# 棋盘复式晶格介质环型光子晶体的完全带隙

刘祥,唐吉玉,刘紫雁

华南师范大学物理与电信工程学院,广东广州 510006

**摘要** 构建了棋盘复式晶格介质环型光子晶体结构,采用平面波展开法对该结构的完全带隙宽度及结构参量进行 了优化。研究结果表明,在优化参数下,完全带隙宽度的最大值为 0.160,带隙率可达 30.59%。该结构的大完全带 隙具有很好的稳定性。

关键词 材料;介质环型光子晶体;平面波展开法;完全带隙;复式晶格;棋盘晶格 中图分类号 O734 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP55.011601

# Complete Bandgap of Dielectric Ring-Shaped Photonic Crystal Based on Checkerboard Complex Lattice

Liu Xiang, Tang Jiyu, Liu Ziyan

College of Physics and Telecommunication Engineering, South China Normal University, Guangzhou, Guangdong 510006, China

**Abstract** The structure of dielectric ring-shaped photonic crystals based on the checkerboard complex lattice is constructed. By the plane wave expansion method, the complete bandgap width of this structure and the structural parameters are optimized. The study results show that, under the optimal parameters, the maximum value of the complete bandgap width is 0.160, and the bandgap ratio is 30.59%. The proposed structure has a good stability. **Key words** materials; dielectric ring-shaped photonic crystal; plane wave expansion method; complete bandgap; complex lattice; checkerboard lattice

OCIS codes 160.5298; 160.5293; 160.4670

## 1 引 言

二维光子晶体是指在空间的两个方向上,由具 有不同介电常数的介质周期性排列形成的一种人工 光学微结构材料,由 Yablonovitch<sup>[1]</sup>和 John<sup>[2]</sup>于 1987年提出,其最基本的特征就是具有光子能隙, 即频率落在光子禁带范围内的电磁波均不能通过光 子晶体。不同于以往光纤等利用全反射原理进行光 传输,光子晶体利用光子禁带和光子局域特性来控 制光子流<sup>[3]</sup>。近年来,基于光子晶体的光通信器件和 太阳能电池等的研究都取得了很大的进展,如利用光 子晶体增强太阳能电池的光俘获<sup>[4-5]</sup>、光子晶体光 纤<sup>[6-7]</sup>、光子晶体隐身材料<sup>[8]</sup>以及光子晶体波导<sup>[9-11]</sup> 等。这些应用都是基于光子晶体的完全带隙特性进 行的,完全光子带隙越宽,光电器件性能就越稳定。

为获得更宽的完全带隙,Kurt等<sup>[12]</sup>提出了一种由圆形空气孔与圆形介质柱复合而成的空气环型结构,研究发现,该复合结构可以得到较宽的完全带隙。研究者基于这种空气环型结构进行了大量研究,提出了许多具有较宽完全带隙的光子晶体结构<sup>[13-15]</sup>。众所周知,制备工艺会带来光子晶体介质柱尺寸和角度等方面的偏差,进而对完全带隙宽度造成很大影响,因此设计出具有较宽且稳定的完全带隙的光子晶体结构具有重要的现实意义。已有的研究表明,棋盘嵌套复式晶格结构<sup>[16]</sup>能有效地增大介质柱型光子晶体的完全带隙

收稿日期: 2017-06-16; 收到修改稿日期: 2017-07-31

基金项目: 国家自然科学基金(11674106)

作者简介:刘祥(1993—),男,硕士研究生,主要从事光子晶体带隙性质方面的研究。E-mail:1924814791@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)

宽度。本文基于二维六角晶格,构建了一种棋盘 嵌套复式晶格介质环型光子晶体结构。考虑到实 际制备工艺的复杂性,在几何结构设计时选用方 形和圆形的介质柱及空气孔的优化组合。这两种 基础形状的制备技术相对成熟,降低晶格对称性 的同时增加了系统的不均匀性,能获得稳定且较 宽的完全带隙,有利于该光子晶体的实际应用。 采用平面波展开法,计算它的完全光子禁带宽度。 通过对参量的仿真优化,获得了一组完全带隙最 宽的最优结构参量。

