

文章编号: 0253-2239(2010)04-1173-05

二维空心介质柱型三角晶格光子晶体的完全光子禁带

冯 帅 杨玉平 王义全

(中央民族大学理学院, 北京 100081)

摘要 利用时域有限差分方法理论研究了由介质锺柱组成的二维三角晶格光子晶体的完全光子禁带。研究表明, 对于由圆形空心锺柱排列在空气中组成的三角晶格光子晶体, TM 偏振和 TE 偏振的光子禁带存在重叠, 因而具有完全禁带。当锺柱的形状为空心三角形时, 可实现宽度为 $0.074 (2\pi c/a)$ 的完全带隙, 该带隙宽度达到了中心频率的 16.2%。

关键词 光子晶体; 时域有限差分方法; 完全带隙

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20103004.1173

Absolute Photonic Band Gap of the Two-Dimensional Hollow-Dielectric Triangular-Lattice Photonic Crystals

Feng Shuai Yang Yuping Wang Yiquan

(College of Science, Minzu University of China, Beijing 100081, China)

Abstract Absolute band gaps of the two-dimensional triangular-lattice photonic crystals consisting of Ge rods are calculated with the finite-difference time-domain method. Through calculating the band structures of the triangular-lattice photonic crystal consisting of hollow circular Ge rods, it is found that the TM-polarized and TE-polarized photonic band gaps can be overlapped, and an absolute photonic band gap can be obtained. A large absolute band gap of $0.074 (2\pi c/a)$ can be obtained for the structures with a triangular lattice of hollow triangular Ge rods immersed in air, corresponding to 16.2% of the central frequency.

Key words photonic crystal; finite-difference time-domain method; absolute band gap

1 引 言

光子晶体(PC)是由两种或两种以上不同介电材料在空间按照一定方式排列所组成的一种人工结构^[1,2]。与普通半导体中由于原子的周期性排列所形成的电子能隙类似,电磁波在介电常数周期性排列的光子晶体中传播时具有光子带隙,即特定频率范围的电磁波无法在光子晶体中传播。对于二维光子晶体,电磁波可以分为两种相互无关的偏振模式, TM 模式(电场方向沿着柱体的轴向)和 TE 模式(电场方向在垂直于柱体轴向的平面内),只有这两种模式都具有带隙而且彼此重叠时,二维光子晶体才具有完全带隙。

三维光子晶体由于可以在任意方向上控制光束的传播,因此成为最理想的光子晶体器件。然而三维光子晶体的实验制备方法较为复杂,并且不能很好地控制其中缺陷的位置和尺寸。相比较而言,二维光子晶体的制备就容易得多,因而可广泛应用于光学平面集成电路。光子晶体的带隙特性决定了它在许多领域中的具体应用,因此寻求具有宽完全禁带的二维光子晶体结构成为了光子晶体研究领域的一个重要方向^[3~19]。光子晶体完全带隙的大小与光子晶体的具体结构有着密切的联系。已有研究表明通过降低晶体结构的对称性,或者利用各向异性材料可以获得较宽的完全禁带。对于二维正方晶格

收稿日期: 2009-08-02; 收到修改稿日期: 2009-10-13

基金项目: 国家 973 计划(2006CB921702)、国家自然科学基金(10705056,10904176)和中央民族大学青年科学基金资助课题。

作者简介: 冯 帅(1975—),男,博士,副教授,主要从事光子晶体领域方面的研究。E-mail: fengshuai75@163.com

光子晶体,无论是介质柱排列在空气中,还是介质背景中挖出空气孔方法组成的结构,都存在较宽的完全禁带。而对于二维三角晶格光子晶体的研究表明,在介质背景中挖出大尺寸空气圆孔方法组成的结构中存在的完全禁带,在由介质柱体排列在空气中组成的三角晶格结构中是否存在大的完全禁带,至今没有相关的报道。

本文研究了由介质柱体排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体,通过比较不同形状的介质柱体的能带结构,发现对于由三角形介质柱组成的二维结构,存在完全禁带。当介质柱的形状由实心三角形改变为空心三角形后,完全禁带的宽度大为增加。

