

# 结构参数对二维 Archimedes A7 晶格 光子晶体禁带的影响

杨毅彪<sup>1</sup>, 王伟军<sup>1</sup>, 费宏明<sup>1</sup>, 梁伟<sup>2</sup>, 王云才<sup>1</sup>

(1. 太原理工大学 物理与光电工程学院, 山西 太原 030024;

2. 太原理工大学 材料科学与工程学院, 山西 太原 030024)

**摘要:**利用平面波展开法对空气背景中介质圆柱和方柱构造的二维 Archimedes A7 晶格光子晶体的禁带结构随介质折射率、填充比的变化关系进行了研究,并进一步计算了介质方柱的旋转角度对完全光子禁带宽度的影响.研究发现,介质圆柱构造的 Archimedes A7 晶格结构在介质柱折射率最低为  $n=2.40$  时出现完全光子禁带,当  $n=2.60$  时禁带宽度达到最大值.介质方柱构造的 Archimedes A7 晶格结构在介质柱折射率  $n=3.80$  时完全禁带宽度达到最大值,且随着折射率的增加禁带宽度变化很小;在介质方柱折射率恒定情况下,其最大禁带宽度与旋转角度无关,但旋转后出现完全禁带的填充比范围明显扩大.

**关键词:**光子晶体;平面波展开法;Archimedes A7 晶格;完全光子禁带

**中图分类号:**0734 **文献标识码:**A

## Effects of structure parameters on the bandgap of two dimensional Archimedes A7 photonic crystals

YANG Yi-Biao<sup>1</sup>, WANG Wei-Jun<sup>1</sup>, FEI Hong-Ming<sup>1</sup>, LIANG Wei<sup>2</sup>, WANG Yun-Cai<sup>1</sup>

(1. College of Physics and Optoelectronics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China;

2. College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

**Abstract:** Plane wave expansion method is introduced to simulate the band structures of two-dimensional photonic crystals made of Archimedes A7 lattice of circular and square dielectric rod in air. The bandgaps of Archimedes A7 lattice with dielectric rods is also discussed as functions of the refractive index, filling fraction and rotation angle. The results show that the complete bandgap can be obtained when the refractive index is greater than 2.40. The width of complete bandgap reaches the maximum when the dielectric refractive index of the circular rod is equal to 2.60. For the Archimedes A7 lattice of square dielectric rod, the complete bandgap reaches the maximum when the dielectric refractive index equals 3.80. The maximum complete bandgap changes in a narrow range as the refractive index increases. When the rotation angle of the square dielectric rods changes, the maximum bandgap keeps constant for a fixed refractive index. However after the change of rotation angle, the complete bandgap appears in a large scale of the filling fraction.

**Key words:** photonic crystal; plane wave expansion method; Archimedean lattice; complete bandgap

**PACS:** 42.70.Qs, 78.20.Bh

### 引言

自 1987 年 S. John<sup>[1]</sup> 讨论光子局域和 E. Yablonovitch<sup>[2]</sup> 在讨论如何抑制自发辐射并各自独立提出光子晶体概念以来,光子晶体的研究越来越受到重视.二维光子晶体在理论研究和实验制作加

工方面虽然取得了长足的发展,但由于受微加工技术的限制,其制备研究主要还只在毫米波段到微米、远红外、红外,和少数的可见光波段.目前,人们已经成功制造出具有完全光子禁带的二维光子晶体,并已应用于高外量子效率发光二极管<sup>[3-5]</sup>、光子晶体光纤<sup>[6]</sup>、滤波器<sup>[7-8]</sup>等方面.

收稿日期:2011-04-26,修回日期:2011-12-12

Received date: 2011-04-26, revised date: 2011-12-12

基金项目:国家自然科学基金(60927007);山西省自然科学基金(2011011003-1)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China(60927007), and the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China(2011011003-1)

作者简介(Biography): 杨毅彪(1967-),男,山西太原人,博士,教授,研究方向为光子晶体理论及光学器件设计, E-mail: yangyibiao\_tyut@sohu.com.

