

文章编号: 0253-2239(2003)09-1025-5

高频区具有大带隙的二维像素型光子晶体结构*

冯尚申^{1,2} 沈林放¹ 何赛灵¹ 肖三水¹

(1 浙江大学现代光学仪器国家重点实验室光及电磁波研究中心, 杭州 310027)
(2 浙江台州学院物理系, 浙江省临海 317000)

摘要: 针对方块像素组成的二维光子晶体,传统平面波展开法可经修正使之收敛速度大大提高。采用快速算法,在高频区域找到了一种具有稳定的较大绝对禁带宽度的 GaAs 光子晶体结构,绝对禁带宽度为 $0.0995\omega_c$ ($\omega_c = 2\pi c/a$, a 为晶格常量, c 为光速),中心频率为 $1.2625\omega_c$ 。

关键词: 光子晶体; 像素型; 快速平面波展开法; GaAs; 绝对禁带

中图分类号: O488 文献标识码: A

1 引 言

光子晶体是由不同介电材料周期排列构成的人工晶体,它的主要特征之一是光子禁带(在该频率区域光子晶体将禁止任何光或电磁波的传播)的存在。无疑,有完全禁带的三维光子晶体最具有应用潜力,然而,目前的实验技术要在可见光或近红外波段制作这样的精细结构,还是困难重重^[1~3]。相比较而言,二维光子晶体存在着众多的应用,又相对比较容易制造,已有不少在红外波段的二维光子晶体的应用实例^[4,5]。所以研究二维光子晶体仍有很大的实用价值。

一般来说,光子晶体的绝对禁带越大,其性能越稳定,就越有应用价值。所以探索更大绝对禁带的光子晶体结构仍是该领域的研究方向之一。目前,人们已提出多种二维光子晶体结构^[6~14],通过结构参量优化以求最大绝对禁带,提出的大多数结构是高介电背景材料圆气孔的周期排列。根据二维光子晶体禁带存在的经验法则,E 偏振波禁带的存在要求高介电材料在结构中分布较集中,而 H 偏振波禁带的存在则要求高介电材料呈网带连通^[15,16],而绝对禁带是 E 偏振禁带和 H 偏振禁带的重叠区域。然而,上述经验法则适用于低频区域的禁带特征,我们认为,在能带结构的高频区,由于电磁场剖面分布的短波长成分变得重要,H 偏振波的电磁能量也容

易集中在离散结构的高介电材料内,因此高介电材料的离散结构有望在高带处产生较大的绝对禁带。

基于上述思想,我们在 GaAs 介质柱正方晶格结构^[6]的基础上,有规则地插入一些小的正方介质柱, GaAs 的相对介电常量为 $\epsilon=11.4$,如图 1(a)所示。进行光子晶体的理论分析面临着大量的数值计算,而寻求精确快捷的计算方法一直是光子晶体理论研究内容之一。图 1(b)的结构可看成是由很多个同样大小的小矩形或正方介质像素(pixel)组成的,对这种像素

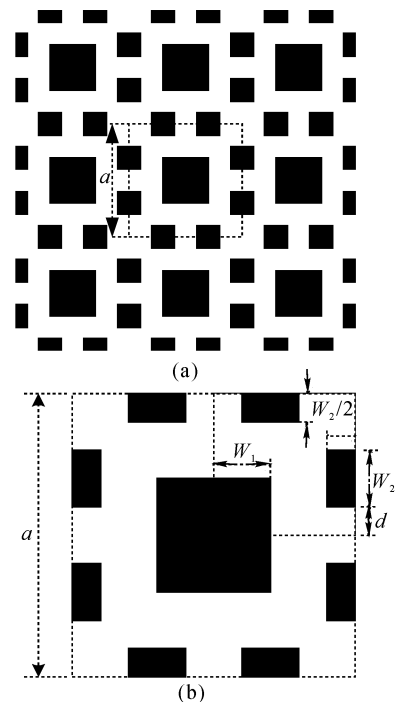


Fig. 1 (a) The structure of photonic crystal. The unit cell of the structure is indicated by the dashed lines; (b) Parameter of the unit cell

* 国家自然科学基金(90101024)、浙江省自然科学基金(ZD0002)重点资助课题。

E-mail: fss@tzc.edu.cn

收稿日期:2002-07-12; 收到修改稿日期:2002-09-23

型结构,传统平面波展开法可经修正使之收敛速度大大提高。采用快速算法,本文在高频区域找到了一种具有稳定的较大绝对禁带宽度的 GaAs 光子晶体结构,绝对禁带宽度为 $0.0995\omega_c$ ($\omega_c=2\pi c/a$, a 为晶格常量),中心频率为 $1.2625\omega_c$ 。

2 快速平面波展开法

已有的研究表明,二维光子晶体的 E 偏振波能带可以用 Ho 等人^[15]的平面波展开法进行快速精确地计算,但对 H 偏振波,已有的平面波展开法却收敛很慢,既耗时精度又低。然而,对于本文考虑的光子晶体结构,其介质界面相互垂直^[16],可以为 H 偏振波建立相应的快速平面波展开算法。

设想正方周期结构二维光子晶体,周期单元——正方形内的介质界面都平行于两个矢基之一的方向。对该结构的周期单元选取适当的坐标系,使周期单元的中心在坐标系原点,单元的基矢为 ax 和 by 。假设周期单元内介质的分布具有如下基本对称性:对 x 轴、 y 轴有反射对称。这样,用第一象限的 $1/4$ 周期单元介质分布即可描述整个结构。

我们对周期单元作 $(2I) \times (2J)$ 分割,这样每个小矩形或正方形内仅包含一种介质,即 ϵ_a 或 ϵ_b 。H 偏振波满足如下麦克斯韦方程形式:

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z, \quad (1)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x, \quad (2)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega\epsilon_0 \epsilon E_y. \quad (3)$$

应用布洛赫定理,对场分量作平面波展开:

$$\begin{aligned} E_x &= \sum_{m,n} U_{m,n}^{(1)} \times \\ &\exp\left[i\frac{2\pi}{a}(mx + ny)\right] \exp[ik_x x + k_y y], \\ E_y &= \sum_{m,n} U_{m,n}^{(2)} \times \\ &\exp\left[i\frac{2\pi}{a}(mx + ny)\right] \exp[ik_x x + k_y y], \\ H_z &= \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{m,n} V_{m,n} \times \\ &\exp\left[i\frac{2\pi}{a}(mx + ny)\right] \exp[ik_x x + k_y y], \end{aligned}$$

这里 $\mathbf{k} = k_x \mathbf{x} + k_y \mathbf{y}$ 为布里渊区内的波矢。把上述表达式代入方程(1),很容易得到该方程在傅里叶空间的对应形式:

$$\left(\frac{2m\pi}{a} + k_x\right) U_{m,n}^{(2)} - \left(\frac{2n\pi}{a} + k_y\right) U_{m,n}^{(1)} = \frac{\omega}{c} V_{m,n}. \quad (4)$$

要获得方程(2)和(3)在傅里叶空间的正确形式,必须要正确地表示 $\epsilon E_x \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ 和 $\epsilon E_y \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ 的傅里叶系数。为书写方便,本文引入 $e_x = E_x \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, $e_y = E_y \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, 则 e_x 和 e_y 都是周期函数,后两个的傅里叶系数即为 $U_{m,n}^{(1)}$ 和 $U_{m,n}^{(2)}$ 。

