

Research on the Characteristics of Bandgaps of Two-Dimensional Photonic Crystal with Graphene Structure

Luhui Yu^{1*}, Zhongze Yang², Haonan Liu¹, Kexin Liu¹, Yong Wan^{1#}

¹College of Physics Science, Qingdao University, Qingdao Shandong

²Qingdao Weiming School, Southlands Schools International China, Qingdao Shandong

Email: #wanyongqd@hotmail.com

Received: Aug. 27th, 2019; accepted: Sep. 5th, 2019; published: Sep. 12th, 2019

Abstract

According to the honeycomb structure of the two-dimensional graphene, we designed circular and hexagonal scatterers. On the basis of a general analysis of the photonic crystal bandgaps, using the plane wave expansion method, the characteristics of the band gap of photonic crystal constituted by two kinds of scattering elements with honeycomb structure were calculated. The bandgap of photonic crystals in TE and TM electromagnetic field modes is obtained, respectively. The relationship between the relative bandgap and the structural parameters of scattering elements is analyzed. According to the value of the relative bandgap, the model with the maximum relative band gap is obtained.

Keywords

Photonic Crystals, Graphene, Scatterers, Bandgap

石墨烯结构的二维光子晶体禁带特性研究

于鲁辉^{1*}, 杨忠泽², 刘浩楠¹, 刘可歆¹, 万 勇^{1#}

¹青岛大学物理科学学院, 山东 青岛

²索斯兰国际学校青岛为明中学, 山东 青岛

Email: #wanyongqd@hotmail.com

收稿日期: 2019年8月27日; 录用日期: 2019年9月5日; 发布日期: 2019年9月12日

*第一作者。

#通讯作者。

摘要

本文设计了圆形、六边形两种散射元并引用二维石墨烯的蜂窝状结构，基于对光子晶体禁带的研究，利用平面波展开法，对这二种散射元构建的蜂窝状光子晶体的禁带特性进行模拟计算。分别得到了在TE和TM两种电磁场模式下光子晶体的禁带宽度，对相对禁带宽度关于散射元结构参数变化的关系做了分析，依据相对禁带宽度的大小，得到了相对禁带最大的模型。

关键词

光子晶体，石墨烯，散射元，禁带

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

光子晶体[1] [2] [3] [4]是介电常数周期性变化而形成能量禁带，禁止特殊波长电磁波在其中传播的材料。准确地说，它们是一类结构，而不是新材料，这些介电常数周期性变化的结构能够阻止特定频率的光子传入或传出，类似于半导体晶体中能带结构对于电子行为的影响。光子晶体中也有光子禁带，它是光子晶体的基本特点，可以在通讯、光子集成电路等方面应用[5] [6] [7]。

石墨烯是一种由碳原子呈蜂窝晶格构成的单层片状结构，光子晶体结构可以模仿石墨烯结构，并人为的进行设计[8] [9]。本文采用了圆形和六边形为散射元，并采用石墨烯结构为排列周期，形成二维光子晶体结构，并对其禁带特性进行研究。

本文创新性地结合石墨烯蜂窝状结构，将其应用于二维光子晶体的禁带研究，分别以圆形和六边形为散射元进行构建，采用平面波展开法，计算了光子晶体在不同结构参数下禁带的变化规律，为光子晶体在通讯和太阳能利用等领域提供了方向，也为石墨烯蜂窝状结构的潜在应用提供了途径。

2. 实验模型

实验模型中参数设置取值一般与材料、晶格常数和散射元有关[1] [2]，本研究介质材料硅的折射率为 $n = 3.50$ ，晶格常数设为 $a = 1 \mu\text{m}$ ，剩余的主要参数就是散射元大小了。图1是两种石墨烯光子晶体示意图：图1(a)为圆形散射元的石墨烯光子晶体示意图；图1(b)为六边形散射元的石墨烯光子晶体示意图。为了避免相邻散射元重叠，在图1(a)中，散射元半径 R ， $0 < R \leq 0.5 \mu\text{m}$ ；在图1(b)中，六边形散射元边长 L ，取 $0 < L \leq 0.577 \mu\text{m}$ 。本模拟计算中，采用平面波展开法[10]求解，研究的精度为 10^{-8} 。

