

# 在高频区存在巨带隙的长方晶格二维光子晶体

梁华秋 冯尚申

(台州学院物理系,浙江临海 317000)

**摘要** 本文利用降低光子晶体的对称性来提高绝对禁带宽度,提出两种长方结构长方介质柱二维光子晶体,用快速平面波展开法研究其高频区的带结构.经参数优化发现,长方晶格包含一套介质柱时,最大绝对禁带宽度  $\Delta\omega$  为  $0.1265\omega_c$  ( $\omega_c = 2\pi c/a$ ,  $a$  为晶格常数,  $c$  为光速),绝对禁带中心频率  $\omega_{mid}$  为  $1.9256\omega_c$ ,  $\Delta\omega/\omega_{mid} = 6.6\%$ ;当长方晶格包含两套介质柱时,最大绝对禁带宽度为  $0.203\omega_c$ ,绝对禁带中心频率为  $1.8597\omega_c$ ,  $\Delta\omega/\omega_{mid} = 10.9\%$ .

**关键词** 光子晶体;长方晶格;快速平面波展开法;巨带隙

**中图分类号** TN203 **文献标识码** A

## 0 引言

由于二维光子晶体制作相对容易,又具有广泛的应用前景<sup>[1-3]</sup>,二维光子晶体的研究也越来越引起人们的关注.目前,在探索具有大带隙、高稳定性的二维光子晶体上已做了大量的工作,并已取得较多的研究成果<sup>[4-15]</sup>.对于一定的工作波长,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数将越大,这有利于实验制造;另一方面,光子晶体的绝对禁带宽度越大,一般来说其性能越稳定.所以,寻找结构简单、高归一化中心频率又具有大带隙的光子晶体十分重要.根据经验法则,降低对称性,能增大其带隙<sup>[4-6]</sup>.降低对称性的一般方法有:采用各向异性材料<sup>[6]</sup>、改变晶胞和介质柱的形状<sup>[9-15]</sup>;Shen等<sup>[7,10,11]</sup>提出高介电材料的离散结构在高频区可以产生较大绝对禁带.文献[9]报道了最简单的正方结构正方介质柱光子晶体其绝对禁带宽度也可达  $0.037\omega_c$  (其中  $\omega_c = 2\pi c/a$ ),中心频率在  $0.6696\omega_c$ ,但未发现在高频区存在绝对禁带.我们从该结构出发,将正方结构变为长方结构,将正方介质柱改为长方介质柱,通过参数优化,发现绝对禁带宽度大大提高,在高频区绝对禁带宽度可达  $0.1265\omega_c$ ,绝对禁带中心频率为  $1.9256\omega_c$ ,绝对禁带宽度与中心频率之比为  $6.6\%$ ;为了进一步提高绝对禁带宽度和稳定性,在长方介质柱基础上再插入一套长方介质柱,使两套长方介质柱整齐排列,通过全程搜索,进行参数优化,发现该结构在高频区绝对禁带宽度高达  $0.203\omega_c$ ,绝对禁带中心频率为  $1.8597\omega_c$ ,绝对禁带宽度与中心频率比值达到了  $10.9\%$ ,这种结构的光子晶体在高频区绝对禁带宽度大大优于目前已提出的光子晶体<sup>[10,11,15]</sup>.

## 1 数值计算结果分析

本文选用最常见的半导体材料 GaAs(相对介电常数  $\epsilon = 11.4$ ,它有成熟的刻蚀工艺)和空气作为光子晶体的介质,提出两种长方晶格长方介质柱光子晶体结构.本文提出的光子晶体结构,介质分界面都为平面且各分界面互相平行或垂直,周期性单元具有通过其中心旋转  $90^\circ$  对称,并且左右、上下都呈镜像反射对称.这一类光子晶体的结构可以看成由很多长方形(或正方形)像素组成,因此把这一类光子晶体称为像素型光子晶体.已有的研究表明,二维光子晶体的 E 偏振波的能带可以用 Ho 等人的平面波展开法<sup>[5]</sup>进行快速精确计算,但对于 H 偏振波,已有的平面波展开法收敛速度很慢,既费时精度又低.对像素型光子晶体,Shen 等对 Ho 的平面波方法加以修正,为 H 偏振波建立相应的快速平面波展开法,并提出多种大带隙的正方结构光子晶体<sup>[7,10,11]</sup>.Feng 等人把这种快速平面波展开法推广到长方晶格,来寻求更大带隙的光子晶体结构,取得了很好的效果<sup>[15]</sup>.我们用这种修正后能适用于长方晶格光子晶体带结构计算的快速平面波展开法计算文献[9]提出的正方结构正方介质柱光子晶体(令  $a = b$ ,即为正方结构),得到的结果与文献完全一致,而文献[9]采用的是平面波展开法,这说明本文采用的快速平面波展开法是有效、可靠的.因此利用这种快速平面波展开法<sup>[15]</sup>,对这两种长方晶格像素型光子晶体进行数值计算.

