六角形散射子光子晶体的界面态*

车 明 刘江涛
(首都师范大学物理系,北京 100037)

摘 要 研究采用平面波展开加超元胞方法计算了正方格子六角形空气散射子二维光子晶体镜面对称异质结的界面态. 经过研究发现,这种异质结界面态可以通过相对于界面横向拉开或者纵向错开而产生,并且调节到绝对带隙中成为传导模. 界面态的个数和变化规律在很大程度上依赖于光子晶体异质结构的几何和物理参量. 通过对比我们发现:与圆柱形散射子相比,在六角形散射子异质结中更易于产生传导模,但是比四方柱形散射子的情况要困难.

关键词 光子晶体 ; 绝对带隙 ; 界面态
中图分类号 O734 **文献标识码** A

0 引言

光子晶体这一概念最先是在 1987 年分别由 S. John 和 E. Yablonovitch 提出来的[1]. 光子晶体能够产生带隙,带隙之内这种能量的电磁波将无法在光子晶体中传播. 二维光子晶体是由柱形散射子周期排列而成,对于二维光子晶体,当电磁波垂直于晶体柱体轴向传播时,电磁场可分解为 E-(TE mode)和 H-(TM mode)两种本征偏振模式的线性叠加,它们的电场矢量分别垂直和平行于柱体的轴向. 两种模式的光子能带都可能有带隙,其重叠部分为绝对带隙[2].

光子晶体的应用价值很大程度上在于局域态的存在,在光子晶体中局部破坏对称性形成缺陷能够产生局域态[3,4]. 线形缺陷对于未来的光电信息技术会有重要的价值,它可以形成光波导作为光子的"线路"来引导光子传递信息. 利用不同结构的光子晶体组成的界面结构就是一个产生线缺陷的不错的想法[5,6].

2001 年 Zhi-Yuan Li[7] 研究了二维正方格子圆柱形散射子的光子晶体异质结构界面态性质. 这种结构由空气圆柱散射子组成,在均匀背景上形成正方格子,沿格子的一条边方向选定一个界面,界面两边唯一的不同是它们的填充率. 这种界面结构并没有界面态的存在,但是当两边的晶格横向拉开或者纵向错开,则分别在 TE 模和 TM 模的带隙中分别发现了界面态. 但是他的工作并没有在绝对带隙中发现界面态. 最近 Yun-Song Zhou[8] 通过对二维长方(正方)格子 - 长方(正方)散射子光子晶体研究发现,可以通过将长方(正方)格子相对于界面横向拉开或者纵向错开而在绝对带隙中产生界面态,而且绝对带隙中的界面态的个数和行为在很大程度上可以通过拉开或错开来调节.

通过前边的这些研究工作,我们发现圆柱形和长方(正方)散射子光子晶体都可以通过界面横向拉开或者纵向错开产生界面态,但是它们两个又有所区别. 前者在绝对带隙中并没有发现界面态,后者在绝对带隙中发现了界面态.

由于四角形的空间对称性没有圆形的好,所以四角形散射子在形成镜面异质结构更容易造成对称性破缺,由于六角形的空间对称性介于四角形和圆形之间,所以我们希望通过研究,看看六角形界面态有何特点,以加强对界面态的认识.

1 计算公式

光子运动满足麦克斯韦方程,由此推导磁场满足以下方程[9~11]

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

式中 $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ 表示的是介电常数,C 是光速,ω 是频率. 将 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ 和 $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ 按平面波展开

$$\boldsymbol{H} = \sum_{G}\sum_{\lambda=1}^{2} b_\lambda(\boldsymbol{G})\mathrm{e}_\lambda \mathrm{e}^{\mathrm{i}(K+G)r} \tag{2}$$

$$\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \sum_{G}\varepsilon(\boldsymbol{G})\mathrm{e}^{\mathrm{i}Gr} \tag{3}$$

$$\varepsilon(\boldsymbol{G}) = \begin{cases} \varepsilon_\mathrm{b} + f(\varepsilon_\mathrm{a} - \varepsilon_\mathrm{b}) & \boldsymbol{G} = 0 \\ (\varepsilon_\mathrm{a} - \varepsilon_\mathrm{b})\mathrm{I}(\boldsymbol{G}) & \boldsymbol{G} \neq 0 \end{cases} \tag{4}$$

ε_a 和 ε_b 分别代表散射子和背景的介电常数,f 叫做填充率,它的定义式为 $f \equiv \frac{S_\mathrm{r}}{S}$,其中 S_r 表示散射子面积. 其中 $I(\boldsymbol{G})$ 的定义式为

$$I(\boldsymbol{G}) \equiv \frac{1}{S}\int_{S_\mathrm{r}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Gr}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{5}$$

*北京市自然科学基金、973 资助项目
Tel:13661008389 Email:chemingcn@sohu.com
收稿日期:2003-10-19

2 计算结果及分析

我们要研究的二维光子晶体如图 1 所示，界面与 y 轴重合，界面两边的布拉菲格子都是正方形．其中 $\varepsilon_a=1$，$\varepsilon_b=12.36$，$f=0.780$，在界面两边沿 x 轴各取 m 个原胞，共有 $2m$ 个原胞组成一个超元胞．超元胞必须要保证足够大，这样才能忽略相邻超元胞的相互影响，根据参考文献[7,8]，对于讨论二维光子晶体界面态的时候，一个超元胞包含有 8 个原胞已经足够大了，即 $m=4$ 平面波个数为 1235 是很充足了．所以就采取这组参量．

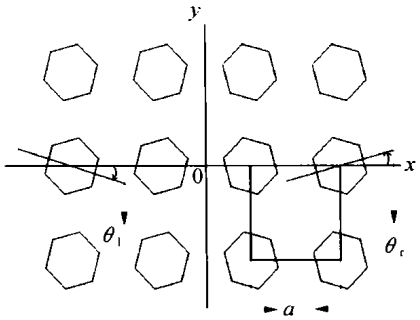

图 1 二维光子晶体异质结构示意图．其中 a 为正方格子的边长．θ_l 和 θ_r 分别表示的是界面左右两边六角散射子相对于 x 轴的旋转方向

Fig. 1 Schematic of mirror-symmetrical two-dimesional photonic crystal heterostructure. the lengths of the square lattice denote a. θ_l and θ_r are the angles of the hexagon cylinder against the x-axis for the left and right sub-lattice

为了使二维光子晶体界面处局域模的存在，这需要二维光子晶体具有尽量宽的绝对带隙．我们采用文献[11]中的最佳参量 $f=0.780$，$\theta_r=\theta_l=15°$，$\varepsilon_a=1$，$\varepsilon_b=12.36$ 计算了态密度(DOS)图，如图 2 所示：得到绝对带隙的宽度为 $\Delta\omega=0.496-0.480=0.016(2\pi c/a)$，$\omega_g=0.488(2\pi c/a)$，我们的结果与文献是一致的．

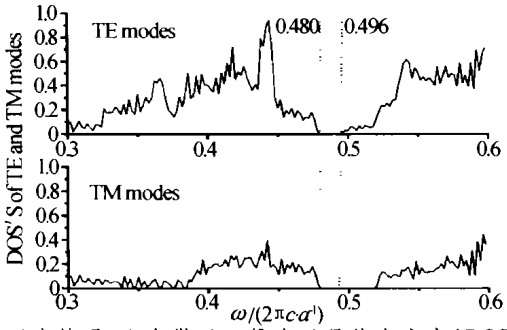

图 2 正方格子，六角散子二维光子晶体态密度(DOS)图

Fig. 2 DOS of two-dimensional photonic crystals in which the hexagon air cylinders set on the square lattices

当我们取 $\theta_r=-\theta_l=15°$，其它参量不变，界面左右两边形成镜面对称结构时，计算得到绝对带隙为 $\Delta\omega=0.496-0.478=0.018(2\pi c/a)$，$\omega_g=0.487(2\pi c/a)$ 与完整晶体的结果略有不同．根据参考文献[8]，长方形散射子完整晶体的 $\Delta\omega=0.053(2\pi c/a)$，$\omega_g=0.480(2\pi c/a)$ 当形成镜面对称结构时($\theta_r=-\theta_l=28°$)，$\Delta\omega=0.040(2\pi c/a)$，$\omega_g=0.382(2\pi c/a)$．

通过和长方形散射子的比较可以看出，形成镜面对称后对于六角形来说变化不是很大，这是因为六角形的对称性较高，$\theta=15°$ 和 $\theta=-15°$ 对于六角形来说变化不是很大．另外在这种情况下，我们并没有发现界面态，这和圆形散射子四角形散射子的情况是一样的[7,8]．

为了得到界面态，我们对系统做两种操作，分别是横向拉开一段距离 dx 和沿着界面纵向错开一段距离 dy，其中 dx 从 $0.05a$ 到 $1.00a$，dy 从 $0.05a$ 到 $0.50a$ 逐步增加，计算结果如图 3，图 4 所示．在图 3 图 4 中横轴表示的是横向拉开或者纵向错开的距离，纵轴分别表示的是绝对带隙的宽度和绝对带隙中的界面态个数，左图实心球表示的都是横向拉开，右图空心球表示的都是纵向错开．从图中可以看出，dx 对能带结构的影响很大，在 $dx=0.05a$ 时，绝对带隙从 $\Delta\omega=0.018(2\pi c/a)$ 变成了 $\Delta\omega=0$，在步长的变化过程中，绝对带隙的宽度和界面态个数的变化似乎没有规律可循．这说明它们敏感地依赖于 dx 的大小．对于纵向错开我们可以得到相似的结果．这个性质对实际的应用是很有利的，可以按照需要调整能带结构．还可以通过调整正方格子相对于界面横向拉开或者纵向错开的距离来人工控制界

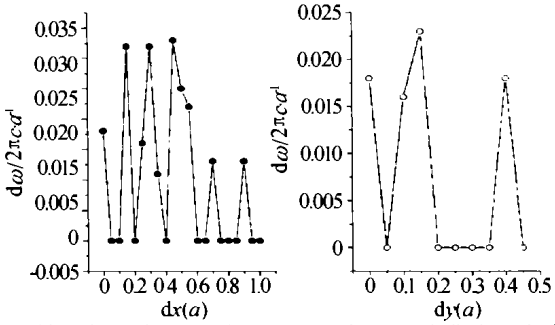

图 3 横向拉开和纵向错开一段距离后绝对带隙的宽度图

Fig. 3 The width of the absolute PBG when the lattice is separated from the interface or slipped along the interface

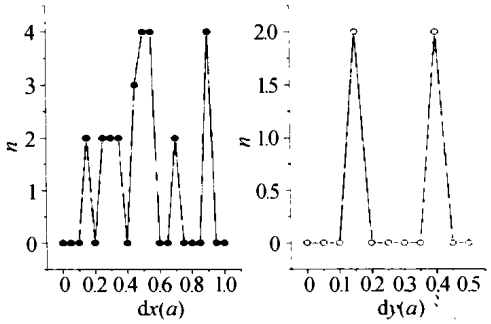

图 4 横向拉开和纵向错开一段距离后绝对带隙中界面态个数图

Fig. 4 The number of interface states in the absolute PBG when lattice is separated from the interface or slipped along the interface

面态的位置．

在图 3 中，当 $dx = 0.45a$ 时绝对带隙的宽度为 $\Delta\omega = 0.033(2\pi c/a)$，同时在图 4 中的这个位置上有 3 个局域态，按照宽带隙、多界面态的原则，可以得到这是横向拉开镜面对称的结构的最佳参量，其能带结构如图 5 所示．其中实线表示的是 TE mode，虚线表示的是 TM mode. 两条水平线之间表示的是光子晶体绝对带隙．圆点（圆圈）线表示的是 TE（TM）mode 界面态．在绝对带隙中发现有 2 个 TE mode，1 个 TM mode. 同样仿照上边的分析我们得到纵向错开的最佳参量为 $dy = 0.15a$，其能带结构如图 6 所示，绝对带隙的宽度为 $\Delta\omega = 0.023(2\pi c/a)$，绝对带隙中仅有 2 个 TE mode 界面态．

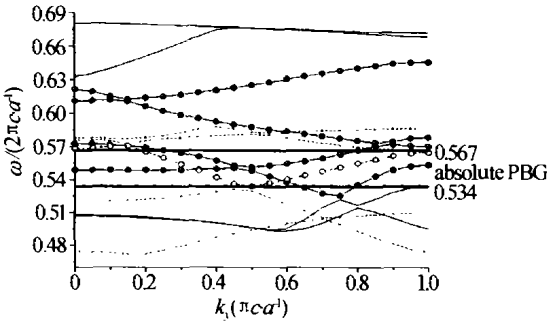

图 5　正方格子相对于界面横向拉开 $dx = 0.45a$ 二维六角散射子光子晶体带隙图

Fig. 5　PBG structures of the two-dimensional photonic crystal when the lattice is separated from the interface by $dx = 0.45a$

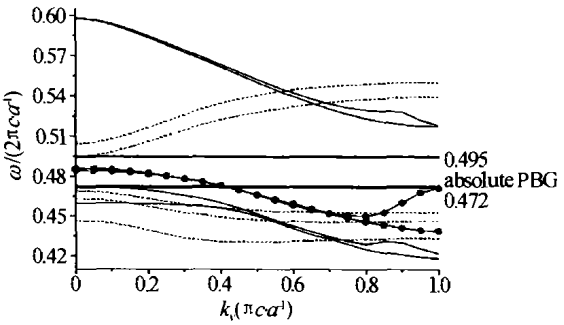

图 6　正方格子相对于界面纵向错开 $dy = 0.15a$ 二维六角散射子光子晶体带隙图

Fig. 6　PBG structures of the two-dimensional photonic crystal when the lattice is slipped along the interface by $dy = 0.15a$