由于石墨烯光子晶体中传播的电磁波模式可以分为TE和TM两种模式，因此模拟时可分为四种情况：1) 是TE模介质柱型；2) 是TE模空气孔型；3) 是TM模介质柱型；4) 是TM模空气孔型。四种情况下，都是通过单一的改变半径 R 或 L 的参数值，计算相对禁带宽度，分别得到相对禁带随参数变化的规律，找出相对禁带最大值对应的参数值。

3. 实验模拟

实验模拟采用的是通用方法：通过改变参数分别对于圆形散射元和六边形散射元构建的石墨烯结构

光子晶体进行模拟计算，得到不同的参数对应的绝对禁带相对禁带的大小，然后经过换算，获得最大的相对禁带宽度[11] [12]。

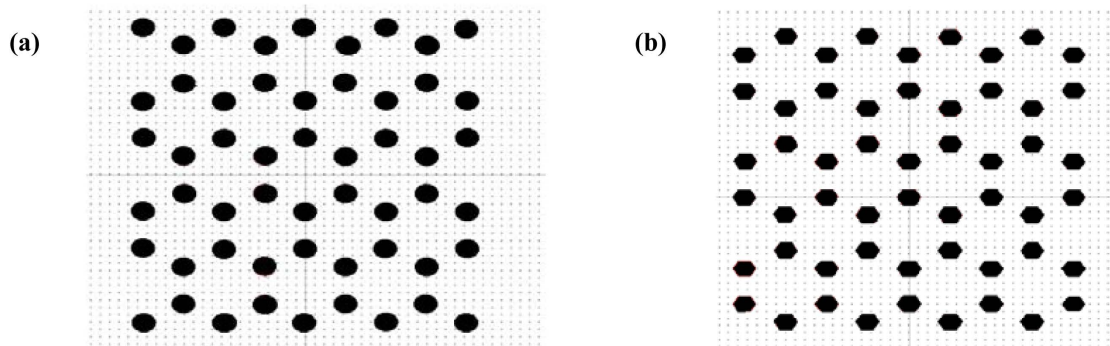


Figure 1. Diagram of graphene photonic crystals
图 1. 石墨烯结构光子晶体示意图

3.1. R 值对圆形散射元石墨烯结构相对禁带宽度的影响

经模拟计算，得到在 TM 模式下得到的相对禁带宽度不理想，在 TE 模式下得到了较大的相对禁带宽度，如图 2 所示，图 2(a)、图 2(b)分别表示了 TE 模介质柱和 TE 模空气孔两种情况下相对禁带宽度关于参数 R 的变化规律。可见，二者变化规律完全不同：

- 1) TE 模介质柱情况下，相对禁带宽度随 R 呈先增大后减小的趋势， $R = 0.24 \mu\text{m}$ 时，相对禁带最大；
- 2) TE 模空气孔情况下，相对禁带宽度随 R 呈增大趋势， $R < 0.28 \mu\text{m}$ 时没有禁带出现， $R = 0.50 \mu\text{m}$ 时，相对禁带最大。

