无源器件开发与集成研究。E-mail: lxd2211@sina.com.cn

构成的人工晶体。光子晶体重要特性之一是形成光子带隙结构(PBG),频率处于光子带隙结构中的电磁场将被禁止在光子晶体中传播。光子晶体的许多应用都是基于它的这种性质。虽然三维光子晶体的完全带隙对电磁场的限制作用最强,但是,按目前的实验技术,要在可见光或近红外波段制作可控的、三维光子晶体波导的精细结构,还是十分困难的^[3,4]。相对而言,二维光子晶体的制作要容易得多,而且利用二维光子晶体禁带的性质,同样存在着许多重要的应用领域^[5~8]。

在研究二维光子晶体能带时,一般只计算波矢在周期性平面内的情况。然而波矢对二维周期性平面偏离会使二维光子晶体的能带发生较大改变,这些变化无论是对利用二维光子晶体禁带性质还是导带性质都应该给予足够的重视。在波矢偏离周期性平面对二维光子晶体能带影响的一些研究中,主要关注的是三角晶格或蜂巢状晶格,考虑填充比、波矢偏离角度及介电常数等参数不同时其色散曲线、带隙及透射谱的影响^[9~12],但并未对能带如何随偏离周期性平面波矢分量的移动规律作深入分析。本文主要研究波矢偏离周期性平面时,三角晶格、蜂巢状晶格和正方晶格的色散曲线、带隙及态密度的变化,并且详细地分析了随着波矢偏离周期性平面分量的增加,色散曲线、带隙和能带间相对移动的规律。

2 计算公式

对磁场 \mathbf{H} 而言,应用平面波展开法,在频域中,磁场 \mathbf{H} 满足的方程为^[13]

$$\sum_{j=1}^2 \sum M_k^{ij}(\mathbf{G}, \mathbf{G}') h_{km}^{G,j} = \frac{\omega_{km}^2}{c^2} h_{km}^{G,i}, \quad (1)$$

其中, $M_k(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$ 表示为

$$M_k(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = |\mathbf{k} + \mathbf{G}| |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \kappa(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \times \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{G_2} \cdot \mathbf{e}_{G'_2} & -\mathbf{e}_{G_2} \cdot \mathbf{e}_{G'_1} \\ -\mathbf{e}_{G_1} \cdot \mathbf{e}_{G'_2} & \mathbf{e}_{G_1} \cdot \mathbf{e}_{G'_1} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中, \mathbf{k} 为第一布里渊区内的波矢; \mathbf{G} 为倒矢量, $\mathbf{G} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3$, $\mathbf{b}_i (i = 1, 2, 3)$ 为倒基矢, n_1, n_2, n_3 为整数; \mathbf{e}_{G_1} 和 \mathbf{e}_{G_2} 为与 $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ 方向垂直的两个正交单位矢量; κ 为 $1/\epsilon$ (ϵ 为介电常数) 的傅里叶展开系数; h_{km}^G 为磁场 \mathbf{H} 的傅里叶展开系数。当 \mathbf{k} 在周期性平面内时,可以通过合理选取 \mathbf{e}_{G_1} 和 \mathbf{e}_{G_2} 的方向,使(2)式化为两个独立的方程,即通常所说的 TE 波和 TM 波的本征方程。

3 结果与讨论

计算时,采用 625 个平面波对介电常数进行展开,计算结果的精确度大于 99%,并且用圆形柱来构成格点,两种介质的介电常数分别为 13 和 1。为了讨论波矢偏离周期性平面的影响,作如下讨论。