2 时域有限差分方法的基本原理

麦克斯韦(Maxwell)方程组是支配宏观电磁现象的一组基本方程。微分形式的麦克斯韦方程组是由两个旋度方程和两个散度方程组成的。其中两个旋度方程是最基本的,其他两个散度方程可以通过这两个旋度方程推导得出。在电导率和磁导率都等于零的空间,这两个旋度方程可表示为

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2)$$

在直角坐标系中,两个旋度方程中电磁场的各个分量可表示为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} &= \epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} &= \epsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} &= \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} \end{aligned} \right\}, \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} \end{aligned} \right\}. \quad (4)$$

时域有限差分方法的基本思想^[20,21]是将 Maxwell 方程组在坐标系中展开成标量场分量的方程组,然后用二阶精度的中心差商代替微商,将连续的空间和时间问题离散化,得到标量场分量的迭代差分方程组。

对 TE 波: $H_x = H_y = H_z = 0$,

$$E_x^{n+1}(i+1/2, j) = E_x^n(i+1/2, j) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i+1/2, j)} \frac{H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2)}{\Delta y}, \quad (5)$$

$$E_y^{n+1}(i, j+1/2) = E_y^n(i, j+1/2) - \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j+1/2)} \frac{H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2) - H_z^{n+1/2}(i-1/2, j+1/2)}{\Delta x}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2) &= H_z^{n-1/2}(i+1/2, j+1/2) - \frac{\Delta t}{\mu(i+1/2, j+1/2)} \times \\ &\left[\frac{E_y^n(i+1, j+1/2) - E_y^n(i, j+1/2)}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i+1/2, j+1) - E_x^n(i+1/2, j)}{\Delta y} \right]; \end{aligned} \quad (7)$$

对 TM 波: $E_x = E_y = H_z = 0$,

$$H_x^{n+1}(i, j+1/2) = H_x^{n-1/2}(i, j+1/2) - \frac{\Delta t}{\mu(i, j+1/2)} \frac{E_z^n(i, j+1) - E_z^n(i, j)}{\Delta y}, \quad (8)$$

$$H_y^{n+1}(i+1/2, j) = H_y^{n-1/2}(i+1/2, j) + \frac{\Delta t}{\mu(i+1/2, j)} \frac{E_z^n(i+1, j) - E_z^n(i, j)}{\Delta x}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} E_z^{n+1}(i, j) &= E_z^n(i, j) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j)} \left[\frac{H_y^{n+1/2}(i+1/2, j) - H_y^{n+1/2}(i-1/2, j)}{\Delta x} - \right. \\ &\left. \frac{H_x^{n+1/2}(i, j+1/2) - H_x^{n+1/2}(i, j-1/2)}{\Delta y} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

利用上述差分格式,选取一个原胞作为计算区域,由数值稳定性条件和计算的频率范围确定出空间离散步长的大小,根据空间离散步长将光子晶体沿坐标轴方向分成很多 Yee 氏网格单元;求出每个

网格点的有效介电常数,再由空间步长和时间步长所满足的数值稳定性条件,得出相应的时间步长。以上参数确定后,利用布洛赫周期性边界条件,就可以将差分方程组在划分好的 Yee 氏网格空间中进

行空间和时间迭代,从而计算出光子晶体中空间电磁场的分布以及电磁场随时间的变化规律,通过傅里叶变换可以计算出包含很大频率范围的频率信息,最终得出光子晶体的能带结构。

3 数值计算与结果

对于由圆形锗柱(介电常数为 18)排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体,当锗柱的半径 $r=0.257a$ (a 为光子晶体的晶格常数)时,利用时域有限差分方法计算得到的两种偏振模的能带结构如图 1 所示,其中实心点线表示为 TM 模的能带结构,空心点线为 TE 模的能带结构。