#### 2 模型构建与计算方法

首先通过在二维六角晶格结构中隔行删除介质 柱的方式,构建长方棋盘格子介质柱结构(介质柱截 面为方形,并使之沿中轴线旋转45°),然后将另一 个长方棋盘格子介质柱结构(介质柱截面为圆形)嵌 套在一起,引入两套晶格降低其对称性。接着在方 形介质柱的中心位置引入圆形空气孔,在圆形介质 柱的中心位置引入矩形空气孔,降低对称性的同时 增加了系统的不均匀性,构建了棋盘嵌套复式晶格 介质环型光子晶体结构。为计算简便,选用这两套 晶格的介质柱互相放置在它们晶格原胞中心位置的 情况。该设计不但可以获得更宽的完全带隙,并且 在几何结构参量的设计上也更加灵活。

图 1 所示为棋盘嵌套复式晶格介质环型光子晶体结构及其相对介电常数空间分布示意图。背景介质为空气,其相对介电常数取 1,散射体选用半导体材料 Ge,其相对介电常数  $\varepsilon = 16$ ,晶格常数  $a = 1 \mu m$ 。棋盘格子方形介质柱宽度为 W,其中心位置引入的圆形空气孔半径为 r,嵌套格子圆形介质柱的半径为 R,其中心位置引入的矩形空气孔的宽度为 w,长度为  $\gamma \cdot w$ (其中  $\gamma$  为该矩形空气孔长与宽的比例系数),矩形空气孔的旋转角为 Y(Y 沿顺时针方向为正)。







采用平面波展开法计算二维光子晶体的光子带 隙<sup>[17-18]</sup>。通过麦克斯韦方程组,可得二维光子晶体 中电、磁场<sup>[19]</sup>应该满足如下方程:

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

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

式中 E 为电场强度, H 为磁场强度,  $\omega$  为电磁波的 频率, c 为光在真空中的速度。

运用布洛赫定理,将相对介电常数与电场或者 磁场进行平面波展开,并结合光子晶体介电常数周 期性分布的特性,得到两个独立的本征方程:

$$\sum_{G,G'} \varepsilon^{-1} (G - G') | \mathbf{k} + G | | \mathbf{k} + G' | \mathbf{H}_G = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{G'},$$
(3)

$$\sum_{\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}'} \varepsilon^{-1} \left( \boldsymbol{G} - \boldsymbol{G}' \right) \left( \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G} \right) \left( \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}' \right) \boldsymbol{H}_{\boldsymbol{G}} = \frac{\omega^2}{c^2} \boldsymbol{H}_{\boldsymbol{G}'},$$
(4)

式中k为第一布里渊区波矢,G、G'为倒格矢, $H_{c}$ 和 $H_{c'}$ 分别为两个不同倒格失下的磁场强度。对(3)、(4)式进行求解,就可得到二维光子晶体的光子能带结构。

运用平面波展开法,计算棋盘复式晶格介质环 型光子晶体的带隙结构,并研究结构参量对光子晶体 体完全带隙的影响。

#### 3 计算结果与分析

#### 3.1 长方棋盘晶格介质柱型光子晶体的完全带隙

首先构建长方棋盘晶格方形介质柱结构,它由 截面为正方形的介质柱绕其中心轴旋转45°构成, 其晶格结构和相对介电常数空间分布分别如 图2(a)、(b)所示。研究该长方棋盘晶格方形介质 柱的宽度W对完全带隙宽度的影响,W从0.01 µm 开始以0.01 µm为步长增加至1 µm,采用平面波展 开法计算其完全带隙特性,计算结果如图2(c)、(d) 所示,其中完全带隙宽度和频率均在归一化入射电 磁波频率下取得(全文同),TM 表示横磁波,TE 表 示横电波。