3.1 波矢在周期性平面内三种晶格的色散关系

通过调整填充比发现,由圆形介质柱和空气为背景的三角晶格、正方晶格和由圆形空气柱和介质为背景构成的蜂巢状晶格不存在 TE 波和 TM 波的公共带隙。对于采用圆形空气柱和介质为背景的三角晶格,计算时沿第一布里渊区的几个高对称点 Γ - P - Q - Γ 方向进行,其中 $\Gamma = (0, 0)$, $P = 2\pi/a$ ($2/3, 0$), $Q = 2\pi/a(1/2, -\sqrt{3}/6)$ 。当 $R/a \geq 0.43$ (R 为圆柱半径, a 为晶格常数) 时,三角晶格存在 TE 波和 TM 波公共带隙,且 $R/a = 0.48$ 时, TE 波和 TM 波公共带隙达到最大值,在使用归一化频率的能带图中,可用 $\omega_0 a/2\pi c$ 代表带隙中心频率, $\Delta\omega a/2\pi c$ 表示公共带隙宽度,其中 ω 为频率, ω_0 为带隙的实际中心频率, $\Delta\omega$ 为带隙的实际宽度。则三角晶格的 $\Delta\omega/\omega_0 = 18.97\%$, $\omega_0 a/2\pi c = 0.4747$ 。而对由圆形介质柱和空气为背景的蜂巢状晶格,当 $0.18 \leq R/a \leq 0.43$ 时,存在 TE 波和 TM 波公共带隙,且 $R/a = 0.23$ 时, TE 波和 TM 波公共带隙达到最大值,此时 $\Delta\omega/\omega_0 = 10.90\%$, $\omega_0 a/2\pi c = 0.5549$ 。对于由圆形空气柱和介质为背景的正方晶格,计算时沿第一布里渊区的 Γ - X - M - Γ 方向进行,其中 $\Gamma = (0, 0)$, $X = (0, \pi/a)$, $M = (\pi/a, \pi/a)$ 。当 $0.45 \leq R/a \leq 0.48$ 时,正方晶格存在 TE 波和 TM 波公共带隙,且 $R/a = 0.462$ 时, TE 波和 TM 波的公共带隙达到最大值,此时 $\Delta\omega/\omega_0 = 3.14\%$, $\omega_0 a/2\pi c = 0.4035$ 。由此可见,波矢在周期性平面内时,三角晶格和蜂巢状晶格形成 TE 波和 TM 波公共带隙较宽,而正方晶格形成的 TE 波和 TM 波公共带隙很窄,这也是实际应用中常利用三角晶格和蜂巢状晶格的一个重要原因。

3.2 波矢偏离周期性平面对晶格色散曲线、带隙和态密度的影响

采用与 3.1 相同的参数:三角晶格 $R/a = 0.48$ (圆形空气柱),蜂巢状晶格 $R/a = 0.23$ (圆形介质柱),正方晶格 $R/a = 0.462$ (圆形空气柱)。当波矢偏离周期性平面分量为 $0.1 \times 2\pi/a$ 时,三角晶格、蜂巢状晶格和正方晶格的色散曲线分别如图 1(a), (b) 和 (c) 所示。当波矢偏离周期性平面时,本

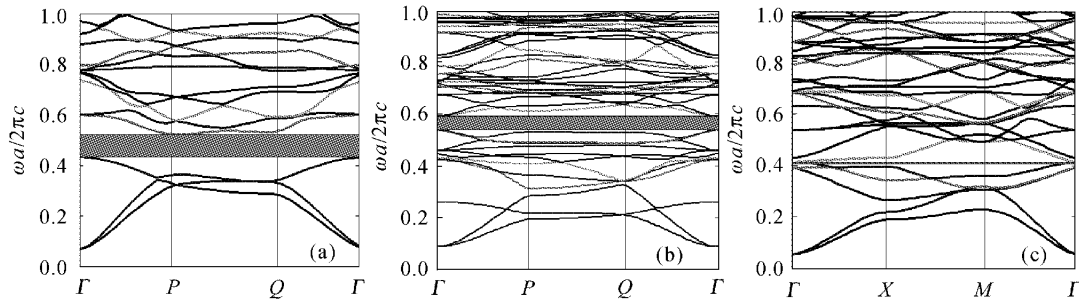


图 1 波矢偏离周期性平面时几种由圆形柱构成的二维光子晶体色散曲线

(a) 三角晶格; (b) 蜂巢状晶格; (c) 正方晶格

Fig. 1 Dispersion relations of two dimensional photonic crystal lattices composed of round rods with the wave vectors off the periodic plane