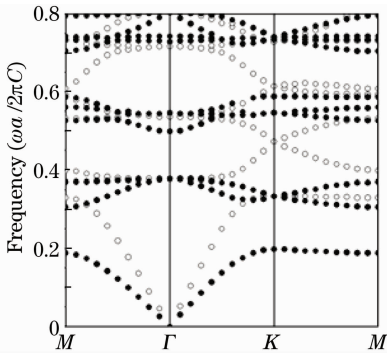


图 1 由圆形锗柱组成的三角晶格光子晶体的能带结构
Fig. 1 Energy-band structures of the triangular-lattice photonic crystal consisting of circular Ge rods

从图中可以看出对于 TM 模,在较低的第一个和第二个能带之间存在一个非常宽的禁带,同时也在第三个和第四个能带之间,以及更高的能带之间存在多个禁带。而对于 TE 模,虽然在第一个和第二个能带之间存在一个光子禁带,但是该禁带的频率区域没有与 TM 模的禁带重合,因而该结构光子晶体没有完全禁带。

在保持介质柱占空比 $f=0.208$ 不变的条件

下,将锗柱的形状改变为空心圆形,其中内半径 $r_1=0.4a$,外半径 $r_2=0.475a$,结构如图 2(a)所示。从图 2(b)中可以看出对于 TE 模,在第一个和第二个能带之间存在一个非常宽的禁带,该带隙的频率范围从 $0.283\sim 0.439(2\pi c/a)$ (式中 c 为真空中的光速)。对于 TM 模,虽然在第一个和第二个能带之间没有光子禁带,但是在第三个和第四个能带之间存在一个窄的光子带隙,该带隙的频率范围从 $0.414\sim 0.438(2\pi c/a)$ 。该频率范围正好处于 TE 模的禁带区域,实现了一个宽度为 $0.024(2\pi c/a)$ 的完全禁带。

保持介质锗柱的占空比不变,将锗柱的形状由圆形改变为三角形,所对应的三角形边长为 $0.693a$,并且使三角形的边长沿着光子晶体的 ΓX 方向。图 3(a)为该种光子晶体的结构示意图,相应的计算结果如图 3(b)所示。可以看出对于 TM 模,在其第三个和第四个能带之间存在着一个带隙,而对于 TE 模,在第二个和第三个能带之间也存在一个带隙,这两个带隙的频率区域部分重合,该完全带隙的频率范围从 $0.426\sim 0.450(2\pi c/a)$,带隙宽度为 $0.024(2\pi c/a)$,为带隙中心频率的 5.5% 。

在此基础上,在保持介质柱占空比不变的条件下,将锗柱的形状由实心三角形改变为空心三角形。当空心三角形的内边长 $r_1=0.3a$,外边长 $r_2=0.755a$ 时,相应的结构示意图和计算得到的能带结构如图 4 所示。从图中可以看出对于 TM 模,在其第三个和第四个能带之间的带隙宽度大大增加,对于 TE 模,第二个和第三个能带之间的带隙也有所增加,这两个带隙的频率区域重合,该完全带隙的频率范围从 $0.42\sim 0.494(2\pi c/a)$,带隙宽度达到了 $0.074(2\pi c/a)$,为带隙中心频率的 16.2% 。已有的研究表明,对于 TM 模,在介质柱排列于空气背景中并且其占空比较小的条

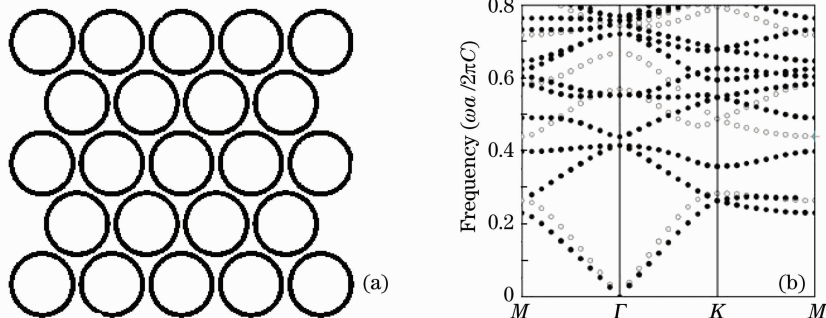


图 2 (a)圆形空心锗柱光子晶体的结构示意图及其(b)能带结构

Fig. 2 Schematic geometry of the PC consisting of hollow circular rods (a) and the corresponding energy-band structure (b)

