

# 散射体形状为鸭式的二维正方光子晶体带隙的研究

刘娟 唐吉玉 陈彦 刘洋 董贵仁 何右青

华南师范大学 物理与电信工程学院, 广东 广州 510006

**摘要** 运用平面波展开法,模拟计算了四种散射体横截面形状分别为圆柱形、沙漏形、元宝形和鸭式的二维光子晶体结构的带隙,并且四种散射体形状的对称性依次降低。结果表明,散射体形状为鸭式的二维光子晶体相比散射体为圆柱形、沙漏形、元宝形的光子晶体更容易产生较宽的完全带隙。并且还进一步研究了介电常数和散射体的大小半圆半径对鸭式二维光子晶体的完全带隙的影响,结果表明,当介电常数为26.6,大半圆半径为0.331  $\mu\text{m}$ ,小半圆半径为大半圆半径的0.535倍时,完全带隙达到了最大值,该最大值为0.058 ( $\omega a/2\pi c$ )。

**关键词** 材料; 正方光子晶体; 平面波展开法; 完全带隙; 鸭式结构

中图分类号 O734

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP52.121602

## Band Gap Properties of Two-Dimensional Square Lattice Photonic Crystal Composed of Duck-Shaped

Liu Juan Tang Jiyu Chen Yan Liu Yang Dong Guiren He Youqing

School of Physical and Telecommunication Engineering, South China Normal University,  
Guangzhou, Guangdong 510006, China

**Abstract** Complete band gap of two-dimensional photonic crystal structure with four different scatterers (circle, hourglass, wing, duck) are simulated. The symmetry of the four scatterers in turn reduce. The results show that the duck-shaped scatterers of photonic crystals are more likely to produce complete band gap than other shapes of scatterers. The influence of dielectric constant and the geometric parameter of duck-shaped scatterer on the complete band gap is studied. The results show that when the dielectric constant is 26.6, the big semicircular radius is 0.331  $\mu\text{m}$ , and the radius of small semicircular is 0.535 times that of the big semicircular, the value of complete band gap reaches the maximum value of 0.0583 ( $\omega a/2\pi c$ ).

**Key words** materials; square photonic lattice; plane wave expansion method; complete band gap; duck-shaped scatterer

**OCIS codes** 160.5298; 160.5293; 160.4670

## 1 引言

1987年, Yablonovitch<sup>[1]</sup>和John<sup>[2]</sup>分别提出了光子晶体(PC)的概念。光子晶体是由不同介电物质的周期性排列所形成的新型光学微结构材料<sup>[3]</sup>。光子晶体材料又被称为科学界和产业界的“光半导体”<sup>[4]</sup>, 得到众多研究者的重视, 光子晶体的研究和应用有了突飞猛进的发展, 主要应用于光子晶体光纤、光子晶体谐振腔、光子晶体微腔、光子晶体波导、光子晶体超棱镜等方面<sup>[5-9]</sup>。尽管光子晶体属于人工材料, 但是自然界却在很久以前就存在有相同性质的物质, 例如蝴蝶的翅膀, 海老鼠的毛, 蛋白石, 或著名的淡水孔雀蛤的表面等等。

光子晶体根据周期性的维数可以按一维、二维、三维的方式分类。本文研究的对象是二维光子晶体, 这类光子晶体在工艺制造上比较简单, 并且应用广泛。光子晶体带隙是光子晶体最基本的性质, 电磁波不能在这个带隙范围内传播, 带隙越宽, 性能越稳定, 应用前景越好, 此外带隙的中心位置也会对光子晶体的应

收稿日期: 2015-06-29; 收到修改稿日期: 2015-08-01; 网络出版日期: 2015-11-07

基金项目: 国家自然科学基金(61271127)

作者简介: 刘娟(1990—), 女, 硕士研究生, 主要从事光子晶体性质方面的研究。E-mail: 1226132644@qq.com

导师简介: 唐吉玉(1965—), 女, 副教授, 硕士生导师, 主要从事固体的性质计算与模拟方面的研究。

E-mail: 195866901@qq.com(通信联系人)