1)简单长方晶格长方介质柱光子晶体结构如图1(a),晶格常数分别为  $a, b$ ,由于对称性,可以用第一象限的  $1/4$  周期单元介质分布即可描述整个结构,介质的坐标与宽度参数见图1(b),图1(b)为  $1/4$  原胞,边长为  $2w, 2s$  的长方介质柱处在原胞的顶角,需要设计的参数有  $b, w$  和  $s$ .按常规的优化方

法,固定  $b, w, s$  中的其中两个参数不变,改变另外一个参数,经过反复的参数优化,发现当  $b=0.222a$ 、 $w=0.059a$ 、 $s=0.0798a$  时,在高频区绝对禁带宽度  $\Delta\omega = 0.1265\omega_e$ ,绝对禁带中心频率  $\omega_{mid} = 1.9256\omega_e$ ,  $\Delta\omega/\omega_{mid} = 6.6\%$ ,其能带结构如图 2(a),图中虚线对应 E 偏振波,实线对应 H 偏振波. 图 2(b)是在倒空间的布里渊区,中心是  $\Gamma$  点. 由图 2(a)可见,绝对禁带出现在 E 偏振的 3'-4'带和 H 偏振的 4-5 带之间,带结构很清晰. 如果把该光子晶体用于光通信领域,其工作波长为  $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$  的光波,则可以算出  $a = 2.98 \mu\text{m}$ 、 $b = 0.66 \mu\text{m}$ 、 $w = 0.18 \mu\text{m}$ 、 $s = 0.24 \mu\text{m}$ ,长方介质柱的尺寸为  $0.36 \mu\text{m} \times 0.48 \mu\text{m}$ .

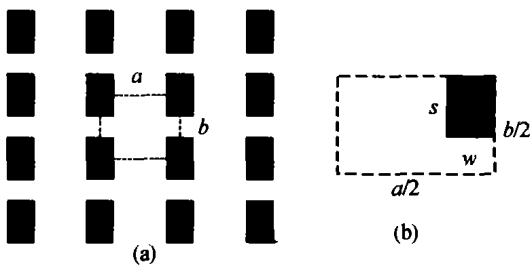


图 1 (a)简单长方晶格长方介质柱光子晶体结构图;(b)1/4 原胞结构参数

Fig. 1 (a)The structure of the simple rectangle lattice photonic crystal with rectangle dielectric rods;(b) Parameter of the 1/4 unit cell

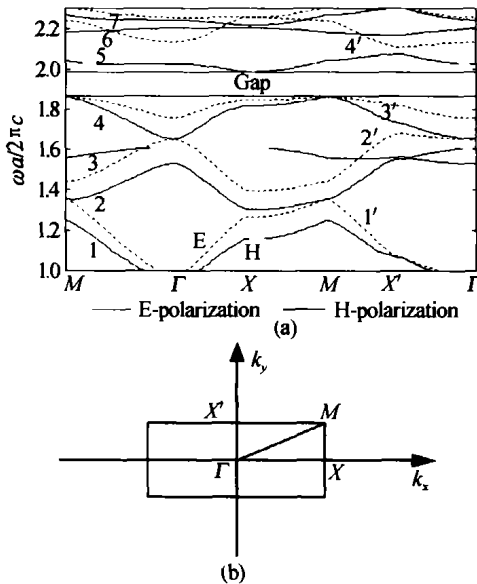


图 2 (a)当  $b=0.222a$ ,  $w=0.059a$ ,  $s=0.0798a$  时,光子晶体的能带分布;(b)布里渊区

Fig. 2 (a)The band structure of the photonic crystal while  $b = 0.222a$ ,  $w = 0.059a$ ,  $s = 0.0798a$ ;(b) The Brillouin zone