二维 Archimedes A7 晶格结构是一种复合三角结构,有的文献也简称其为 A7 晶格<sup>[5]</sup>. 已有研究发现,由空气圆柱在介质材料背景中构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体具有较大的完全光子禁带<sup>[9]</sup>; A·David 等<sup>[3,4]</sup>和 M·Rattier 等<sup>[5]</sup>将空气圆柱 Archimedes A7 晶格光子晶体应用于发光二极管以提高外量子效率. 对于由介质圆柱构造的具有简单结构的二维光子晶体,如 Triangular 晶格和 Square 晶格,即使在介质柱折射率很大时也难以产生完全光子禁带<sup>[10]</sup>. 二维 Archimedes A7 晶格光子晶体的制备并不比 Triangular 晶格增加太多难度,如果采用较低折射率材料即可构造出完全光子禁带,则对于 Archimedes A7 晶格的光子晶体的应用是很有意义的.

本文利用平面波展开法研究空气背景下介质柱构成的二维 Archimedes A7 晶格光子晶体完全禁带随介质柱折射率、介质填充比、介质柱形状及介质柱旋转角度的变化规律,寻找理想的结构参数值,为此类光子晶体材料的制备与应用提供理论参考.

## 1 理论方法和结构模型

平面波展开法是日前应用最广的光子晶体理论分析方法之一. 假设二维光子晶体的介电常数分布在  $y$  轴方向是均匀的,在  $x-z$  平面呈周期性变化,那么介电常数  $\varepsilon$  就是  $x$  和  $z$  的函数,用  $\varepsilon(\mathbf{r}_\parallel)$  表示介电常数;电场  $\mathbf{E}$  与  $z$  方向平行时称为  $\mathbf{E}$  偏振(TM 模);相应的,磁场  $\mathbf{H}$  与  $z$  方向平行时称为  $\mathbf{H}$  偏振(TE 模),利用 Maxwell 方程来描述光在光子晶体内部的传播,得到磁场  $\mathbf{H}$  的定态波动方程

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

结合 Bloch 定理,得出倒晶格空间磁场  $\mathbf{H}$  的本征方程

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

本文讨论的是二维光子晶体结构,由式(2)分解得  $\mathbf{H}$  偏振只有  $z$  分量时磁场  $\mathbf{H}$  的对称矩阵本征值方程

$$\sum_{\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G})(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \eta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} H_{z,\mathbf{k},\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} H_{z,\mathbf{k},\mathbf{G}} \quad (3)$$

同理,可以得出  $\mathbf{E}$  偏振(TM 模)的  $\mathbf{E}$  场本征值方程

$$\sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{k} + \mathbf{G}'|^2 \eta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} E_{z,\mathbf{k},\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} E_{z,\mathbf{k},\mathbf{G}} \quad (4)$$

一般取  $N > 300$  个平面波时有较好的收敛性.  $\mathbf{E}$

偏振和  $\mathbf{H}$  偏振重叠的禁带为完全光子禁带.

Archimedes A7 晶格是一种复合三角结构,在空气背景( $n = 1.00$ )下,沿  $y$  轴相互平行且无限延伸的介质柱构成的二维周期排列结构,每七个散射体原胞看作一个格点,这些原胞分布三角晶格上. 计算中的 Archimedes A7 晶格分别由圆柱和方柱两种不同形状的介质柱构成,空气背景中介质圆柱和方柱型 Archimedes A7 晶格光子晶体结构见图 1,其中图 1(a)、(b)代表的是介质柱,相邻介质柱的中心距  $a$  为晶格常数, $d$  为介质圆柱的直径或介质方柱的边长;图 1(b)是旋转一定角度后的介质方柱 Archimedes A7 晶格光子晶体结构.

