

文章编号: 0253-2239(2006)01-0126-5

类蜂窝状结构完全带隙二维光子晶体*

林旭彬 陈钰杰 李宝军

(中山大学光电材料与技术国家重点实验室, 广州 510275)

摘要: 通过在二维三角晶格中引入两个完全一样的介质圆柱构成了类蜂窝状结构光子晶体, 并对其光子能带进行了频域计算。借助数值方法分析了介质柱位置改变对光子能带的影响, 计算结果表明, 这种类蜂窝状结构二维光子晶体可以产生很宽的带隙, 而且在一定填充率下, 可以通过调整介质柱的位置使完全光子带隙达到最大化。

关键词: 光电子学; 光子晶体; 完全带隙; 频域方法; 蜂窝状结构; 三角晶格

中图分类号: O488 文献标识码: A

Photonic Crystal with Absolute Band Gap in a Two-Dimensional Quasi-Honeycomb Structure

Lin Xubin Chen Yujie Li Baojun

(State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275)

Abstract: A type of two-dimensional photonic crystals with a quasi-honeycomb structure, which is formed by introducing two consistent dielectric cylinders into a triangular lattice, is investigated here. The relationship of its band gaps with the position of cylinders is numerically calculated and the photonic energy band is evaluated by the frequency domain method. The calculated results demonstrate the existence of large band gaps in quasi-honeycomb-structured two-dimensional photonic crystal. At a certain filling ratio, the largest absolute bandgap can be obtained by optimizing the position of the cylinders introduced.

Key words: optoelectronics; photonic crystal; absolute band gap; frequency domain method; honeycomb structure; triangular lattice

1 引 言

近年来,人们对周期介质结构研究产生了浓厚兴趣,这种周期介质结构材料称为光子晶体,它的一个重要特征是具有光子带隙。光子带隙概念是类比了描述电子波在自然晶体中传播的结果得到的,利用这种带隙材料可以限制某一频率范围内电磁波的传播^[1,2]。当电磁波的频率落在光子带隙中,电磁波在光子晶体中的传播就被禁止。光子带隙的存在非常鼓舞人心,近年来在感兴趣的波段中寻找光子带隙结构的研究越来越热^[3~6],这是因为可以通过利用光子带隙来控制光子的自发辐射,在低阈值、低噪声半导体激光器的研制方面有潜在的应用价值。

研究表明,只有三维光子晶体才能在各个方向限制光的传播,但三维光子晶体的制备非常困难^[7]。进一步研究表明,降低晶格的对称性可以增大带隙的频率^[8,9],而且还易于用成熟的微细加工技术制备出低对称的光子晶体。目前,在红外频段获得光子带隙的方法是在二维晶格上制备由平行介质柱组成的二维光子晶体,而二维光子晶体产生的带隙就可以抑制电磁波在晶格平面上传播。众所周知,根据电场或者磁场平行于介质柱的轴向可将电磁波在二维平面内的传播分成 E 偏振(电场在二维平面内)和 H 偏振(磁场在二维平面内)两种偏振模式。只有当两种偏振模式存在的光子带隙有重叠时才能产

* 国家自然科学基金重大研究计划(90401008)、新世纪优秀人才支持计划、教育部科学技术研究重点项目(104144)、高等学校博士学科点专项科研基金(20040558009)和广州市科技计划项目——纳米专项(2004Z3-D2051)资助课题。