2)为了在高频区寻求更大带隙的光子晶体结构,在图 1(a)的基础上再插入一套长方介质柱,使两套长方介质柱整齐排列,这样的光子晶体结构如图 3(a),晶格常数分别为  $a, b$ ,1/4 原胞的结构参数如图 3(b). 由图 3 可见,需要设计的参数有  $b, w_1$ 、

$w_2, s$ ,采用同样的方法,进行全局参数搜索优化发现,当  $b = 0.298a$ 、 $w_1 = 0.031a$ 、 $w_2 = 0.059a$ 、 $s = 0.0718a$  时,该结构存在巨大的绝对禁带,其能带结构如图 4(布里渊区与图 2(b)相同).绝对禁带宽度  $\Delta\omega$  为  $0.203\omega_e$ ,绝对禁带中心频率  $\omega_{mid}$  为  $1.8597\omega_e$ ,绝对禁带宽度与中心频率比值提高到了 10.9%,这个结果比 Xiao 等<sup>[10]</sup>和 Shen 等<sup>[11]</sup>报道的结果都要高得多. 通过图 4 与图 2 的比较发现,插入另一套介质柱后,E 和 H 偏振的带结构分布向下移动,但在图 4 中 H 偏振带结构向下移动比较明显,使得 E 偏振的 3'-4'带与 H 偏振的 5-6 带重叠,构成了该光子晶体的绝对禁带,宽度明显增加,中心频率略有降低,参数  $b$  有明显的增加. 这可能是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 偏振波的电磁场能量也容易集中在离散结构的高介电材料内,插入一套较小的介质柱就是这种离散的一种表现.

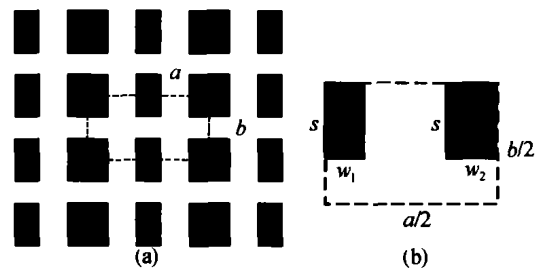


图 3 (a)长方晶格中包含两套整齐排列长方介质柱光子晶体结构图;(b)1/4 原胞结构参数

Fig. 3 (a)The structure of the rectangle lattice photonic crystal with two set of rectangle dielectric rods;(b) Parameter of the 1/4 unit cell

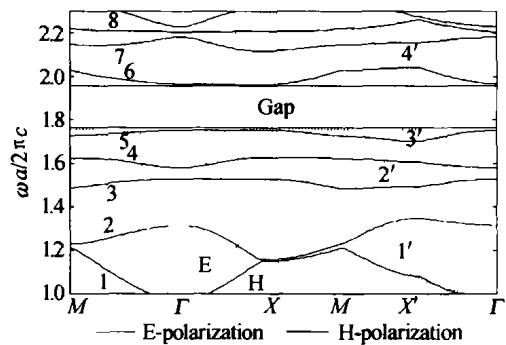


图 4 当  $b=0.298a$ ,  $w_1 = 0.031a$ ,  $w_2 = 0.059a$ ,  $s = 0.0718a$  时,光子晶体的能带分布

Fig. 4 The band structure of the photonic crystal while  $b = 0.298a$ ,  $w_1 = 0.031a$ ,  $w_2 = 0.059a$ ,  $s = 0.0718a$

图 5(a)是固定  $w_1 = 0.031a$ 、 $w_2 = 0.059a$ 、 $s = 0.0718a$  下,绝对禁带宽度  $\Delta\omega$  随着  $b$  的变化. 由图可见  $b$  在  $0.244a$  到  $0.308a$  之间,  $\Delta\omega$  均大于  $0.165\omega_e$ ,表明  $\Delta\omega$  随  $b$  的变化不敏感. 图 5(b)给出的是固定  $b = 0.298a$ 、 $w_2 = 0.059a$ 、 $s = 0.0718a$  时,  $\Delta\omega$  随  $w_1$  的变化,在峰值附近  $\Delta\omega$  随  $w_1$  变化不敏感. 图 5(c)、(d)是改变  $w_2$  和  $s$  时的  $\Delta\omega$  随着  $w_2$  和  $s$  的变化关系,由图可见存在两个峰位置,而且当  $0.083a < w_2$