## 2 数值模拟结果及讨论

首先,利用平面波展开法分别模拟计算不同折射率下,介质圆柱构造的二维 Archimedes A7 晶格 TE 模和 TM 模禁带随介质填充比( $f = d/a$ )的变化关系. 研究结果发现,介质折射率介于 2.40 ~ 5.70 之间都出现了完全光子禁带,最大完全禁带宽度介于  $\Delta = 0.007(\omega a/2\pi c)$  至  $\Delta = 0.021(\omega a/2\pi c)$  之间,见图 2. 通过进一步优化计算发现,折射率  $n = 2.60$  (可采用 SiC 或 GaN 材料)介质的介质圆柱在介质填充比  $f = 0.54$  时完全光子禁带最大,其 TM 模和 TE 模的色散曲线见图 3,其中 TE 模的第二禁带和 TM 模的第一禁带重叠部分即为完全光子禁带,完全光子禁带的宽度  $\Delta_{\max} = 0.604 - 0.583 = 0.021(\omega a/2\pi c)$ .

对介质折射率  $n = 2.60$  构造的介质圆柱型 Archimedes A7 晶格进行进一步研究发现,在填充比  $f = 0.50$  到  $f = 0.80$  的较大范围内连续变化时,都存在 TE 模禁带和 TM 模禁带重合的完全光子禁带,完全光子禁带的宽带处于  $\Delta = 0.010(\omega a/2\pi c)$  至  $\Delta =$

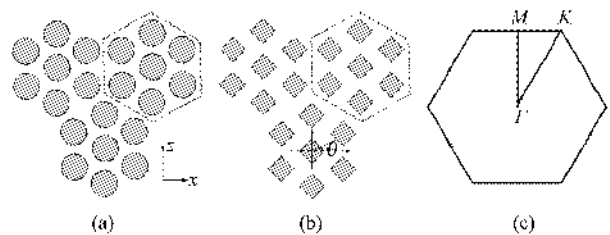


图 1 二维 Archimedes A7 晶格光子晶体结构,虚线部分为选取的晶胞 (a) 介质圆柱 (b) 介质方柱 (c) 简约布里渊区,  $\Gamma, M, K$  是布里渊区的对称点

Fig. 1 2D Archimedean lattice, Dotted lines mark the unit cell (a) circle rods (b) square rods (c) Brillouin zone,  $\Gamma, M, K$  is brillouin zone symmetry points

0.021 ( $\omega a/2\pi c$ ) 之间,且完全光子禁带宽度随填充比  $d/a$  的变化较为缓慢.图 4 给出了折射率  $n = 2.60$  介质的介质圆柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体的 TM/TE 模禁带随填充比  $d/a$  的变化曲线,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,两者重叠的部分即为出现完全光子禁带的区域.

空气背景中的介质方柱构造的二维 Archimedes A7 晶格光子晶体结构,在介质折射率  $n$  介于 2.50 ~ 3.00 和 3.30 ~ 6.00 之间均出现了完全光子禁带,当介质折射率  $n = 3.80$  (可采用 GaSb 材料)时有最大完全禁带,如图 5 所示.

图 6 给出了介质方柱折射率为  $n = 3.80$  时光子晶体的 TM/TE 模禁带,介质填充比在  $f = 0.40$  到  $f = 0.70$  之间连续变化时, TM 模的第二条禁带和 TE 模第二条禁带发生重叠,都出现了完全光子禁带且禁带宽度比较稳定.在介质填充比  $f = 0.62$  时出现的完全光子禁带宽度最大,为  $\Delta_{max2} = 0.369 - 0.350 = 0.019$  ( $\omega a/2\pi c$ ). 相对于介质圆柱而言,空气背景中的介质方柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体的最大完全光子禁带整体向低频方向移动.