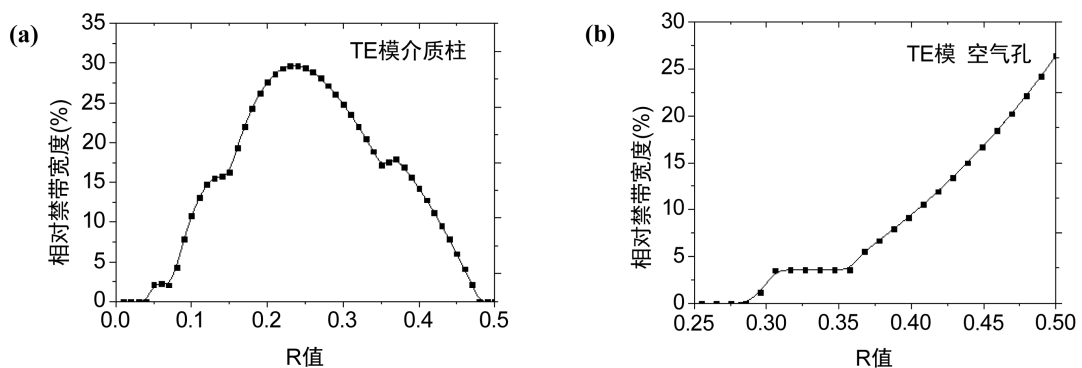


Figure 2. (a) The variation of the bandgap of the TE mode medium column with the R parameter; (b) The variation law of the bandgap of the TE mode air hole column with the R parameter

图 2. (a) TE 模介质柱禁带随 R 参数变化规律；(b) TE 模空气孔柱禁带随 R 参数变化规律

3.2. R 值对六边形散射元石墨烯结构相对禁带宽度的影响

经模拟计算，在 TE 模空气孔和 TM 模介质柱两种情况下得到的禁带，二者有相似的地方：在 TE 模介质柱和 TM 模空气孔两种情况下得到了较大的相对禁带宽度，相对禁带宽度随 L 都呈先增大后减小的趋势。如图 3 所示，图 3(a)、图 3(b)分别表示了这两种情况下相对禁带宽度关于参数 R 的变化规律。但是，而且也有区别：1) TE 模介质柱情况下，当 $L = 0.19 \mu\text{m}$ 时，相对禁带较大；2) TM 模空气孔情况下，当 $L = 0.47 \mu\text{m}$ 时，相对禁带最大。

3.3. 两种石墨烯结构最大的相对禁带

通过对以上进行的模拟进行总结, 可以获得圆形和六边形散射元石墨烯结构四种情况下的相对禁带的最大值对应的结构, 具体数据如表 1 所示。

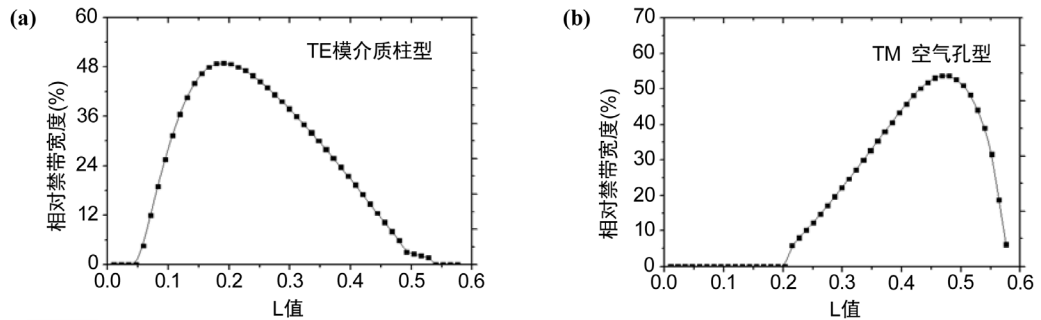


Figure 3. (a) The variation of dielectric column bandgap with L parameters in TE mode; (b) The variation of air pass bandgap with L parameter in TM mode

图 3. (a) TE 模介质柱禁带随 L 参数变化规律; (b) TM 模空气孔型禁带随 L 参数的变化规律

Table 1. Parameters corresponding to the maximum relative bandgap in four cases

表 1. 四种情况下最大相对禁带对应的参数

散射元形状	圆形			六边形		
散射元类型	R (μm)	禁带中心频率(a/λ)	相对禁带宽度(%)	L (μm)	禁带中心频率(a/λ)	相对禁带宽度(%)
TE 模介质柱	0.24	0.29	29.7	0.19	0.42	49.0
TE 模空气孔	50	0.14	26.7	0.57	0.55	14.6
TM 模介质柱	0.50	0.16	29.6	0.39	0.31	11.5
TM 模空气孔	0.48	0.36	14.56	0.47	0.36	53.6