作者简介: 林旭彬(1981~),男,广东人,硕士研究生,主要从事二维光子晶体波导器件的研究。

E-mail: linxubin_zsu@126.com

收稿日期: 2005-04-15; 收到修改稿日期: 2005-06-13

生完全带隙,从而禁止任意偏振光在二维平面内的传播。在目前研究的二维周期结构中,三角晶格结构光子晶体备受瞩目。研究发现,当空气的填充系数较大时,空气柱在介质中的三角晶格结构光子晶体存在一个比较大的完全带隙^[10~12]。但是,为了最大化完全带隙,柱的直径必须与晶格常量的大小相当,其严格要求使得对介质柱的刻蚀要求非常苛刻,这增加了微细加工技术的难度。为了解决该问题,Padjen 等^[13]通过改变介质柱的形状对光子带隙进行了研究,发现圆形横截面的介质柱能够获得较大的完全带隙,而且容易从实验上实现。另外,通过改变六角晶胞中介质柱的分布,例如在原胞中引入两个横截面都为圆形的介质柱,可在未改变六角形布拉维格子的情况下改变光子晶体的特性。Cassagne 等^[14]发现在六角晶胞中通过引入两个介质柱形成的蜂窝状结构存在较大的完全带隙,进一步研究表明,如果两个介质柱的半径不同也可以产生各种完全带隙^[15]。

本文提出方案是在维持六角布拉维格子不变的情况下,在六角晶胞中引入两个完全一样的介质柱,且这两个介质柱是相同介质、互相平行的无限长圆柱,其背景是不同介电常量的介质。通过改变两个介质柱在三角晶格中的位置,观察其对光子带隙的影响,结果表明,这种结构可以产生不依赖于偏振方向的完全光子带隙,而且在填充系数不大的情况下仍存在完全光子带隙,从而可避免刻蚀很薄的半导体层,降低微细加工的难度。同时,改变晶胞中介质柱的位置,可以改变带隙的宽度,从而得到最大化完全光子带隙。

2 模型和方法

在没有自由电荷和自由电流的介质中,麦克斯韦方程可以写成

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

其中 $\epsilon(\mathbf{r})$ 为介电常量的空间分布, $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 为磁场强度, ω 为频率, c 为光速。

(1) 式可以看成是一个在无限区域求解哈密顿本征值的问题,一般产生连续的本征频率 ω 。从(1)式可以知道,介电常量在空间的分布决定着本征频率的值。如果 $\epsilon(\mathbf{r})$ 是周期性结构,根据布洛赫定理,本征函数将满足下面的形式:

$$\mathbf{H} = \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \mathbf{H}_k, \quad (2)$$

其中 k 为布洛赫波矢, H_k 为周期势场(可以在晶胞中得到完全解)。把(2)式代入(1)式中,得

$$(\nabla + i\mathbf{k}) \times \frac{1}{\epsilon} (\nabla + i\mathbf{k}) \times H_k = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H_k. \quad (3)$$

因为 H_k 是周期性的,所以实际上是限制在晶体中一个晶胞的有限区域内求解厄米本征值的问题,而无需在整个晶体中求解。在一个有限的空间中,哈密顿方程将会产生一系列分立的本征值。这样,对于 H_k 参量中每一个参量 k ,将对应着无穷多个分立的本征频率 $\omega: \omega_n(k)$ (其中 $n = 1, 2, 3, \dots$)。当分立的本征频率表示成波矢 k 的函数进行画图时,这些频率带将构成晶体的“能带”结构。本文采用文献[17]提出的频域方法对晶体中的光子能带进行计算。

选择如图 1 所示存在较大完全带隙的三角晶胞,根据选择的坐标轴,晶胞的基矢可表示为

$$\tau_1 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \tau_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad (4)$$

其中 a 为晶格常量。在晶胞中,引入两个完全一样的无限长介质圆柱,假设这两个介质柱的位置分别为 $u_1 = -u_2 = u(d, \theta)$ 并由参量 d 和 θ 决定,其中 d 为两个介质柱之间的距离, θ 为两个介质柱连线与基矢 τ_1 之间夹角。我们取 $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$, $d \geq 0$ 且使得 u 在 τ_1 上的投影 $u_{\tau_1} \leq a/4$, 由于晶格和介质柱分布的对称性,这样就可以取尽了介质柱所在位置的所有可能,从而避免重复计算。考虑两种特殊情况,当 $d = \sqrt{3}a/3$ 且 $\theta = 30^\circ$ 时,它们将构成正六角二维排列结构,也就是前面提到的蜂窝状结构;当 $d = 0$ 时,两个介质柱完全重叠在一起,则构成三角结构。除了上面两种特殊情况以外结构,我们称之为类蜂窝状结构。从 d 的取值范围还可以知道,本文甚至考虑了两个介质柱有重叠部分的情况,而且结果表明

