

三角形复式晶格的光子带结构研究*

金崇君 秦 柏 杨 森 秦汝虎

(哈尔滨工业大学应用物理系, 哈尔滨 150001)

摘 要 设计了一种三角形复式晶格结构的光子晶体, 在该类晶体中, 电介质圆柱在空气中的排列存在 E 偏振和 H 偏振的光子带隙重叠区, 称之为绝对光子带隙; 而空气圆孔在电介质中排列时, 虽然 E 偏振和 H 偏振均分别存在光子带隙, 但不存在绝对光子带隙。同时利用晶体的光子带结构研究了有效长波介电常数, 所得结果与静电理论吻合。

关键词 光子晶体, 光子带结构, 光子带隙, 复式晶格。

1 引 言

自从 John^[1]和 Yablonovitch^[2]分别提出了光子晶体的概念后, 已引起了人们的极大关注。所谓光子晶体就是一种电介质在另一种电介质中的周期排列, 从而形成了介电常数的周期调制。在某些光子晶体的光子带结构中存在与半导体能带结构中的能隙相似的光子带隙, 频率在光子带隙内的光子不能在光子晶体中传播, 光子晶体的这种特性具有极大的理论价值和潜在的应用前景。频率落在光子带隙内的自发辐射受到抑制^[1, 2], 它修正了原子、分子和激子系统的基本特征, 在光子带隙内可研究光子的迁移率边和 Anderson 定域化, 可用于设计零阈值的激光器^[3]; 光子晶体在通讯上^[4]、在光双稳、光开关和光限幅上^[5]均有潜在的应用前景。这些可能的应用前景激发起人们研究光子晶体的浓厚兴趣, 尤其是寻找具有宽带隙和易于制造的光子晶格结构的研究。

从文献报道结果看^[6-8], 二维光子晶体与三维光子晶体比较, 它具有以下几个特征, 1) H 偏振和 E 偏振的光子带隙通常不象三维结构的那样能重叠在一起; 2) 实验室中制造光子带隙落在红外和可见光区的三维光子晶体仍然十分困难, 但二维光子晶体的制造却比较容易; 3) 它可能应用于光学薄膜。为了获得较好的二维光子晶体, 人们希望它的 H 偏振和 E 偏振的光子带隙能相互重叠。Villeneuve 及其合作者已研究了三角形排列和方形排列的布拉菲 (Bravais) 晶格中的光子带隙的重叠情况^[6], 发现只有空气圆孔在电介质栅中的排列才存在 H 偏振和 E 偏振的光子带隙的重叠, 称之为绝对光子带隙。但要制造绝对光子带隙在可见光或红外区的光子晶体, 则要在电介质上钻与波长同量级的孔, 无论是离子束刻蚀或激光打孔, 都不可能得到很深的孔, 因此这种光子晶体在现有技术条件下很难制造, 而且一旦制得便不

* 国家自然科学基金课题。

收稿日期: 1996 年 5 月 15 日; 收到修改稿日期: 1996 年 10 月 18 日

能改变(如在其中添加圆柱和删除圆柱,进行缺陷模研究等)。为此,本文研究了三角形复式晶格的光子带结构,发现电介质圆柱在空气中按三角形复式晶格排列时存在绝对光子带隙,这种结构由于避开了繁琐的钻孔,而且容易添加圆柱和删除圆柱,进行缺陷模研究,因此具有一定的价值。

2 理 论

众所周知,电磁波在电介质中的传播服从如下的麦克斯韦(Maxwell)方程:

$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0, & \nabla \times \mathbf{H} &= \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\mu_0 \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, & \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

在二维结构中,首先考虑的是电磁波的磁场分量平行于圆柱轴的情况,也即 \mathbf{H} 偏振。此时 \mathbf{H} 和 \mathbf{E} 可写成:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = [0, 0, H_3(\mathbf{x})] \exp(-i\omega t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = [E_1(\mathbf{x}), E_2(\mathbf{x}), 0] \exp(-i\omega t) \quad (2)$$

把方程(2)代入方程(1)中,由旋度方程得: \mathbf{H} 和 \mathbf{E} 的非零分量表达式:

$$\frac{\partial E_2}{\partial x_1} - \frac{\partial E_1}{\partial x_2} = i\omega \mu \mu_0 H_3, \quad \frac{\partial H_3}{\partial x_1} = i\omega \epsilon(\mathbf{x}) \epsilon_0 E_2, \quad \frac{\partial H_3}{\partial x_2} = -i\omega \epsilon(\mathbf{x}) \epsilon_0 E_1 \quad (3)$$