通过图 5 和图 6 的对比，前者的带隙宽于后者的，界面态的个数也多于后者．这说明横向拉开更有利于界面态的产生，文献[8]中计算了正方形散射子也有相同的性质，但是对于长方形散射子则没有类似的性质．看来到底拉开好还是错开好只能视其具体结构而论．

将本文与文献[7]比较：在绝对带隙中发现了界面态，而文献[7]只是在极化带隙中发现界面态．我们认为主要原因是圆柱散射子的对称性较高，在这种体系中不太容易破坏对称性性．与文献[8]比较：我们计算镜面对称系统的绝对带隙明显小于文献[8]的，原因同样在于对称性，长方形和正方形散射子的旋转对称性都比六角形的低，以上分析表明：对称性对界面态有重要的影响．对称性破坏的越严重，越有利于界面态．

3　结论

计算了六角形散射子在二维正方格子中的光子晶体镜面对称结构的界面态．发现保持晶格完整时不能产生界面态．只有当沿界面横向拉开或者纵向错开时，才能产生界面态，横向拉开更有利于界面态的产生．

参考文献

1　Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phy Rev Lett*, 1987, **58**(20): 2059 ~ 2062

2　Joannopouls J D, Mead R D, Winn J N. Photonic crystal: molding the flow of light, New York Princeton University Press, 1995. 80 ~ 115

3　Netti M C, Charlton M D B, Parker G J, *et al.* Visible photonic band gap engineering in silicon nitride wave guides. *Appl Phys Lett*, 2000, **76**(8): 991 ~ 993

4　Tokushima M, Kosaka H, Tomita A, *et al.* Lightwave propagation through a 120° sharply bent single-line-defect photonic crystal wave guide. *Appl Phys Lett*, 2000, **76**(8): 952 ~ 954

5　Ouyang Z B, An H N, Ruan S C, *et al.* Promoting the coupling effeciency of waves by a 2D photonic crystals. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(1): 69 ~ 72

6　许桂雯，欧阳征标，安鹤男，等．光子晶体缺陷模的带宽与品质因子研究．光子学报，2003，**32**(9): 1079 ~ 1082
Xu G W, Ouyang Z B, An H N, *et al. Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(9): 1079 ~ 1082

7　Lin Lan-Lan, Li Zhi-Yuan. Interface states in photonic crystal heterostructures. *Phys Rev B*, 2001, **63**(10): 1103 ~ 1106

8　Zhou Y S, Gu B Y, Wang F H. Guided modes in photonic crystal heterostructure composed of rotating non-circular air cylinders in two-dimensional lattices. *J Phys Condens Matter*, 2003, **15**(10): 4109 ~ 4118

9　Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap: in periodic dielectric structures. *Phys Rev Lett*, 1990, **65**(25): 3152 ~ 3155

10　Li Z Y, Wang J, Gu B Y. Creating of partial band gaps in anisotropic photonic-band-gap structures. *Phys Rev B*, 1998, **58**(7): 3721 ~ 3729

11　Wang R Z, Wang X H, Gu B Y, *et al.* Effect of shapes and orientations of scatters and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals. *J Appl Phys*, 2001, **90**(9): 4307 ~ 4313

Guide Modes in Photonic Crystal Heterostructures Composed of Hexagon Air Rods in Two-dimensional Lattices

Che Ming, Liu Jiangtao

Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100037

Received date: 2002-10-19

Abstract The interface states in absolute photonic band gap (PBG) of photonic crystal heterostructures composed of two semi-infinite two-dimensional photonic crystals, in which the hexagon air cylinders set on the square lattices are studied. The PC structures of this heterostructures are calculated by use of the plane-wave expansion method in combination with a super cell technique. The calculated results show that there are some interface states appearing in the absolute PBG in the mirror symmetric heterostructures when the lattice is separated from the interface or slipped along the interface , the width of absolute gap and the number of the interface states depend on the geometric and physical parameters of the heterostructures. Comparing the results of hexagon cylinders with that of both square and circular cylinders, the property of hexagon cylinders is superior to circular cylinders, and inferior to square cylinders. It is believed that this result is due to the symmetry of hexagon cylinders that is between both circular and square.

Keywords Photonic crystals; Absolute gap; Interface state

Che Ming was born in 1980. He is a master degree student at present. His major interest is the theory and application of photonic crystals.