

光子晶体旋转角度对带隙特性的影响

刘 雯, 孙晓红, 刘 薇

(郑州大学信息工程学院, 河南省激光与光电信息技术重点实验室, 河南 郑州 450052)

摘 要: 利用平面波展开法研究了两种结构的光子晶体 (PC) 在旋转操作情况下的带隙特性。构建了两种结构不同的光子晶体, 并比较了这两种光子晶体结构带隙特性的不同。分别讨论了旋转操作对两种结构光子晶体 TE 模式带隙特性的影响, 发现 TE 模式的带隙受到介质在 x - z 平面分布情况的影响。根据计算的结果, 分析了旋转操作对带隙特性产生影响的原因, 并给出了最优化带隙的角度范围。本研究对实验上制作性能优良的光子晶体结构具有较好的理论指导意义。

关键词: 光电子学; 光子晶体; 平面波展开法; 旋转角度

中图分类号: O431.2

文献标识码: A

文章编号: 1007-5461(2014)03-0329-06

Effects of rotation angle on band-gap characteristics of photonic crystal

LIU Wen, SUN Xiao-hong, LIU Wei

(Henan Provincial Key Laboratory of Laser and Opto-electronic Information Technology, School of Information Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China)

Abstract: The plane wave expansion method was used to explore the photonic band-gap characteristics of two kinds of photonic crystal structure under rotation operation. Two different kinds of photonic crystal structure were constructed and the band-gap characteristics of these two kinds of structure were compared. The effect of the rotation operation on the band gap of two kinds of structure in TE mode respectively was discussed. It's found that the distribution of medium column in x - z plane together influence TE mode band gaps. According to the result of calculation, the reason of the influence on the band gap characteristics was analyzed, and the angle range of the optimum band gap was given. It has better theoretical guiding significance on producing photonic crystal of good performance.

Key words: optoelectronics; photonic crystal; plane wave expansion method; angle of rotation

1 引 言

1987 年, Yablonovitch 及 Sajeev 不约而同地提出光子能带结构^[1], 具有光子能带结构的介电物质称为光能隙系统 (PBG), 或简称光子晶体 (Photonic crystals)。光子晶体^[2,3] 是一种周期排列的人工微结构材料, 其最根本的特征是具有光子禁带^[4], 按其空间结构分布分为一维、二维、三维光子晶体。所谓光子带隙是由于介电常数不同的材料在空间周期性排列导致介电常数的空间周期性, 使得光折射率产生周期性分布, 光在其中传播时产生能带结构, 在带隙中的光子频率被禁止传播, 因此称光子禁带。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (11104251)

作者简介: 刘 雯 (1989 -), 研究生, 主要从事光子晶体方面研究。 **E-mail:** liuwen@snzou.cn

导师简介: 孙晓红 (1971 -), 女, 博士, 教授, 主要从事光子晶体超能材料, 光传感, 电转换的聚合物液晶等方面的研究工作。

E-mail: iexhsun@zzu.edu.cn

收稿日期: 2013-11-01; **修改日期:** 2014-03-06

由于其优良的性能,光子晶体材料被科学界和产业界称为“光半导体”,自这一概念提出后,在理论研究和应用方面都取得了很大的进展,目前在光子晶体光纤和光子晶体谐振腔中已得到应用。

光子晶体结构的带隙^[5,6]研究集中在填充因子、折射率(介电常数)的变化对带隙特性的影响,本文利用平面波展开法(PWM),从光子晶体结构和入射角度入手,来讨论它们对带隙的影响。

2 理论分析

在对光子晶体的研究中,电子能带的许多处理被延伸用于处理光子能带,从麦克斯韦方程组出发,在矢量波理论的框架里计算光子晶体的能带结构。光子晶体能带的计算常用的方法有平面波展开法(PWM)^[7]、时域有限差分法(FDTD)^[8]、传输矩阵法^[9]、超元胞法等,其中平面波展开的方法是在光子晶体能带研究中使用的较早也用得最多的一种方法,适用于研究完整周期性结构的光子晶体带隙^[10]。

平面波法是在计算光子晶体能带时,应用 Bloch 定理将电磁场在倒格矢空间以平面波叠加的形式展开,将 Maxwell 方程组化为本征方程,然后求解得到传播光子的本征频率。