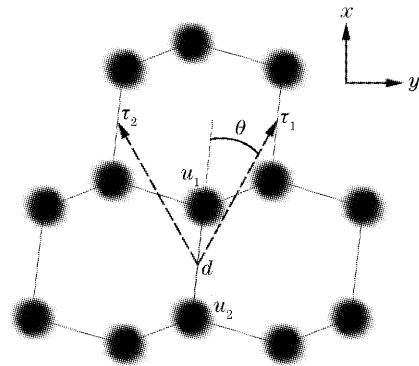


图 1 类蜂窝状二维光子晶体结构
Fig. 1 Two-dimensional quasi-honeycomb photonic crystal structure

这样的结构也同样存在大的完全带隙。

3 光子能带图

影响光子带隙的因素不仅有填充系数 β , 而且还跟介质柱的位置 $u(d, \theta)$ 有关。给定填充系数 β , 可研究光子能带图与位置的关系。我们假设两个介质柱的半径均为 r , 且填充了相同介电常量的材料, 对不同填充系数下介质柱位置 $u(d, \theta)$ 对光子能带的影响进行了研究, 这里只是给出一些重要的结果。为了与文献[13, 14]的结果比较, 选取填充系数 β 的最大值为 60%, 即介质柱的半径 $r \leq \sqrt{3}a/6$ 。考虑在背景介质为 GaAs ($\epsilon_b = 13.6$) 中填充空气柱 ($\epsilon_a = 1$) 和在背景介质为空气中填充 GaAs 介质柱两种情况。这里选择具有代表性的半导体 GaAs 是因为它在红外区存在人们感兴趣的光学性质, 从而可推广到其他类似系统。

3.1 空气柱在 GaAs 中

首先考虑填充率 $\beta = 60\%$ 的情况。在 $\theta = 30^\circ$ 时, 带隙随 d 变化的关系如图 2(a) 所示, 位置 $d = 2r = \sqrt{3}a/3$ 对应蜂窝状结构, 而位置 $d = 0$ 对应三角结构。从图中可以看到, 对于 E 偏振存在几个带隙, 而且它们的数目随着 d 的变化而变化。在三角结构位置, 不存在任何 E 偏振带隙。用 E_i 或 H_i 表示在第 i 和第 $i+1$ 个能带之间出现的 E 偏振或 H 偏振带隙, 则当 $d > 0$ 时, E_1 带隙开始打开, 而且在大约 $d = 0.53a$ 的位置达到最大宽度。当两个介质柱的位置偏离较远时, E_1 带隙逐渐消失。在蜂窝状

结构位置存在三个 E 偏振带隙 (E_1, E_3, E_6)。其它 E 偏振带隙 E_5, E_7, E_8 在三角结构和蜂窝状结构的位置都不存在, 而在其他某个 d 值范围内存在。对于 H 偏振, 在三角结构中存在 H_1 和 H_7 两个带隙, 这两个带隙分别在 $d = 0.52a$ 和 $d = 0.28a$ 的位置闭合。在蜂窝状结构的位置, 同样存在着 H_2, H_8, H_9 三个带隙, 其中 H_2 带隙很窄。同时, 从图中也可以看到, 这种情况下存在着两个分别是由 E_3 和 H_2 带隙、 E_8 和 H_6 带隙之间相互重叠而产生的很窄的完全带隙。 $E_3 - H_2$ 完全带隙出现在 $0.45a \leq d \leq 0.62a$ 范围, 其最大宽度为 5%。 $E_8 - H_6$ 带隙出现在 $0.4a \leq d \leq 0.5a$ 范围, 其最大宽度为 4%。从上面的结果可以看到, 调整两个介质柱在三角晶格中的位置, 不仅可以获得其他带隙, 而且在适当的位置可以获得更大的完全带隙。