用产生影响<sup>[10-13]</sup>。前人研究发现,降低光子晶体结构的对称性有助于得到比较好的完全带隙<sup>[14-15]</sup>,方法是使用各向异性的介质材料代替各项同性材料或者改变散射体的形状以及晶格结构,本文选择后者,获得了较好的完全带隙。

## 2 基本原理

光子晶体的能带结构的计算方法有多种,在这里用平面波展开法进行计算<sup>[16-17]</sup>,主要是用麦克斯韦方程组求解<sup>[18]</sup>。当介质为各向同性、无色散的非磁性介质时,根据麦克斯韦方程组便可得出二维(2D)光子晶体中电磁波偏振矢量  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 、 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$  应满足的方程:

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

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

式中  $c = (\varepsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$  表示真空中光速,  $\omega$  表示电磁波频率,  $\varepsilon(\mathbf{r})$  表示光子晶体介质的介电常数。

考虑到电磁波满足布洛赫定理以及二维光子晶体的周期性,则可以简化为两个独立的本征方程,即

$$\sum \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}| |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| H_c = \frac{\omega^2}{c^2} H_{c'}, \quad (3)$$

$$\sum \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G})(\mathbf{k} + \mathbf{G}') H_c = \frac{\omega^2}{c^2} H_{c'}, \quad (4)$$

式中  $\mathbf{k}$  为第一布里渊区波矢,  $\mathbf{G}$  为倒格矢。解此本征方程,便可得到光子晶体的能带图。

## 3 模拟计算与分析

在模拟过程中,以空气介质为背景介质,其介电常数取1,散射体为半导体材料 Ge,其介电常数取16.03,设晶格常数  $a$  为  $1 \mu\text{m}$ ,二维光子晶体结构的填充比为0.32。模拟得到不同形状散射体的二维正方晶格光子晶体的完全带隙。

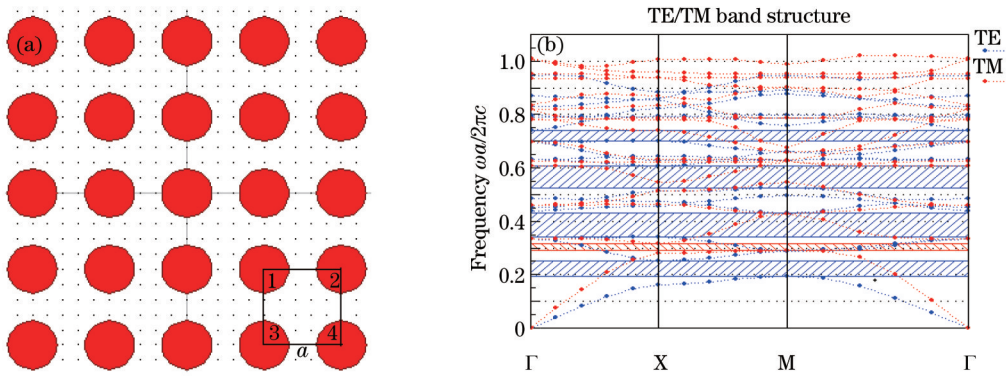


图1 散射体为圆柱形的二维光子晶体。(a) 结构;(b) 带隙

Fig.1 2D PC with circular scatterers. (a) Schematic diagrams; (b) band gap

当散射体形状为圆柱形时,此时填充比为  $f = \frac{S_1 + S_2 + S_3 + S_4}{a^2} = \frac{\pi r^2}{a^2}$ ,填充比大小为0.32,则圆柱半径为

$0.319 \mu\text{m}$ ,模拟带隙的结果如图1(b)所示。从图中看出,TE带隙有4条,TM带隙只有1条,两种带隙没有发生重叠,所以不存在完全带隙。这是因为散射体形状为圆柱形,对称轴有无数条,对称性极好,不易形成完全带隙。

当散射体形状为由上下两个半圆组合的沙漏形状时,填充比仍为四部分的面积和与晶格常数  $a$  的平方的比值。填充比大小保持为0.32,沙漏的上下两个半圆的半径为  $0.319 \mu\text{m}$ ,模拟结果如图2(b)所示。从图中看出带隙发生了重叠,即出现了完全带隙,该完全带隙的宽度为  $0.024(\omega a/2\pi c)$ ,中心频率为  $0.513 \text{ Hz}$ 。这是因为沙漏形的散射体对称轴有两条,相对于散射体为圆柱的二维立方晶格光子晶体,其对称性降低了。