光在光子晶体中传播时,描述电磁波的 Maxwell 方程组为

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{J} \end{cases}, \quad (1)$$

其中 $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}$, $\mathbf{D}$ 、 $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{B}$ 、 $\mathbf{H}$ 、 ρ 以及 $\mathbf{J}$ 分别为电位移、电场、磁通量密度、磁场、电荷密度以及电流密度。

在无空间电荷和电流的情况下,即电荷密度 ρ 及电流密度 $\mathbf{J}$ 为零, Maxwell 方程组可以表示为

$$\begin{cases} \nabla \cdot \{\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)\} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = -\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \end{cases}, \quad (2)$$

将方程进行变形可得到麦克斯韦方程的本征值方程

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \{\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)\} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

$$\nabla \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right\} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t). \quad (4)$$

设光子晶体中传播的电磁波为

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \end{cases}, \quad (5)$$

将 (5) 代入方程 (3)、(4) 可以得到电磁波在光子晶体中的传播方程

$$\frac{1}{\varepsilon(\gamma)} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\gamma) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{E}(\gamma), \quad (6)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\gamma)} \nabla \times \mathbf{H}(\gamma) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\gamma), \quad (7)$$

其中 ω 是本征角频率, 然后将其在倒格矢空间进行傅里叶展开, 得到

$$\sum_{\mathbf{G}'} K(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G}) (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \mathbf{H}_{z, kn}(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega_{kn}}{c} \right)^2 \mathbf{H}_{z, kn}(\mathbf{G}), \quad (8)$$

$$\sum_{\mathbf{G}'} K(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}'|^2 \mathbf{E}_{z, kn}(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega_{kn}}{c} \right)^2 \mathbf{E}_{z, kn}(\mathbf{G}), \quad (9)$$

其中 $K(\mathbf{G})$ 是 $\frac{1}{\varepsilon(\gamma)}$ 的傅里叶展开系数, $\mathbf{G}$ 为倒易空间的倒格矢, $\mathbf{k}$ 为第一布里渊区内的波矢。应用 Bloch 理论, 利用平面波展开法求解上述两个特征方程。

3 计算结果与讨论

3.1 两种不同结构的光子晶体带隙对比

本文用软件构建了两种三角晶格结构模型如图 1(a)、2(a) 所示, 均是以空气介质为背景介质, 半径为 r 的圆形介质柱构成的三角晶格光子晶体^[11]。

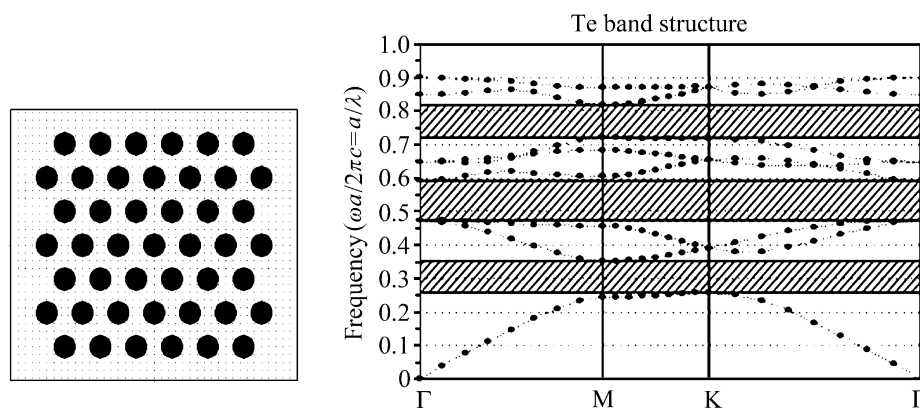


Fig.1 (a) Hexagonal structure, (b) The band gap of PCs

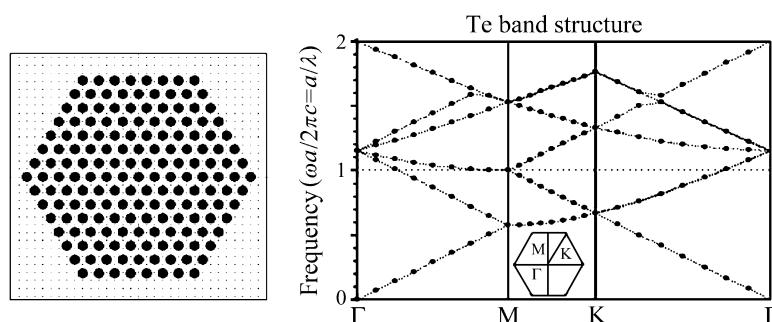


Fig.2 (a) Hexagonal rings structure, (b) The band gap of PCs

如图 1(a) 所示为第一种 Hexagonal structure 的光子晶体, 在软件中设置填充因子为 0.2、折射率为 1.5 时即有带隙出现, 具有良好的光子禁带。当入射波为 TE 波, 设置参数填充因子为 0.3, 介质柱折射率为 3 时, 计算得到的晶体结构的带隙特性如图 2(b) 所示, TE 模式出现三条带隙, 其中第一带隙频率宽度为 0.09328。

而如图 2(a) 中所示的第二种 Hexagonal rings structure 光子晶体在同样参数设置下, 软件计算得到的带隙图如图 2(b) 所示, TE 模式下没有带隙出现。

与第一种光子晶体结构相比, 其带隙特性具有明显的差异, 相比较而言, 第一种光子晶体结构具有更好的带隙特性。

3.2 结构旋转角度对光子晶体带隙特性的影响

3.2.1 第一种光子晶体结构

在软件中设置入射波为 TE 波, 背景折射率为 1, 介质柱折射率为 3, 填充因子为 0.3 的情况下, 选用 Plane Waves 方法, 通过软件计算来研究光子晶体结构整体顺时针旋转角度 θ 对晶体结构的带隙特性的影响^[12]。旋转角度 θ 的取值范围为 $0^\circ \sim 180^\circ$ 。在角度 $\theta = 30^\circ$ 时旋转得到的光子晶体结构及其带隙图如图 3 所示。

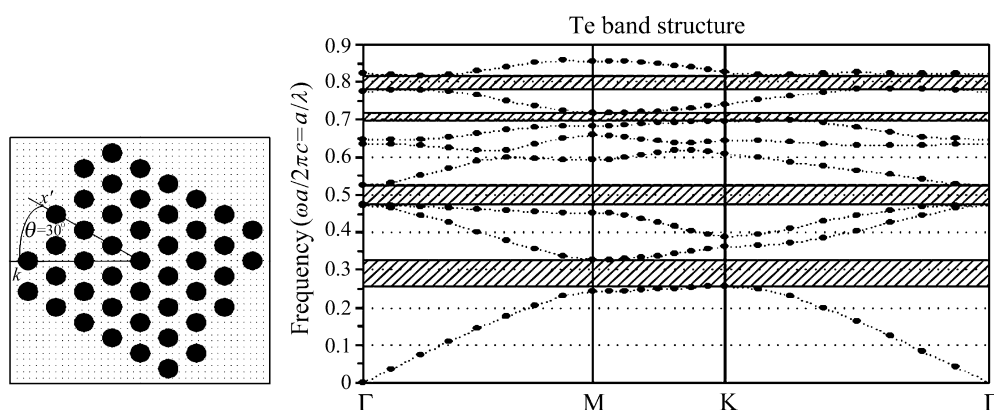


Fig.3 (a) Angle $\theta = 30^\circ$, (b) The band gap of PCs

通过一系列的模拟计算得到的第一带隙宽度和角度 θ 的关系曲线如图 4 所示。由图示数据可以看出, 带隙的宽度随着角度 θ 呈周期性变化, 周期为 60° 。角度 θ 在 $0^\circ \sim 11^\circ$ 、 $49^\circ \sim 71^\circ$ 、 $109^\circ \sim 131^\circ$ 范围内改变时第一带隙频率宽度不发生变化, 始终维持在最大值。当 θ 等于 30° 、 90° 、 150° 时, 第一带隙宽度最小。

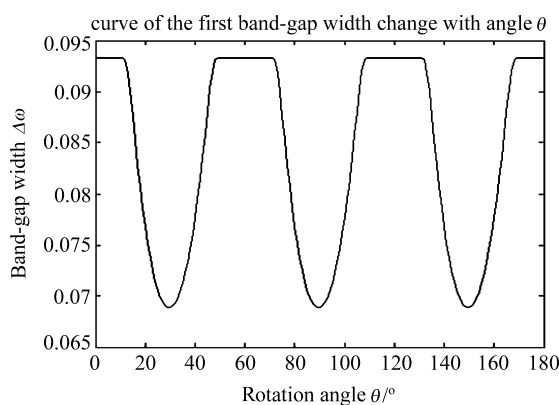


Fig.4 The first band-gap width versus angle θ

3.2.2 第二种光子晶体结构

图 2(a) 中所示的第二种光子晶体结构在折射率为 3、填充因子为 0.3, 其他参数保持不变的情况下, 研究晶体结构整体顺时针旋转角度 θ 对晶体结构、带隙特性的影响。通过模拟计算得到的带隙宽度和角度 θ 的关系表 (部分数值) 如表 1 所示。第一行表示的是旋转角度 θ 不同的值, 第二行表示的是带隙的宽度。

Table 1 The band-gap versus θ

θ	17	17.1	20	29	30	31	42	42.7	43
带宽	0	0.01745	0.05602	0.09069	0.09114	0.08971	0.02694	0.01689	0

对数值模拟结果进行分析, 因为光子晶体结构的六次旋转对称性, 旋转角度 θ 周期为 60° 。在 θ 较小时, 随着角度 θ 的增大, 带隙宽度也加大, 当旋转角度 $\theta = 30^\circ$ 时, 带隙宽度达到最大值。在这以后带隙

宽度随着角度 θ 的增大而减小至 0, 关于 $\theta = 30^\circ$ 对称。当 $\theta = 30^\circ$ 时光子晶体结构及其计算得到的带隙图如图 5 所示。图 6 为得到的带隙宽度随着角度 θ 改变的变化曲线。

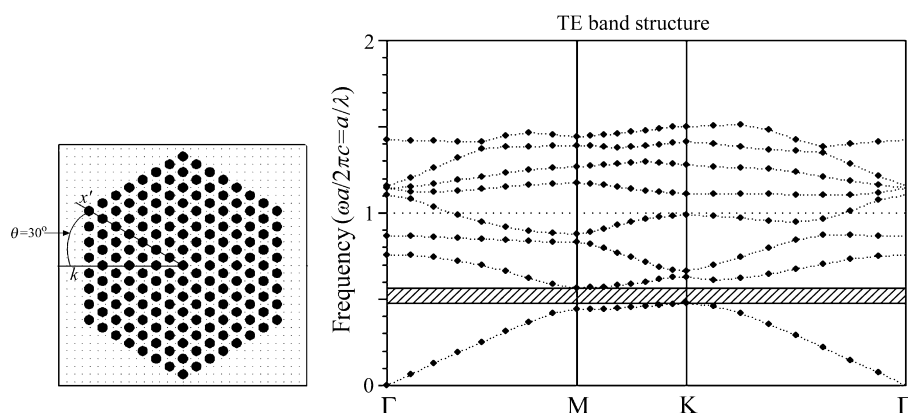


Fig.5 (a) Angle $\theta = 30^\circ$, (b) The band gap of PCs

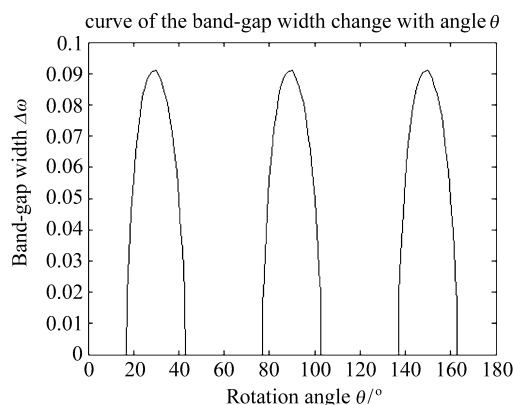


Fig.6 The band-gap versus rotation angle θ

对两种结构进行旋转操作后的结果进行分析, 发现旋转操作改变了 $x-z$ 平面的介质分布状况, TE 模式的带隙受到了很大的影响。光的入射角度对光子晶体的带隙有比较大的影响, 如简单的一维光子晶体 Bragg 光栅, 不同角度 Bragg 反射波长不一样, 得到的带隙结果不同。对于二维和三维的光子晶体也有相同的结论。这里研究的旋转操作是对光子晶体结构整体进行的, 只是相对改变入射光入射方向, 相当于不变晶体位置, 改变电场与横轴的夹角。所以进行旋转操作会对光子晶体结构的带隙特性产生影响。

4 结 论

本文采用平面波展开法 (PWM), 对三角晶格光子晶体结构的带隙特性进行了模拟分析。通过对比发现图示第一种光子晶体结构比后者更容易出现带隙。研究了两种结构由旋转角度 θ 不同引起的带隙特性的变化, 给出了第一带隙宽度随着角度 θ 变化的曲线图, 并分析了引起带隙变化的原因。

通过改变第一种光子晶体结构的整体旋转角度 θ , 模拟得到带隙宽度随着角度 θ 的周期性变化, 周期为 60° 。角度 θ 在很大范围内改变时第一带隙宽度始终为最大值。当 θ 等于 30° 、 90° 、 150° 时, 第一带隙宽度是最小值。然后改变第二种三角晶格结构的旋转角度 θ 模拟引起的带隙特性的变化。结果表明, 当 $\theta = 30^\circ$ 时, 得到的带隙宽度最大, 带隙特性最好; 由计算得到的带隙宽度随着角度 θ 的变化曲线可以看出, 旋转角度 θ 周期为 60° 。

对比两种结构, 第二种光子晶体结构在很大范围内没有光子禁带, 且最大带隙频率宽度仅为 0.09114, 带隙特性较差。而对于第一种光子晶体结构, 旋转角度 θ 在很大范围内改变时带隙宽度维持在最大值, 具

有良好的光子禁带特性。在实际应用制作光子晶体材料时, 第一种结构更具有实用意义。

参考文献 :

- [1] Sajeev J. Strong localization of photons in certain disordered dielectric super lattice [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58(23): 2486-2489.
- [2] Yin J L, Huang X G. Properties and applications of photonic quasicrystal [J]. *Laser and Optoelectronics Progress* (激光与光电子学进展), 2010, 47(01): 1601-1608 (in Chinese).
- [3] Andreani L C, Agio M. Photonic bands and gap maps in a photonic crystal slab [J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2002, 38(7): 891-898.
- [4] Sajoda K. *Optical Properties of Photonic Crystals* [M]. Berlin: Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH and Co. K, 2001.
- [5] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, 65(25): 3152.
- [6] Xu Lianqiang, Shi Zonghua, Yan Kezhu. Study of rules about the structure parameters affecting photonic band gap of two-dimensional tri-lattices photonic crystals [J]. *Laser Journal* (激光杂志), 2007, 28(3): 25-26 (in Chinese).
- [7] Zhang Wenfu, Wang Peng, Fang Qiang, *et al.* Calculating the photonic band gap structure of two-dimensional photonic crystal using the plane wave expansion method [J]. *Journal of Xi'an University of Post and Telecommunications* (西安邮电学院学报), 2007, 12(3): 17-20 (in Chinese).
- [8] Bierwirth K, Schulz N, Amdt F. Finite-difference analysis of rectangular dielectric waveguide structures [J]. *IEEE Trans. Microwave Theory Technol.*, 1986, 34(11): 1104.
- [9] Pendry J B, Mackinnon A. Calculation of photon dispersion relations [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 69(19): 2772.
- [10] Pu Rongqiang, Yu Hongying, Shen Linfang. Band gaps in two-dimensional photonic crystals with composite square-lattices of dielectric columns [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics* (量子电子学报), 2012, 29(6): 735-740 (in Chinese).
- [11] Tan Renbing, Zhang Jin, Zhang Xi, *et al.* Band gap structures of 2D triangular lattice photonic crystals [J]. *Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory* (光谱实验室), 2006, 23(6): 1259-1264 (in Chinese).
- [12] Zhao Mingming, Lü Yanwu, Yu Jiaxin, *et al.* Effect of rotation on photonic band gap of two-dimensional square lattice photonic crystal with hollow rod [J]. *Acta Physica Sinica* (物理学报), 2008, 57(2): 1061-1065 (in Chinese).