先考虑 ϵe_x 的傅里叶变换。可以看出, ϵe_x 随 x 变量连续分布,而 e_y 随 y 变量连续分布。第一步对 ϵe_x 在 x 方向作傅里叶变换,并应用逆法则^[17],得到

$$(\epsilon e_x)_m = \sum_{m'} \|\alpha\|_{m,m'}^{-1} e_m^{(1)}(y), \quad (5)$$

这里 $(\epsilon e_x)_m$ 和 $e_m^{(1)}$ 表示函数 ϵe_x 和 e_x 对变量 x 的傅里叶系数;上标“ -1 ”表示对矩阵求逆,矩阵 $\|\alpha\|$ 定义为

$$\|\alpha\|_{m,m'} = \alpha_{m,m'}(y)$$

而

$$\begin{aligned} \alpha_m &= \frac{1}{a} \int_{-2/a}^{2/a} \frac{1}{\epsilon} \exp\left(-i\frac{2\pi}{a}mx\right) dx = \\ &\frac{2}{a} \sum_{i=1}^J \frac{1}{\epsilon_{i,j}} \omega_x^i \cos\left(\frac{2\pi}{a}mx_c^i\right) \frac{\sin(\pi m \omega_x^i/a)}{\pi m \omega_x^i/a} \\ &(y_c^i - \omega_y^i/2 \leq y \leq y_c^i + \omega_y^i/2, j = 1, 2, \dots, J) \end{aligned}$$

其中 ω_x^i 为(第一象限) $1/4$ 周期单元内沿 x 方向第 i 块分割小矩形的宽度, x_c^i 为小矩形中心点的 x 坐标; ω_y^i 和 y_c^i 的定义与 ω_x^i 和 x_c^i 的定义相似。

可以看出,每个 $\alpha_m(y)$ 的分布实际上可以用 J 维向量 $\{\alpha_m^j\}$ 来表示, $\|\alpha\|$ 对变量 y 的依赖性相应也可用系列矩阵 $\|\alpha^j\|$ ($j = 1, 2, \dots, J$) 来描述。

由 e_x 在 y 方向分布的连续性,可推断 $e_m^{(1)}(y)$ 随 y 连续。对方程(5)作 y 方向的傅里叶变换,并应用劳朗(Laurent)法则^[16],得到

$$(\epsilon e_x)_{m,n} = \sum_{m',n'} r_{m,m',n,n'}^{(1)} U_{m',n'}^{(1)}, \quad (6)$$

这里

$$\begin{aligned} r_{m,m',n,n'}^{(1)} &= \frac{1}{a} \int_{-2/a}^{2/a} \|\alpha\|_{m,m'}^{-1} \exp\left[-i\left(\frac{2\pi}{a}ny\right)\right] dy = \\ &\frac{2}{a} \sum_{j=1}^J \|\alpha^j\|_{m,m'}^{-1} \omega_y^j \cos\left(\frac{2\pi}{a}ny_c^j\right) \frac{\sin(\pi n \omega_y^j/a)}{\pi n \omega_y^j/a}, \end{aligned}$$

上面通过正确处理积分函数的傅里叶变换,得到了 (ϵe_x) 的正确傅里叶系数。根据 ϵ 和 e_y 的性质,可以类似地得到如下结果:

$$(\epsilon e_y)_{m,n} = \sum_{m',n'} r_{m,m',n,n'}^{(2)} U_{m',n'}^{(2)}, \quad (7)$$

其中

$$r_{m,n,n'}^{(2)} = \frac{2}{a} \sum_{i=1}^l \|\beta^i\|_{n,n'}^{-1} \omega_x^i \cos\left(\frac{2\pi}{a} m x_c^i\right) \frac{\sin(\pi m \omega_x^i/a)}{\pi m \omega_x^i/a},$$

$$\|\beta^i\|_{n,n'} = \beta_{n-n'}^i,$$

$$\beta_n^i = \frac{2}{a} \sum_{j=1}^J \epsilon_{ij} \omega_y^j \cos\left(\frac{2\pi}{a} y_c^j\right) \frac{\sin(\pi m \omega_y^j/a)}{\pi m \omega_y^j/a}$$

将方程(6)和(7)分别代入方程(2)和(3),可得

$$\sum_{m',n'} \left\{ \left(\frac{2m\pi}{a} + k_x\right) \|r^{(2)}\|_{l,l'}^{-1} \left(\frac{2m'\pi}{a} + k_x\right) + \left(\frac{2n\pi}{a} + k_y\right) \|r^{(1)}\|_{l,l'}^{-1} \left(\frac{2n'\pi}{a} + k_y\right) \right\} U_{m',n'} = \frac{\omega^2}{c^2} U_{m,n}, \quad (10)$$

$$l = (n + N)(2N + 1) + m + N + 1, \quad l' = (n' + N)(2N + 1) + m' + N + 1$$

这里 $m, m', n, n' \in [-N, N]$, 对应的平面波数目取为 $(2N + 1)^2$; 而矩阵

$$\|r^{(1)}\|_{l,l'} = r_{m,m',n,n'}^{(1)}, \quad \|r^{(2)}\|_{l,l'} = r_{m-m',n,n'}^{(2)},$$

用类似方法可以求得 E 偏振波的本征值方程为

$$\sum_{m',n'} \left[\left(\frac{2m'\pi}{a} + k_x\right)^2 + \left(\frac{2n'\pi}{a} + k_y\right)^2 \right] \|\epsilon\|_{l,l'}^{-1} U_{m',n'} = \frac{\omega^2}{c^2} U_{m',n'}, \quad (11)$$

这里 $\|\epsilon\|_{l,l'}^{-1}$ 为函数 ϵ 的 Teoplitz 矩阵, l 和 l' 的定义与前面相同。

3 数值结果与讨论

本文选取最常见的半导体材料 GaAs 作为研究对象(这类半导体材料有成熟的刻蚀工艺),在空气中排成正方周期的光子晶体结构如图 1(a)所示,晶格常量为 a ,各介质的坐标与宽度参量见图 1(b)。从图 1(a)与图 1(b)中,可以看出,需要设计的参量是 w_1, w_2 和 d ,很明显,这样的结构可以看成是由许多个小正方或小矩形像素组成的。因此,可采用本征方程(10)和(11)分别来计算 H 偏振和 E 偏振的本征频率。经反复计算发现,当平面波数目大于 361 个时,归一化频率在 $[0, 2]$ 区间内,计算结果的相对误差都小于 1%。通过与其它平面波方法的比较与验证,发现经修正后的平面波展开法的计算时间与收敛速度都比传统的平面波方法或 Ho 的方法要快许多倍。通过全局参量搜索优化,发现,当 $w_1 = 0.242a, w_2 = 0.203a, d = 0.124a$ 时,该结构具有最大的绝对禁带,禁带宽度为 $0.0995\omega_c$,绝对禁带的中心频率为 $1.2625\omega_c$ 。图 2 给出了该参量结构的能带分布,在能带结构图中,虚线对应 E 偏振波的能带结构,实线对应 H 偏振波的能带结构。图 3(a)、图 3(b)分别为光子晶体绝对禁带二维等高图,它们是改变 w_1, w_2, d 三个参量中的两个参量得到的,如果用 $(w_1, w_2, d; \Delta\omega)$ 表示绝对禁带宽度峰值的位置

到

$$\left(\frac{2n\pi}{a} + k_y\right) V_{m,n} = -\frac{\omega}{c} \sum_{m',n'} r_{m,m',n-n'}^{(1)} U_{m',n'}^{(1)}, \quad (8)$$

$$\left(\frac{2m\pi}{a} + k_x\right) V_{m,n} = \frac{\omega}{c} \sum_{m',n'} r_{m-m',n,n'}^{(2)} U_{m',n'}^{(2)}, \quad (9)$$

从方程(4)、(8)和(9),可推出 H 偏振波的正确本征方程形式:

