

文章编号:1001-9014(2012)01-0035-07

Ge 基二维三角晶格光子晶体的光子带隙

刘建军^{1,2}, 范志刚¹, 肖昊苏¹, 张旺¹, 关春颖³, 苑立波³

(1. 哈尔滨工业大学 航天学院, 黑龙江 哈尔滨 150001; 2. 东北石油大学 电子科学学院, 黑龙江 大庆 163318;
3. 哈尔滨工程大学 理学院, 黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要: 导出了二维三角晶格光子晶体的填充系数与正多边形散射子外接圆半径的普适关系, 并利用平面波展开法计算了 Ge 基二维三角晶格光子晶体的光子带隙. 计算表明: Ge 圆柱置于空气背景中时, 可产生 TM、TE 带隙, TM 带隙占优势; 随着 Ge 填充系数的增大, 光子带隙的宽度先增大后减小, 其中心频率由高频向低频移动; TM 模第一带隙宽度在半径为 $0.14a$ 处达峰值. 空气圆柱置于 Ge 背景中时, 可产生 TM、TE 及完全带隙, TE 带隙占优势; 随着空气填充系数的增大, 光子带隙的宽度先增大后减小, 其中心频率由低频向高频移动; TE 模第一带隙宽度和最大完全带隙宽度分别在半径为 $0.46a$ 和 $0.49a$ 处达峰值.

关键词: 光子晶体; 填充系数; 平面波展开法; 光子带隙
中图分类号: O734 **文献标识码:** A

Photonic band gap in Ge-based two-dimensional triangular lattice photonic crystals

LIU Jian-Jun^{1,2}, FAN Zhi-Gang¹, XIAO Hao-Su¹, ZHANG Wang¹,
GUAN Chun-Ying³, YUAN Li-Bo³

(1. School of Astronautics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China;
2. School of Electronic Science, Northeast Petroleum University, Daqing 163318, China;
3. College of Science, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China)

Abstract: The relationship between the filling factor and the circumcircle radius of the regular polygon scatter is deduced in a two-dimensional triangular lattice photonic crystal. The photonic band gaps (PBGs) are calculated with the plane wave expansion method in Ge-based two-dimensional triangular lattice photonic crystals. When Ge cylinder is placed in air background, the TM band gaps and TE band gaps appear with the TM band gaps dominating. As Ge filling factor increases, the width of the photonic band gaps increase initially but then decrease and the center frequency decrease. The width of the first band gap of the TM band gaps reaches the maximum at the radius of $0.14a$. On the contrary, when air cylinder is placed in Ge background, the TM band gaps and TE band gaps as well as the complete band gaps appear with the TE band gaps dominating. With the air filling factor increasing, the width of the photonic band gaps also increase initially then decrease, whereas the center frequency increase. The width of the first band gap of TE band gaps and the largest complete band gap reaches the maximum at the radius of $0.46a$ and $0.49a$, respectively.

Key words: photonic crystal; filling factor; plane wave expansion method; photonic band gap

PACS: 41.20.Jb, 42.25.Dd, 42.25.Fx, 42.70.Qs

引言

光子晶体 (photonic crystal)^[1] 是一种介电常数呈周期性变化排布的, 且在光波长量级上 (微米量级) 构建的材料. 光子晶体因其最基本特征“光子带隙”、“光子局域”而具有操控光子流动的能力^[1-4], 可使光停滞或局域而又不吸收不破坏, 即保持光信

息的完整性并可被利用性. 因此, 光子晶体具有重要的科学价值而被广泛应用, 如全方向反射镜^[5]、光子晶体光纤及其器件^[6-7]、微腔及激光器^[8-9]、大角度弯曲且低损耗波导^[10]及其耦合器件^[11]等.

光子晶体中光子带隙的产生、宽窄及其中心频率的大小变化都受光子晶体结构参数及基质材料介电常数的影响^[12-15]. 填充系数是光子晶体结构参数

中极其重要的概念,是光子带隙特征的重要影响因素,它与光子晶体的空间维度、晶格结构、散射子形状及大小等密切相关。

二维光子晶体相对一维光子晶体应用更加广泛,相对三维光子晶体制备更加容易.因此,二维光子晶体的理论及实验研究更受关注.二维光子晶体典型的晶格结构有:三角、正方、蜂窝状等.蜂窝状晶格制备较难,正方晶格结构不够稳定,而又被称为六角密排结构的三角晶格,因其结构稳定性良好及制备方便的优势,使其成为制备二维光子晶体的首选,并已得到广泛应用,如光纤^[7]、激光器^[8]、功分器^[16]及负折射平板透镜^[17]等.对二维三角晶格光子晶体光子带隙结构研究,虽已有大量报道^[18-21],但大多只是涉及 Si 基、GaAs 基、ZnS 基等及典型形状散射子,如:圆形、方形、正六边形等,目前还未见有正 N 边形散射子外接圆半径 r_N 与填充系数 f 的变化关系的相关报道,而该变化关系式涵盖了散射子的所有典型形状,因此更具普适性.另外,Ge 基圆形散射子的半径(填充系数)与光子带隙结构的变化关系的相关报道也并不多见。