由图 2 和图 5 可以看出,对于圆柱和方柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体其最大完全禁带并非随着折射率的变化而持续增加,禁带宽度分别在 2.60 和 3.80 处出现了最大值,并在 3.00 和 3.20 处出现了最小值.通常由介质柱构造的晶格结构比由空气柱构造的晶格结构更容易出现 TE 模禁带,且 TE 模禁带一般比 TM 模禁带宽很多<sup>[11-15]</sup>.空气背景下对于给定晶格结构的光子晶体,当介质柱材料的折射率改变时,光子晶体基本单元晶胞内两种不同

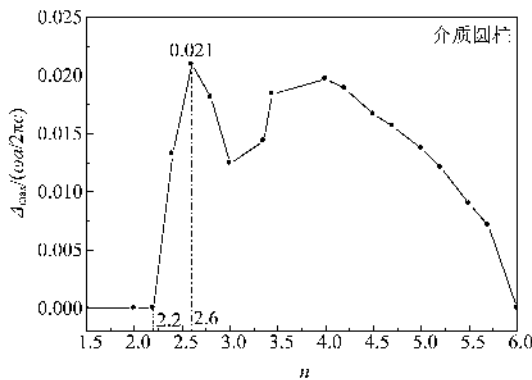


图 2 介质圆柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体的最大完全光子禁带随介质折射率的变化曲线  
Fig. 2 The largest complete bandgap for a Archimedean lattice of circle rods in air as a function of the refractive index

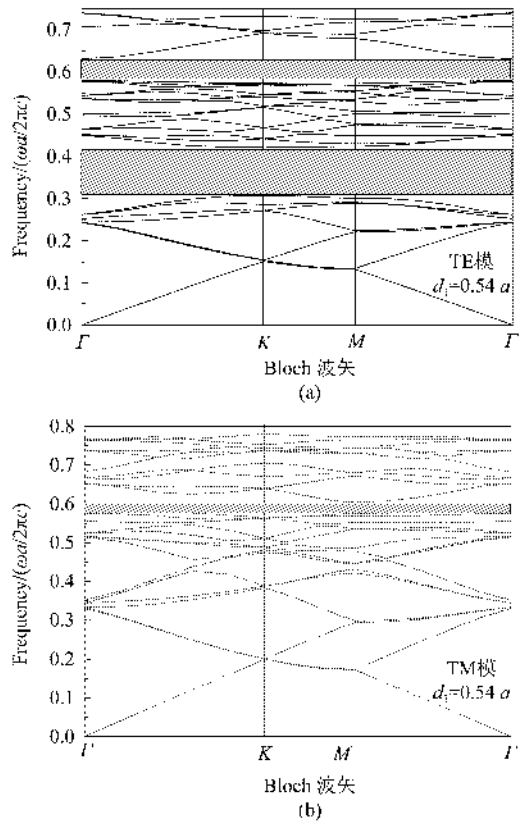


图 3 介质圆柱在空气背景中的 Archimedes A7 晶格光子晶体的色散曲线 (a)TE 模 (b)TM 模  
Fig.3 Dispersion diagram of the Archimedes A7 lattice with circle rods in air (a) TE mode (b) TM mode

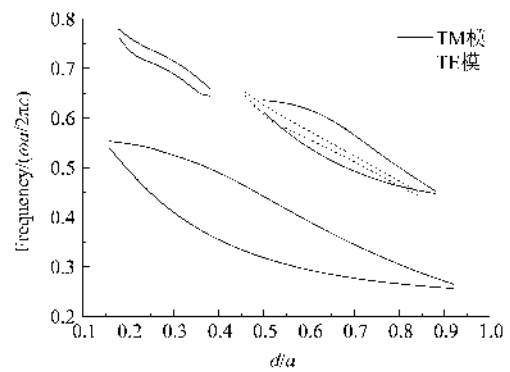


图 4 介质圆柱 Archimedes A7 晶格光子晶体的 TM/TE 模禁带  
Fig.4 TE and TM bandgaps for the Archimedes A7 lattice of circle rods in air