和峰值,则从图 3(a)中可以看出,存在两个峰,坐标分别为 $(0.216a, 0.203a, 0.124a; 0.0811\omega_c)$ 和 $(0.242a, 0.203a, 0.124a; 0.0995\omega_c)$;若固定 $w_2 = 0.203a, d = 0.124a$,则 w_1 在 $0.199a$ 到 $0.222a$ 与 $0.234a$ 到 $0.254a$ 改变时,绝对禁带宽度均在 $0.06\omega_c$ 以上;若固定 $w_2 = 0.203a, w_1 = 0.242a$,则 d 在 $0.1a$ 到 $0.154a$ 改变时,绝对禁带宽度均在 $0.06\omega_c$ 以上。图 3(b)是固定 $w_1 = 0.242a$,改变 w_2, d 的结果,由图可见,绝对禁带宽度对 d 不是很敏感。表明这个光子晶体结构的禁带结构是较稳定的。

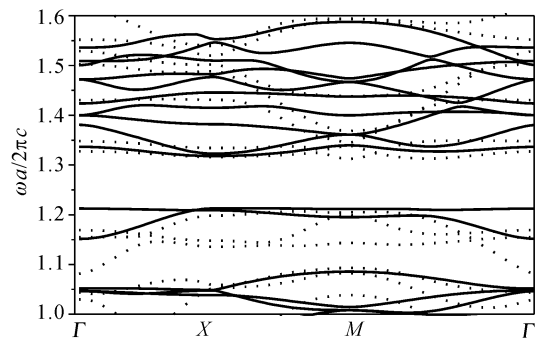


Fig. 2 Band structure of the photonic crystal. The dash lines correspond E polarizations, the solid lines correspond H polarizations

总之,像素型的光子晶体可以构成大禁带的光子晶体,而对这一类结构的光子晶体,本文采用了一种改进的快速平面波展开法(该方法只适用于像素型的光子晶体),获得了在高频区域上具有稳定较大绝对禁带的二维光子晶体结构,绝对禁带宽度为

$0.0995\omega_c$, 中心频率 ω_c 为 $1.2625\omega_c$, 相对禁带宽度为 $\Delta\omega/\omega_c \approx 0.08$ (该量与 a 无关)。众所周知, 对于一定的工作波长 (例如在光通信应用中波长为 $1.55 \mu\text{m}$), 如果归一化中心频率 ($\omega a/2\pi c$) 越高, 对应的光子晶体晶格常量将变大, 这有利于实验制造。然而, 当晶格常量 a 增大时, $\omega_c = 2\pi c/a$ 减少, 绝对禁带宽度将有所降低, 此时, 可能要求激光器有更好

的波长稳定性, 即波长的漂移范围小。需要表明的是, 对一定的归一化中心频率, a 的增大使对应的禁带中心绝对频率也变低, 结果禁带宽度相对禁带中心频率的百分比保持不变。在很多的情况下涉及的是禁带宽度相对中心频率的百分比, a 的选取需要根据具体的要求来设计。因此, 本文得到的光子晶体结构具有实际的应用价值。

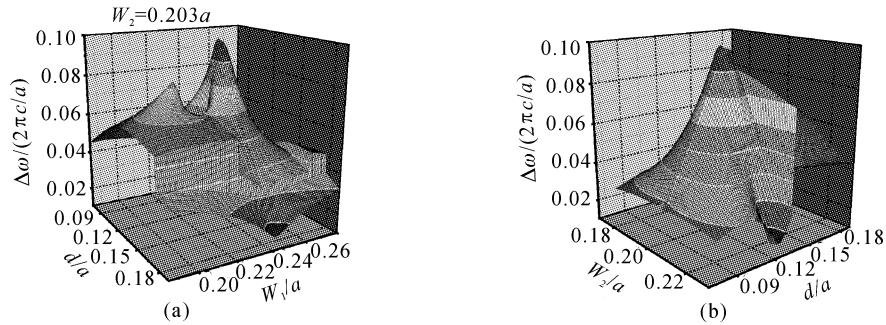


Fig. 3 A complete band gap versus w_1 or w_2 and d . (a) Fixed $w_2 = 0.203a$; (b) Fixed $w_1 = 0.242a$