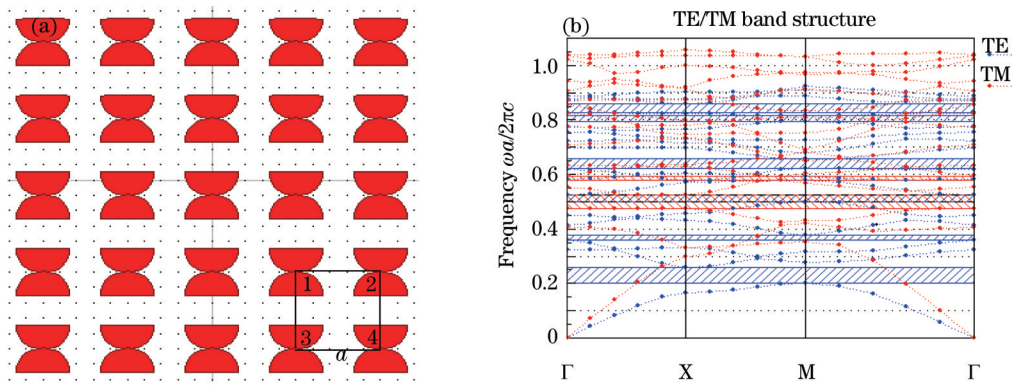


图2 散射体为沙漏状的二维光子晶体。(a) 结构; (b) 带隙

Fig.2 2D PC with hourglass scatterers. (a) Schematic diagrams; (b) band gap

当散射体形状为元宝形时, 设小半圆半径为  $r$ , 大半圆半径为  $R$ , 填充比大小为 0.32, 根据填充比的定义,  $f = \frac{S_1 + S_2 + S_3 + S_4}{a^2} = \frac{\pi r^2 + \pi R^2}{a^2}$ , 则大小半圆的半径分别为  $0.404 \mu\text{m}$  和  $0.202 \mu\text{m}$ 。模拟计算结果如图 3 (b) 所示。可以看到两条完全带隙, 带隙最宽达到  $0.026(\omega a/2\pi c)$ , 中心频率为  $0.386 \text{ Hz}$ 。完全带隙比沙漏状的光子晶体带隙宽, 这是因为元宝形散射体的对称轴只有一条, 对称性比沙漏状散射体更差。