下面考虑更小的填充率 $\beta = 49\%$ 的情况。由于 $\theta = 1^\circ$ 在附近存在着一个比较大的完全带隙, 所以这里给出了在 $\theta = 1^\circ$ 时光子带隙随 d 变化的关系, 如图 2(b) 所示。比较图 2(a) 和图 2(b), 可以看出带隙的数目有所下降, 而且有些带隙的宽度变窄, 例如 E_1, H_1, H_7, H_9 , 但在图 2(b) 中出现了一个由 E_5 带隙和 H_4 带隙之间相互重叠而产生较大完全带隙。进一步可看出, $E_5 - H_4$ 带隙在 $d = 0.27a$ 位置出现, 在 $d = 0.38a$ 位置达到 6.5% 的最大宽度, 其中心频率为 $\omega a / (2\pi c) = 0.49$ 。图 3 为完全带隙最大时所在位置的结构, 可以看到两个介质柱之间存在互相重叠的部分。

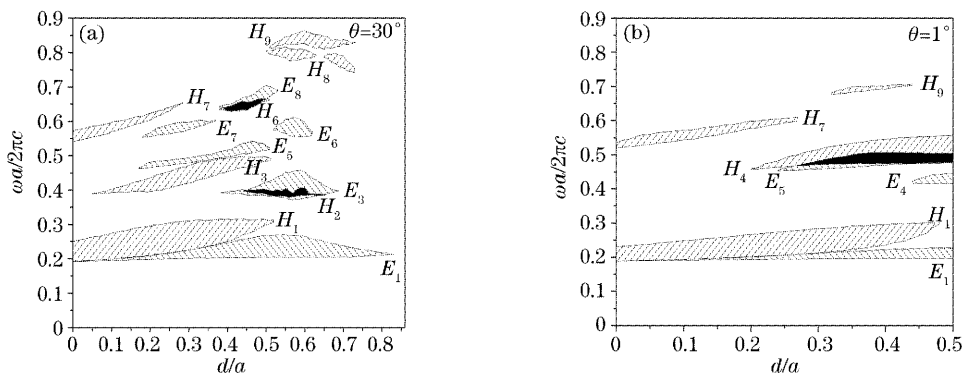


图 2 在背景介质为 GaAs 中填充空气柱的类蜂窝状结构中 E 偏振和 H 偏振光子能带结构与介质柱之间距离的关系。

(a) $\beta = 60\%$, $\theta = 30^\circ$, (b) $\beta = 49\%$, $\theta = 1^\circ$ 。图中黑色部分表示完全光子带隙

Fig. 2 Photonic band gaps for quasi-honeycomb structures of air cylinders in background dielectric of GaAs of E -polarized and H -polarized versus the distance between air cylinders for (a) $\beta = 60\%$ and $\theta = 30^\circ$, (b) $\beta = 49\%$ and $\theta = 1^\circ$. The black represents absolute band gaps

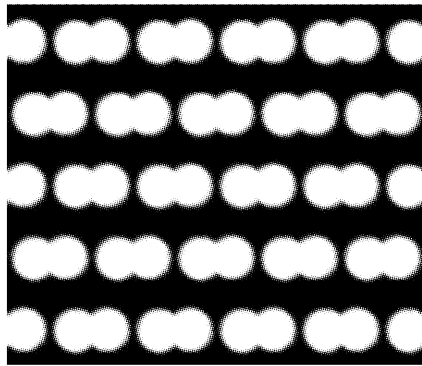
图3 $\beta=49\%$ 、 $\theta=1^\circ$ 、 $d=0.38a$ 时的结构示意图