分析模拟实验结果可得: 以六边形为散射元的石墨烯结构光子晶体比以圆形为散射元的石墨烯结构光子晶体所得到的相对禁带宽度理想: 1) 以六边形为散射元的石墨烯结构光子晶体结构中, TE 模介质柱型情况下, $L = 0.19 \mu\text{m}$ 时, 相对禁带最大, 其能带情况如图 4(a)所示, 其中阴影部分代表禁带, 其归一化中心频率为 0.29, 相对禁带宽度为 49.0%; 2) TM 模空气孔情况下, $L = 0.47 \mu\text{m}$ 时, 相对禁带最大, 其能带情况如图 4(b)所示, 其中阴影部分代表禁带, 其归一化中心频率为 0.36, 相对禁带宽度为 53.6%。

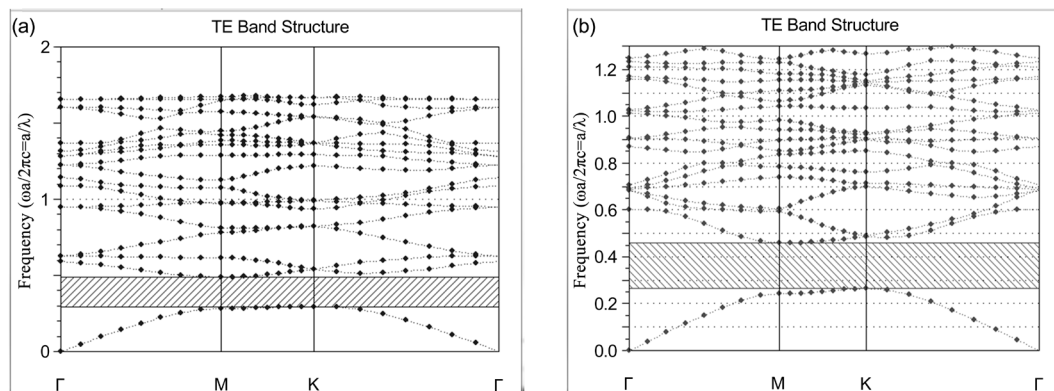


Figure 4. Energy band diagram of experimental simulation

图 4. 实验模拟的能带图

4. 结论

本文创新性设计了石墨烯蜂窝状结构的二维光子晶体, 分别以圆形和六边形为散射元进行构建, 采用平面波展开法, 计算了光子晶体在结构参数的变化下相对禁带宽度的变化规律。最终得到六边形散射元所构建的更加理想的该光子晶体相对禁带宽度, 且在 TE 模介质柱型和 TM 模空气孔型两种情况下, 相对禁带宽度都呈先增大后减少的趋势, 最后得到相对禁带最理想的情况: 六边形散射元构建的光子晶体, TE 模介质柱型情况下, $L = 0.19 \mu\text{m}$ 时, 归一化中心频率为 0.29, 相对禁带宽度为 49.0%; TM 模空气孔型, $L = 0.47 \mu\text{m}$ 时, 归一化中心频率为 0.36, 相对禁带宽度达到最大为 53.6%。可见, 散射元结构和周期性排列类似时, 更容易形成相对宽的禁带, 这为制作实际的光子晶体提供了相应的数据以及合理的模型, 尤其对太阳能方面的应用具有实际的意义, 也为石墨烯结构的应用提供了方向。

参考文献

- [1] Yablonovitch, E. (1987) Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. *Physical Review Letters*, **58**, 2059-2062. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2059>
- [2] Chen, S.B., Li, D.C., Tian, X.Y., et al. (2012) Effective Fabrication Method of 3D Photonic Crystals with Diamond Structure. *Rapid Prototyping Journal*, **18**, 49-55. <https://doi.org/10.1108/13552541211193494>
- [3] Tang, B.S., Tang, X.Z. and Wang, G. (2011) Transmission Spectra of Two Dimensional Cylindrical Layered Complex Periodic Photonic Crystal. *Infrared and Laser Engineering*, **40**, 2138-2142.
- [4] