六角蜂窝结构光子晶体异质结带隙特性研究*

关春颖 苑立波*

(哈尔滨工程大学理学院,哈尔滨 150001) (2005年5月10日收到,2005年7月18日收到修改稿)

利用蜂窝结构光子晶体具有两个范围较大绝对带隙的特性,设计新型六角蜂窝结构光子晶体异质结,采用平面波展开和超晶胞相结合的方法来研究异质结的能带结构特性.给出异质结的结构和相应的能带图,分析异质结界面传导模,研究两侧结构作横向拉开和侧向滑移时对传导模的影响,讨论这些结构的实际可行性.计算结果表明,没有任何晶格移动,此种结构异质结在绝对带隙中就有导模存在,两边晶格横向拉开对导模影响较大,而侧向 滑移的影响则较小.

关键词:光子晶体,异质结,光子带隙,超晶胞 PACC:4270,7340,7125

1.引 言

光子晶体的概念最早是由 Yablonovitch^[1]和 Iohn^[2]于 1987 年提出的 因具有光子带隙结构 具有 一些普通材料所无法比拟的特性。使光子晶体的结 构、制备和量子电动力学特性的研究在近年来备受 人们关注并得到广泛的研究,在光子晶体中引入缺 陷可以产生导模^{3]},而光子晶体异质结利用两种不 同晶格间的界面也是可以产生传导模的4-61.异质 结两边不同晶格结构的绝对带隙若出现在同一位 置 这个异质结在这一公共的带隙中则可能产生导 模,正方格子圆形散射子异质结(SCSC),在两边填 充因子不同时 将两个子晶格沿着界面横向拉开或 者纵向滑移时仅能在偏振带隙中产生传导模4〕而 在长方格子上放置长方形散射子和三角格子上放置 圆形散射子构成的异质结(RRTC)无需从界面做晶 格拉开或者侧向滑移在绝对带隙中就可以产生界面 传导模^{6]} 但其两边晶格的空气填充系数都较大 这 使器件制备的难度大大增加,另外三角形和方形结 构的绝对带隙对散射子的尺寸大小比较敏感 这就 要求制作器件时 精度要非常高.这里我们利用六角 蜂窝结构在填充系数不大时就可以产生绝对带隙这 一特性[7] 根据六角蜂窝结构的能带图 设计六角蜂

窝结构异质结,给出计算结果并讨论一些参数的 影响。

2. 计算方法及模型结构

电磁波中磁场 H 满足方程

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

这里 $\epsilon(\mathbf{r})$ 和 $\mu(\mathbf{r})$ 分别是介质的介电常数和磁导 率 ,通常取 $\mu(\mathbf{r})=1$; c 为真空中的光速 ; ω 为光波 频率 .求解方程(1)的方法很多 ,诸如时域有限差分 法^[s],有限元法^[s],平面波法^[10],传输矩阵法^[11]等 等 时域有限差分法和有限元法是目前比较流行的 数值算法 ,对于求解场分布和研究场的动态特性是 很好的工具 ,但对于研究能带结构 ,平面波展开法仍 具有绝对的优势.这里我们采用平面波与超晶胞相 结合的方法来求解该方程.

首先计算具有相同周期理想晶格的能带图,蜂 窝结构光子晶体横截面如图 1(a),图中 a 是晶格常 数,D 是圆形散射子的直径.当散射子的介电常数 为 12.96,背景为空气时,计算所得能带分布如图 1 (b),图中交叠部分为 TE 和 TM 模的绝对带隙.从图 中可以看出,此种结构的光子晶体在填充系数不大 时,存在两个范围较大的绝对光子带隙.假设具有不 同参数的两个蜂窝结构光子晶体,一个光子晶体的

^{*}高等学校优秀青年教师教学、科研奖励计划基金(批准号:158110330001)资助的课题.

[†] E-mail : lbyuan@vip.sina.com

第一个绝对光子带隙与另一个光子晶体的第二个绝 对光子带隙的中心频率是重合的,那么由这两个光 子晶体构成的异质结在公共的带隙中则有可能出现 传导模.我们正是利用这一特点来设计光子晶体异 质结的结构,即两边半无限大晶格的周期和填充系 数均不同,但具有公共的绝对光子带隙.



图 1 理想蜂窝结构光子晶体能带图 (a)蜂窝结构;(b)蜂窝结构光子晶体能带图



设计的异质结结构如图 2,阴影部分是介电常数 ε 为 12.96 的圆柱形电介质 ,空白部分为基质空 气 ,y 轴是界面 ,d 是两边半无限大晶格的间距 , l_1 和 l_2 是左右两边各自相邻散射子的间距 ,即 $l_1 = a/\sqrt{3}$, $l_2 = b/\sqrt{3}$.图中矩形表示我们实际计算采用的超 原胞 ,共取 48 个散射子 ,它的第一布里渊区也是

一矩形.兼顾带隙宽度和中心频率的一致性,我们选 择左右两边晶格常数分别为a,b,且b = 2/3a,相对 半径 $R_a = 0.15a$, $R_b = 0.21b$.则在y轴方向其仍然 是周期的,周期为2a或3b.左右两边无限大光子晶 体能带图如图 3 示 (a)和(b)分别表示具有晶格常 数为a和b的理想蜂窝结构光子晶体的能带图,虚 线和实线分别表示 TE 模和 TM 模的色散关系(b) 图的纵轴已利用a进行了调整.从图中可以看出, 左边晶格 TE 模的第5能带和第6个能带与 TM 模 的第7能带和第8个能带间存在绝对光子带隙,带 隙范围是(0.89476,0.99343)($2\pi c/a$);而右边晶格 TE 模的第3能带和第4个能带与 TM 模第6能带和 第7个能带间也存在绝对光子带隙,带隙范围是 (0.91216,0.99378)($2\pi c/a$),且两者交叠部分较大. 两者带隙重叠部分 $\Delta\omega$ 为(0.91216,0.99343) $2\pi c/a$.



图 3 左右两边无限大光子晶体能带图 (a)左侧晶格常数为 a 时理想晶格能带图 (b)右侧晶格常数为 b 时理想晶格能 带图

3. 计算结果与分析

由两者构成的异质结在没有任何晶格移动(d =0)时,在第一不可约布里渊区 K, 方向的能带结 构如图 4 示 计算过程中所取平面波数为 $81 \times 27 =$ 2187个 这足以保证计算的准确性, 虚线和实线仍 分别表示 TE 模和 TM 模的色散关系,带有圆圈和实 心点标志的曲线表示 TE 和 TM 局域模,两条双点划 线表示异质结所具有的绝对光子带隙范围 ((0.95312,1.0136)(2πc/a)),与两边半无限大晶格 所共有的绝对带隙略有差别,这是因为兼顾带隙宽 度 左右两边晶格的绝对带隙的中心频率没有完全 一致所致 从图中可以看出 在没有做任何晶格移动 时,在异质结的绝对光子带隙中有 TE 和 TM 导模存 在 但我们只需考虑异质结绝对带隙和两边晶格共 有绝对带隙两者的交叠区域 图中点划线表示两边 晶格共有绝对带隙的上限,可以看出重叠区域有一 个 TE 导模存在 这与我们预想是一致的.



图 4 异质结能带结构图(d=0)

下面考虑晶格做相对移动时对导模的影响.当 界面两边晶格相对横向拉开一定距离时,计算结果 表明此操作对导模是有影响的.我们给出相对横向 拉开 *d* = 1/8*l*₁ 和 *d* = 1/6*l*₁ 时计算所得的能带结构, 如图 5 和图 6 所示,图中标志与图 4 相同.从图中可 以看出,此时导模贯穿整个带隙,TE 和 TM 导模数 量增加,且导模频率下移.

进一步考虑晶格做侧向滑移对导模的影响.结 果发现侧向滑移对导模影响不大,我们选取侧向滑 移 *d* = 0.4*l*₁,所得能带结构如图7示,可以看出与不 发生侧向滑移时相比,区别不是很大,有两条TE 导模.



图 5 横向拉开 d = 1/8l1 时能带结构







图 7 侧向滑移 $d_{y} = 0.4 l_{1}$ 时能带结构

4.结 论

本文根据六角蜂窝结构的光子能带特性,研究 由六角蜂窝结构构成的新型异质结结构,讨论其导 模特性,发现在没有晶格移动时在所设计的异质结 的界面内就有导模存在,横向拉开对导模影响较大, 而侧向滑移对导模基本没有影响.

- [1] Yablonovitch E 1987 Phys. Rev. Lett. 58 2059
- [2] John S 1987 Phys. Rev. Lett. 58 2486
- [3] Tokushima M, Kosaka H, Tomita A, Yamada H 2000 Appl. Phys. Lett. 76 952
- [4] Lin L L Li Z Y 2001 Phys. Rev. B 63 033310
- [5] Zhou Y S , Gu B Y , Wang F H 2003 Journal of Physics : Condensed Matter 15 4109
- [6] Liu J T, Zhou Y S, Wang F H, Gu B Y 2004 Acta Phys. Sin. 53 1845 (in Chinese) [刘江涛、周云松、王福合、顾本源 2004 物理

学报 53 1845]

- [7] Joannopoulos J D 1995 Photonic crystals : Molding the Flow of Light (New Jersey : Princeton) p126
- [8] Lavrinenko A, Borel P I, Frandsen L H, Thorhauge M 2004 Opt. Express. 12 234
- [9] Figotion A, Godin Y A 1997 J. Comp. Phys. 136 585
- [10] Yablonovitch E , Gmitter T J , Leung K M 1991 Phys. Rev. B 67 2295
- [11] Yonekura J 1999 J. Lightwave Technol. 17 1500

Analysis of band gap in honeycomb photonic crystal heterostructure *

Guan Chun-Ying Yuan Li-Bo[†]

(School of Science , Harbin Engineering University , Harbin 150001 , China)
(Received 10 May 2005 ; revised manuscript received 18 July 2005)

Abstract

In the present paper, a new kind of honeycomb photonic crystal heterostructure(PCH) is proposed. The band gap structure of this photonic crystal heterostructure is investigated with supercell technique based on the plane-wave expansion method. The configuration of heterostructure and the corresponding band structures are obtained and the guide modes are analyzed. Furthermore, the influences of longitudinal sideslipping and transverse displacement of lattices on the band gap structures are discussed. It may provide a new configuration to generate guide modes. The achieved results show that the guide modes can exist in this heterostructure without any shift of lattices, and guide modes are highly sensitive to transverse shift, while sideslipping affects guide modes only slightly.

Keywords : photonic crystal , heterostructure , photonic band gap , guide modes PACC : 4270 , 7340 , 7125

^{*} Project supported by the Research Award Fund for Outstanding Young Teachers in Higher Education Institutions, China (Grant No. 158110330001).

[†] E-mail :lbyuan@vip.sina.com