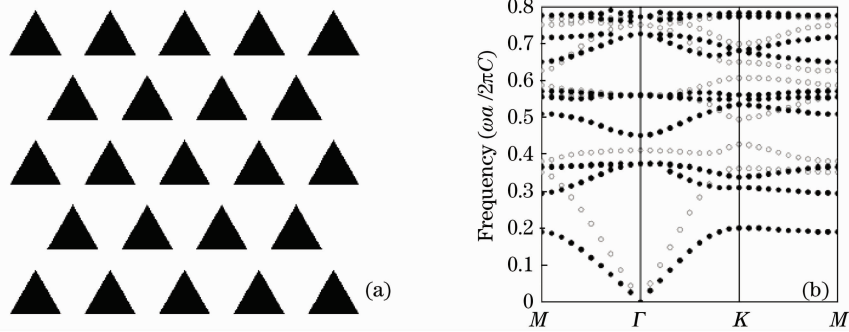


图 3 (a)三角形锺柱光子晶体的结构示意图及其(b)能带结构

Fig. 3 Schematic geometry of the PC consisting of triangular rods (a) and the corresponding energy band structure (b)

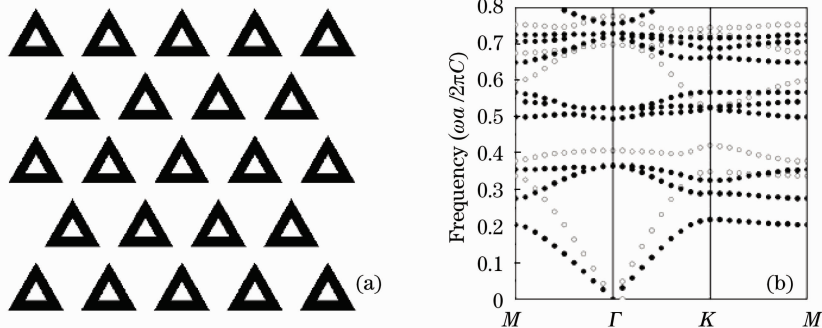


图 4 (a)三角形空心锺柱光子晶体的结构示意图及其(b)能带结构

Fig. 4 Schematic geometry of the PC consisting of hollow triangular rods (a) and the corresponding energy band structure (b)

件下存在较宽的光子禁带;而对于 TE 模,其宽光子禁带出现于高折射率材料互联的结构中。提出的三角形空心结构光子晶体,综合考虑了 TM 模和 TE 模宽带隙出现的条件,因而得出了非常宽的完全光子禁带。

在保持锺柱占空比不变的条件下,计算了当空心三角形的内边长分别为 $r_1=0.1a, 0.2a, 0.4a, 0.5a$ 和 $0.6a$ 时,光子晶体的完全禁带宽度分别为 $0.028, 0.05, 0.071, 0.047$ 和 $0.03(2\pi c/a)$ 。从中可以看出空心三角形的尺寸在一定范围内时,可以获得一个比较宽的完全禁带。在保持空心内边长 $r_1=0.3a$ 不变的条件下,计算了完全带隙宽度受外边长的影响,得出占空比在较大范围内变化时,该空心三角形结构光子晶体仍存在一个较宽的完全光子禁带。

4 结 论

理论研究了由介质锺柱排列在空气中组成的二维三角晶格光子晶体的完全禁带特性。研究结果表明,对于由空心圆形介质柱组成的三角晶格结构,可以使得 TM 偏振和 TE 偏振的光子禁带存在重叠,具有完全禁带。当锺柱的形状由圆形改变为三角形后,也可产生完全禁带。当介质柱形状为三角形空