科研工作者对 Ge 基二维光子晶体研究较少,其主要原因在于:(1) Ge 材料的理论透过率较低(如在常温下长波段透过率低于 50%),且实际透过率随温度升高而明显降低(如在 150℃ 时,长波段透过率在 20% 以下);(2) Ge 材料的折射率温度系数 (dn/dT) 较大,比其它红外光学材料一般要高 1~2 个数量级^[22].然而,若用其作为常温(若恒温,则 $dn/dT=0$)下二维光子晶体带隙型微结构器件的基质材料,其材料本身的透过率高低不应是考虑的重点. Ge 虽存在不足,但具有其它优点:(1) 高介电常数 ($\epsilon_{\text{Ge}} \approx 16$) 且低色散,更易产生光子带隙且理论计算与实际结果更吻合(理论计算一般把折射率设为定值,而低色散意味折射率随频率(或波长)变化小,可近似取其为定值);(2) 良好的机械强度,更易被加工;(3) 不吸潮,化学性质稳定.因此,Ge 作为常温下二维光子晶体的基质材料,更具重要优势及应用前景.而 Ge 基二维三角晶格光子晶体光子带隙的理论计算对其实验及应用研究更具指导意义。

本文经严密推导得出了 Ge 基二维三角晶格光子晶体的填充系数 f 与正 N 边形散射子外接圆半径 r_N 的普适关系,并利用平面波展开法计算了 Ge 基二维三角晶格光子晶体在两种情况下的光子带隙:(1) Ge 圆柱置于空气背景中;(2) 空气圆柱置于 Ge 背景中。

1 基本理论与算法

假设组成二维光子晶体的介质为线性、各向同性、无色散、低损耗、非磁性介质,且空间无自由电荷和传导电流分布,再根据麦克斯韦方程组的微分式、电磁场物质方程、时谐波场、旋度计算及分离变量,可得二维光子晶体中的电磁波偏振矢量 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 、 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 满足方程^[1]:

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

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

其中 $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ 为真空中的光速, ω 为电磁波频率。

如何由已知空间分布的相对介电常数 $\epsilon(\mathbf{r})$ 或者折射率 $n \approx [\epsilon(\mathbf{r})]^{1/2}$ 求解式(1)、(2)中 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 偏振(TM 模)、 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 偏振(TE 模)下的能带结构和光子带隙,即是二维光子晶体理论计算的核心问题。

二维光子晶体能带结构和光子带隙的计算方法很多,如:平面波展开法(PWE)^[23]、时域有限差分法(FDTD)^[24]、传输矩阵法(TMM)^[25]等.平面波展开法是诸多算法中最早且最常用的方法之一,它应用布洛赫(Bloch)定理把相对介电常数和电场或磁场用平面波展开,即利用结构的周期性将 Maxwell 方程从实空间变换到离散 Fourier 空间而化成一个本征方程,求解本征方程即可得到光子能带及带隙。

假设二维光子晶体散射子柱的轴向为 z 轴(即散射子柱垂直 xy 平面),则横磁模(TM)(磁场 \mathbf{H} 位于 xy 平面内,且电场 \mathbf{E} 平行于散射子柱)及横电模(TE)(电场 \mathbf{E} 位于 xy 平面内,且磁场 \mathbf{H} 平行于散射子柱)下的电磁方程分别为:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_z \mathbf{j}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}) = H_x \mathbf{i} + H_y \mathbf{k} \quad , \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_x \mathbf{i} + E_y \mathbf{k}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}) = H_z \mathbf{j} \quad , \quad (4)$$

再根据麦克斯韦方程组中的两个旋度方程、物质方程及时谐波场,可推导出 TM 模及 TE 模下的亥姆霍兹(Helmholtz)方程:

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \left(\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 E_z = 0 \quad , \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 H_z = 0 \quad , \quad (6)$$

根据二维光子晶体的概念,其相对介电常数 ϵ 分布呈周期性,即:

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad , \quad (7)$$

其中,晶格平移矢量 $\mathbf{R} = M_1 \mathbf{a}_1 + M_2 \mathbf{a}_2$ ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 是二维

光子晶体的基矢, M_1, M_2 是任意整数)。

相对介电常数的倒数也具有周期性, 可以将其进行平面波展开^[26]:

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} \eta_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (8)$$

其中, 倒格子矢量 $\mathbf{G} = N_1 \mathbf{b}_1 + N_2 \mathbf{b}_2$ ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ 是二维光子晶体的倒格基矢, N_1, N_2 是任意整数); 傅里叶展开系数 $\eta_{\mathbf{G}}$ 为:

$$\eta_{\mathbf{G}} = \frac{1}{\Omega} \int_{\text{wsc}} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \cdot d^2\mathbf{r}, \quad (9)$$