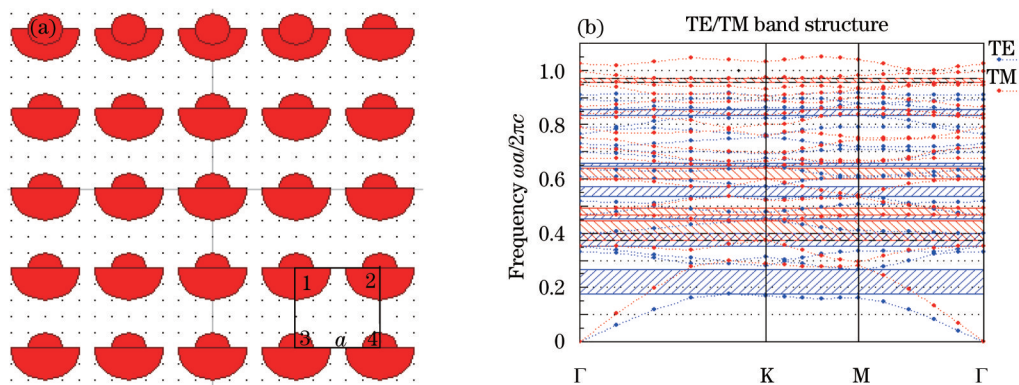


图3 散射体为元宝状的二维光子晶体。(a) 结构; (b) 带隙图

Fig.3 2D PC with wing scatterers. (a) Schematic diagrams; (b) band gap

第四种结构为鸭式二维立方晶格光子晶体, 是由散射体形状为元宝形的光子晶体结构中小半圆向右偏离大半圆中心位置  $0.22 \mu\text{m}$  得到的, 如图 4(a) 所示。大小半圆半径分别用  $r, R$  表示,  $f = \frac{S_1 + S_2 + S_3 + S_4}{a^2} = \frac{\pi r^2 + \pi R^2}{a^2}$ 。图 4 (b) 为鸭式散射体的几何结构及其参数, 由于小半圆的偏离导致其没有对称轴, 对称性极差。二维光子晶体的填充比仍为 0.32, 大圆半径仍为  $0.404 \mu\text{m}$ , 小圆半径仍为  $0.202 \mu\text{m}$ 。扫描其带隙结构, 如图 4(c) 所示, 图 (d) 为图 (c) 中完全带隙部分的放大图, 由图可知出现了 5 条完全带隙, 带隙的宽度最大达到了  $0.039(\omega a/2\pi c)$ , 中心频率为  $0.493 \text{ Hz}$ 。

以上计算表明: 散射体的对称性影响到完全带隙的条数及完全带隙的宽度。对称性越差, 完全带隙条数越多, 最宽的完全带隙宽度越大, 即打破散射体的对称性将有益于完全带隙的出现。这是因为散射体形状对称性越好, 在第一布里渊区越容易出现带隙简并。带隙简并将导致带隙条数减少, 完全带隙出现的可能性就变小, 为了得到条数更多带隙宽度较宽的完全带隙, 可以选择散射体形状对称轴较少的光子晶体, 因为散射体的对称轴越少, 对称性就越差, 带隙简并越容易被破坏, 新的带隙就越容易出现, 这样完全带隙越容易形成。所以没有对称轴的散射体为鸭式的二维光子晶体结构形成了条数最多、带隙最宽的完全带隙。

下面进一步研究散射体为鸭式的二维光子晶体的介电常数  $\epsilon$ 、大小半圆半径  $R$  和  $r$  对完全带隙的影响。

采用控制变量法研究  $\epsilon, R, r$  对完全带隙的影响。保持计算中  $R, r$  不变,  $\epsilon$  的变化范围为  $0 \sim 40$ , 所得最大带隙宽度和介电常数  $\epsilon$  的关系如图 5(a) 所示。图中蓝色代表 TE 带隙, 红色代表 TM 带隙, 绿色为两种带隙的重叠部分, 即完全带隙。从图中可以看出, 当介电常数小于 5 时, TE 和 TM 带隙没有重叠, 即不存在完全带隙。当介电常数大于 5 时, 随着介电常数的增加, 完全带隙的宽度先增大后减小, 中心频率也逐渐降低。

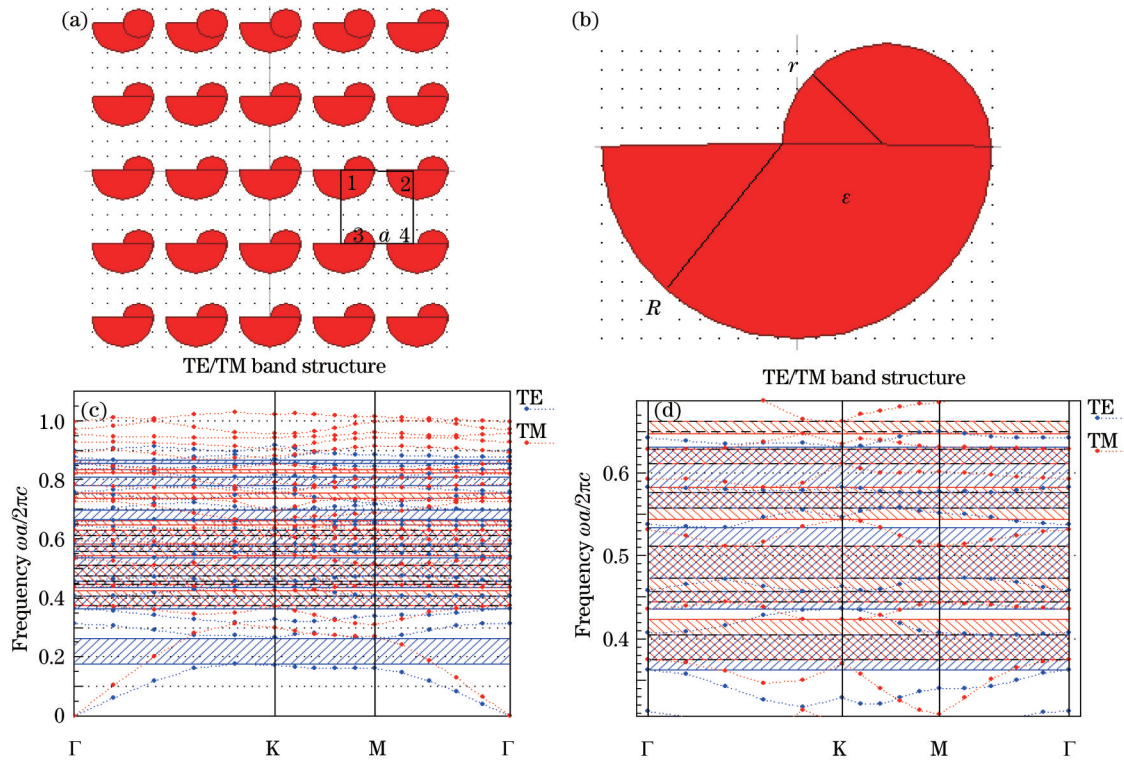


图4 鸭式二维光子晶体。(a) 结构图; (b) 单个散射体结构; (c) 带隙; (d) 完全带隙

Fig.4 2D PC with duck scatterers. (a) Schematic diagrams; (b) a unit cell of duck-shaped scatterer; (c) band gap; (d) complete bandgap

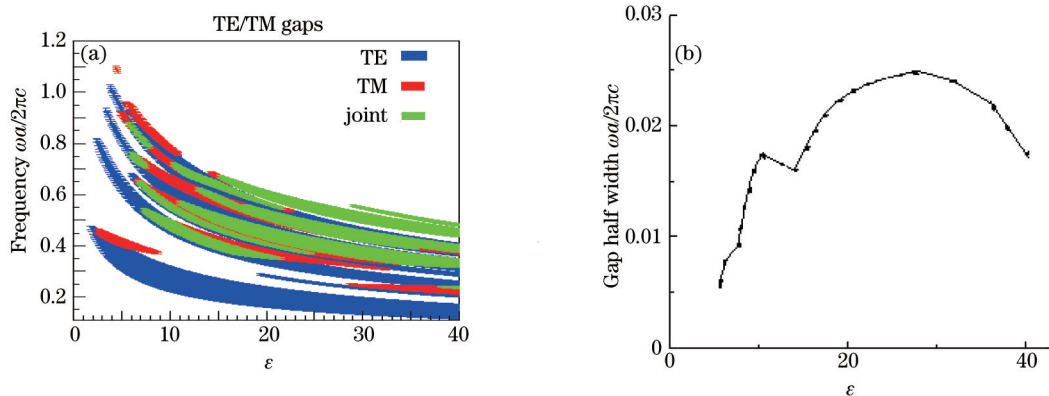


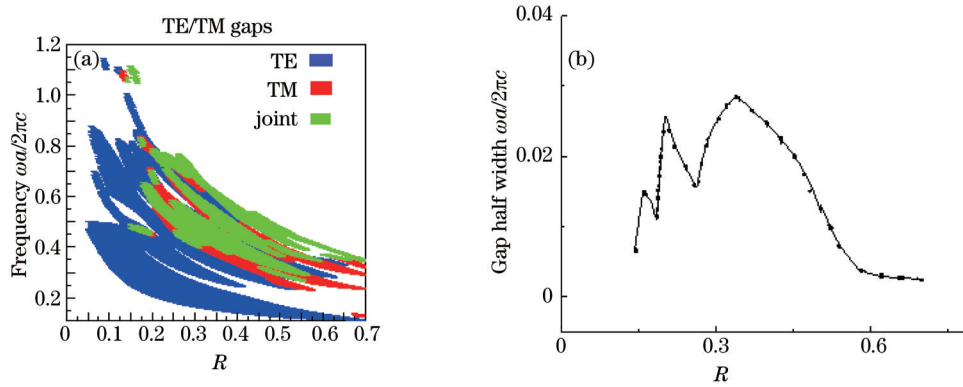
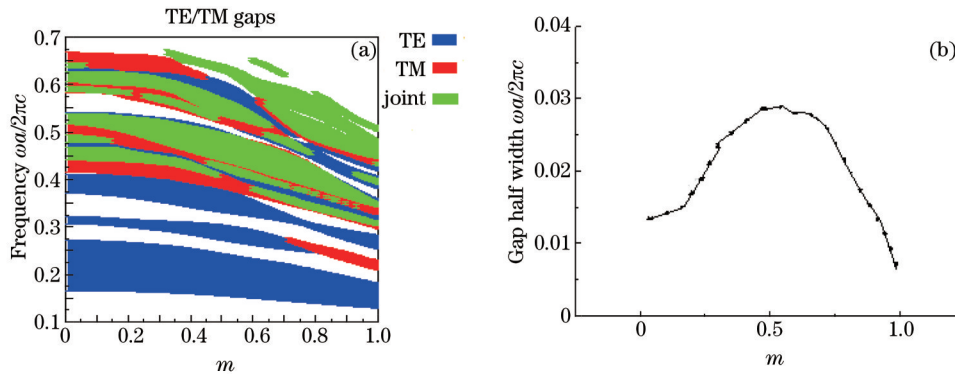
图5 (a)  $\epsilon$  对带隙的影响; (b) 不同的  $\epsilon$  对应的带隙宽度

Fig.5 2D PC consisting of duck scatterers. (a) Gap map with various  $\epsilon$ ; (b) the largest complete bandgap with different  $\epsilon$

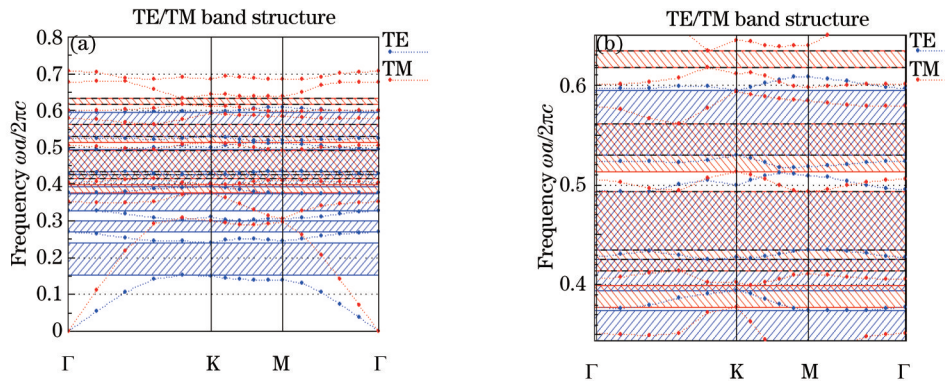
图5(b)为不同的介电常数 $\epsilon$ 对应的完全带隙宽度,从图中可知,当介电常数为26.6时,完全带隙宽度最大,为0.049( $\omega a/2\pi c$ ),中心频率位于0.397 Hz。

将散射体的介电常数固定为26.6,并保持散射体小圆半径与大圆半径的比值为0.5不变,然后扫描鸭式二维光子晶体的散射体大半圆的半径 $R$ 对完全带隙的影响如图6(a)所示。图中结果表明:随着散射体半圆半径的增加,完全带隙的中心频率降低。当 $R$ 小于0.25  $\mu\text{m}$ 时,TE带隙占优势;当 $R$ 在0.25~0.55  $\mu\text{m}$ 之间时,完全带隙占优势, $R$ 在0.55~0.70  $\mu\text{m}$ 之间时,TM带隙占优势。完全带隙与大圆半径 $R$ 的对应关系如图6(b)所示,可以看出,当 $R$ 为0.331  $\mu\text{m}$ 时,完全带隙宽度达到最大,为0.057( $\omega a/2\pi c$ ),中心频率为0.469 Hz。

设置散射体大圆半径 $R$ 为0.331  $\mu\text{m}$ ,小圆半径与大圆半径的比值为 $m$ ,即 $m=r/R$ 。扫描 $m$ 对带隙的影响如图7(a)所示。从图中可知,整个过程都存在着完全带隙,并且随着 $m$ 的变大,完全带隙宽度先增大后减小,中心频率不断地减小;完全带隙宽度和 $m$ 关系如图7(b)所示,由图可知,当 $m$ 为0.535时,最宽的完全带隙达到最大,为0.058( $\omega a/2\pi c$ ),中心频率为0.4637 Hz。

图6 (a)  $R$ 对带隙的影响; (b) 不同的 $R$ 所对应的不同的带隙宽度Fig.6 (a) Gap map of 2D PC consisting of duck scatterers with various  $R$ ; (b) largest complete bandgap with different  $R$ 图7 (a)  $m$ 对带隙的影响; (b) 不同的 $m$ 对应的带隙宽度Fig.7 (a) Gap map of 2D PC consisting of duck scatterers with various  $m$ ; (b) the largest complete bandgap with different  $m$ 

选择上面计算所得的最佳参数:介电常数为26.6,大圆半径为 $0.331 \mu\text{m}$ ,小圆半径为大圆半径的0.535倍,重新模拟计算鸭式二维光子晶体的最宽完全带隙如图8所示,最宽带隙为 $0.058(\omega a/2\pi c)$ 。

图8 鸭式二维光子晶体( $\epsilon=26.6, R=0.331 \mu\text{m}, m=0.535$ )。(a) 带隙图; (b) 完全带隙Fig.8 2D PC with duck scatterers ( $\epsilon=26.6, R=0.331 \mu\text{m}, m=0.535$ ). (a) Band structure; (b) complete bandgaps

## 4 结 论

在相同填充比的情况下,散射体形状的对称性极大地影响着二维光子晶体的完全带隙宽度,对称性越差,完全带隙的带隙宽度越宽。在本文研究的几种散射体形状中,散射体形状为鸭式的二维光子晶体,更容易产生完全带隙,并且带隙条数比较多,带隙也较宽。对于散射体形状为鸭式的二维光子晶体,当介电常数为26.6、 $R$ 为 $0.331 \mu\text{m}$ 、小半圆半径和大半圆半径的比值 $m$ 为0.535时,其完全带隙宽度达到最大,最大宽度为 $0.0583(\omega a/2\pi c)$ 。这一结果可以为设计拥有较宽完全带隙的二维光子晶体结构提供理论依据。

## 参 考 文 献

1 E Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics electronics[J]. Phys Rev Let, 1987, 58(20): 2059-2062.

- 2 S John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(23): 2486-2489.
- 3 D Liu, Y Gao, D Gao, *et al.*. Photonic band gaps in two-dimensional photonic crystals of core-shell-type dielectric nanorod heterostructures[J]. Optics Communications, 2012, 285(7): 1988-1992.
- 4 Liu Yang, Tang Jiyu, Wang Xi, *et al.*. Optimal design of photonic band gap in Ge-based tetragonal lattice 2D photonic crystal [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2014, 35(4): 491-495.  
刘洋, 唐吉玉, 王茜, 等. Ge基二维正方晶格光子晶体带隙优化设计[J]. 发光学报, 2014, 35(4): 491-495.
- 5 Chai Lu, Hu Minglie, Fang Xiaohui, *et al.*. Advances in femtosecond laser technologies with photonic crystal fibers[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(1): 0101001.  
柴路, 胡明列, 方晓惠, 等. 光子晶体光纤飞秒激光技术研究进展[J]. 中国激光, 2013, 40(1): 0101001.
- 6 Zhou Zhaoxian, Hu Minglie, Zhou Yuzhu, *et al.*. Broadband spectrum Bessel beams directly output from a photonic crystal fiber[J]. Chinese J Lasers, 2015, 42(3): 0302001.  
周钊贤, 胡明列, 周雨竹, 等. 光子晶体光纤直接产生超连续贝塞尔光束[J]. 中国激光, 2015, 42(3): 0302001.
- 7 Wang Xianwang, Zhang Wei, Han Jintao, *et al.*. Investigation of structure design and transmission characteristic of GeSbSe photonic crystal waveguides[J]. Chinese J Lasers, 2015, 42(1): 0105001.  
王贤旺, 张巍, 韩金涛, 等. GeSbSe光子晶体波导结构设计及传输特性研究[J]. 中国激光, 2015, 42(1): 0105001.
- 8 Liu Qineng. Interference theory of the defect mode in one-dimensional doped photonic crystal[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(8): 0806001.  
刘启能. 一维掺杂光子晶体缺陷模的干涉理论[J]. 中国激光, 2013, 40(8): 0806001.
- 9 Liu Hui, Liu Dan, Zhao Heng, *et al.*. Study on complete photonic band gaps of two-dimensional air annular photonic crystals [J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(19): 194208.  
刘会, 刘丹, 赵恒, 等. 空气环形二维光子晶体完全带隙特性研究[J]. 物理学报, 2013, 62(19): 194208.
- 10 Liu Guangyu, Ning Yongqiang, Zhang Lisen, *et al.*. Two-dimension photonic crystal complete bandgap [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2011, 32(2): 169-173.  
刘光裕, 宁永强, 张立森, 等. 二维光子晶体的完全带隙[J]. 发光学报, 2011, 32(2): 169-173.
- 11 N Zhu, J Wang, C Cheng, *et al.*. Research of band gap properties based on two-dimensional photonic crystal with mixed shapes of rods[J]. Optik, 2013, 124(4): 309-312.
- 12 Liu Jianjun, Fan Zhigang, Xiao Haosu, *et al.*. Photonic band gap in Ge-based two-dimensional triangular lattice photonic crystals[J]. J Infrared Millim Waves, 2012, 31(1): 35-41.  
刘建军, 范志刚, 肖昊苏, 等. Ge基二维三角晶格光子晶体的光子带隙[J]. 红外与毫米波学报, 2012, 31(1): 35-41.
- 13 Chen Xupan, Cao Quanxi. Study of complete bandgap of two-dimensional columnar photonic crystals[J]. Acta Physica Sinica, 2008, 57(5): 3249-3253.  
程旭攀, 曹全喜. 二维圆柱形光子晶体的完全禁带研究[J]. 物理学报, 2008, 57(5): 3249-3253.
- 14 X He, S Du, B Liu, *et al.*. Absolute photonic band gaps of two-dimensional square-lattice photonic crystals with Taiji-shaped dielectric rods[J]. Optics Communications, 2011, 284(14): 3491 - 3496.
- 15 X Li, Y Yang, P Han, *et al.*. Numerical simulation of absolute photonic band gaps for two-dimensional photonic crystals with the rotational square lattice[J]. Optoelectronics Letters, 2010, 6(5): 359-362.
- 16 Han Lihong, Liu Liming, Yu Zhongyuan, *et al.*. Effects of filling ratio and lattice points direction on two-dimensional triangular-lattice photonic crystal band gap characteristics[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(1): 0116003.  
韩利红, 刘立明, 俞重远, 等. 填充比和格点方向对二维三角晶格光子晶体带隙的影响[J]. 光学学报, 2013, 33(1): 0116003.
- 17 He Li, Tong Yuanwei, Zhang Yewen, *et al.*. The band structure in microwave frequency for quasi-1-D coaxial photonic crystals[J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(2): 935-940.  
赫丽, 童元伟, 张冶文, 等. 用传输矩阵法研究微波波段准一维同轴光子晶体能隙结构[J]. 物理学报, 2006, 55(2): 935-940.
- 18 Sun Bo, Zhao Hongdong, Feng Jiapeng, *et al.*. Band gap of two-dimensional cubic lattice photonic based on the plane wave expansion method[J]. Journal of Synthetic Crystals, 2014, 43(9): 2399-2403.  
孙渤, 赵红东, 冯嘉鹏, 等. 基于平面波展开法的二维立方晶格光子晶体带隙研究[J]. 人工晶体学报, 2014, 43(9): 2399-2403.

栏目编辑: 刘丰瑞