

二维 Kagome 格子光子晶体禁带的数值模拟*

杨毅彪^{1,2} 王云才² 李秀杰¹ 梁 伟¹

(1 太原理工大学材料科学与工程学院, 太原 030024)

(2 太原理工大学应用物理系, 太原 030024)

摘 要 采用平面波展开法模拟计算了由空气背景中的介质柱构成的二维 Kagome 格子光子晶体的能带结构, 得到了使完全光子禁带最大化的结构参量. 计算结果表明: 由圆形、正六边形和正四边形三种不同形状介质柱构成的 Kagome 格子光子晶体都出现了完全光子禁带, 最大禁带分别为 $\Delta=0.014(\omega a/2\pi c)$ 、 $\Delta=0.013(\omega a/2\pi c)$ 、 $\Delta=0.011(\omega a/2\pi c)$. 发现由圆形和正六边形两种介质柱构成的 Kagome 格子光子晶体在填充比连续变化的较大的范围内都有宽度较为稳定的完全禁带, 且它们具有非常相似的能带结构.

关键词 光子晶体; 光子禁带; 平面波展开法; Kagome 格子

中图分类号 O482.3 **文献标识码** A

0 引言

在介电常量呈空间周期性变化的材料中, 电磁波传播时会受到调制而形成能带结构. 光子能带之间可能出现光子禁带, 电磁波的频率如果在光子禁带范围内, 将不能在光子晶体中传播. 这种由不同介电常量的材料在空间中有序排列形成的周期性介电结构就是光子晶体(Photonic Crystals), 又称为光子带隙材料(Photonic Bandgap Materials). 由于光子晶体通过光子禁带以及禁带中的缺陷态可以很方便地禁止或允许一定频率的光子通过, 使其在基础研究、材料制备和实际应用上都有着巨大的科学价值和广泛的应用前景. 自从 1987 年 E. Yablonovitch^[1] 和 S. John^[2] 提出了光子晶体的概念以来, 光子晶体已成为物理学和材料科学的研究热点.

光子晶体的应用是基于光子禁带的存在和禁带的大小, 在理论上需要研究不同结构光子晶体的禁带性质, 设计出禁带尽可能大的光子晶体材料. 计算光子晶体能带常用的方法有时域有限差分法^[3]、平面波展开法^[4,5]、传输矩阵法^[6]、有限元法、多重散射法等. 如何有效利用这些方法计算光子晶体的结构参量和选取合适的介质材料是目前光子晶体研究的一个基本课题. 对于二维光子晶体, 在建立模型、模拟计算和材料制备上都较为容易, 同时二维光子晶体比三维光子晶体更容易在可见光和红外频率范围产生带隙^[7]. 二维 Kagome 格子是由交错的三角形构成的类似竹篮子样式的结构, 每个格点有四个

近邻^[8]. 具有 Kagome 格子结构的材料在制备^[9,10]和反铁磁性研究^[11,12]方面近年已有文献报道, 同时 Kagome 结构的材料对于光子晶体光纤也具有潜在的应用价值^[13,14]. 本文将固体物理学中计算能带常用的平面波展开法应用于光子晶体, 通过数值计算给出了三种在空气中的介质柱构成的二维 Kagome 格子光子晶体的能带结构, 以期对二维光子晶体材料的制备和应用提供理论依据.

1 计算方法和二维 Kagome 格子光子晶体模型

如果不存在源且介质是不导电, 光子晶体的能带结构可以通过求解麦克斯韦方程组来得到. 取 $\mu=1$, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{i\omega t}$, 可以得到 \mathbf{H} 场的定态波动方程

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

电磁波在周期势 $\epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = \epsilon(\mathbf{r})$ 中, 解用波矢 \mathbf{k} 表征. 根据 Bloch 定理, $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 和介电常量的倒数 $\eta(\mathbf{r}) = 1/\epsilon(\mathbf{r})$ 可以展开为

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} H_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

$$\eta(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \eta_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

式中导格矢 $\mathbf{G} = la + mb + nc$, 将式(2), (3)代入式(1)可得在倒格子空间 \mathbf{H} 场的本征方程

$$-\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \eta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} \quad (4)$$

对于本文讨论的二维情况, 电磁波可以分解为 E 偏振(TM 模)和 H 偏振(TE 模). 由式(4)分解可得 H 偏振(TE 模)时只有 z 分量的 \mathbf{H} 场的对称矩阵本征值方程.

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G})(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \eta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} H_{z, \mathbf{k}, \mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} H_{z, \mathbf{k}, \mathbf{G}} \quad (5)$$

*国家自然科学基金和 TiAl 基金合金固体渗硅层的形成及抗氧化机理研究(批准号: 50171046)资助项目
Tel: 0351-6018398 Email: yangyibiao_tyut@sohu.com
收稿日期: 2005-01-20

TM 模的 E 场的本征值方程也可同理给出. 由于 G 可取无穷多个倒格矢, 式(1)代表无穷多个方程. 规定光子晶体中两个介质的介电常量 ϵ_a 、 ϵ_b , 可通过数值计算求出电磁场的能带结构, 即 $k-\omega$ 关系. 通常取 $N > 300$ 个平面波时, 有较好的收敛性^[15]. 二维光子晶体对 TM 模和 TE 模的电磁波具有不同的能带结构. 若两种模式的电磁波在某些频率范围都存在禁带, 且二者的禁带重合, 光子晶体就具有一个完全的光子禁带, 所有模式的电磁波都不能在其中传播.

目前对二维光子晶体的研究大多采用砷化镓材料, 对由半导体材料锗构造的光子晶体的计算还不多见. 本文计算中采用的介质为半导体材料锗 Ge, 介电系数为 $\epsilon = 16.0$, 在空气背景($\epsilon = 1.0$)中由互相平行而沿轴向无限伸展的实心直柱构成二维周期性阵列. 本文研究的 Kagome 格子分别由三种不同形状的介质柱构成: (a)圆柱、(b)正六边形柱、(c)正四边形柱. 由锗介质柱构成的三种二维 Kagome 格子光子晶体的晶格结构如图1, 图中实心单元代表

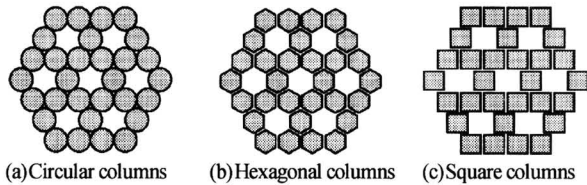


图1 二维 Kagome 格子光子晶体的晶格结构
Fig.1 2-D photonic crystals with Kagome lattice

锗介质柱, 相邻两柱的中心距 a 为晶格常量. 设圆柱的直径为 d_1 、正六边形柱的对边距离为 d_2 、正四边形柱的边长为 d_3 . 当填充比最大时, $d_1 = a$ 、 $d_2 = a$ 、 $d_3 = 0.8660 a$. 三种晶格结构的填充比分别为

$$f_1 = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \times \frac{d_1^2}{a^2} \quad f_2 = \frac{3}{4} \times \frac{d_2^2}{a^2} \quad f_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{d_3^2}{a^2}$$

2 数值计算结果和讨论

通过数值计算, 发现由锗圆柱排列成的 Kagome 结构光子晶体, 当圆柱直径在 $d_1 = 0.51a$ 到 $d_1 = 0.69a$ 较大范围连续变化时, 都存在 TM 模禁带和 TE 模禁带相重叠的完全光子禁带. 完全禁带宽度介于 $\Delta = 0.007(\omega a/2\pi c)$ 至 $\Delta = 0.014(\omega a/2\pi c)$ 之间, 且禁带宽度随参量 d_1 的变化较为缓慢. 当圆柱直径在 $d_1 = 0.84a$ 到 $d_1 = 0.90a$ 小范围内连续变化时, 也出现完全光子禁带. 完全禁带宽度介于 $\Delta = 0.006(\omega a/2\pi c)$ 至 $\Delta = 0.009(\omega a/2\pi c)$ 之间. 通过优化计算, 发现当圆柱直径 $d_1 = 0.59a$ (填充比 $f = 0.237$) 时完全禁带最大, TE 模和 TM 模的色散曲线如图2. 图中实线表示 TM 模, 虚线表示 TE 模.

纵坐标为归一化频率 $(\omega a/2\pi c)$, 横坐标为 Bloch 波矢. 图中 TM 模的第二禁带和 TE 模的第二禁带有部分发生重叠, 完全禁带宽度 $\Delta = 0.373 - 0.359 = 0.014(\omega a/2\pi c)$.

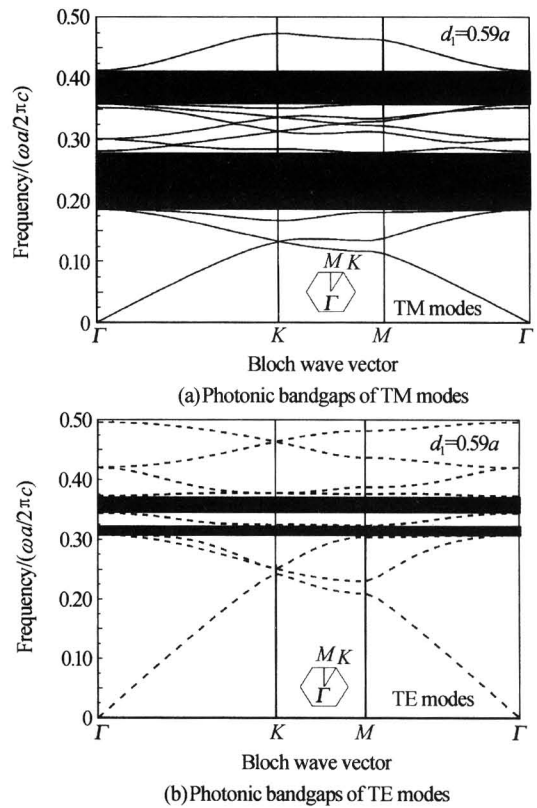


图2 圆柱 Kagome 格子光子晶体的色散曲线
Fig.2 Dispersion diagram of the Kagome lattice photonic crystals with circular columns

对于正六边形介质柱排列成的 Kagome 结构, 当正六边形对边距离在 $d_2 = 0.50a$ 到 $d_2 = 0.64a$ 较大范围连续变化时, 都存在 TM 模禁带和 TE 模禁带相重叠的完全光子禁带. 完全禁带宽度介于 $\Delta = 0.007(\omega a/2\pi c)$ 至 $\Delta = 0.013(\omega a/2\pi c)$ 之间, 且禁带宽度随参量 d_2 的变化较为缓慢. 六边形对边距离从 $d_2 = 0.80a$ 到 $d_2 = 0.86a$ 小范围内连续变化时, 也存在完全光子禁带. 完全禁带宽度介于 $\Delta = 0.005(\omega a/2\pi c)$ 至 $\Delta = 0.009(\omega a/2\pi c)$ 之间. 当六边形对边距离 $d_2 = 0.58a$ (填充比 $f = 0.252$) 时完全禁带最大, TM 模和 TE 模的色散曲线如图3. 图中 TM 模的第二禁带和 TE 模的第二禁带有部分发生重叠, 完全禁带宽度 $\Delta = 0.364 - 0.351 = 0.013(\omega a/2\pi c)$.

由正四边形介质柱排列成的 Kagome 结构光子晶体, 正四边形边长从 $d_3 = 0.70a$ 到 $d_3 = 0.78a$ 范围内连续变化时, 也存在完全光子禁带, 完全禁带宽度介于 $\Delta = 0.007(\omega a/2\pi c)$ 至 $\Delta = 0.011(\omega a/2\pi c)$ 之间. 当正四边形边长 $d_3 = 0.75a$ (填充比 $f = 0.487$) 时完全禁带最大, 完全禁带宽度 $\Delta = 0.174 - 0.163 = 0.011(\omega a/2\pi c)$. TM 模和 TE 模的色散曲线如图

4. 图中 TM 模的第一禁带和 TE 模的第一禁带有部分发生重叠, 在低能区出现完全光子禁带.

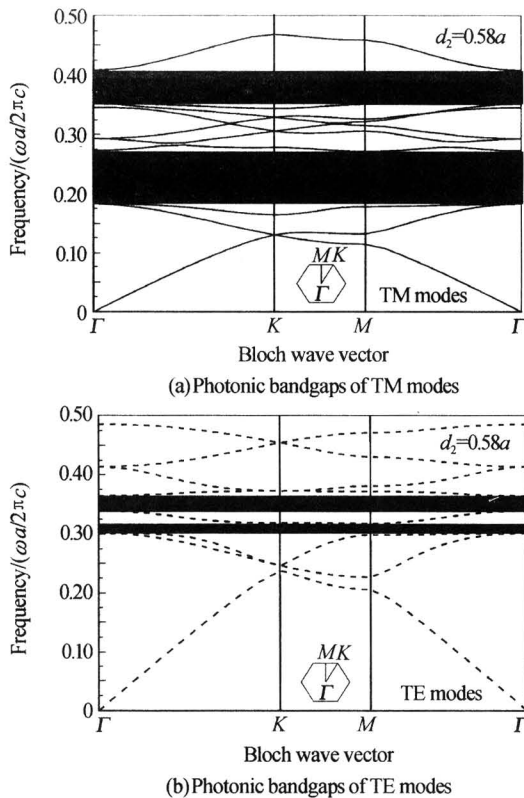


图 3 正六边形柱 Kagome 格子光子晶体的色散曲线
Fig. 3 Dispersion diagram of the Kagome lattice photonic crystals with hexagonal columns

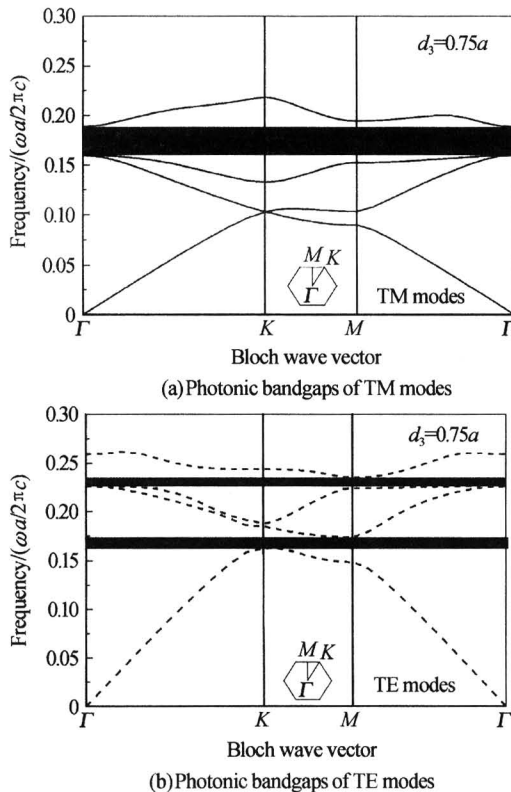


图 4 正四边形柱 Kagome 格子光子晶体的色散曲线
Fig. 4 Dispersion diagram of the Kagome lattice photonic crystals with square columns

计算结果表明, 由圆形、正六边形和正四边形三种不同形状介质柱构成的 Kagome 结构光子晶体都出现了完全光子禁带, 最大禁带宽度很接近, 分别为 $\Delta=0.014(\omega a/2\pi c)$ 、 $\Delta=0.013(\omega a/2\pi c)$ 、 $\Delta=0.011(\omega a/2\pi c)$. 与 TE 模禁带、TM 模禁带和完全光子禁带相对应的归一化频率都随填充比的增大而向低频方向移动. 图 5 模拟出了圆形和正六边形介质柱构成的两种 Kagome 结构光子晶体的 TM/TE 模禁带, 图中纵坐标为归一化频率 $(\omega a/2\pi c)$, 横坐标分别为圆柱直径 d_1 和正六边形对边距离 d_2 与晶格常量 a 的比值, 实线包围的区域为 TM 模禁带, 虚线包围的区域为 TE 模禁带. 可以看出, 这两种 Kagome 结构光子晶体具有非常相似的禁带结构, 并且在填充比连续变化的较大的范围内都有较为稳定的完全禁带宽度, 这就相对降低了对光子晶体材料制备的要求.

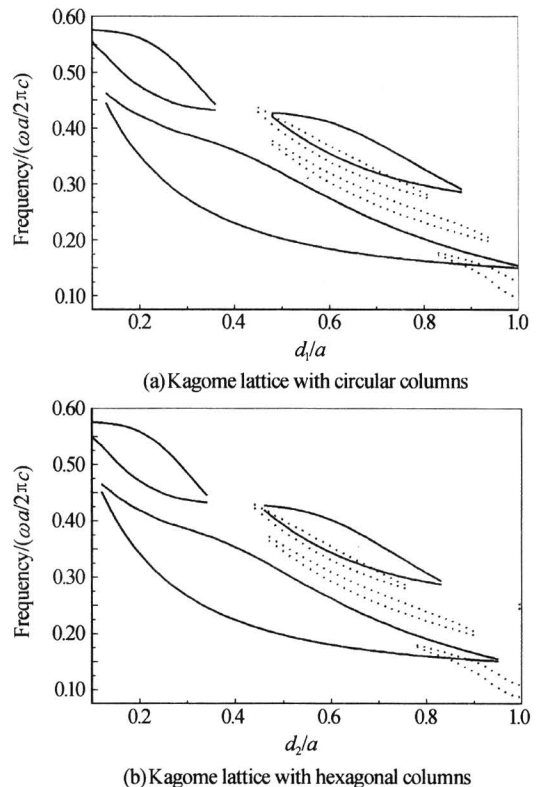


图 5 圆柱和正六边形柱 Kagome 格子光子晶体 TM/TE 模的禁带

Fig. 5 TM and TE band gaps of the Kagome lattice photonic crystals

通过计算, 发现由 TM 模光子禁带和 TE 模光子禁带重叠而形成的完全光子禁带都出现在填充比 f 介于 $0.177 \sim 0.555$ 的范围内. 这是因为, 对于二维 Kagome 格子光子晶体, 当填充比较小, 介质柱孤立分布在空气背景中, 容易出现较大的 TM 模光子禁带, 而不易产生 TE 模光子禁带. 随着介质柱逐渐增大, 介质柱之间的空气层逐渐变薄, 介电材

料的连通性变好, TM 模光子禁带宽度变小, 转而会有利于形成 TE 模光子禁带. 作为验证, 还进一步计算了空气柱分布在高介电材料中的二维 Kagome 格子光子晶体, 发现介质较为连续分布的结构中容易出现 TE 模光子禁带. 上述结果与介质柱分布在空气中以及空气柱分布在介质中的 Square 格子光子晶体^[16]和 Triangular 格子光子晶体^[17]中的 TM 模禁带和 TE 模禁带出现的规律是一致的.

3 结论

本文利用平面波展开法模拟计算了由空气背景中的介质柱构成的二维 Kagome 格子光子晶体的能带结构. 发现圆形、正六边形和正四边形三种不同形状介质柱构成的 Kagome 结构光子晶体都出现了完全光子禁带, 最大禁带宽度很接近, 分别为 $\Delta=0.014(\omega a/2\pi c)$ 、 $\Delta=0.013(\omega a/2\pi c)$ 、 $\Delta=0.011(\omega a/2\pi c)$. 其中锲圆柱和正六边形柱排列成的 Kagome 结构光子晶体具有非常相似的能带结构, 同时发现由这两种介质柱构成的光子晶体在填充比连续变化的较大的范围内都有宽度较为稳定的完全禁带.

参考文献

- 1 Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(23): 2486~2489
- 3 李岩, 郑瑞生, 田进寿, 等. 一种类分形结构光子晶体的能带. *光子学报*, 2004, **33**(10): 1218~1221
Li Y, Zheng R S, Tian J S, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(10): 1218~1221
- 4 Busch K, John S. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems. *Phys Rev (E)*, 1998, **58**(3): 3896~3908
- 5 Zhang Z, Satpathy S. Electromagnetic wave propagation in periodic structures; Bloch wave solution of Maxwell's equations. *Phys Rev Lett*, 1990, **65**(21): 2650~2653
- 6 崔应留, 蔡祥宝. 缺陷态复周期光子晶体的特性研究. *光子学报*, 2004, **33**(6): 704~707
Cui Y L, Cai X B. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(6): 704~707
- 7 Krauss T F, De La Rue R M, Brand S. Two dimensional photonic-bandgap structures operating at nearinfrared wavelengths. *Nature*, 1996, **383**(6602): 699~702
- 8 Mekata M. Kagome: The story of the basketweave lattice. *Physics Today*, 2003, **56**(2): 12
- 9 Balents L, Fisher M P A, Girvin S M. Fractionalization in an easy-axis Kagome antiferromagnet. *Phys Rev (B)*, 2002, **65**(22): 224412~223319
- 10 Mohan P, Nakajima F, Akabori M, *et al.* Fabrication of semiconductor Kagome lattice structure by selective area metalorganic vapor phase epitaxy. *Applied Physics Letters*, 2003, **83**(4): 689~691
- 11 Arrachea L, Capriotti L, Sorella S. From the triangular to the kagome lattice: Following the footprints of the ordered state. *Phys Rev (B)*, 2004, **69**(22): 224414~224423
- 12 Kimura T, Tamura H, Shiraishi K, *et al.* Magnetic field effects on the ferromagnetism and transport properties of Kagome dot superlattices. *Physica (E)*, 2002, **12**(1): 197~199
- 13 Benabid F, Knight J C, Antonopoulos G, *et al.* Stimulated raman scattering in hydrogen-filled hollow-core photonic crystal fiber. *Science*, 2002, **298**(5592): 399~402
- 14 阮双琛, 杨冰, 朱春艳, 等. 2.2W 掺 Yb³⁺ 双包层光子晶体光纤激光器. *光子学报*, 2004, **33**(1): 15~16
Ruan S C, Yang B, Zhu C Y, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(1): 15~16
- 15 冯端, 金国钧. 凝聚态物理学(上卷). 北京: 高等教育出版社, 2003. 163~166
Feng D, Jin G J. *Condensed Matter Physics (Volume I)*. Beijing: Higher Education Press, 2003. 163~166
- 16 Joannopoulos J D, Meade R D, Winn J N. Photonic crystal: Molding the Flow of Light. NJ: Princeton University Press, 1995
- 17 Yang X L, Cai L Z, Wang Y R. Larger bandgaps of two-dimensional triangular photonic crystals fabricated by holographic lithography can be realized by recording geometry design. *Optics Express*, 2004, **12**(24): 5850~5856

Numerical Simulation of the Photonic Bandgap of Two-dimensional Photonic Crystals with Kagome Lattice

Yang Yibiao^{1,2}, Wang Yuncai², Li Xiujie¹, Liang Wei¹

¹ College of materials science and engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024

² Department of applied physics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024

Received date: 2005-01-20

Abstract Plane wave expansion method was employed to simulate the bandgap of 2-D photonic crystals with Kagome lattice. The optimum structural parameters of photonic crystals with the largest complete bandgap were obtained. Complete bandgaps were obtained when the germanium columns were in the shape of circular, hexagonal and square, respectively. It is showed that the complete bandgaps can be attained steadily as the filling fraction is changed in a wide range for circular and hexagonal columns, and their band structures are similar.

Keywords Photonic crystals; Photonic bandgap; Plane wave expansion method; Kagome lattice

Yang Yibiao was born in 1967 in Shanxi Province, China. He got his B. S. degree at Physics Department, Jinan University. He has worked in Taiyuan University of Technology since 1987. Now he is a candidate for Ph. D. degree in Taiyuan University of Technology. His major research fields are the theory and application of photonic crystals. He has been an associate professor since 2001.