Fig.3 The schematic structure for $\beta=49\%$, $\theta=1^\circ$ and $d=0.38a$

3.2 GaAs 柱在空气中

根据文献[13,14]的报道,我们选取 $\beta=30\%$ 、 $\theta=30^\circ$ 得到如图4所示蜂窝状结构光子带隙随 d 变化的关系。从图4可看出,对 E 偏振,在三角结构中存在着两个带隙 E_1 、 E_3 ,随着两个介质柱慢慢远离, E_1 和 E_3 带隙逐渐闭合。当 d 增大到 $\sqrt{3}a/3$ 时,介质柱排列构成了蜂窝状结构,存在着三个光子带隙 E_2 、 E_6 、 E_7 。在其他位置,也出现如 E_4 、 E_5 、 E_7 的大带隙。相对于 E 偏振, H 偏振带隙的数目比较少,而且带隙宽度比较窄。首先在三角结构中,不存在任何的 H 偏振带隙,但在蜂窝状结构,则存在两个光子带隙 H_3 、 H_5 。其中 H_3 带隙的宽度较大,覆盖了很大的范围。从图4可看出, H_3 带隙分别与 E_4 、 E_5 、 E_6 带隙相重叠构成了三个很宽的完全带隙。 H_3-E_6 完全带隙在蜂窝状结构中存在着一个最大的

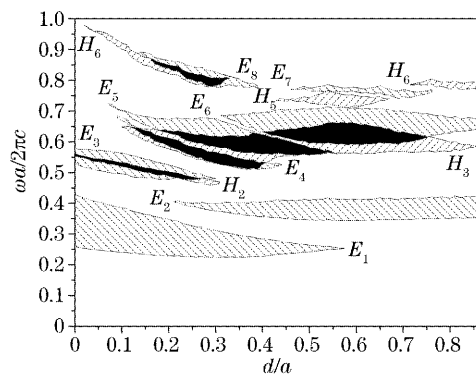


图4 在背景为空气中填充 GaAs 柱的类蜂窝状结构中,当 $\beta=30\%$ 、 $\theta=30^\circ$ 时光子能带结构与介质柱之间的距离关系

Fig.4 Photonic band gaps for quasi-honeycomb structure with GaAs cylinders in air background versus the distance between GaAs cylinders for $\beta=30\%$ and $\theta=30^\circ$

完全带隙,其宽度为 11%,中心频率为 $\omega a/(2\pi c)=0.64$,与文献[13,14]的结果相符,但值得一提的是本工作中晶格常量是文献[13,14]中晶格常量的 $\sqrt{3}$ 倍。从图4中还可看出,在蜂窝状结构中不存在 H_3-E_4 和 H_3-E_5 这样的完全带隙,而在其他位置如 $d=0.32a$ 和 $d=0.38a$ 处则存在最大宽度分别为 6.4% 和 10.7% 的完全带隙,其中心频率分别为 $\omega a/(2\pi c)=0.54$ 和 0.60。从上面的结果可以知道,除蜂窝状结构外,改变两个介质柱的位置,仍然可以在其他位置获得较大的完全带隙,且其宽度与蜂窝状结构的完全带隙宽度相当。

下面考虑更低的填充率 $\beta=22\%$ 。在这个填充率下,蜂窝状结构的能带图如图5所示。图中实线和虚线部分分别与 E 偏振、 H 偏振相对应。当两个偏振模式存在的带隙相互重叠时产生完全带隙。从图中可以看到,在更低的填充率下蜂窝状结构仍然存在较大的带隙, E_4 带隙与 H_3 带隙, E_6 带隙与 H_5 带隙相互重叠分别构成了两个完全带隙,这两个完全带隙的中心频率分别为 $\omega a/(2\pi c)=0.69$ 和 0.84,其宽度分别为 8.5% 和 4.7%。但计算发现,通过改变两个介质柱的位置,可以获得更大的完全带隙。图6是当 $\theta=0^\circ$ 时光子带隙随 d 的变化关系。从图中可以看到,在三角结构中,存在着两个 E 偏振带隙 E_1 、 E_4 ,而不存在任何 H 偏振带隙。当两个介质柱相互远离时, H 偏振带隙慢慢出现,当 $d=0.19a$ 时, H_3 带隙打开,并且随着 d 的增加,其宽度逐渐变宽。 H_3 带隙与 E_4 、 E_5 两个带隙相重叠构成了两