材料的相对光学厚度及入射电磁波的中心波长随之发生变化,结果会导致光子晶体 TE 模和 TM 模的能带结构都会发生变化,但变化的幅度有所不同.完全光子禁带的宽度取决于 TE 模和 TM 模禁带在变化过程中相互重叠的程度.随着 Archimedes A7 晶格的介质柱散射了折射率增大,TE 模禁带基本没有发

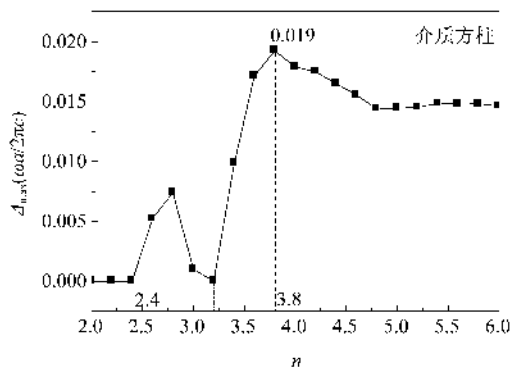


图5 介质方柱构成的 Archimedes A7 晶格光子晶体的最大完全光子禁带随介质折射率的变化曲线  
Fig. 5 The largest full bandgap for a Archimedean lattice of square rods in air as a function of the refractive index

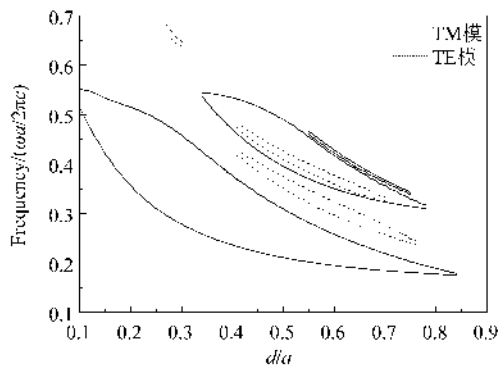


图6 介质方柱 Archimedes A7 晶格光子晶体未旋转时的 TM/TE 模禁带  
Fig. 6 TE and TM bandgaps for the Archimedes A7 lattice of square rods in air (rotation angle = 0°)

生变化,只是在填充比较大处其禁带的中心频率向低频方向有微小移动;而 TM 模禁带会整体向高频方向移动,并且禁带宽度、产生禁带的填充比范围和禁带数目都会发生改变。逐渐增加圆柱形散射子的折射率,其第一 TM 模禁带向高频方向移动并与第二 TE 模禁带逐渐重叠开始出现完全光子禁带,在折射率为 2.60 时,第二 TE 模禁带完全包围了上升的第一 TM 模禁带,两者完全重叠区域最大,出现第一个完全禁带峰值(如图 4);随着折射率继续增大,原第一 TM 模禁带偏离了第二 TE 模禁带,同时在低频区产生新的 TM 模禁带并向高频方向移动与第二 TE 模禁带再次重叠,但由于新产生的 TM 模禁带宽度较窄,此时两种模式禁带重叠产生的完全光子禁带变小,使完全禁带出现最小值( $n = 3.00$  处);折射率进一步增大,使新产生的 TM 模禁带与第二 TE 模禁带重叠区域逐渐扩大,直至出现了图 2 中的第二个完全禁带峰值。由于散射子形状的不同,方柱形散

射子的禁带变化与圆柱形散射子存在差异。方柱形散射了折射率为 2.50 时,其第一 TM 模禁带与第二 TE 模禁带开始重叠出现完全禁带,在折射率 2.80 时两者完全重叠,完全禁带达到第一个峰值;之后,介质方柱在折射率增大的过程中,第一 TM 模禁带向高频方向移动并逐渐离开第二 TE 模禁带,折射率增加到 3.20 时,其第一 TM 模禁带已完全偏离第二 TE 模禁带但此时并未产生新的 TM 模禁带,光子晶体结构不存在完全光子禁带( $n = 3.20$  处);随着折射率进一步增加使晶格产生了新的 TM 禁带与第二 TE 禁带重新重叠,并且产生 TM 模禁带的填充比范围扩大并且禁带宽度的增加,完全禁带又达到峰值(如图 6)。所以,在光子晶体的设计中,要考虑折射率与晶体结构参数的匹配才能实现增大禁带宽度的目的。