参 考 文 献

- 1 Wen W. J., Wang N., Ma H. R. *et al.*. Field induced structural transition in miscocrystallites. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **82**(21):4248~4251
- 2 Zhang W. Y., Lei X. Y., Wang Z. L. *et al.*. Robust photonic band gap from tunable scatterers. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**(13):2853~2856
- 3 Li Z. Y., Zhang Z. Q. Fragility of photonic band gaps inverse-opal photonic crystals. *Phys. Rev. (B)*, 2000, **62**(3):1516~1519
- 4 Happ T. D., Markard A., Kamp M. *et al.*. InP-base short cavity lasers with 2D photonic crystal mirror. *Electron. Lett.*, 2001, **37**(7):428~430
- 5 Song Junfeng, Chang Yuchun, Wang Huisong *et al.*. Transmission characteristic of photonic crystal waveguide. *Chin. J. Lasers* (中国激光), 2002, **A29**(8):711~713 (in Chinese)
- 6 Kee C. S., Kim J. E., Park H. Y. Absolute photonic band gap in a two-dimensional chessboard lattice. *Phys. Rev. (E)*, 1997, **56**(6):R6291~R6293
- 7 Qiu M., He S. L. Large complete band gap in two-dimension photonic crystals with elliptic air holes. *Phys. Rev. (B)*, 1999, **60**(15):10610~10612
- 8 Anderson C. M., Giaps K. P. Larger two-dimensional photonic band gaps. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**(14):2949~2952
- 9 Zhang X. D., Zhang Z. Q. Creating a gap without symmetry breaking in two-dimensional photonic crystals. *Phys. Rev. (B)*, 2000, **61**(15):9847~9850
- 10 Qiu M., He S. L. Optimal design of a two-dimensional

- 11 Agio M., Andreani L. C. Complete photonic band gap in a two-dimensional chessboard lattice. *Phys. Rev. (B)*, 2000, **61**(23):15519~15522
- 12 Jin Chongjun, Qin Bai, Qin Ruhu. Photonic band structure of simple cubic dattce in chiral medium-plane wave method. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 1998, **18**(1):118~123 (in Chinese)
- 13 Xiao Sanshui, Shen Linfong, He Sailing. Large complete band gap at low and high frequencies in a two-dimensional anisotropic photonic crystal. *Acta Physica Sinica* (物理学报), 2002, **51**(12):2858~2864 (in Chinese)
- 14 Ouyang Zhengbiao, Zhu Jun, Li Jinzhen. Photonic bandgaps in photonic crystals with tapered periods at both ends. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2002, **22**(5):612~615 (in Chinese)
- 15 Ho K. M., Chan C. T., Soukoulis C. M. Existence of a photonic based on effective medium theory for analyzing photonic crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(25):3152~3155
- 16 Lalanne P. Effective properties and band structure of lamellar subwavelength crystals; plane-wave method revisited. *Phys. Rev. (B)*, 1998, **58**(20):9801~9807
- 17 Shen L. F., He S. L. A plane-wave expansion method based on effective medium theory for analyzing photonic crystals. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 2002, **19**(5):1021~1024

A Two-Dimensional Pixel-Type of Photonic Crystal Structure with a Large Complete Band Gap at High Frequency

Feng Shangshen^{1,2} Shen Lingfang¹ He Sailing¹ Xiao Sanshui¹

1 State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Center for Optical and Electromagnetic Research, Zhejiang University, Hangzhou 310027
2 Department of Physics, Taizhou College, Linhai, Zhejiang Province, 317000

(Received 12 July 2002; revised 23 September 2002)

Abstract: A revised plane-wave expansion method for quickly calculating the band structure of photonic crystals of pixel type is used to design a photonic crystal of square lattice with a large absolute band gap at high frequency. The optimal GaAs photonic crystal structure has a large absolute band gap of $\Delta\omega = 0.0995\omega_e$ (where $\omega_e = 2\pi c/a$, a is the lattice constant, c is light velocity) with a mid-gap frequency of $1.2625\omega_e$.

Key words: photonic crystal; pixel; modified plane-wave expansion method; GaAs; absolute band gap