从图 2 可以看出,当方形介质柱的宽度 W 小于 0.16 μm 时,没有完全带隙产生;当 W 增大到 0.39  $\mu$ m时,完全带隙宽度达到最大值 0.037,中心 频率为 0.530,带隙率(完全带隙与中心频率之比) 为 7.0%。并在 0.38  $\mu$ m  $\leq$  W  $\leq$  0.41  $\mu$ m 范围内保持 该完全带隙宽度,使得该结构对由制备工艺引起的 方形介质柱宽度的偏离具有一定的稳定性。



图 2 (a)结构;(b)相对介电常数空间分布;(c)不同 W 对应的完全带隙宽度;(d) W=0.39 μm 时的带隙图 Fig. 2 (a) Structure; (b) spatial distribution of relative dielectric constant; (c) complete bandgap width versus W; (d) bandgap diagram when W=0.39 μm

### 3.2 棋盘嵌套晶格介质柱型光子晶体的完全带隙 棋盘嵌套晶格结构是在长方棋盘晶格介质柱型 光子晶体的基础上,在棋盘格子的原胞中心引入截

面为圆形的介质柱,其晶格结构和相对介电常数空间分布如图 3(a)、(b)所示。研究该圆形介质柱的 半径 R 对完全带隙宽度的影响,R 从 0.01 μm 开始



图 3 (a)结构;(b)相对介电常数空间分布;(c)不同的 R 对应的完全带隙宽度;(d)  $R = 0.22 \ \mu m$  时的带隙图 Fig. 3 (a) Structure; (b) spatial distribution of relative dielectric constant; (c) complete bandgap width versus R; (d) bandgap diagram when  $R = 0.22 \ \mu m$ 

以 0.01 μm 为步长增加至 1 μm,采用平面波展开法 计算该嵌套复式晶格结构的完全带隙特性,计算结 果如图 3(c)、(d)所示。

相比于长方棋盘晶格而言,嵌套复式格子在原 棋盘晶格的原胞中心引入了圆形介质柱,不仅降低 了晶格的对称性,还增加了介质材料的占空比,故能 得到更大的完全带隙。可以看出,当嵌套圆形介质 柱的半径 R 取 0.22 µm 时,完全带隙宽度达到最大 值 0.081,中心频率为 0.506,带隙率为 16.01%。

3.3 棋盘嵌套晶格介质环型光子晶体的完全带隙

为了进一步降低介质柱的对称性,增加系统的 不均匀性,获得大完全带隙,在方形介质柱的中心位 置引入圆形空气孔,在圆形介质柱的中心位置引入 矩形空气孔,构建了棋盘嵌套复式晶格介质环型光 子晶体,其晶格结构和相对介电常数空间分布如 图 4(a)、(b)所示。分别研究了引入的圆形空气孔 的半径 r 和矩形空气孔的宽度 w 对该介质环型光 子晶体完全带隙的影响。r 从 0.01 μm 开始以 0.01 μm为步长增加到 0.20 μm, w 从 0.01 μm 开始 以0.01 μm为步长增加到 0.44 μm, 其计算结果分别 如图 4(c)、(d)所示。

由图 4 可以看出,当引入的圆形空气孔的半径 r 取 0.09  $\mu$ m、引入的矩形空气孔的宽度 w 取 0.16  $\mu$ m时,完全带隙宽度达到最大值 0.143,中心 频率为 0.553,带隙率为 25.86%。并且完全带隙宽 度在 0.08  $\mu$ m $\leqslant$ r $\leqslant$ 0.10  $\mu$ m、0.14  $\mu$ m $\leqslant$ w $\leqslant$ 0.19  $\mu$ m 条件下保持平坦,这使得棋盘嵌套晶格介质环型光 子晶体结构对由制备工艺引起的空气孔尺寸的偏离 具有较好的稳定性。

再考虑矩形空气孔的长宽比 γ 及旋转角度  $\phi$  对 完全带隙和中心频率的影响。取  $\varepsilon = 16$ , R =0.22  $\mu$ m,r=0.09  $\mu$ m,W=0.39  $\mu$ m,w=0.16  $\mu$ m,矩 形空气孔长宽比 γ 从 0.1 开始以 0.01 为步长增加至 3;考虑到正方形的旋转对称性,将旋转角度  $\phi$  从 0°开 始以 1°为步长增加至 90°,采用平面波展开法,计算 γ 和  $\phi$  对完全带隙的影响,结果如图 5(a)、(b)所示。



图 4 (a)结构;(b)相对介电常数空间分布;(c)不同 r 对应的完全带隙宽度;(d)不同 w 对应的完全带隙宽度 Fig. 4 (a) Structure; (b) spatial distribution of relative dielectric constant; (c) complete bandgap width versus r; (d) complete bandgap width versus w

由图 5 可知,当长宽比γ取1,即为方形空气孔 时,完全带隙宽度达到最大值,并且在 0.9≪γ≪1.3 条件下保持平坦;同时,对矩形空气孔的旋转角度φ 而言,大完全带隙在0°≪φ≪25°条件下保持平坦。这说 明棋盘嵌套晶格介质环型光子晶体对由制备工艺引起 的空气孔的尺寸和角度的偏离都具有很好的稳定性。

最后,考虑具有不同相对介电常数的介质材料 以及晶格常数 a 对完全带隙宽度和中心频率的影 响。基于二维六角晶格构建嵌套复式介质环结构, 在其等边三角形原胞中,方形介质柱和方形介质柱、 方形介质柱和圆形介质柱的间距都等于晶格常数 a。取 $R=0.22 \mu m, r=0.09 \mu m, W=0.39 \mu m, w=$  $0.16 \mu m, \gamma=1, \phi=0^{\circ}$ 。相对介电常数  $\epsilon$  从 1 开始以 1 为步长增加至 50,晶格常数 a 从 0.8  $\mu m$  开始以 0.01  $\mu m$ 为步长增加到 1.2  $\mu m$ ,采用平面波展开法,计 算  $\epsilon$  和 a 对完全带隙的影响,结果如图 6 所示。









图 6 不同(a)  $\epsilon$  和(b) *a* 对应的完全带隙宽度 Fig. 6 Complete bandgap width versus (a)  $\epsilon$  and (b) *a* 

光子晶体要获得完全带隙必须要有足够大的相 对介电常数差。由图 6 可知,当选择介电常数为 $\epsilon$ = 41 的介质材料,并调整晶格常数 a=1.02  $\mu$ m 时,能 得到最大完全带隙宽度,其值为 0.160,中心频率为 0.523,带隙率为 30.59%。同时发现,在 36 $\leqslant \epsilon \leqslant$ 44、 0.95  $\mu$ m $\leqslant a \leqslant$ 1.09  $\mu$ m 条件下可维持所获得的大完 全带隙,这不仅说明该介质环型结构对实际制备过 程中晶格周期偏离及材料掺杂引起的介电常数偏差 均具有良好的稳定性,且使得可供选择的介质材料 种类更多样化。

所提介质环型光子晶体之所以能获得如此大的 完全带隙,究其原因有三点。1)背景为空气的介质 柱型光子晶体易得到 TM 带隙,背景为介质的空气 孔型光子晶体易得到 TE 带隙。棋盘嵌套复式晶格 介质环型光子晶体结合了这两大特点,易同时得到 TM 和 TE 带隙重叠形成的完全光子禁带。2)介质 柱和空气孔的结合,使得它们几何结构参量的变化 更加灵活,更有效地降低了光子晶体结构的对称性。 3)高介电常数介质材料的使用以及介质柱中空气 孔的引入,共同增强了该二维光子晶体微结构对光 的散射能力,大完全带隙得以形成。表1给出了近 三年最新研究成果,可以看出,该棋盘复式晶格介质 环型光子晶体结构能获得较大的完全带隙宽度和较 好的带隙率。

表 1 二维光子晶体完全带隙宽度、中心频率和带隙率的对比

Table 1 Comparisons of complete bandgap width, central frequency and bandgap ratio of two-dimensional photonic crystals

| Literature | Complete      | Center    | Bandgap   |
|------------|---------------|-----------|-----------|
|            | bandgap width | frequency | ratio / ½ |
| This paper | 0.160         | 0.523     | 30.59     |
| Ref. [3]   | 0.136         | 0.406     | 33.55     |
| Ref. [15]  | -             | -         | 16.89     |
| Ref. [17]  | 0.058         | -         | -         |

#### 4 结 论

基于平面波展开法,对影响棋盘嵌套复式晶格 介质环型光子晶体完全带隙的结构参量分别进行了 优化计算,得到了最优参量组合。研究结果表明,相 较于已有的光子晶体结构,所设计的棋盘嵌套复式 晶格介质环型光子晶体具有更宽的完全带隙和较大 的带隙率。同时,该完全带隙对由制备工艺引起的 晶格常数和介电常数偏差,介质柱和空气孔的尺寸、 角度偏离都具有一定的稳健性。所设计的大带隙光 子晶体微结构为未来新型光电器件和高吸光效率太 阳能电池等的研发提供了一定的参考。

#### 参考文献

- Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics electronics [J]. Physical Review Letters, 1987, 58(20): 2059-2062.
- John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. Physical Review Letters, 1987, 58(23): 2486-2489.
- [3] Li C Q, Fan Q B, Yang M J, et al. Complete photonic band gaps of two-dimensional triangular lattice photonic crystals based on copper-coin-shaped air hole [J]. Acta Photonica Sinica, 2015, 44(6): 0623001.

李传起,范庆斌,杨梦婕,等.铜币形空气孔二维三角晶格光子晶体的完全光子带隙[J].光子学报,2015,44(6):0623001.

Lu H D, Tie S N, Liu J. Simulation of enhancing light trapping in crystalline silicon thin film solar cells with diffraction gratings and photonic crystals [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53 (7): 070403.

卢辉东,铁生年,刘杰. 衍射光栅和光子晶体增强晶体硅薄膜太阳电池光俘获的模拟研究[J].激光与光电子学进展,2016,53(7):070403.

[5] He X J, Liu M, Zhang Y Y, et al. Study on improving absorption of Si thin-film solar cells with metal grating and photonic crystals back reflectors[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(5): 050501.

何孝金,刘敏,张姚姚,等.金属光栅和光子晶体背 反射提升硅薄膜太阳电池光吸收的研究[J].激光与 光电子学进展,2016,53(5):050501.

- [6] Lü J T, Wang C M, Zhu C H, et al. Dual-core photonic crystal fiber transverse-stress sensor based on surface plasmon resonance [J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(8): 0828002.
  吕健滔, 王春明,朱晟界,等.基于表面等离子体共 振的双芯光子晶体光纤横向应力传感器[J].光学学 报, 2017, 37(8): 0828002.
- [7] Ma J, Yu H H, Xiong J G, et al. Research progress of photonic crystal fiber sensors [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(7): 070006.
  马健,余海湖,熊家国,等.光子晶体光纤传感器研 究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(7): 070006.
- [8] Zhang L C, Qiu L L, Lu W, et al. Preparation of opal photonic crystal infrared stealth material [J]. Acta Physica Sinica, 2017, 66(8): 084208.

张连超,邱丽莉,芦薇,等.蛋白石型光子晶体红外 隐身材料的制备[J].物理学报,2017,66(8): 084208.