$<0.111a$ ,  $0.088a < s < 0.116a$  时均出现一个变化比较平坦的区域,其完全禁带宽度相对变小,但均在  $0.1\omega_c$  以上. 同样如果把这种光子晶体应用到光通信 ( $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$ ) 领域,则根据峰值参数可求得  $a = 2.88$

$\mu\text{m}$ ,  $b = 0.86 \mu\text{m}$ ,  $w_1 = 0.09 \mu\text{m}$ ,  $w_2 = 0.17 \mu\text{m}$ ,  $s = 0.21 \mu\text{m}$ , 两个长方介质柱的尺寸分别为  $0.18 \mu\text{m} \times 0.41 \mu\text{m}$ ,  $0.34 \mu\text{m} \times 0.41 \mu\text{m}$ . 可见  $a$  略有减少,  $b$  有明显增加, 介质柱尺寸变化不大.

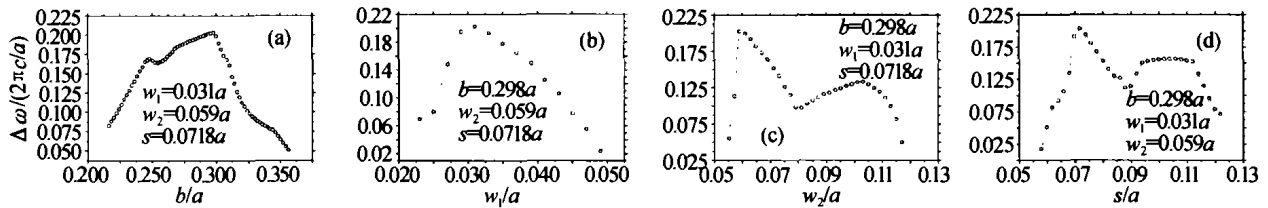


图 5 (a) 固定  $w_1, w_2, s$  不变, 绝对禁带宽度随着  $b$  的变化; (b) 固定  $b, w_2, s$  不变, 绝对禁带宽度随着  $w_1$  的变化; (c) 固定  $b, w_1, s$  不变, 绝对禁带宽度随着  $w_2$  的变化; (d) 固定  $b, w_1, w_2$  不变, 绝对禁带宽度随着  $s$  的变化

Fig. 5 (a) The photonic crystal band gap varies as  $b$ , while  $w_1, w_2, s$  are fixed; (b) The photonic crystal band gap varies as  $w_1$ , while  $b, w_2, s$  are fixed; (c) The photonic crystal band gap varies as  $w_2$ , while  $b, w_1, s$  are fixed; (d) The photonic crystal band gap varies as  $s$ , while  $b, w_1, w_2$  are fixed

## 2 结论

综上所述, 利用快速平面波展开法计算了本文提出的两种长方结构长方介质柱光子晶体, 通过参数优化, 发现这两种结构光子晶体在高频区存在巨大带隙, 对长方晶格只含一套介质柱时, 最大绝对禁带  $\Delta\omega$  为  $0.1265\omega_c$ , 绝对禁带中心频率  $\omega_{\text{mid}}$  为  $1.9256\omega_c$ ,  $\Delta\omega/\omega_{\text{mid}} = 6.6\%$ ; 当长方晶格包含两套介质柱时, 最大绝对禁带宽度为  $0.203\omega_c$ , 绝对禁带中心频率为  $1.8597\omega_c$ ,  $\Delta\omega/\omega_{\text{mid}} = 10.9\%$ , 这个结果优于目前已提出的其它高频区像素型光子晶体结构的结果, 如: Xiao 等在文献 [10] 中报道  $\Delta\omega = 0.1\omega_c$ ,  $\omega_{\text{mid}}$  为  $1.653\omega_c$ ,  $\Delta\omega/\omega_{\text{mid}} = 6\%$ . 在很多的情况下涉及的是禁带宽度的百分比,  $a$  的选取需要根据具体的要求来设计. 本文提出的光子晶体结构简单, 寻求高频区的大带隙的方法是有效的, 具有一定的应用价值.