进一步研究介质方柱旋转角度的变化对光子禁带的影响。在介质折射率为  $n = 3.80$  的条件下对介质方柱在  $0^\circ \sim 45^\circ$  之间进行不同角度的旋转,发现最大完全光子禁带在  $0.017 \sim 0.019 (\omega a / 2\pi c)$  之间变化,说明旋转角度的改变对最大完全光子禁带的影响很小。同时发现旋转角度在  $25^\circ$  到  $40^\circ$  的范围内,出现完全光子禁带的填充比  $f$  区域都较介质方柱未旋转时明显增大。因为改变 Archimedes A7 晶格光子晶体介质方柱的旋转角度,一定程度地降低了光子晶体晶格的对称性,使能带筒并被部分消除,产生一些新的带隙。由于 Archimedes A7 晶格的对称性已比三角晶格低并且本身产生的 TM 禁带的宽度十分有限,故旋转对其最大完全光子禁带宽度的影响很小,但降低晶格对称性仍使产生完全光子禁带的填充比范围有了增加。图 7 给出了在旋转角度为  $35^\circ$  时介质方柱 Archimedes A7 晶格光子晶体的 TM/TE 模禁带,在填充比  $f$  区域从  $0.34 \sim 0.74$  都出现完全光子禁带,其最大完全光子禁带为  $\Delta_{\max 2} = 0.019 (\omega a / 2\pi c)$ 。

研究表明,由介质圆柱和方柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体的最大禁带宽度随介质折射率的变化曲线具有一定的相似性,都在介质折射率较低时产生了两个峰值。对于介质圆柱  $n = 2.60$  时光子禁带宽度达到最大值, $n = 4.00$  (可采用 Ge 材料)时达到第二个峰值,之后完全光子禁带的宽度随折射率的增加而迅速减小。介质方柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体的第一个峰值较小,在介质折射率增大到  $n = 3.80$  出现了最大完全光子禁带,之后随着介质折射率的增加禁带宽度较为稳定。

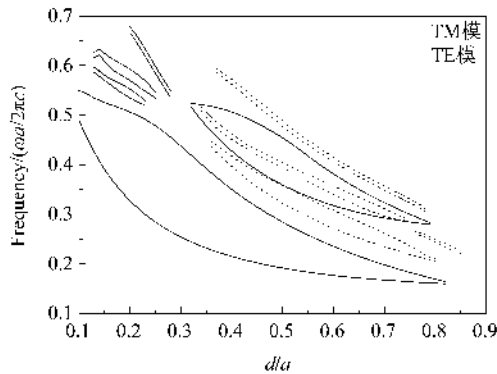


图7 介质方柱旋转  $35^\circ$  时 Archimedes A7 晶格光子晶体的 TM/TE 模禁带

Fig.7 TE and TM bandgaps for the Archimedes A7 lattice of squar rods in air (rotation angle =  $35^\circ$ )

介质方柱旋转一定角度后可实现更大填充比范围出现完全光子禁带,并保持其最大完全光子禁带宽度不变。

### 3 结论

通过改变二维 Archimedes A7 晶格光子晶体的结构参数,利用平面波展开法研究其禁带特性.发现介质圆柱构造的 Archimedes A7 晶格在折射率  $n = 2.40$  到  $n = 5.80$  之间都出现完全光子禁带,最大禁带宽度为  $\Delta_{\max 1} = 0.021(\omega a/2\pi c)$ ,且能实现在介质柱折射率较低时( $n = 2.60$ )产生最大完全光子禁带,这一特性为其在未来的制备和应用中提供了很大的便利.介质方柱构造的 Archimedes A7 晶格光子晶体在介质折射率  $n = 3.80$  时出现最大完全光子禁带,最大禁带宽度和圆柱型光子晶体接近,为  $\Delta_{\max 2} = 0.019(\omega a/2\pi c)$ .这两种介质柱构造的 Archimedes A7 晶格结构光子晶体在填充比连续变化比较大的范围内都有禁带宽度较为稳定的完全光子禁带.采用介质方柱降低了晶格结构的对称性,可使完全光子禁带在较大介质折射率情况下保持稳定,同时使最大完全光子禁带整体向低频方向移动.介质方柱还可以通过旋转在最大禁带宽度不变的情况下使出现完全禁带的介质填充比范围明显扩大。

### REFERENCES

- [1] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 1987, **58**(23):2486-2489.
- [2] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Physical Review Letters*, 1987, **58**(20):2059-2062.
- [3] David A, Benisty H, Weisbuch C. Optimization of light-diffracting photonic-crystals for high extraction efficiency LEDs[J]. *Journal of Display Technology*, 2007, **3**(2):133-148.
- [4] David A, Fujii T, Matioli E, et al. GaN light-emitting diodes with Archimedean lattice photonic crystals[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, **88**(7):073510.
- [5] Rattier M, Benisty H, Schwoob E, et al. Omnidirectional and compact guided light extraction from Archimedean photonic lattices[J]. *Applied Physics Letters*, 2003, **83**(7):1283.
- [6] Dudley J M, Genty G, Coen S. Supercontinuum generation in photonic crystal fiber[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2006, **78**(4):1135-1184.
- [7] HUANG Sheng-Ye, SHI Jun-Feng, WANG Dong-Sheng, et al. High pass property of square lattice photonic crystal waveguides[J]. *Journal of Infrared and Millimeter Waves* (黄声野,史峻峰,王东生,等.四方晶格光子晶体波导的高通滤波特性. *红外与毫米波学报*), 2006, **25**(3):179-182.
- [8] Djavid M, Ghaffari A, Monifi F, et al. Photonic crystal narrow band filters using biperiodic structures[J]. *Journal of Applied Sciences*, 2008, **8**(10):1891-1897.
- [9] David S, Chelnokov A, Lourtioz J M. Wide angularly isotropic photonic bandgaps obtained from two-dimensional photonic crystals with Archimedean-like tilings[J]. *optics letters*, 2000, **25**(14):1001-1003.
- [10] YANG Yi-Biao, WANG Shuan-Feng, LI Xiu-Jie, et al. Band gap characteristics of two-dimensional photonic crystals made of triangular lattice of dielectric rods[J]. *Acta Physica Sinica*. (杨毅彪,王拴峰,李秀杰,等.介质柱型二维 Triangular 格子光子晶体的禁带特性. *物理学报*), 2010, **59**(7):5073-5077.
- [11] Cassagne D, Jouanin C, Bertho D. Hexagonal photonic-band-gap structures[J]. *Physical Review B*, 1996, **53**(11):7134-7142.
- [12] Jovanović Đ, Gajić R, Hingerl K. Refraction and band isotropy in 2D square-like Archimedean photonic crystal lattices[J]. *Optics Express*, 2008, **16**(6):4048-4058.
- [13] XU Jing, CHEN Xiao-Shuang, ZHOU Mei, et al. Numerical study on photonic properties in two-dimensional complex photonic crystals of square lattice[J]. *Journal of Infrared and Millimeter Waves* (徐靖,陈效双,周梅,等.二维正方形复式晶胞光子晶体的光子特性研究. *红外与毫米波学报*), 2005, **24**(4):0241-0244.
- [14] 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[J]. *Optics Express*, 2004, **12**(24):5850-5856.
- [15] CHENG Xu-Pan, CAO Quan-Xi. Study of complete bandgap of two-dimensional columnar photonic crystals[J]. *Acta Physica Sinica* (程旭攀,曹全喜.二维圆柱形光子晶体的完全禁带研究. *物理学报*), 2008, **57**(5):3249-3253.