- [9] Yuan M M, Zhu N, Huang Y, et al. Broadband slow light effect of nonlinear line defect photonic crystal waveguide [J]. Optoelectronic Technology, 2017, 37(1): 39-43.
  袁敏敏,朱娜,黄毅,等.非线性线缺陷光子晶体波 导的宽带慢光效应[J].光电子技术, 2017, 37(1): 39-43.
- [10] Zhao X, Liu C, Ma H L, *et al.* Photonic crystal band selection and energy beam splitter based on energy coupling effect between waveguides [J]. Acta Physica Sinica, 2017, 66(11): 114208.
  赵绚,刘晨,马会丽,等.基于波导间能量耦合效应的光子晶体频段选择与能量分束器 [J].物理学报, 2017, 66(11): 114208.
- [11] Qian C J, Xie X, Yang J N, et al. Coupling of twodimensional slab photonic crystal micro-cavities and waveguides [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(3): 030001.
  钱琛江,谢昕,杨静南,等. 二维平板光子晶体微腔 与波导的耦合 [J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(3): 030001.
- [12] Kurt H, Citrin D S. Annular photonic crystals [J].Optical Express, 2005, 13(25): 10316-10326.
- [13] Zhang Y R, Kong L K, Feng Z H, *et al*. Design of a two-dimensional photonic crystal with large photonic bandgap based on ring-shaped air holes [J]. Optical Technique, 2010, 36(2): 285-289.
  张亚茹,孔令凯,冯卓宏,等.基于空气环结构的大带隙二维光子晶体的设计[J].光学技术, 2010, 36(2): 285-289.
- [14] Liu H, Liu D, Zhao H, et al. Study on the complete bandgap characteristics of air-ring two-dimensional photonic crystals [J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(19): 194208.
  刘会,刘丹,赵恒,等. 空气环型二维光子晶体完全 带隙特性研究[J].物理学报, 2013, 62(19): 194208.
- [15] Liu D, Hu S, Xiao M, et al. Study on band gap characteristics of two-dimensional silica-based honeycomb ring[J]. Journal of Central China Normal University (Nature Sciences), 2016, 55 (5): 660-664.

刘丹, 胡森, 肖明, 等. 二维硅基蜂窝状空气环型光 子晶体禁带特性研究[J]. 华中师范大学学报(自然 科学版), 2016, 55(5): 660-664.

- [16] Wang J L, Chen H M. Study on complete photonic band gap of two-dimensional checkerboard [J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56(2): 922-926.
  汪静丽,陈鹤鸣.二维棋盘格子复式晶格的完全光子 带隙研究[J].物理学报, 2007, 56(2): 922-926.
- [17] Liu J, Tang J Y, Chen Y, et al. Band gap properties of two-dimensional square lattice photonic crystal composed of duck-shaped [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(12): 121602.
  刘娟,唐吉玉,陈彦,等.散射体形状为鸭式的二维 正五米子晶体带隙的研究[J] 激光与光电子尝进

正方光子晶体带隙的研究[J].激光与光电子学进展,2015,52(12):121602.

[18] Han J T, Zhang W, Wei F J, et al. Investigation of

wideband slow light in  $Ge_{20}$  Sb<sub>15</sub> Se<sub>65</sub> photonic crystal slab waveguides [J]. Chinese Journal of Lasers, 2015, 42(6): 0606002.

韩金涛,张巍,魏凤娟,等.Ge<sub>20</sub>Sb<sub>15</sub>Se<sub>65</sub>硫基光子晶 体平板波导的宽带慢光特性研究[J].中国激光, 2015,42(6):0606002.

[19] Yan Q Z, Jia D F, Fu X Y, et al. Study on slow-light properties of 2D square lattice photonic crystal waveguide [J]. Semiconductor Optoelectronics, 2016, 37(5): 610-615.
目青芝,贾东方,付晓宇,等.二维正方晶格光子晶体波导的慢光特性研究[J].半导体光电, 2016, 37(5): 610-615.