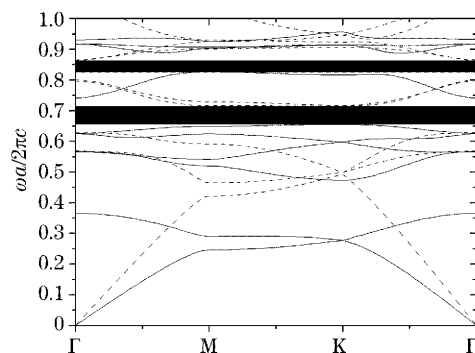


图5 在背景为空气中填充 GaAs 柱的类蜂窝状结构中, $\beta=22\%$ 时蜂窝状结构光子晶体的光子能带。图中的对称波矢点是采用了文献[15]中的记法

Fig.5 Photonic band gaps for honeycomb structure with GaAs cylinders in air background versus the distance between GaAs cylinders for $\beta=22\%$. The symmetrical wave vector points are labeled using the notation of Ref. [15]

个完全带隙。其中 H_3-E_5 完全带隙一直保持很窄的宽度,而 H_3-E_4 带隙的宽度则比较大。在 $d=0.3a$ 时, H_3-E_4 完全带隙的宽度达到最大值 10.2%,其中心频率在 $\omega a/(2\pi c)=0.62$,需注意的是此时 $d<2r$,所以两个介质柱之间有重叠的部分,其结构与图 3 类似。

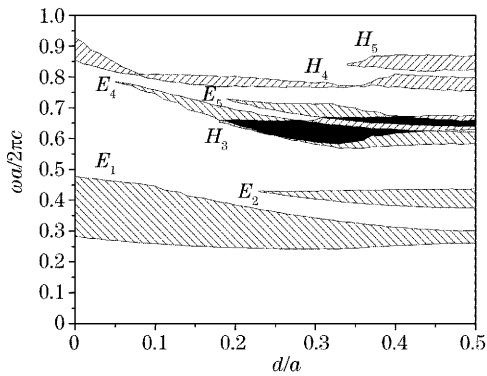


图 6 在背景为空气中填充 GaAs 柱的类蜂窝状结构中,当 $\beta=22\%$ 、 $\theta=0^\circ$ 时光子能带结构与介质柱之间的距离关系

Fig. 6 Photonic band gaps for quasi-honeycomb structure with GaAs cylinders in versus the distance between GaAs cylinders for $\beta=22\%$ and $\theta=0^\circ$

我们知道,蜂窝状结构属于 D_{6h} 点群,是高对称结构。当改变两个介质柱的位置时,就破坏了这种对称性,而光子晶体对称性的破坏是产生带隙的有效手段。另外,由于 E 偏振的带隙容易出现在高介电常量的介质孤立分布的结构中(如处在空气中的介质柱的光子晶体),而 H 偏振的带隙容易出现在介质较为连续分布的结构中(如介质中空气柱的光子晶体)。图 3 的结构正好是这两种情况妥协的结果,所以如图 3 所示的类蜂窝状结构存在着比较大的完全带隙。

4 结 论

通过在三角晶格中引入两个完全一样介质柱的办法可得到较大的完全带隙二维光子晶体,而介质柱的位置是影响光子带隙结构的一个很重要因素,在一定的介质填充率下,通过调整介质柱的位置可以获得最大化完全带隙,这个位置不一定是在蜂窝状结构中。例如,在背景介质为 GaAs 中填充空气柱,当填充率为 49% 时, u 在 $\theta=1^\circ$ 、 $d=0.38a$ 的位置存在一个中心频率为 $\omega a/(2\pi c)=0.49$ 、宽度为 6.5% 的完全带隙;在背景介质为空气中填充介质柱,当填充率为 22%, u 在 $\theta=0^\circ$ 、 $d=0.3a$ 的位置存