(a) triangular lattices; (b) honeycomb lattices; (c) square lattices

征模式不能再分解为 TE 模和 TM 模。从图 1 可见,此时二维光子晶体色散曲线表现出一个明显的特点:低频端出现一个不存在模式的区域。如果令波矢偏离周期性平面分量为 k_z ,将图 1 中三角晶格、蜂巢状晶格和正方晶格所形成的带隙称为绝对带隙,其随 k_z 的变化如图 2(a) 所示。在图 2(a) 中,线 4,5 和 6 分别为蜂巢状晶格、三角晶格和正方晶格最低阶模式频率与 k_z 的关系曲线,可见,随着 k_z 的增加,最低阶模式的频率非线性增大。

由于实际制作的二维光子晶体不可能是无限的,但当二维光子晶体纵向(垂直于周期性平面方向)长度 $L \gg a$ (L 为纵向长度),横向(周期性平面内两个基本矢量方向)包括足够多周期,可以将有限的二维光子晶体近似视为无限的,这时的二维光子晶体色散曲线可用无限大二维光子晶体色散曲线近似描述。在图 2(a) 中,还利用自由空间中的光线和等效介质中的光线(直线 1,2 和 3 所示,这三条直线的差别是填充比不同)对这样的二维光子晶体模式进行简单分类。等效介质的等效折射率定义为: $n_{\text{eff}} = [f\epsilon_a + (1-f)\epsilon_b]^{1/2}$,其中 f 为填充比, ϵ_a 为圆形柱的介电常数, ϵ_b 为背景的介电常数。自由空间中光线是直线 $\omega = ck_z$ (c 为真空中的光速);等效介质中光线 1,2 和 3 是直线 $\omega = vk_z$ ($v = c/n_{\text{eff}}$ 为等效介质中的光速)。对某一填充比和某一晶格而言,线 $\omega = ck_z$ 和线 $\omega = vk_z$ 将能带图分成了三个区域。波矢偏离周期性平面时,二维光子晶体色散关系必须满足: $\omega \geq vk_z$,所以直线 $\omega = vk_z$ 以下的区域是模式的禁区;在自由空间中任何存在的模式都必须满足 $\omega \geq ck_z$,所以线 $\omega = ck_z$ 以上区域存在的模式可同时存在于自由空间和二维光子晶体内部,这些模式对介

质而言是泄漏模;线 $\omega = vk_z$ 和线 $\omega = ck_z$ 间的区域是二维光子晶体非泄漏模区域。由于禁带是态密度为零的区域,所以图 2(a) 中,线 $\omega = ck_z$ 以上的绝对带隙适合做反射镜应用,而线 $\omega = vk_z$ 以上的公共带隙,都可对晶体内发生的自发发射过程产生重要的影响,有减弱自发发射的作用。

从图 2(a) 可见,三角晶格、蜂巢状晶格和正方晶格形成的绝对带隙宽度,随 k_z 的增加逐渐变小,而带隙中心频率逐渐变大,达到一定值时消失。三角晶格和蜂巢状晶格形成的绝对带隙较宽,并且这种宽的带隙能够在线 $\omega = vk_z$ 上方保持很大的 k_z 范围,虽然正方晶格也能在线 $\omega = vk_z$ 上方保持很大的范围,但它的带隙宽度直至消失都很窄。从绝对带隙影响二维光子晶体自发发射的角度看,在一定 k_z 范围内保持较大宽度的绝对带隙更有助于减小自发发射,所以三角晶格和蜂巢状晶格比正方晶格更有利于减小自发发射概率和提高发光器件的输出功率。