### 参考文献

- Zhu Z H, Ye W M, Ji J R, et al. Analysis of photonic crystal filter. *Acta Photonica Sinica*, 2004, 33 (6): 700 ~ 703
- Mekis A, Chen J C, Kurland I, et al. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides. *Phys Rev Lett*, 1996, 77 (18): 3787 ~ 3790
- Ouyang Z B, An H N, Ruan S C, et al. Promoting the coupling efficiency of waves by a 2D photonic crystal. *Acta Photonica Sinica*, 2004, 33 (1): 69 ~ 72
- Anderson C M, Giapis K P. Larger two-dimensional photonic band gaps. *Phys Rev Lett*, 1996, 77 (14): 2949 ~ 2952
- 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
- Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z. Large absolute band gap in 2D anisotropic photonic crystals. *Phys Rev Lett*, 1998, 81 (12): 2574 ~ 2577
- Feng S S, Shen L F, He S L, et al. A two-dimensional pixel-type of photonic crystal structure with a large complete band gap at high frequency. *Acta Optica Sinica*, 2003, 23 (9): 1025 ~ 1029
- Lalanne P. Effective properties and band structure of lamellar subwavelength crystals: plane-wave method revisited. *Phys Rev B*, 1998, 58 (20): 9801 ~ 9807
- Kee C S, Kim J E, Park H Y. Absolute photonic band gap in a two-dimensional square lattice of square dielectric rods in air. *Phys Rev E*, 1997, 56 (6): 6291 ~ 6293
- Xiao S S, Shen L F, He S L. Large complete band gap at low and high frequencies in a two-dimensional anisotropic photonic crystal. *Acta Physica Sinica*, 2002, 51 (12): 2858 ~ 2864
- Shen L F, He S L, Xiao S S. Large absolute band gaps in two-dimensional photonic crystals formed by large dielectric pixels. *Phys Rev B*, 2002, 66 (16): 165315-1 ~ 165315-6
- Agio M, Andreani L C. Complete photonic band gap in a two-dimensional chessboard lattice. *Phys Rev B*, 2000, 61 (23): 15519 ~ 15522
- Li Y, Zheng R S, Tian J S, et al. Photonic band of quasi-fractal photonic crystal structure. *Acta Photonica Sinica*, 2004, 33 (10): 1218 ~ 1221
- Feng S S, Shen L F, He S L. A two-dimensional anisotropic photonic crystal with a large absolute band gap. *Acta Photonica Sinica*, 2003, 32 (2): 235 ~ 238
- Feng S S, Shen L F, He S L. A two-dimensional photonic crystal formed by a triangular lattice of square dielectric rods with a large absolute band gap. *Acta Physica Sinica*, 2004, 53 (05): 1540 ~ 1545

## Giant Band Gaps of Rectangle Lattice 2D Photonic Crystal at High Frequency

Liang Huaqiu, Feng Shangshen

*Department of Physics, Taizhou College, Linhai, Zhejiang Province 317000*

Received date: 2004-04-13

**Abstract** The absolute band gap is improved by reducing the symmetry of the photonic crystal, two structures of the rectangle lattice 2D photonic crystal with rectangle dielectric rods is put forward. The modified plane-wave expansion method for calculating quickly the band structure is used to study the absolute band structure at high frequency field, parameters is optimized, when rectangle lattice 2D photonic crystal contains only one set of rectangle dielectric rods, an absolute band gap  $\Delta\omega = 0.1265\omega_e$  (where  $\omega_e = 2\pi c/a$ ,  $a$  is the lattice constant,  $c$  is light speed) is found at a high frequency field, which mid-frequency  $\omega_{\text{mid}} = 1.9256\omega_e$ ,  $\Delta\omega/\omega_{\text{mid}} = 6.6\%$ ; when rectangle lattice 2D photonic crystal contains two set of rectangle dielectric rods, a larger absolute band gap  $\Delta\omega = 0.203\omega_e$  is also found at a high frequency field, which mid-frequency  $\omega_{\text{mid}} = 1.8597\omega_e$ ,  $\Delta\omega/\omega_{\text{mid}} = 10.9\%$ .

**Keywords** Photonic crystal; Rectangle lattice; Modified plane-wave expansion method; Giant band gaps

**Liang Huaqiu** was born in 1967. He graduated from Zhejiang Normal University in 1988. He is a lecturer of Department of Physics in Taizhou College. His major research field is photonic crystal.