在一个中心频率为 $\omega a/(2\pi c)=0.62$ 、宽度为 10.2% 的完全带隙。这一计算结果对今后类蜂窝状结构光子晶体的制备具有参考价值。

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 Cheryl M. Anderson, Konstantinos P. Giapis. Larger two-dimensional photonic band gap[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**(14): 2949~2952
- 4 An Henan, Ouyang Zhengbiao, Xu Guiwen *et al.*. The influences of the structure parameters of a two-dimensional square photonic crystal on its photonic bandgap properties [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(6): 842~846 (in Chinese)
安鹤男,欧阳征标,许桂雯等. 二维光子晶体结构参量对光子禁带特性的影响[J]. *光学学报*, 2004, **24**(6): 842~846
- 5 Li Yanfeng, Wang Qingyue, Hu Minglie. Vectorial effective index method for photonic crystal fibers[J]. *Chin. J. Lasers*, 2004, **31**(11): 1332~1336 (in Chinese)
栗岩峰,王清月,胡明列. 光子晶体光纤的矢量有效折射率分析方法[J]. *中国激光*, 2004, **31**(11): 1332~1336
- 6 Yongjun He, Zhongchao Wei, Yongchun Zhong *et al.*. Crystal thickness and sphere dispersion dependence of the photonic band gap of silica colloidal crystals[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2004, **2**(8): 471~474
- 7 Lin Xubin, Zhao Yuzhou, Li Jing *et al.*. Fabrication techniques of inverse opal structure photonic crystal[J]. *J. of Synthetic Crystals*, 2004, **33**(6): 1022~1030 (in Chinese)
林旭彬,赵玉周,李静等. 反蛋白石结构光子晶体制备技术[J]. *人工晶体学报*, 2004, **33**(6): 1022~1030
- 8 E. Ozbay, E. Michel, G. Tuttle *et al.*. Micromachined millimeter-wave photonic band-gap crystals[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**(16): 2059~2061
- 9 Shanhuai Fan, Pierre R. Villeneuve, Robert D. Meade *et al.*. Design of three-dimensional photonic crystals at submicron lengthscales[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **65**(11): 1466~1468
- 10 M. Plihal, A. A. Maradudin. Photonic band structure of two-dimensional systems: The triangular lattice [J]. *Phys. Rev. (B)*, 1991, **44**(16): 8565~8571
- 11 Robert D. Meade, Karl D. Brommer, Andrew M. Rappe *et al.*. Existence of a photonic band gap in two dimensions[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **61**(4): 495~497
- 12 Pierre R. Villeneuve, Michel Piche. Photonic band gap in two-dimensional square and hexagonal lattice[J]. *Phys. Rev. (B)*, 1992, **46**(15): 4969~4972
- 13 R. Padjen, J. M. Gerard, J. Y. Marzin. Analysis of the filling pattern dependence of the photonic bandgap for two-dimensional systems[J]. *J. Mod. Opt.*, 1994, **41**(2): 295~310
- 14 D. Cassagne, D. Bertho. Photonic band gaps in a two-dimensional graphite structure[J]. *Phys. Rev. (B)*, 1995, **52**(4): R2217~R2220
- 15 D. Cassagne, C. Jouanin, D. Bertho. Hexagonal photonic-band-gap structures[J]. *Phys. Rev. (B)*, 1996, **53**(11): 7134~7142
- 16 Steven G. Johnson, John D. Joannopoulos. *Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice* [M]. Boston: Kluwer Academic Publishers, 2002
- 17 Steven G. Johnson, John D. Joannopoulos. Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis[J]. *Opt. Express*, 2001, **8**(3): 173~190