

doi: 10.3788/gzxb20144306.0616003

## 二维介质柱型 Archimedes ( $4,8^2$ ) 复式晶格光子晶体禁带特性研究

韩昌盛, 杨毅彪, 王云才, 费宏明, 陈智辉, 李祥霞

(太原理工大学 物理与光电工程学院; 新型传感器与智能控制教育部重点实验室, 太原 030024)

**摘 要:**采用平面波展开法分别模拟了空气背景下由介质圆柱和方柱构造的二维 Archimedes ( $4,8^2$ ) 复式晶格光子晶体的能带结构, 讨论了介质柱形状、折射率、填充比和旋转对称性等因素对完全光子禁带的影响. 研究发现, 当折射率在 2.60 到 5.40 之间时, 介质圆柱和方柱构造的二维 Archimedes ( $4,8^2$ ) 复式晶格光子晶体都出现了完全光子禁带. 随着折射率的增大, 最大完全禁带宽度并非随之增大而是存在峰值, 介质圆柱型晶格在折射率为 2.80 时出现峰值; 介质方柱型晶格在折射率为 2.80 和 4.40 两处出现峰值, 且旋转介质方柱能够明显增大禁带宽度, 同时存在最佳旋转角度. 分析结果表明, 在最大完全禁带处, 折射率、填充比以及旋转角度等因素的变化对禁带特性的影响很小.

**关键词:**人工晶体; 光子带隙; 平面波展开法; 光子晶体; Archimedes 晶格; Maxwell 方程; 超材料; 光子器件; 光子集成技术

中图分类号: O481.1; O472.3

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2014)06-0616003-5

## Bandgap Characteristics of Two-dimensional Archimedes ( $4,8^2$ ) Compound Lattice Photonic Crystals with Dielectric Rods

HAN Chang-sheng, YANG Yi-biao, WANG Yun-cai, FEI Hong-ming, CHEN Zhi-hui, LI Xiang-xia  
(Key Laboratory of Advanced Transducers and Intelligent Control System, Ministry of Education,  
Department of Physics and Optoelectronic, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

**Abstract:** The bandgaps of the two-dimensional Archimedes ( $4,8^2$ ) lattice consisting of different dielectric circular and square rods were calculated with the plane wave expansion method. The bandgaps of the lattice with dielectric rods were investigated as the refractive index, dielectric rods shape, filling fraction and rotational symmetry changing. It was found that the width of the complete photonic bandgaps is not always increasing with the difference of the refractive index. The widest complete photonic bandgaps could be achieved in the ( $4,8^2$ ) structure when the refractive index is between 2.60 and 5.40. For the Archimedes ( $4,8^2$ ) lattice of circular dielectric rod, the width of complete bandgap reaches the maximum when the dielectric refractive index of rod is equal to 2.80. Also, the complete bandgap of square dielectric rod reaches the maximum when the dielectric refractive index equals 2.80 and 4.40. In addition, the rotation angle of square dielectric rods can significantly increase the width of complete bandgap. The results demonstrate that the quantity, width and frequency position of bandgaps can be modulated by changing the refractive index, the filling fraction and other structural parameters.

**Key words:** Synthetic crystals; Photonic band gap; Plane wave expansion method; Photonic crystals; Archimedes lattice; Maxwell equations; Metamaterials; Photonic devices; Photonic integration technology

**OCIS Codes:** 160.5298; 160.5293; 230.5298; 050.5298; 350.4328

基金项目: 国家自然科学基金 (Nos. 61274089, 61307069, 61340053) 资助

第一作者: 韩昌盛 (1989-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为二维光子晶体能带特性. Email: han\_changsheng@163.com

导师 (通讯作者): 杨毅彪 (1967-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为光子晶体能带结构及在光电器件中的应用研究. E-mail: yangyibiao\_tyut@sohu.com