其中, Ω 为维格纳-赛茨原胞面积。

根据 Bloch 定理, 可以将电场及磁场分量进行平面波展开:

$$E_z = \sum_{\mathbf{G}} E(\mathbf{k} + \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (10)$$

$$H_z = \sum_{\mathbf{G}} H(\mathbf{k} + \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (11)$$

其中, \mathbf{k} 为第一布里渊区波矢。

把式(8)和式(10)代入式(5), 式(8)和式(11)代入式(6)可得本征方程:

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G})(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \eta_{(\mathbf{G} - \mathbf{G}')} E(\mathbf{k} + \mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E(\mathbf{k} + \mathbf{G}), \quad (12)$$

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G})(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \eta_{(\mathbf{G} - \mathbf{G}')} H(\mathbf{k} + \mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H(\mathbf{k} + \mathbf{G}), \quad (13)$$

式(12)和式(13)即为标准的求解光子能带及带隙的本征方程。由以上的推导过程可知, 平面波展开法具有绝对的优势: (1) 物理概念清晰; (2) 理论推导简单。另外, 信息量丰富及可应用于改进研究新型的光子晶体, 也是其优点。因此, 本文采用平面波展开法计算 Ge 基二维三角晶格光子晶体的光子带隙。

2 数值计算与分析

2.1 填充系数的计算与分析

填充系数是用来描述散射子在晶格中排列的密集程度, 对于二维光子晶体结构, 填充系数被定义为二维截面原胞中所包含的所有散射子的面积之和与原胞面积的比值。

填充系数对带隙的影响是非线性的, 它取决于晶格的几何机构(如: 三角、正方、蜂窝状等)、散射子形状(其截面如: 圆形、方形、正六边形等)及大小等因素, 因此其最佳值只有通过数值计算来确定。

下面推导出散射子形状为正多边形的二维三角晶格光子晶体的填充系数表达式, 并给出其散射子外接圆的最大半径值。

二维三角晶格光子晶体的原胞结构, 见图 1。设晶格常数为 a , 正多边形散射子的边数为 N , 其外接圆半径为 r_N , 最大半径为 $r_{N\max}$, 填充系数为 f_N , 最大填充系数为 $f_{N\max}$ 。

由图 1 易知, 原胞(即菱形 ABCD)中所含散射子为菱形 ABCD 四个角内的散射子相加。根据二维光子晶体的平移对称性, 可把 B、C、D 三部分的散射子平移到含 A 点的散射子空间内, 则四部分正好组成一个完整的散射子。即填充系数可转化为单个正 N 边形散射子截面面积与原胞面积之比, 得:

$$f_N = \frac{\frac{1}{2} \cdot r_N \cdot r_N \cos \frac{\pi}{N} \cdot \sin \frac{\pi}{N} \cdot 2 \cdot N}{2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{4} a^2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{r_N}{a}\right)^2 \cdot N \cdot \sin \frac{2\pi}{N} \quad (N \geq 3), \quad (14)$$

由式(14)易知, 填充系数与正多边形的边数及外接圆半径与晶格常数的比值密切相关, 且当 N (或 r_N) 确定, r_N (或 N) 增大时, 填充系数 f_N 增大。

当 $N \rightarrow +\infty$ 时, 即有:

$$f_{N \rightarrow +\infty} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{r_N}{a}\right)^2 \cdot N \cdot \sin \frac{2\pi}{N} \right) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{r_{N \rightarrow +\infty}}{a}\right)^2 \cdot \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\sin \frac{2\pi}{N}}{\frac{2\pi}{N}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{r_{N \rightarrow +\infty}}{a}\right)^2, \quad (15)$$

式(15)同圆形散射子情形。

对于不同的多边形, 其边数 N 不同, 则 $r_{N\max}$ 可能不同, $f_{N\max}$ 也不同(当散射子相碰时, $r_N \sim f_N$ 取得最

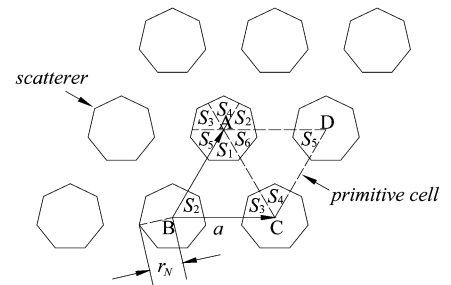


图 1 二维三角晶格光子晶体的原胞结构示意图
Fig. 1 Diagram of the primitive cell structure in two-dimensional triangular lattice photonic crystal

大值). 可分别计算得到 $r_{0\max} = a/2$ (圆形)、 $r_{3\max} = a/2 \cdot 1/\cos(\pi/6)$ 、 $r_{4\max} = a/2 \cdot \cos(\pi/6)/\cos(\pi/4)$ 、 $r_{5\max} = a/2 \cdot 1/\cos(\pi/10)$ 、 $r_{6\max} = a/2$ 、 $r_{7\max} = a/2 \cdot 1/\cos(\pi/14)$ 、 $r_{8\max} = a/2 \cdot \cos(\pi/12)/\cos(\pi/8)$ 、 $r_{10\max} = a/2$ 、 $r_{12\max} = a/2 \cdot 1/\cos(\pi/12)$ 、... 经进一步推导得出以下普适公式.

(a) 当 $N = 2k + 1$, 且 $k = 1, 2, 3, \dots$, 时,

$$r_{N\max} = \frac{a}{2} \cdot \frac{1}{\cos \frac{\pi}{2N}} \quad (N \uparrow, \text{则 } r_{N\max} \downarrow) \quad (16)$$

(b) 当 $N = 4k + 2$, 且 $k = 1, 2, 3, \dots$, 时,

$$r_{N\max} = \frac{a}{2} \quad (17)$$

(c) 当 $N = 4k$, 且 $N \neq 12k'$ ($k' = 1, 2, 3, \dots$), $k = 1, 2, 3, \dots$, 时,

$$r_{N\max} = \frac{a}{2} \cdot \frac{\cos \frac{\pi}{N'}}{\cos \frac{\pi}{N}} \quad (\text{其中 } N' = 6k) \quad (18)$$

(d) 当 $N = 4k$, 且 $N = 12k'$ ($k' = 1, 2, 3, \dots$), $k = 1, 2, 3, \dots$, 时,

$$r_{N\max} = \frac{a}{2} \cdot \frac{1}{\cos \frac{\pi}{N}} \quad (N \uparrow, \text{则 } r_{N\max} \downarrow) \quad (19)$$

(e) 由(a) ~ (d)可知, 对于任意正多边形, 其外接圆半径有:

$$r_{N\max} \geq \frac{a}{2} \quad (20)$$

根据以上结论, 我们可以得到典型形状散射子二维三角晶格光子晶体的最大填充系数及散射子的最大外接圆半径分别为: 圆形, $f_{0\max} = 90.7\%$, $r_{0\max} = 0.5a$; 方形, $f_{4\max} = 86.5\%$, $r_{4\max} = 0.612a$; 正六边形, $f_{6\max} = 75.0\%$, $r_{6\max} = 0.5a$.

2.2 光子带隙的计算与分析

下面计算常温下常用的红外光学材料 Ge 与空气介质构成的二维三角晶格光子晶体的光子带隙结构.

设晶格常数为 a , 红外光学材料 Ge 的折射率 $n_{\text{Ge}} = 4.0032$, 空气介质的折射率 $n_0 = 1.0003$, 散射子为圆形. 考虑两种情况: (1) 空气背景中周期性排列的 Ge 柱; (2) Ge 背景中周期性排列的空气柱.

(1) 空气背景中周期性排列的 Ge 圆柱

通过平面波展开法计算空气背景中周期性排列 Ge 柱情况的二维三角晶格光子晶体, 可得到带隙随散射子半径 r 及填充系数 f 的变化关系图, 如图 2.

由图 2 可知, 对于空气背景中周期性排列 Ge 圆柱情况的二维三角晶格光子晶体, 我们可以得出以

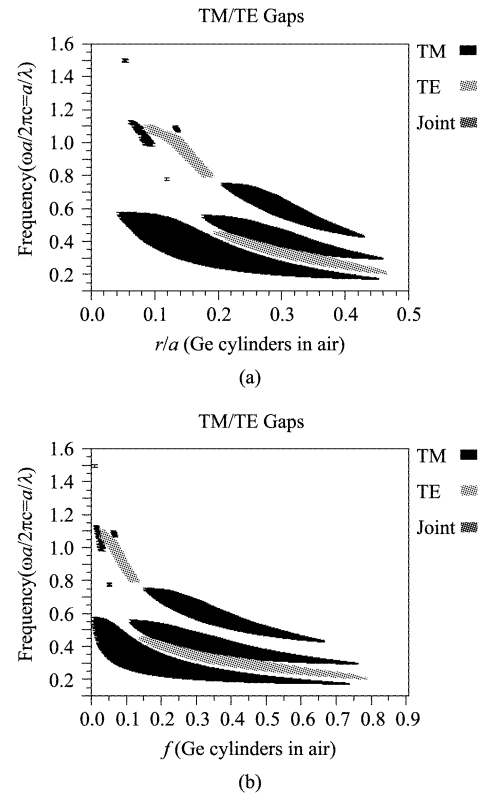


图 2 Ge 圆柱半径 r 及填充系数 f 变化时的光子带隙
Fig. 2 Photonic band gap with different radiuses and filling factors of the Ge cylinders

下结论: (1) 可产生 TM 带隙和 TE 带隙, 但不产生完全带隙, 且 TM 带隙占优势; (2) 随着 Ge 圆柱半径 r (填充系数 f) 的增大, TM、TE 带隙的中心频率均逐渐减小, 即光子带隙的中心频率由高频向低频移动; (3) 光子带隙宽度先增大后减小.

(2) Ge 背景中周期性排列的空气圆柱

通过平面波展开法计算 Ge 背景中周期性排列空气柱情况的二维三角晶格光子晶体, 可得到带隙随散射子半径 r 及填充系数 f 的变化关系图, 如图 3.

由图 3 可知, 对于 Ge 背景中周期性排列空气柱情况的二维三角晶格光子晶体, 可得到如下结论: (1) 可产生大量的 TM 带隙和 TE 带隙以及完全带隙, 且 TE 带隙占优势; (2) 随着空气圆柱半径 r (填充系数 f) 的增大, TM、TE 及完全带隙的中心频率均逐渐增大, 即光子带隙的中心频率由低频向高频移动; (3) 光子带隙宽度呈先增大后减小趋势.

为了深层揭示 Ge 基二维三角晶格光子晶体的光子带隙特性, 在此提取并分析两种情况下的最大光子带隙, 即第一种情况下 TM 模的第一带隙及第二种情况下 TE 模的第一带隙和最大完全带隙. 根据图 2 及图 3, 可得到三者的中心频率及宽度分别

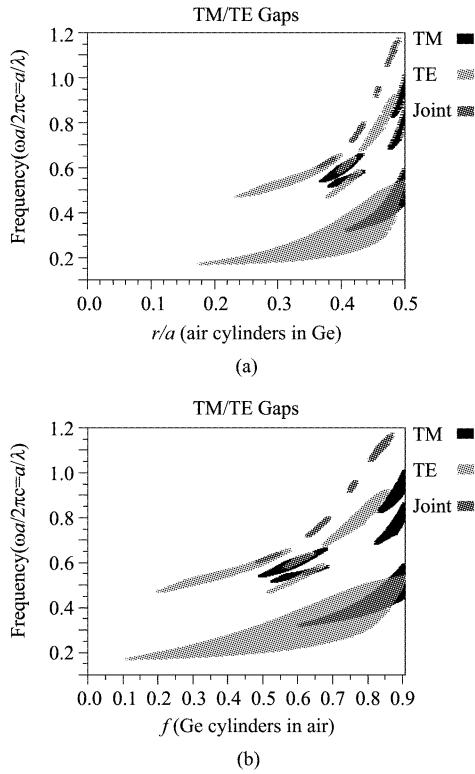


图3 空气圆柱半径 r 及填充系数 f 变化时的光子带隙
Fig.3 Photonic band gap with different radiuses and filling factors of the air cylinders

与散射子半径 r 及填充系数 f 的关系曲线,如图4.

对于第一种情况下 TM 模的第一带隙及第二种情况下 TE 模的第一带隙及最大完全带隙,根据图4,我们可以得到几点结论:(1)随着散射子半径 r (填充系数 f) 的增大,第一种情况下带隙中心频率由高频向低频移动,而第二种情况下带隙中心频率则由低频向高频移动;(2)两种情况下光子带隙的宽度都是先增大后减小,且第一种情况增速大减速小,而第二种情况增速小减速大;(3)TM、TE 及完全带隙宽度分别在 $r = 0.14a$ ($f = 0.071$)、 $r = 0.46a$ ($f = 0.768$)、 $r = 0.49a$ ($f = 0.871$) 处取得峰值 $\Delta\omega_{\max} = 0.220(2\pi c/a)$ 、 $0.207(2\pi c/a)$ 、 $0.112(2\pi c/a)$,且对应的中心频率分别为 $\omega_0 = 0.408(2\pi c/a)$ 、 $0.387(2\pi c/a)$ 、 $0.475(2\pi c/a)$,带隙相对宽度分别为 $\Delta\omega_{\max}/\omega_0 = 53.9\%$ 、 53.5% 、 23.6% .

根据电磁场理论,可推导出频率与介质相对介电常数的关系: $k = \omega \cdot (\epsilon\mu)^{1/2} = \omega \cdot (\epsilon_0\epsilon_r\mu_0\mu_r)^{1/2} \approx \omega \cdot \epsilon_r^{1/2}/c$,即 $\omega = kc \cdot \epsilon_r^{-1/2}$.由此我们可以定性的得到两种情况下光子带隙中心频率的变化趋势:(1)第一种情况,随着 Ge 柱半径 r (填充系数 f) 的增大,介质的有效相对介电常数 ϵ_{eff} 增大, $\epsilon_{\text{eff}}^{-1/2}$ 减小,

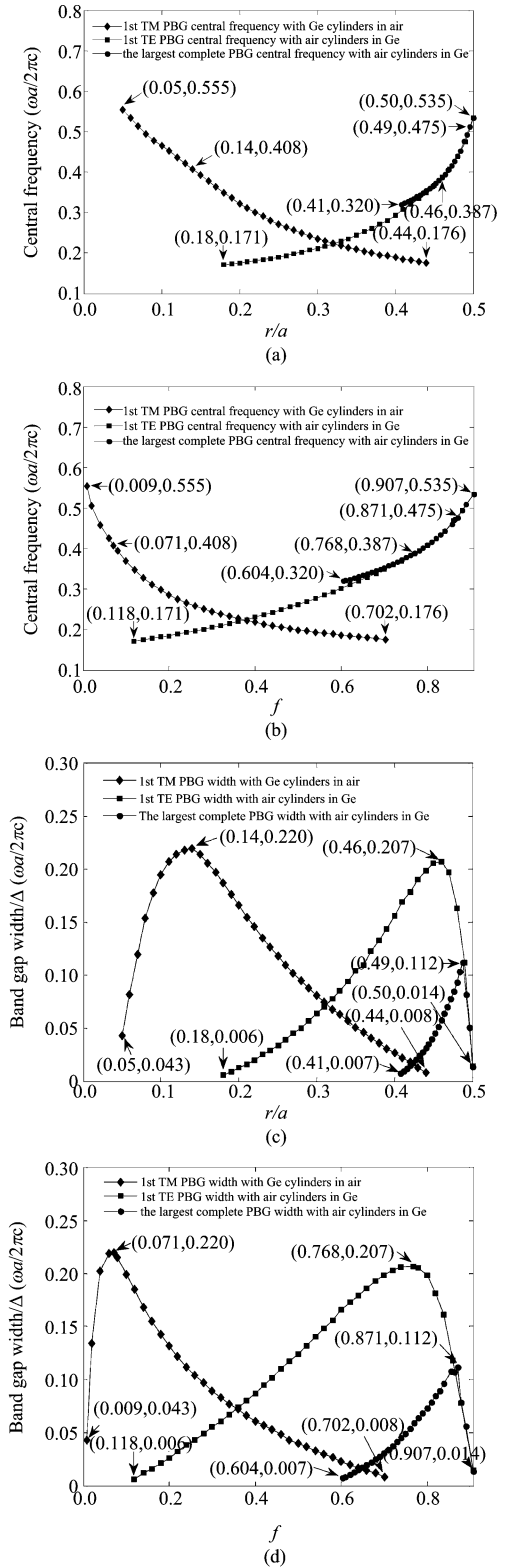


图4 第一种情况下 TM 模的第一带隙及第二种情况下 TE 模的第一带隙及最大完全带隙,三者的中心频率及宽度分别与散射子的半径 r 及填充系数 f 的关系
Fig.4 Relationship between the width and the center frequency of the first TM PBG for the first case and the first TE PBG and largest complete PBG for the second case and the radiuses and the filling factors of the scatters

则 ω 减小,即频率由高频向低频移动;(2) 第二种情况,随着空气柱半径 r (填充系数 f) 的增大,介质的有效相对介电常数 $\varepsilon_{\text{reff}}$ 减小, $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ 增大,则 ω 增大,因此中心频率由低频向高频移动。

另外,我们可以根据 Maxwell-Garnett 公式^[27] 计算两种情况下有效相对介电常数,即:

$$\varepsilon_{\text{reff}} = \varepsilon_e + 3f\varepsilon_e \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_e}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_e - f(\varepsilon_i - \varepsilon_e)}, \quad (21)$$

其中, ε_e 为背景介质的相对介电常数, ε_i 为散射子的相对介电常数, f 为散射子的填充系数。

再根据 $\varepsilon_{\text{reff}}$ 可得到两种情况下的 $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$, 由 $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ 的变化趋势可推知中心频率 ω 的变化趋势. 第一种情况, $\varepsilon_e = 1.0003$, $\varepsilon_i = 4.0032$; 第二种情况, $\varepsilon_e = 4.0032$, $\varepsilon_i = 1.0003$; f 值由式(15) 确定. 可易得两种情况下介质的有效相对介电常数的 $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ 与散射子半径 r (填充系数 f) 的关系,如图 5.

由图 5 可知,当空气背景中周期性排列 Ge 圆柱时,随着 Ge 圆柱半径 r (填充系数 f) 的增大,则 $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ 减小,即带隙的中心频率 ω 减小;当 Ge 背景中周期性排列空气圆柱时,随着空气圆柱半径 r (填充

系数 f) 的增大,则 $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ 增大,即带隙的中心频率 ω 增大。

Ge 基二维三角晶格光子晶体中,散射子的周期排列,使介质的介电常数呈周期性变化. 光波在光子晶体中传播时,散射子对光波中的光子产生布拉格散射效应,而导致了光子带隙的产生. 散射子半径及介电常数的不同,导致了光子带隙宽度的各异. 对于空气背景中排布 Ge 柱的二维三角晶格光子晶体(低折射率背景中排布高折射率柱),在散射子“小”半径 $r=0.05a$ (“低”填充系数 $f=0.009$) 时即可产生光子带隙;对于 Ge 背景中排布空气柱的二维三角晶格光子晶体(高折射率背景中排布低折射率柱),在散射子“大”半径 $r=0.18a$ (“高”填充系数 $f=0.118$) 时方可产生光子带隙. 随着散射子半径的增大,布拉格散射效应更为显著,从而光子带隙宽度也随之增大;当散射子半径增大到一定程度时(此时带隙宽度达峰值),某些频率的光子将在散射子中透射,从而削弱了布拉格散射效应,因而导致了光子带隙宽度又逐渐减小。

根据上述分析,我们可以得出 Ge 基二维三角晶格光子晶体中导致光子带隙的中心频率变化及光子带隙的宽窄变化的因素分别在于:(1) 有效相对介电常数的变化;(2) 布拉格散射效应的强弱。

3 结论

对于 Ge 基二维三角晶格光子晶体,我们可以得出以下结论。

(1) 设正 N 边散射子,其外接圆半径为 r_N ,则该散射子所对应的二维三角晶格光子晶体的填充系数为: $f_N = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{r_N}{a}\right)^2 \cdot N \cdot \sin \frac{2\pi}{N} (N \geq 3)$, 且 $r_{N\text{max}} \geq$

$\frac{a}{2}$. 当 N (或 r_N) 确定, r_N (或 N) 增大时,填充系数 f_N 增大。

(2) 当空气背景中周期排布 Ge 圆柱时,只产生 TM、TE 带隙,不产生完全带隙, TM 带隙占优势;随着 Ge 柱半径 r (填充系数 f) 的增大,光子带隙的宽度 $\Delta\omega$ 先增大后减小,且增速大减速小,光子带隙的中心频率 ω_0 变化总趋势是由高频向低频移动;在 $r=0.14a$ ($f=0.071$) 处, TM 模第一带隙宽度达峰值 $\Delta\omega_{\text{max}} = 0.220 (2\pi c/a)$, 其中心频率 $\omega_0 = 0.408 (2\pi c/a)$, 带隙相对宽度为 $\Delta\omega_{\text{max}}/\omega_0 = 53.9\%$ 。

(3) 当 Ge 背景中周期排布空气圆柱时,可产生 TM、TE 及完全带隙, TE 带隙占优势;随着空气柱半

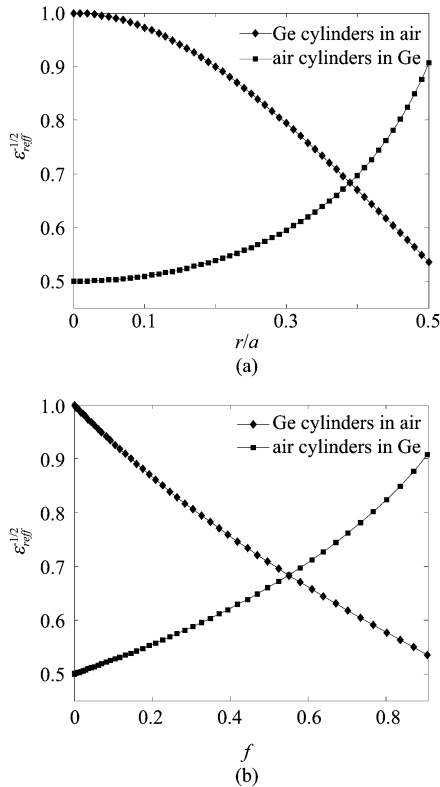


图 5 两种情况下介质的有效相对介电常数的 $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ 分别与散射子的半径 r 及填充系数 f 的关系

Fig. 5 Relationship between the $\varepsilon_{\text{reff}}^{-1/2}$ and the radiuses and the filling factors of the scatters for the two cases

径 r (填充系数 f) 的增大,光子带隙的宽度 $\Delta\omega$ 先增大后减小,且增速小减速大,光子带隙的中心频率 ω_0 变化总趋势是由低频向高频移动;在 $r = 0.46a$ ($f = 0.768$) 处,TE 模第一带隙宽度达峰值 $\Delta\omega_{\max} = 0.207(2\pi c/a)$,其中心频率 $\omega_0 = 0.387(2\pi c/a)$,带隙相对宽度为 $\Delta\omega_{\max}/\omega_0 = 53.5\%$;在 $r = 0.49a$ ($f = 0.871$) 处,最大完全带隙宽度达峰值 $\Delta\omega_{\max} = 0.112(2\pi c/a)$,其中心频率 $\omega_0 = 0.475(2\pi c/a)$,带隙相对宽度为 $\Delta\omega_{\max}/\omega_0 = 23.6\%$.

(4) 导致 Ge 基二维三角晶格光子晶体的光子带隙中心频率变化及光子带隙宽窄变化的根本原因分别在于:①有效相对介电常数的变化;②布拉格散射效应的强弱.

REFERENCES

- [1] Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N, *et al.* Photonic Crystals: Molding the Flow of Light [M]. Second Edition. Princeton University Press, Princeton and Oxford, 2008:1-24.
- [2] Cregan R F, Mangan B J, Knight J C, *et al.* Single-mode photonic band gap guidance of light in air[J]. *Science*, 1999, **285**(5433):1537-1539.
- [3] Chow E, Lin S Y, Johnson S G, *et al.* Three-dimensional control of light in a two-dimensional photonic crystal slab[J]. *Nature*, 2000, **407**(6807):983-986.
- [4] Almeida V R, Barrios C A, Panepucci R R, *et al.* All-optical control of light on a silicon chip[J]. *Nature*, 2004, **431**(7012):1081-1084.
- [5] Fink Y, Winn J N, Fan S H, *et al.* A dielectric omnidirectional reflector[J]. *Science*, 1998, **282**(5394):1679-1682.
- [6] Russell P. Photonic crystal fibers[J]. *Science*, 2003, **299**(5605):358-362.
- [7] Cerqueira SA. Recent progress and novel applications of photonic crystal fibers[J]. *Rep. Prog. Phys.*, 2010, **73**(2):024401.
- [8] Akahane Y, Asano T, Song BS, *et al.* High-Q photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal[J]. *Nature*, 2003, **425**(6961):944-947.
- [9] Park H G, Kim S H, Kwon S H, *et al.* Electrically driven single-cell photonic crystal laser[J]. *Science*, 2004, **305**(5689):1444-1447.
- [10] Mekis A, Chen J C, Kurland I, *et al.* High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**(18):3787-3790.
- [11] Chen X Y, Shum P, Hu J J. Special control of the cutoff frequencies in a 2D photonic crystal coupled-cavity waveguide[J]. *Opt. Commun.*, 2007, **276**(1):93-96.
- [12] Singh S K, Pandey J P, Thapa KB, *et al.* Structural parameters in the formation of omnidirectional high reflectors[J]. *Prog. Electromagn. Res.*, 2007, **70**:53-78.
- [13] Prasad T, Colvin V L, Mittleman D M. Dependence of guided resonances on the structural parameters of terahertz photonic crystal slabs[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 2008, **25**(4):633-644.
- [14] Mao X Y, Huang Y D, Cui K Y, *et al.* Effects of structure parameters and structural deviations on the characteristics of photonic crystal directional couplers[J]. *J. Lightwave Technol.*, 2009, **27**(18):4049-4054.
- [15] Oh J R, Lee Y K, Park H K, *et al.* Effects of symmetry, shape, and structural parameters of two-dimensional SiN_x photonic crystal on the extracted light from $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ film[J]. *J. Appl. Phys.*, 2009, **105**(4):043103.
- [16] Ma Z, Ogusu K. Power splitter based on cascaded multi-mode photonic crystal waveguides with triangular lattice of air holes[J]. *Opt. Commun.*, 2009, **282**(17):3473-3476.
- [17] Smigaj W, Gralak B, Pierre R, *et al.* Antireflection gratings for a photonic-crystal flat lens[J]. *Opt. Lett.*, 2009, **34**(22):3532-3534.
- [18] Takayama S, Kitagawa H, Tanaka Y, *et al.* Experimental demonstration of complete photonic band gap in two-dimensional photonic crystal slabs[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2005, **87**(6):061107.
- [19] Wuelbern J H, Schmidt M, Eich M, *et al.* Omnidirectional photonic band gap in polymer photonic crystal slabs[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, **91**(22):221104.
- [20] Shi P, Huang K, Kang X L, *et al.* Creation of large band gap with anisotropic annular photonic crystal slab structure[J]. *Opt. Express*, 2010, **18**(5):5221-5228.
- [21] Dyogtyev A V, Sukhoivanov I A, De La Rue R M. Photonic band-gap maps for different two dimensionally periodic photonic crystal structures[J]. *J. Appl. Phys.*, 2010, **107**(1):013108.
- [22] YU Huai-Zhi. *Infrared Optical Materials* [M]. Beijing: National Defence Industry Press(余怀之. 红外光学材料. 北京:国防工业出版社), 2007:48-106.
- [23] 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):3152-3155.
- [24] Cicek A, Ulug B. Influence of Kerr nonlinearity on the band structures of two-dimensional photonic crystals[J]. *Opt. Commun.*, 2008, **281**(14):3924-3931.
- [25] Tang B S, Shen T G. Effect of disorder on transmission spectra of two-dimensional photonic crystals with transfer matrix method[J]. *J. Infrared. Millim. W.*, 2007, **26**(1):73-76.
- [26] Busch K, John S. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems[J]. *Phys. Rev. E*, 1998, **58**(3):3896-3908.
- [27] Zeng Y, Zhang H T, Zhang H Y, *et al.* Effective permittivity calculation of composites with interpenetrating phases[J]. *J. Electron. Mater.*, 2010, **39**(8):1351-1357.