心结构时,可以实现宽度达到带隙中心频率 16.2% 的宽完全禁带。

参 考 文 献

- 1 E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 S. John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**: 2486~2489
- 3 D. Cassagne, C. Jouanin, D. Bertho. Hexagonal photonic-band-gap structures [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**(11): 7134~7142
- 4 J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, S. H. Fan. Photonic crystals: putting a new twist on light [J]. *Nature*, 1997, **386**(6621): 143~149
- 5 Z. Y. Li, B. Y. Gu, G. Z. Yang. Large absolute band gap in 2D anisotropic photonic crystals [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**(12): 2574~2577
- 6 M. Qiu, S. L. He. Large complete band gap in two-dimensional photonic crystals with elliptic air holes [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**(15): 10610~10612
- 7 X. H. Wang, B. Y. Gu, G. Z. Yang *et al.*. Large absolute photonic band gaps created by rotating noncircular rods in two-dimensional lattices [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**(16): 11417~11421
- 8 Y. Y. Pu, G. Q. Liang, W. D. Mao *et al.*. Fabrication of two-dimensional photonic crystals with triangular rods by single-exposure holographic lithography[J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2007, **24**(4): 983~985
- 9 K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phys. Rev.*

- Lett.*, 1990, **65**(25): 3152~3155
- 10 H. J. Shen, H. P. Tian, Y. F. Ji. Photonic bands, gap maps, and intrinsic losses in three-component 2D photonic crystal slabs [J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2009, **7**(3): 231~234
- 11 Zhu Shaoan, Zhong Yongchun, Wang Hezhou. Photonic band gap of the distorted face-center-cubic structure photonic crystal fabricated by holographic lithography [J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(2): 279~282
朱少安, 钟永春, 汪河洲. 光全息制作的变形面心立方结构光子晶体的带隙 [J]. *光学学报*, 2006, **26**(2): 279~282
- 12 Chen Tieqi, Xu Keshu. Calculation of photonic bands of multiple periodic dielectric structures consisting of spherical atoms [J]. *Acta Optica Sinica*, 1996, **16**(3): 325~331
陈铁岐, 徐克瑞. 由球形原子构成的多种周期性介电结构的光子能带计算 [J]. *光学学报*, 1996, **16**(3): 325~331
- 13 Kong Weijin, Yun Maojin, Wang Mei *et al.*. Beam splitter and deflector in two-dimensional photonic crystals [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(3): 818~821
孔伟金, 云茂金, 王 美 等. 二维光子晶体分束器和偏转器 [J]. *光学学报*, 2009, **29**(3): 818~821
- 14 R. Z. Wang, X. H. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals [J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **90**(9): 4307~4313
- 15 T. Pan, F. Zhuang, Z. Y. Li. Absolute photonic band gaps in a two-dimensional photonic crystal with hollow anisotropic rods [J]. *Solid State Commun.*, 2004, **129**(8): 501~506
- 16 J. D. Joannopoulos, R. D. Mead, J. N. Winn. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*[M]. Princeton: Princeton University Press, 1995
- 17 L. F. Shen, S. L. He, S. S. Xiao. Large absolute band gaps in two-dimensional photonic crystals formed by large dielectric pixels [J]. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**(16): 165315
- 18 Yin Jianling, Huang Xuguang, Liu Songhao. Effect of structure disorder on band gap of eight-fold photonic quasicrystals [J]. *Chinese J. Lasers*, 2007, **34**(8): 1077~1080
殷建玲, 黄旭光, 刘颂豪. 结构无序对 8 重准晶光子晶体带隙特性的影响 [J]. *中国激光*, 2007, **34**(8): 1077~1080
- 19 Lu Xiaodong, Han Peide, Quan Yujun *et al.*. Influences of wave vector direction on energy bands and applications of two-dimensional photonic crystals [J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(6): 770~774
陆晓东, 韩培德, 全宇军 等. 波矢方向对二维光子晶体能带及应用的影响 [J]. *中国激光*, 2006, **33**(6): 770~774
- 20 K. S. Yee. Numerical solutions of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. *IEEE Tran. Antenn. Propag.*, 1966, **14**: 302~307
- 21 J. P. Berenger. Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves [J]. *J. Comput. Phys.*, 1996, **127**(2): 363~379