由上述方程组消去 E_1 和 E_2 ,同时设二种介质的相对磁导率均为 1,可得关于 H_3 的表达式

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})} \frac{\partial H_3}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})} \frac{\partial H_3}{\partial x_2} \right] = -\frac{\omega^2}{c^2} H_3 \quad (4)$$

为了求解(4)式,把周期势 $\epsilon^{-1}(\mathbf{x})$ 展开成关于 \mathbf{G} 的傅里叶级数。其中 \mathbf{G} 是 \mathbf{x} 的倒格矢。

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x})} = \sum_{\mathbf{G}} P(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}) \quad (5)$$

同时由周期性结构可知, $H_3(\mathbf{x})$ 可以按布洛赫(Bloch)波展开,即

$$H_3(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}] \quad (6)$$

其中 \mathbf{k} 为二维波矢, $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{x}_1 + k_2 \mathbf{x}_2$ 。把(5)式和(6)式代入(4)式得:

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') P(\mathbf{G} - \mathbf{G}') A(\mathbf{k} + \mathbf{G}') = (\omega^2/c^2) A(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \quad (7)$$

(7)式使得 \mathbf{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。

对于电场方向平行于圆柱轴的 \mathbf{E} 偏振,同理可得如下的方程:

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') P(\mathbf{G} - \mathbf{G}') A(\mathbf{k} + \mathbf{G}') = (\omega^2/c^2) A(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \quad (8)$$

(8)式是求解一个非对称矩阵的本征值和本征函数问题。

本文设计的光子晶体晶格结构如图 1 所示,在三角形晶格的每一个格点上按放两个相切的圆柱,且切点在格点上,轴心沿 \mathbf{x}_2 方向。选择这种结构的原因是:因为在三角形布拉菲晶格中,电介质圆柱的周期排列不存在绝对光子带隙^[6],作者认为这是能带的简并引起的,因此降低晶格的对称性有可能使绝对光子带隙出现。通过数值试验,发现这种复式晶格的对称

性较低, 它使能带简并度降低而产生一绝对光子带隙。它的相对介电常数 $\epsilon(\mathbf{x})$ 可以表示成:

$$\epsilon(\mathbf{x}) = \epsilon_b + (\epsilon_a - \epsilon_b) \sum_l [\Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{x}(l) - R\mathbf{x}_2) + \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{x}(l) + R\mathbf{x}_2)] \quad (9)$$

式中 $\Gamma(\mathbf{x})$ 定义为 $\Gamma(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & |\mathbf{x}| < R \\ 0 & |\mathbf{x}| > R \end{cases}$, ϵ_a 和 ϵ_b 分别为圆柱(孔) 或周围基质的相对介电常数, $\mathbf{x}(l)$ 为晶格位矢, R 为圆柱(孔) 半径。

由(5) 式和(9) 式可得 $P(\mathbf{G})$:

$$P(\mathbf{G}) = \begin{cases} f/\epsilon_a - (1-f)/\epsilon_b & \mathbf{G} = 0 \\ 2(1/\epsilon_a - 1/\epsilon_b)f J_1(GR) \cos(G_y R)/(GR) & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (10)$$

式中 f 为电介质圆柱或者空气圆孔所占的体积百分数, $J_1(x)$ 为一阶贝塞尔函数, G_y 为 \mathbf{G} 的 x_2 方向分量。

在计算中, 本文截取 235 个平面波来求解(7) 式和(8) 式的本征值, 所得结果的精度大于 1%。

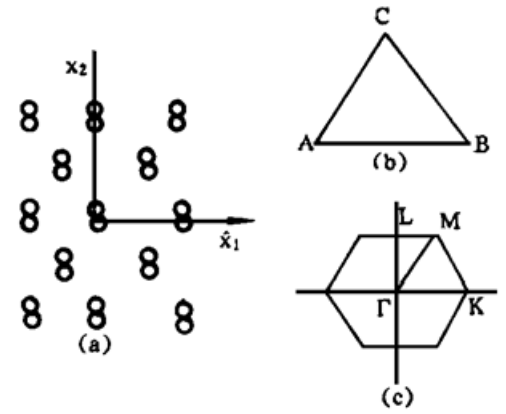


Fig. 1 (a) The structure of the triangular non-Bravais lattice; (b) The structure of the triangular lattice, the primitive translation vectors are: $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a(1/2, \sqrt{3}/2)$; (c) The first Brillouin zones of the triangular lattice