收稿日期: 2013-11-07; 录用日期: 2014-02-14

<http://www.photon.ac.cn>

## 0 引言

光子晶体是不同介电常量的介质材料在空间呈周期性排布的结构,于1987年首次提出<sup>[1-2]</sup>以来,由于其广泛的应用潜力迅速成为国际学术界的研究热点.借鉴于成熟的半导体制备技术,二维光子晶体消除了三维光子晶体难于制备的劣势,同时比一维光子晶体拥有更广泛的应用,因此二维光子晶体的理论研究更具有实际意义.根据电矢量/磁矢量与传播方向的垂直关系,电磁波可以分解为TE和TM两种偏振模.如果在某些频率范围内,TE和TM模电磁波都无法透过光子晶体,该频率范围就称为光子晶体的完全光子禁带,完全光子禁带是光子晶体的最基本特征之一<sup>[3-4]</sup>.这一特征有许多重要的应用,例如光子晶体光纤<sup>[5]</sup>、滤波器<sup>[6]</sup>、高外量子效率发光二极管<sup>[7]</sup>、反射器<sup>[8]</sup>等.因此,理论上研究光子晶体结构参数对禁带特性的影响,并设计具有尽可能大的完全禁带的光子晶体对提高各种光学器件性能具有十分重要的意义.

降低光子晶体结构的对称性,可以部分解除布里渊区中高对称点处光子能带的简并对光子晶体带隙尺度的限制,增大完全光子禁带的频率范围.所以通过采用能够降低结构对称性的复式结构获得超宽完全禁带成为主要的研究方向之一.2012年,Fulya Bagci等<sup>[9]</sup>使用空气中的介质三角-六角晶格组成的复合二维光子晶体取得了相对带隙宽度为6.9%的完全禁带;Shi Peng等<sup>[10]</sup>采用空气中的GaAs圆柱和网格结构组成的复式正方/六角晶胞的二维光子晶体分别实现了相对带隙宽度为17.4%和20.1%的完全禁带.本文的Archimedes(4,8<sup>2</sup>)复式晶格结构具有更低的结构周期对称性,理论上愈加有利于宽禁带的形成;文献<sup>[11-12]</sup>是在固定的较大折射率材料情况下,研究晶格参数对禁带特性的影响.本文研究大范围折射率下晶格参数对禁带特性的影响,并且探索较低折射率材料所能取得的完全禁带更具有重要意义.

## 1 理论方法与结构模型

光子晶体的主要研究方法有平面波法<sup>[13-14]</sup>、传输矩阵法<sup>[15-16]</sup>、有限时域差分法<sup>[17-18]</sup>等,本文采用最为常用的平面波法.假设光子晶体材料是非磁性材料,因此磁导率 $\mu$ 等于真空中的磁导率 $\mu_0$ ,二维光子晶体的介电常量 $\epsilon(r)$ 在 $x-z$ 平面呈周期性变化,电磁波在光子晶体中的传播用Maxwell旋度方程表示为

$$\nabla \times E(r,t) = -\mu_0 \frac{\partial H(r,t)}{\partial t} \quad (1)$$

$$-\frac{1}{\epsilon(r)} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} E_0(r) = \frac{\omega^2}{c^2} E_0(r) \quad (2)$$

可以推导出表征光子晶体的本征值方程为

$$-\frac{1}{\epsilon(r)} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} E_0(r) = \frac{\omega^2}{c^2} E_0(r) \quad (3)$$

$\omega$ 是本征角频率, $c$ 为真空中的光速.结合利用布洛赫定理,最终得到一个含Hermitian矩阵的E偏振本征值方程,即

$$\sum_{G'} \kappa(G-G') |k+G| |k+G'| \xi_{G'} = \frac{\omega^2}{c^2} \xi_G \quad (4)$$

同理可得H偏振的本征值方程为

$$\sum_{G'} \kappa(G-G') (k+G) \cdot (k+G') \phi_{G'} = \frac{\omega^2}{c^2} \phi_G \quad (5)$$

比较本征方程(4)和(5)可以发现,E偏振(TM模)和H偏振(TE模)的禁带结构是有区别的,完全光子禁带就是不管对于E偏振还是H偏振该处都存在带隙.

Archimedes(4,8<sup>2</sup>)晶格光子晶体由截面为圆形或方形的介质柱构成,介质柱周期排列于空气背景中,其每个顶点周围依次是一个正四边形和两个正八边形,如图1(a)、(b)所示,黑色顶点代表垂直于平面的无限长介质柱,相邻的介质柱的中心距为晶格常量 $a$ ,介质圆柱的直径或方柱边长为 $d$ ,图1(c)为晶格的简约布里渊区, $\Gamma$ 、 $M$ 、 $X$ 为布里渊区对称点.

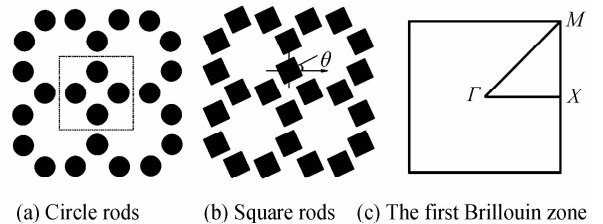


图1 二维 Archimedes(4,8<sup>2</sup>)晶格结构  
Fig. 1 Two-dimensional Archimedes(4,8<sup>2</sup>) lattice structure

## 2 数值计算结果及讨论

### 2.1 介质圆柱型 Archimedes(4,8<sup>2</sup>)晶格结构光子晶体禁带特性

如图2所示,对于空气背景下介质圆柱构造的Archimedes(4,8<sup>2</sup>)晶格结构光子晶体,利用平面波展开法研究其完全光子禁带随介质圆柱的折射率与填充比( $f=d/a$ )的变化关系.发现在介质柱材料折射率为 $n=2.20$ 到 $n=5.40$ 间都出现了完全光子禁带;保持介质圆柱折射率不变,连续改变填充比 $f=0.1 \sim 1.0$ (变化步长为0.01),寻找每种折射率材料的最大完全光子禁带,发现其最大完全光子禁带的宽度介于 $\Delta=0.01629(\omega a/2\pi c)$ 到 $\Delta=0.04842(\omega a/2\pi c)$ 之间.该结构在低折射率为2.20时就可以产生完全光子禁带,表明拥有更低晶格对称性的Archimedes(4,8<sup>2</sup>)晶格结构可以有效消除能级简并,更加有利于完全禁带的形成.并且介质圆柱构造的Archimedes(4,8<sup>2</sup>)晶格结构光子晶体的禁带宽度并非随着介电常量差值递增而是

存在一个峰值,说明要想取得最大的完全光子禁带,不能只局限于高介电常量差,而是要综合考虑各项结构参数.由图 2 可知,当  $n=2.80$ (采用 GaN 材料)时禁带宽度出现最大值.

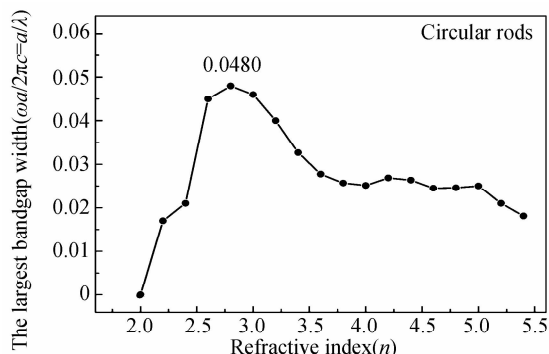


图 2 介质圆柱构造的 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格光子晶体的最大完全光子禁带随介质折射率的变化曲线  
Fig. 2 The largest complete band gap for Archimedes (4,8<sup>2</sup>) lattice of dielectric circular rods in the air as a function of the refractive index

图 3 反映了介质圆柱 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格光子晶体在折射率为 2.80 时 TM/TE 模禁带随填充比的变化关系,其中虚线包围的区域为 TM 模禁带,实线包围的区域为 TE 模禁带,两者重叠的区域即为完全光子禁带.可以看出,随着填充比的增大,TE/TM 禁带宽度都有一个先增大后减小的过程,这是因为布喇格散射效应随着填充比的增大逐渐明显,导致 TE/TM 禁带宽度随之增大;当填充比增大到一定程度时,光子在某些频率可以透过散射子,即减弱了布喇格散射效应,使得 TE/TM 禁带宽度反而减小.同时中心频率都向低频处移动,这是因为电磁波的频率为  $\omega(k) = ck/\epsilon^{1/2}$ ,随着介质填充比的增大,该结构的平均介电常量  $\epsilon$  增大,光子频率  $\omega$  不断减小.当  $f=0.70$  时,在归一化频率 0.515 49~0.467 07 之间出现的完全光子禁带宽度达到最大值 0.048 42( $\omega a/2\pi c$ ),其相对带隙宽度  $R=$

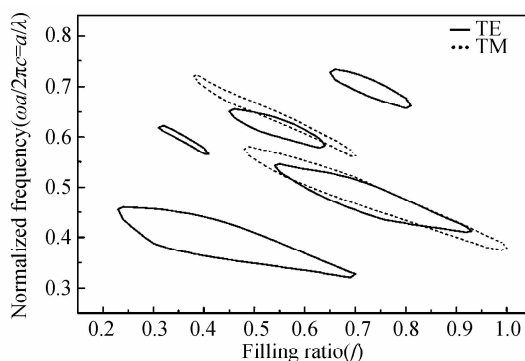


图 3 介质圆柱 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格光子晶体的 TM/TE 模禁带随填充比的变化  
Fig. 3 TE/TM band gaps for Archimedes (4,8<sup>2</sup>) lattice of dielectric circular rods in the air along with the filling ratio

( $f_{\max} - f_{\min}$ )/ $f_{\text{mid}}$  可达 9.86%,其对应的 TE 模和 TM 模的色散曲线如图 4.

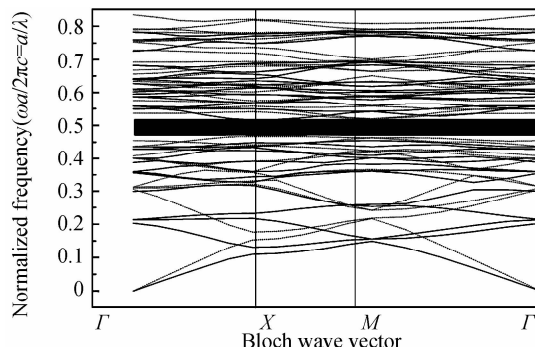


图 4 介质圆柱在空气背景中的 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格光子晶体的色散曲线

Fig. 4 Dispersion diagram for Archimedes (4,8<sup>2</sup>) lattice of dielectric circular rods in the air

## 2.2 介质方柱型 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格结构光子晶体禁带特性

如图 5 所示,对于空气背景下介质方柱构造的 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格结构光子晶体,研究其完全光子禁带随介质方柱折射率与填充比的变化关系.发现在折射率为 2.60 到 5.40 之间都出现了完全光子禁带,随着折射率的增加,其最大完全光子禁带在  $n=2.80$  和  $n=4.40$  处出现了两个禁带峰值,其禁带峰值分别为  $\Delta=0.031\ 72(\omega a/2\pi c)$  和  $\Delta=0.032\ 36(\omega a/2\pi c)$ ,其相对带隙宽度分别为 6.50% 和 7.68%,同样可以说明最大完全光子禁带的产生要综合考虑各结构参数,并且两处禁带峰值为实际制备具有较大完全光子禁带的光子晶体提供了更多的材料选择范围.

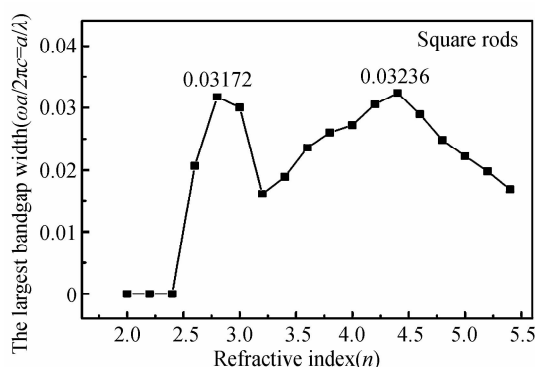


图 5 介质方柱构造的 Archimedes (4,8<sup>2</sup>) 晶格光子晶体的最大完全光子禁带随介质折射率的变化曲线  
Fig. 5 The largest complete band gap for Archimedes (4,8<sup>2</sup>) lattice of dielectric square rods in the air as a function of the refractive index

图 6 为介质方柱折射率为 2.80 时不同填充比下 TE/TM 模的禁带结构,随着填充比的增大,TE 模禁带和 TM 模禁带宽度以及中心频率同样出现随填充比先增大后减小的过程,当填充比  $f=0.49\sim 0.78$  时存在稳定的完全禁带,其中  $f=0.61$  时完全禁带最大为

$\Delta=0.50412-0.47240=0.03172$  ( $\omega a/2\pi c$ ), 其对应的 TE 模和 TM 模的色散曲线如图 7. 综合图 2 和图 5 可以发现, 最大禁带宽度处对应折射率的微小变化对禁带宽度的影响很小; 综合图 3 和图 6 可以发现, 最大禁带宽度随填充比的变化比较平缓, 最大禁带宽度处对应填充比的微小变化对禁带宽度以及禁带中心频率的影响同样很小. 说明该结构的能带特性在存在结构参数微扰的情况下依旧很稳定, 这一特点可以降低实验制备对介电常量以及介质柱尺度精度的要求, 更加利于实际制备.

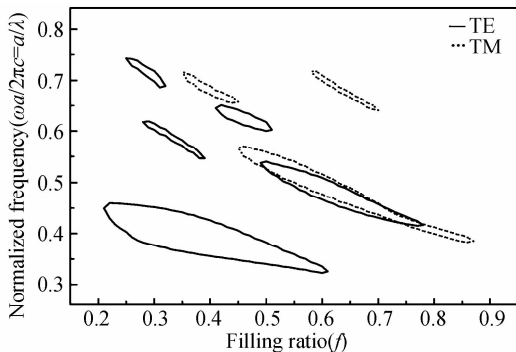


图 6 介质方柱 Archimedes ( $4,8^2$ ) 晶格光子晶体的 TM/TE 模禁带随填充比的变化

Fig. 6 TE/TM band gaps for Archimedes ( $4,8^2$ ) lattice of dielectric square rods in the air along with the filling ratio

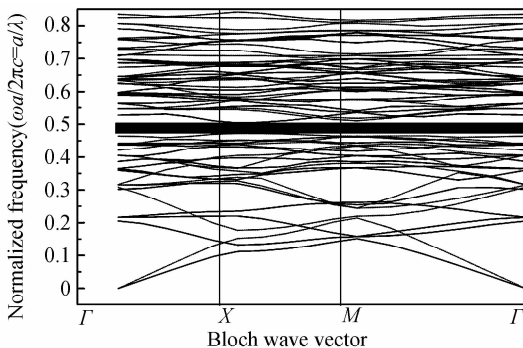


图 7 介质方柱在空气背景中的 Archimedes ( $4,8^2$ ) 晶格光子晶体的色散曲线

Fig. 7 Dispersion diagram for Archimedes ( $4,8^2$ ) lattice of dielectric square rods in the air

### 2.3 旋转介质方柱对 Archimedes ( $4,8^2$ ) 晶格结构光子晶体禁带特性影响

与介质圆柱不同的是, 对介质方柱进行旋转可以进一步降低整个晶格结构的周期对称性, 进而导致禁带特性发生相应变化. 如图 1(b) 所示, 考虑到正方形方柱自身的旋转对称性, 只需考虑顺时针旋转  $0^\circ\sim 45^\circ$  (取  $5^\circ$  的变化步长), 同时连续改变填充比  $f$ . 以出现介质方柱禁带峰值的折射率 2.80 (可采用 GaN 材料) 为例, 得出不同旋转角度和填充比下所对应的最大完全带隙的位置及宽度, 模拟的结果如表 1.

表 1 介质方柱构造的二维 Archimedes ( $4,8^2$ ) 晶格光子晶体在不同旋转角度时的最大带宽及填充比

Table 1 The largest complete band gap and the frequency scope for the Archimedes ( $4,8^2$ ) lattice of dielectric square rods with various angles in the air

Angle/ ( $^\circ$ )	Filling ratio $f$	Frequency of the maximum complete band-gap ( $\omega a/2\pi c$ )	Width of band-gap ( $\omega a/2\pi c$ )	Relative band-gap width/(%)
5	0.61	0.504 95~0.473 00	0.031 95	6.53
10	0.61	0.506 80~0.473 07	0.033 73	6.88
15	0.61	0.509 15~0.473 32	0.035 83	7.29
20	0.62	0.508 41~0.469 33	0.039 08	7.99
25	0.62	0.511 92~0.469 20	0.042 72	8.71
30	0.62	0.515 08~0.469 05	0.046 03	9.35
35	0.62	0.516 87~0.468 93	0.047 94	9.73
40	0.61	0.520 43~0.473 17	0.047 26	9.51
45	0.61	0.519 85~0.473 05	0.046 80	9.43

从表 1 可以发现, 随着介质柱旋转角度的变化, 最大完全光子禁带宽度发生变化. 在 2.2 节, 未旋转介质方柱时其最大完全禁带宽度为  $\Delta=0.03172$  ( $\omega a/2\pi c$ ), 其相对带隙宽度为 6.50%. 对比表 1 可以看出, 随着介质方柱进行一定角度的旋转后其带宽明显增大, 当旋转角度为  $35^\circ$  时, 在填充比  $f=0.62$  处出现的带宽峰值达到了  $\Delta=0.04794$  ( $\omega a/2\pi c$ ), 其相对带隙宽度可达 9.73%, 旋转使得相对带隙宽度增加了 49.69%. 由此可知, 对于空气背景中介质方柱构造的 Archimedes ( $4,8^2$ ) 晶格光子晶体, 改变方柱旋转角度是增大其带宽的一种有效方法, 这是由于旋转使得晶格结构的对称性降低, 光子晶体的光子能带筒并被部分消除, 从而能够增大带宽甚至产生新的光子禁带. 并且由最大禁带宽度与旋转角度的对应关系可以发现, 当旋转角度取合适值时, 晶体的连通性最低, 然后无论旋转角度增大还是减小都会使晶体的连通性增强, 导致禁带宽度变小. 同时发现, 旋转角度在  $30^\circ\sim 40^\circ$  之间时, 最大完全禁带相对带隙宽度为 9.35%~9.73%, 变化仅为 0.38%, 说明该结构在最大禁带处旋转角度的变化对禁带特性的影响很小.

### 3 结论

研究发现, 空气背景下介质圆柱和方柱构造的 Archimedes ( $4,8^2$ ) 晶格光子晶体在较低的折射率处就可取得完全光子禁带并且出现禁带的折射率范围很大, 同时在较低折射率处便出现了禁带宽度峰值: 介质圆柱型在折射率最低为 2.20 时就开始产生完全光子禁带, 随着折射率的增大完全禁带在低折射率  $n=2.80$  处达到峰值  $\Delta=0.04842$  ( $\omega a/2\pi c$ ), 相对带隙宽度达到 9.86%; 介质方柱型在  $n=2.80$  和  $n=4.40$  高低两折射率处出现两个禁带峰值, 带宽分别为  $\Delta=0.03172$  ( $\omega a/2\pi c$ ) 和  $\Delta=0.03236$  ( $\omega a/2\pi c$ ), 相对带隙

宽度分别为 6.50% 和 7.68%。一般而言,折射率差越大,布喇格散射越明显,光子带隙就越宽,但本文却发现了与此不同的新现象,即禁带宽度并非随折射率差增大而递增,而是存在一个先增大后减小的过程。并且,通过旋转介质方柱角度可降低晶格对称性,能进一步增大带宽。

#### 参考文献

- [1] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 1987, **58**(23): 2486-2489.
- [2] YABLONVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Physical Review Letters*, 1987,**58**(20): 2059-2062.
- [3] MATSUSHITA S, SUAVET O, HASHIBA H. Full-photon-band gap structure for prospective dye-sensitized solar cells[J]. *Electrochimica Acta*, 2010, **55**(7): 2398-2403.
- [4] KUNDIKOVA N D, MIKLYAEV Y V, PIKHULYA D G. Rhombohedral photonic crystals by triple-exposure interference lithography: complete photonic band gap [J]. *Optics Communications*, 2012, **285**(6): 1238-1241.
- [5] WANG D D, WANG L L. Design of topas photonic bandgap fiber with high birefringence and low confinement[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2010, **621**(1-3): 548-551.
- [6] ROBINSON S, NAKKEERAN R. Two dimensional photonic crystal ring resonator based add drop filter for cwm systems [J]. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 2013, **124**(18): 3430-3435.
- [7] LIM C M, SONG H. Theoretical demonstration of dbr-assisted super-periodic photonic-crystal light-emitting diodes with narrow divergence angles[J]. *Optics Communications*, 2010, **283**(7): 1553-1557.
- [8] XING Y P, HAN P D, FAN Y J, *et al.* Optimization of the emitter region and the metal grid of a concentrator silicon solar cell[J]. *Journal of Semiconductors*, 2013, **34**(5): 054005-1-054005-8.
- [9] BAGCI F, AKAOGLU B. Effects of structurally deformed sub-lattice points on the dispersion properties of 2d hybrid triangular-graphite photonic crystal [J]. *Optics Communications*, 2012, **285**(6): 1486-1493.
- [10] SHI P, HUANG K, LI Y P. Photonic crystal complex unit cell for large complete band gap[J]. *Optics Communications*, 2012, **285**(13-14): 3128-3132.
- [11] DOMINGUEZ S, COMAGO I, GARCI O, *et al.* Design, optimization and fabrication of 2d photonic crystals for solar cells[J]. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, 2013, **11**(1): 29-36.
- [12] OKANO M, YAMADA T, SAKAKIBARA Y, *et al.* Analysis of vertical coupling between a 2d photonic crystal cavity and a hydrogenated-amorphous-silicon-wire waveguide [J]. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, 2012, **10**(3): 287-295.
- [13] REZAEI B, FATHOLLAHI KHALKHALI T, KALAFI M. Tunable out-of-plane band gap of two-dimensional anisotropic photonic crystals infiltrated with liquid crystals[J]. *Optics Communications*, 2011, **284**(3): 813-817.
- [14] WANG K, FENG L S, YANG D W, *et al.* Design of silicon hole based photonic crystal filter with high selectivity[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, **41**(2): 154-158.
- [15] ZHANG H F, LIU S B, KONG Xiang-kun, *et al.* Analytical investigation of omnidirectional photonic band gaps in one-dimensional superconductor-dielectric photonic crystals[J]. *Optik*, 2013, **124**(17): 3007-3012.
- [16] LIU X, ZHOU J, ZHU B Q, *et al.* Electro-optical tunable filter with symmetric generalized fibonacci photonic crystal [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(11): 1723-1727.
- [17] MAHMOUD Y M, GHAOUTI B, AHMED T. A new optical add-drop filter based on two-dimensional photonic crystal ring resonator [J]. *Optik*, 2013, **124**(17): 2864-2867.
- [18] LIN G M, CHEN X Y, LI J J, *et al.*  $1 \times 2$  Optical drop splitter in a rod-type silicon photonic crystal [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, **41**(3): 311-315.