文章编号:1001-9014(2010)05-0389-03

线缺陷对二维四方圆柱形介质光子晶体禁带的影响

孙家兆, 邢怀中* (东华大学 应用物理系,上海 201620)

摘要:利用平面波展开方法研究了二维四方格子圆柱形介质光子晶体中线缺陷对光子禁带的影响.结果表明光子晶体中的缺陷层圆柱半径及缺陷层厚度对光子晶体禁带有显著影响.TE 波的第一禁带宽度随着缺陷层半径的增加先增加后减小,禁带的中心位置随着缺陷层圆柱半径的增加而下降,禁带的数目也随着缺陷层圆柱半径的增加 而明显变化.禁带的宽度随着缺陷层厚度与正常层厚度差别的增加而减小.

关键 词:光子晶体;光子禁带;平面波展开法;缺陷层

中图分类号:0734 文献标识码:A

EFFECT OF LINE DEFECTS ON THE BAND OF TWO DIMENSIONAL SQUARE PHOTONIC CRYSTAL

SUN Jia-Zhao, XING Huai-Zhong*

(Department of Applied Physics, Donghua University, Shanghai 201620, China)

Abstract: The effect of line defects on photonic band gap was investigated for the two dimensional photonic crystal consisting of square lattices of dielectric cylinder by means of plane wave expansion method. The result shows that both the radius and the width of defect layer in photonic crystal have an obvious effect on photonic band gap. The first band gap width of the TE wave was a maximum with the increase of the radius of the defect cylinders. The centre of the band gap shifts down and the numbers of band gap are changed well with increase of the radius of the defect cylinders. In addition, the band gap width is reduced as the difference between the width of defect layer and that of normal layer increases.

Key words: photonic crystal; photonic band gap; plane wave expansion method; defect layer

引言

自从 Yablonovitch^[1]和 John^[2] 1987 年提出了光 子晶体概念以来,光子晶体的理论和实验研究引起 了国内外的广泛兴趣。光子晶体光子禁带,如果光 的频率落入禁带中,则光在光子晶体中的传播被禁 止。光子晶体计算的方法很多,目前国内外采用的 方法主要有:平面波展开法、转移矩阵法、有限时域 差分法及有限元法^[3~5]等。光子晶体分为一维、二 维和三维光子晶体,其中三维光子晶体虽应用前景 最为广泛,但实现其在可见光和红外波段下的制备 仍是十分困难的。相比较而言,二维光子晶体不但 存在着众多的应用,而且相对容易制备,所以研究二 维光子晶体更具实用价值,目前在二维光子晶体方 面的工作已取得了很大的进展^[6~10]。大多工作主 要集中光子晶体的填充比或者介电常数变化对光子 禁带的影响,而对光子晶体中引入缺陷对光子禁带 的影响以及产生它的机理报道相对较少。鉴于此, 本文主要用平面波展开方法研究缺陷对四方格子圆 柱形介质光子晶体光子禁带的影响。

1 平面波展开法理论

平面波展开法在光子晶体计算中有广泛的应 用。可以由麦克斯韦方程:

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad , \tag{1}$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$
 , (2)

推导出表征光子晶体的本征方程:

收稿日期:2009-08-28,修回日期:2010-03-15

Received date: 2009 - 08 - 28, revised date: 2010 - 03 - 15

作者简介:孙家兆(1974-),男,山东滕州人,东华大学硕士研究生,主要从事光子晶体方面研究 通讯作者:E-mail: xinghz@ dhu. edu. cn.

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r})\right] = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}) \quad , \quad (3)$$

其中 $\varepsilon(\vec{r})$ 为相对介电常数, $\vec{H}(\vec{r})$ 为磁场强度矢量,在光子晶体中均是空间位移矢量 \vec{r} 的周期性函数; ω 为震荡频率;c为真空中光速。 $\vec{H}(\vec{r})$ 周期性分布,满足布洛赫定理:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})h(\vec{r})\hat{e}k \quad , \tag{4}$$

$$h(\vec{r} + \vec{R}) = h(\vec{r}) \quad , \tag{5}$$

其中格矢 $\vec{R} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3, \hat{e}_k$ 为垂直于波 矢 \vec{k} 且平行于 \vec{H} 的单位矢量。将 $h(\vec{r})$ 和 $\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}$ 在倒

空间展成傅立叶级数:

$$h(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} h(\vec{G}) \exp(i\vec{G}\cdot\vec{r}) \quad , \qquad (6)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \sum_{\vec{c}} \varepsilon^{-1}(\vec{G}) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) \quad , \qquad (7)$$

把(7)式代入(5)式可得:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \sum_{\vec{c},\lambda} h(\vec{c},\lambda) \exp[i(\vec{k}+\vec{c})\cdot\vec{r}] , \quad (8)$$
$$\cdot \hat{e}_{\lambda \ \vec{k}+\vec{c}} \quad (\lambda = 1,2)$$

把式(8)、(9)代入式(3)经简化可得:

$$-\sum_{\vec{c},\lambda} \varepsilon^{-1} (\vec{G}_i - \vec{G}) h(\vec{G},\lambda) (\vec{k} + \vec{G}i) \times [(\vec{k} + \vec{G}) \times \hat{e}_{\lambda,\vec{k} + \vec{G}}]$$
$$= \frac{\omega^2}{2^2} h(\vec{G}_i,\lambda) \hat{e}_{\lambda,\vec{k} + \vec{G}} , \qquad (9)$$

对于二维的光子晶体,式(10)可化为对应 TE、 TM 极化的两个独立的本征方程:

$$\sum_{\vec{c}} \varepsilon^{-1}(\vec{G}_{i},\vec{G}) \mid \vec{k} + \vec{G} \mid |\vec{k} + \vec{G}_{i}| \begin{pmatrix} h(\vec{G},1) & h(\vec{G}_{i},1) \\ h(\vec{G},2) & h(\vec{G}_{i},2) \end{pmatrix}$$
$$= \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \begin{pmatrix} h(\vec{G}_{i},1) \\ h(\vec{G}_{i},2) \end{pmatrix} (TM) , \qquad (10)$$

2 计算结果和讨论

首先为了比较起见,我们研究二维四方圆柱形 介质单元的光子晶体光子能带结构,考虑介电常数 $\varepsilon = 11.56$ 的圆柱形介质,周期地放在均匀的空气介 质中规则排列组成7×7四方晶体结构,其晶格常数 为a,圆柱体半径为R = 0.30a。为方便只讨论 TE 波的情况,理论计算得到其能带结构如图 1 所示。





从图中可以看出,存在两个比较明显的禁带,第一禁 带在归一化频率0.26~0.34的范围内,第二禁带在 归一化频率0.46~0.56的范围内,第二禁带比第一 禁带略宽。

为了研究缺陷层对光子晶体禁带的影响,在上 述模型的基础上,设置第三层为缺陷层(线缺陷), 介质圆柱体的半径为r,其结构如图2所示。让r由 0.01a增加到0.5a,理论计算的结果由图3给出。 通过图3可以发现缺陷层圆柱体半径的变化对TE 波有明显的影响。首先,可以看到TE 波的第一禁 带的宽度随着缺陷层圆柱层半径的增加先变大后变 小,这是由于缺陷层圆柱保半径的变化影响了晶体 的连通性造成的,当圆柱半径在合适的值时,晶体的 连通性最低,然后无论半径增加还是减小都会使晶 体的连通性增强。在r=0.3a 时达到最大值,有缺 陷时的禁带宽度明显比没有缺陷时要小。另外的几 条禁带与第一禁带宽度的变化不同,随着缺陷层圆 柱层半径的增加呈现先变小后变大的规律。其次, 缺陷层圆柱半径的变化对TE 波的禁带的个数以及





Fig. 2 The two-dimension square photonic crystal with defect layer



图 3 缺陷层圆柱半径变化时的二维四方光子晶体 TE 波禁 带变化





图 4 缺陷层厚度变化时的二维四方光子晶体禁带 Fig. 4 The gap map as the width of the defect layer changes for 2D square photonic crystal

禁带的带边都有明显的影响。从图 1 中可以看出, 没有缺陷时有 2 条禁带,而引入缺陷后,在 r = 0. 15*a* 之前有一条禁带,在 r = 0. 16*a* 至 r = 0. 41*a* 之间,有 两条禁带。在 r = 0. 42*a* 禁带基本消失。最后,每条 禁带的中心位置,都呈现出随着缺陷层圆柱半径的 增加而有向下移动的趋势。

在研究缺陷层宽度对 TE 波禁带的影响时,同 样取图 2 所示的结构, *R* = 0. 3*a*,令缺陷层圆柱的中 心到两边相邻的圆柱的中心的距离为 *D*,让 *D* 由 0. 6*a*增加到 1. 3*a*,观察晶体的禁带随 *D* 变化的情 况,计算结果如图 4 所示。首先可以看到,有缺陷 后,光子晶体的第一禁带的宽度变窄了,缺陷层厚度 与原来层的厚度差别越大,禁带越窄。其次,缺陷层 厚度对禁带的条数有显著的影响。在 *D* = 0. 6*a* 到 *D* = 0. 69*a*之间,存在两条禁带,在 *D* = 0. 7*a* 与 *D* = 0. 79*a* 之间存在四条禁带,在 *D* = 0.79*a* 与 *D* = 0.85*a* 之间又下降为三条禁带,在 *D* = 0.85*a* 到 *D* = 1.18*a* 之间又恢复了两条禁带。另外,缺陷层的宽度对禁 带中心位置有较小的影响。

3 结论

研究发现无论是线缺陷层的圆柱半径,还是线缺陷层厚度都对光子晶体的禁带分布有明显的影响。 禁带的中心位置随着缺陷层圆柱半径的增加而向下 移动,禁带的宽度随着缺陷层圆柱半径与正常圆柱半 径的差别的增加而减小。另外,禁带的条数也随着缺 陷层圆柱半径的增加而明显变化。通过合理调节缺 陷层的参数,可以得到理想的禁带结构,结果对设计 和制作各种需要的光子器件有一定的指导意义。

REFERENCES

- [1] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. *Physical Review Letters*, 1987, **58**(20):2059–2062.
- [2] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric super lattices [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58(23):2486-2489.
- [3] ZHOU Mei, CHEN Xiao-Shuang, JI Ya-Lin, et al. Effect of structure and defect on transmitted character of 2D photonic crystal[J]. J. Infrared Millim. Waves(周梅,陈效双, 季亚林等. 结构和缺陷对二维金属光子晶体的光子能带 的影响. 红外与毫米波学报),2003,22(3):229-233.
- [4] MALDOVAN M, THOMAS E L, CARTER C W. Layer-by-layer diamond-like woodpile structure with a large photonic band gap [J]. *Physical Review Letters*, 2004, 84(3):362-364.
- [5] PENDRY J B, MACKINNON A, Calculation of photon dispersion relations [J]. *Physical Review Letters*, 1992, 69 (19):2772–2775.
- [6] ZENG Yong, CHEN Xiao-Shuang, LU Wei. Propagation loss in two-dimensional polaritonic photonic crystal waveguides [J]. *Physics Letters A*, 2006, **351** (4): 319— 322.
- [7] ZHOU Reng-Long, CHEN Xiao-Shuang, LU Wei. Negative refractive behavior of a two-dimensional negative-index photonic crystal using a wave vector diagram method[J]. Solid State Communications, 2006, 139(7):345-350.
- [8] ZENG Yong, CHEN Xiao-Shuang, LU Wei. Modified spontaneous emission from a two-dimensional photonic crystal
 [J]. *Physical Review E*, 2004, 70(4):047601_1-3.
- [9] ZHOU Mei, CHEN Xiao-Shuang, XU Jing, et al. Fabrication and photonic band gap property of the two-dimensional square lattice based on silicon[J]. Acta Physica Subuca(周 梅,陈效双,徐靖,等. 硅基两维光子晶体的制备和光子 带隙特性. 物理学报),2004,53(10):3583-3586.
- [10] Xu Jing, CHEN Xiao-Shuang, Zhou Mei, et al. Numerical study on photonic properties in two-dimensional complex photonic crystals of square lattice[J]. J. Infrared Millim. 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):241-244.