实际上,由于 k_z 的作用,使光子能带间发生了相对移动,进而引起绝对带隙发生变化。图 2(b) 给出了正方晶格当 $R/a = 0.462$ (圆形空气柱) 时,前五个能带在 k_z 值分别为 $0, 0.4 \times 2\pi/a$ 和 $0.8 \times 2\pi/a$ 时的分布情况。从图 2(b) 可见,随 k_z 的增加,能带分布表现出几个明显特点:能带均向高频端移动,处于不同频率范围的能带,向高频端移动快慢不同;能级简并情况发生变化,在某些 (k_x, k_y) 位置出现新的能级简并,而原简并能级简并解除或消失;能带的走势发生变化,尤其低频端能带改变明显,趋于平坦化。能带的这些变化会引起原有绝对带隙消失和新绝对带隙生成,并且由于低阶能带变化更明显,使得绝对带隙更易在低阶能带间形成。从图 2(b) 可见,

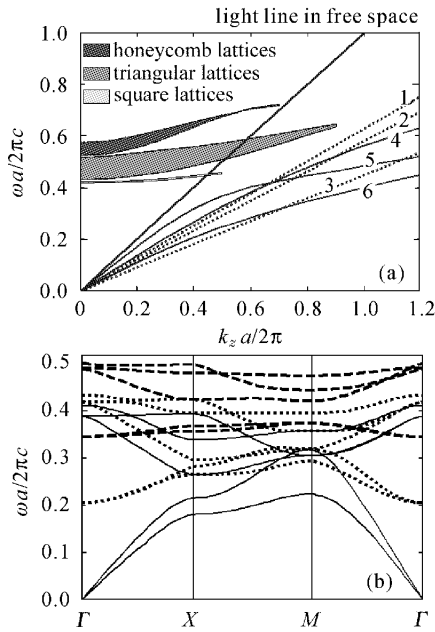


图 2

(a) 蜂巢状晶格、三角晶格和正方晶格的绝对带隙 k_z 的变化。图中线 1, 2, 3 分别是以三种晶格为等效介质的等效介质光线；线 4, 5, 6 是三种晶格的最低阶模式频率随 k_z 的变化；(b) 当波矢偏离周期性平面时，正方晶格最低的五个能级的分布情况。图中实线、点线和长划线分别为 $k_z = 0, 0.4 \times 2\pi/a$ 和 $0.8 \times 2\pi/a$ 时的分布

Fig. 2

(a) the changes of band gaps in honeycomb lattices, triangular lattices and square lattices with the increase of k_z . The lines 1, 2 and 3 denote the dispersion relations of light in equivalent medium of honeycomb lattices, triangular lattices and square lattices respectively; The lines 4, 5 and 6 are the relations of frequency of the lowest order mode with the increase of k_z in honeycomb lattices, triangular lattices and square lattices respectively; (b) the distribution of the lowest five energy bands in square lattices. The solid lines, dot lines and dash lines are at $k_z = 0, 0.4 \times 2\pi/a$ and $0.8 \times 2\pi/a$ respectively

当 $k_z = 0.8 \times 2\pi/a$ 时，正方晶格在第二和第三个能带间出现了一个较宽的绝对带隙，绝对带隙宽度 $\Delta\omega a/2\pi c$ 的 $\omega a/2\pi c$ 值介于 $0.37 \sim 0.42$ 之间。此外，因每一个能带中都包含了第一布里渊区全部的 k 状态，即每一能带的 ω 值和 (k_x, k_y) 组合间存在一一对应关系，所以能带平坦化将引起二维能态密度增加。三种 k_z 值的态密度如图 3 所示。如果定义角度： $\theta = \arccos k_z/k$ (k 为总的波矢量)，那么不同频段光辐射沿不同空间角 θ 方向的态密度不同，从而使发生自发发射的难易程度与频率及空间角有很大关系。所以，为了更好地控制自发发射，考虑 k_z 对光子晶体色散曲线和带隙的影响是十分必要的。

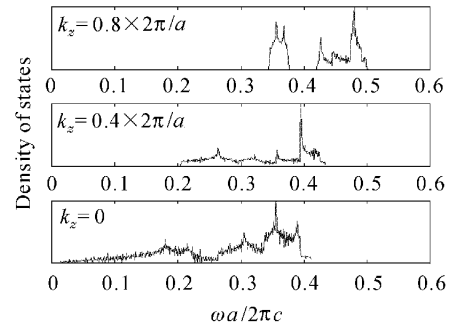


图 3 圆形空气柱组成的正方晶格态密度分布，其中 $R/a = 0.462$

Fig. 3 State densities of square lattices composed of air round rods with $R/a = 0.462$

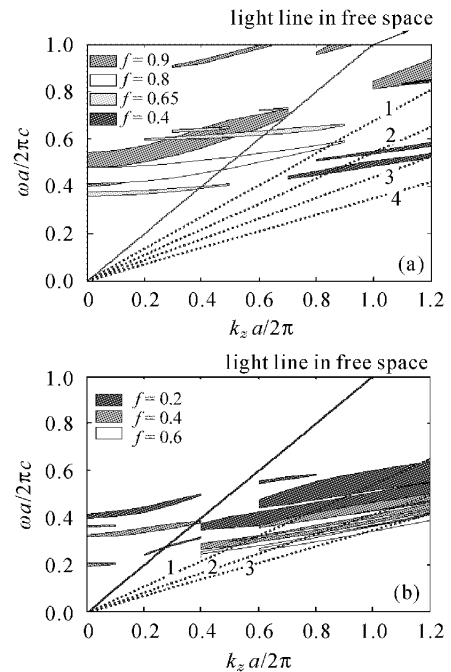


图 4 绝对带隙随 k_z 的变化

(a) 三角晶格(空气圆柱)不同填充比时的带隙分布，直线 1, 2, 3, 4 分别是填充比为 0.9, 0.8, 0.65, 0.4 时等效介质中的光线；(b) 蜂巢状晶格(介质圆柱)不同填充比时带隙分布，直线 1, 2, 3 是填充比分别为 0.2, 0.4, 0.6 时等效介质中的光线

Fig. 4 Variations of the absolute band gaps with the increase of k_z

(a) triangular lattices (air round rods); 1, 2, 3 and 4 denote the light lines in equivalent medium of triangular lattices with filling factors being 0.9, 0.8, 0.65 and 0.4; (b) honeycomb lattices (dielectric round rods), 1, 2 and 3 denote the light lines in equivalent medium of honeycomb lattices with filling factors being 0.2, 0.4 and 0.6

3.3 波矢偏离周期性平面对不同填充比的三角晶格和蜂巢状晶格带隙的影响

对于给定的材料和晶格结构，填充比是影响色

散曲线图中能带分布的重要因素,所以下面讨论在填充比变化的情况下,波矢偏离周期性平面对二维光子晶体带隙的影响。由于当波矢在周期性平面内时三角晶格和蜂巢状晶格所形成的带隙较宽,所以下面讨论三角晶格(圆形空气柱)和蜂巢状晶格(圆形介质柱)的前 11 个能带形成绝对带隙的情况,如图 4 所示。其中选择三角晶格的 f 分别为 0.9, 0.8, 0.65 和 0.4, 蜂巢状晶格的 f 分别为 0.2, 0.4 和 0.6。

从图 4 可见,当波矢偏离周期性平面且填充比不同时,三角晶格和蜂巢状晶格绝对带隙的位置和个数也不同。对三角晶格而言,填充比较小时,虽然波矢偏离周期性平面也能出现绝对带隙,但绝对带隙宽度很窄,并且随 k_z 增加消失很快,当填充比很大时,绝对带隙变宽,随着 k_z 的增加,在很大 k_z 范围内存在绝对带隙。对蜂巢状晶格而言,反映出的规律刚好相反。这是因为对三角晶格采用空气柱,而对蜂巢状晶格采用介质柱的缘故。从三角晶格和蜂巢状晶格绝对带隙分布来看,三角晶格在填充比较大时和蜂巢状晶格在填充比较小时形成的绝对带隙很宽,但是三角晶格在泄漏模和非泄漏模区域都保持了很宽的绝对带隙,所以三角晶格作为反射镜和在更大的空间角范围内减小自发发射的性能要好于蜂巢状晶格。蜂巢状晶格在非泄漏模区域的带隙分布相对集中,这一特点使得它更有利于应用在更宽的频谱范围内来减小自发发射。

4 结 论

利用波矢偏离周期性平面时三角晶格、蜂巢状晶格和正方晶格色散曲线的变化,详细讨论了偏离周期性平面的波矢分量对三种晶格子色散曲线和带隙的影响。随着 k_z 的增加,能带的表现为:所有能带均向高频端移动,低阶能带移动明显,且趋于平坦化。低阶能带的明显变化使原来没有禁带的能带间出现禁带,能带间已存在的禁带变小或消失,这些变化将会对利用光子晶体抑制自发发射和作为反射镜应用产生影响。在带隙的一些应用中,三种晶格子性能的比较结果为:三角晶格、蜂巢状晶格比正方晶格

更能有效地减少自发发射概率,三角晶格比蜂巢状晶格更能有效地发挥反射镜作用。

参 考 文 献

- 1 Eli Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 Sajeev John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2486~2489
- 3 Weijia Wen, Ning Wang, Hongru Ma *et al.*. Field induced structural transition in mesocrystallites [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **82**(21): 4248~4251
- 4 W. Y. Zhang, X. Y. Lei, Z. L. Wang *et al.*. Robust photonic band gap from tunable scatters [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**(13): 2853~2856
- 5 C. Cuisin, A. Chelnkon, J. M. Lourtioz *et al.*. Submicrometer resolution Yablonovite templates fabricated by X-ray lithography [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **77**(6): 770~772
- 6 Yang Guangqiang, Zhang Xia, Ren Xiaomin *et al.*. Experimental research on dispersion compensation of 10 Gb/s clock signal using photonic crystal fiber [J]. *Chinese J. Lasers*, 2005, **32**(9): 1221~1224
杨广强,张霞,任晓敏等. 利用光子晶体光纤实现 10 Gb/s 光传输系统的色散补偿 [J]. *中国激光*, 2005, **32**(9): 1221~1224
- 7 Lin Xubin, Liu Yukui, Li Baojun. Theoretical study of silicon-based two-dimensional photonic crystal coupler [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(9): 1157~1160
林旭彬,刘玉奎,李宝军. 硅基二维光子晶体耦合器理论研究 [J]. *光学学报*, 2005, **25**(9): 1157~1160
- 8 Lou Shuqin, Wang Zhi, Ren Guobin *et al.*. Highly birefringent index guiding photonic crystal fibers [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(10): 1310~1315
娄淑琴,王智,任国斌等. 折射率导模高双折射光子晶体光纤 [J]. *光学学报*, 2004, **24**(10): 1310~1315
- 9 Wan Kuang, Cheolwoo Kim, Andrew Stapleton *et al.*. Calculated out-of-plane transmission loss for photonic-crystal slab waveguides [J]. *Opt. Lett.*, 2003, **28**(19): 1781~1783
- 10 S. Foteinopoulou, A. Rosenberg, M. M. Sigalas *et al.*. In- and out-of-plane propagation of electromagnetic wave in low index contrast two dimensional photonic crystals [J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **89**(2): 824~830
- 11 Xiaoping Feng, Yasuhiko Arakawa. Off-plane angle dependence of photonic band gap in a two dimensional photonic crystal [J]. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1996, **32**(3): 535~542
- 12 Thomas Sondergaard, Jes Broeng, Anders Bjarklev *et al.*. Suppression of spontaneous emission for a two dimensional honeycomb photonic bandgap structure estimated using a new effective-index model [J]. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1998, **34**(12): 2308~2313
- 13 K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(25): 3152~3155