3 结果与讨论

本文研究了如图 1 所示的三角形复式晶格的光子带结构。图 2 和图 3 分别为电介质圆柱在空气基质中排列和空气圆孔的电介质栅中排列的光子带结构, 两者的圆柱所占体积百分数 f 均为 0.55, 电介质的相对介电常数 20。从图 2 看, H 偏振和 E 偏振的光子带结构是不同的, H 偏振在第一光子带和第二光子带以及第三光子带和第四光子带之间均出现了带隙; 而 E 偏振在第六和第七光子带间出现一个带隙, 而且带隙的宽度特别窄; 同时, H 偏振的第二带隙和 E 偏振的第一带隙相互重叠而出现绝对光子带隙, 其宽度为其中心频率的 7.6%。图 3 是空气在电介质栅中排列的光子带结构, 在 H 偏振下, 第一和第二光子带之间出现一个带隙, 而更高光子带间没有出现带隙; 对于 E 偏振, 在第一和第二光子带、第三和第四光子带以及第六和第七光子带间均出现了带隙, 但是 E 偏振和 H 偏振两者之间没有重叠的光子带

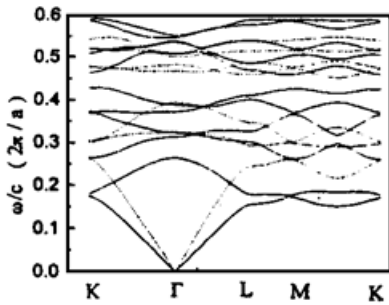


Fig. 2 Photonic band structure of a triangular non-Bravais lattice constructed from dielectric rods in air background, $\epsilon_a = 20$, $\epsilon_b = 1$, $f = 0.55$, solid line denotes E polarization, dashed line denotes H polarization

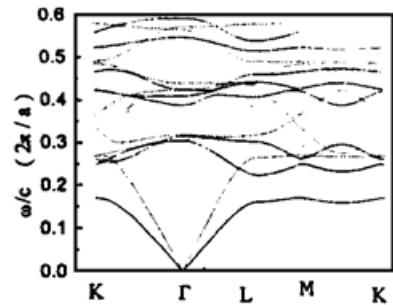


Fig. 3 Photonic band structure of a triangular non-Bravais lattice constructed from air holes in a dielectric matrix. $\epsilon_a = 1$, $\epsilon_b = 20$, $f = 0.55$, solid line denotes E polarization, dashed line denotes H polarization

隙。对于不同的电介质相对介电常数和圆柱体积百分数 f 下的这两种晶体的光子带结构的计算表明: 当 $f = 0.55$ 时, 电介质圆柱在空气中的排列, 只要电介质的相对介电常数大于 15 时, 就存在绝对光子带隙, 而且在 $f = 0.55$ 时, 出现的绝对光子带隙较大; 而空气圆孔在电介质栅中的排列, 在不同的体积分数下, 无论电介质的相对介电常数多大, 都不存在绝对光子带隙。近来, 许多研究者都力图把是否出现光子带隙和电介质的相互联结的周期排列($\epsilon_a < \epsilon_b$, B 型结构) 和非相互联结的周期排列($\epsilon_a > \epsilon_b$, A 型结构) 联系起来^[6-8]。本文所设计的三角形复式晶格只在 A 型结构中才可能出现绝对光子带隙, 而三角形和方形布拉菲晶格只在 B 型结构中才可能出现绝对光子带隙^[6]。故此, 要确定一类晶体是否存在绝对光子带隙, 不仅与 A 型或 B 型结构有关, 而且同所选择的晶格结构以及对称性程度有关。

根据光子带结构可以确定光子晶体的有效长波介电常数 ϵ_{eff} , 定义:

$$\epsilon_{\text{eff}} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{c^2}{(d\omega/dk)^2}$$

取 $k = (2\pi/a)(0.005, 0.0)$, 对最低的一个能带进行计算, 所得结果如图 4(a) 和图 4(b) 的虚线所示。为验证其正确性, 根据静电理论^[9]得到沿轴向的有效介电常数为: $\epsilon_{ax} = f\epsilon_a + (1-f)\epsilon_b$, 沿径向的有效介电常数 ϵ_{ra} 为: $\epsilon_{ra} = [e_b(\epsilon_a + \epsilon_b) - f\epsilon_b(\epsilon_b - \epsilon_a)] / [(\epsilon_a + \epsilon_b) - f(\epsilon_a - \epsilon_b)]$, 分别如图 4 中的实线所示。从图 4 看, 由 E 偏振所得的结果与轴向的有效介电常数符合, 这是因为 E 偏振波的电场是沿轴向的, 因此所得的值是表示轴向的有效介电常数; 反之, 由 H 偏振所得的值应和径向的有效介电常数吻合, 但从图中看, 当 f 较小时, 两者基本吻合, 但 f 较大时, 偏差较大: 同时本文对不同的波矢方向进行了计算, 结果表明波矢 k 的方向不同时, 由 H 偏振所得的 ϵ_{eff} 值是不同的, 作者认为这是由于周期排列的各向异性导致的。

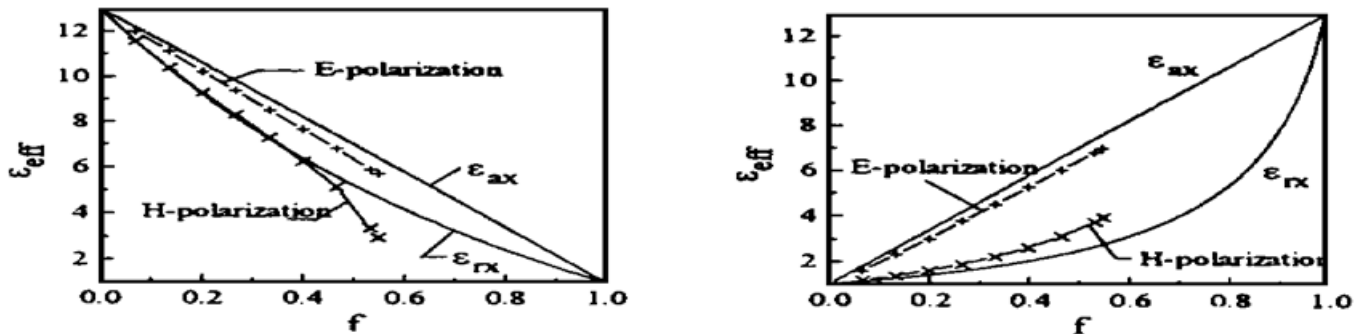


Fig. 4 The relationship of effective long-wavelength dielectric constants ϵ_{eff} with volume fraction of cylinders. The solid curves denote the results calculated through electrostatic theory. The dashed curves denote the results calculated by photonic band gap. (a) Air cylinders in dielectric matrix with $\epsilon_b = 13$, (b) Dielectric cylinders with $\epsilon_a = 13$ in air background

结 论 本文设计了一种三角形复式晶格结构的光子晶体, 在这类晶体中, 电介质圆柱在空气中排列存在着 E 偏振和 H 偏振所共有的绝对光子带隙, 为制造在红外区具有绝对光子带隙的二维光子晶体提出了一个较为容易实现的结构。并且研究了这种光子晶体的有效长波介电常数, 所得结果和静电理论相一致。

参 考 文 献

- [1] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23) : 2486~ 2489
- [2] E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20) : 2059~ 2062
- [3] E. Yablonovitch, J. Gmitter, Photonic band structure: The face-centered-cubic case. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **63**(18) : 1950~ 1953
E. Yablonovitch, Photonic Band Structure, Edited by C. M. Soukios, *Photonic Band Gap and Localization*, New York, Plenum Press, 1993 : 207~ 233
- [4] Y. Yamamoto, S. Mchida, W. H. Richardson, Photon number squeezed states in semiconductor lasers. *Science*, 1992, **255**(5049) : 1219~ 1224
- [5] Michael Scalora, Jonathan P. Dowling. Charles, M. Bowden *et al.*, Optical limiting and switching of ultrashort pulses in nonlinear photonic band gap materials. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **73**(10) : 1368~ 1371
- [6] Pierre R. Villeneuve, Michel Piché, Photonic Band Gaps in Two-Dimensional Square and Triangular Lattices, Edited by C. M. Soukoulis, *Photonic Band Gaps and Localization*, New York, Plenum Press, 1993 : 283~ 288
- [7] H. Sami. Sozumer, Joseph W. Haus, Photonic bands: simple-cubic lattices. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1993, **10**(2) : 296~ 302
- [8] K. M. Leung, Y. F. Liu, Full vector wave calculation of photonic band structures in face-centered-cubic dielectric media. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(21) : 2646~ 2649
- [9] Craig F. Bohren, Donald R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. New York, John Wiley & Sons, 1983

Two Dimensional Photonic Band Structure: Triangular Non-Bravais Lattice

Jin Chongjun Qin Bai Yang Miao Qin Ruhu

(Applied Physics Department, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001)

(Received 15 May 1996; revised 18 October 1996)

Abstract A triangular non-Bravais lattice was designed in this paper, the crystal constructed from dielectric rods in air background can generate a common band gap for both orthogonal polarizations E and H that is called absolute photonic band gap, but the crystal constructed from air circular holes in dielectric matrix can not generate an absolute photonic band gap. The effective long-wavelength dielectric constant of this crystal has been calculated using photonic band structure, simultaneously, the results agree with electrostatic theory well.

Key words photonic crystal, photonic band structure, photonic band gap, non-Bravais lattice.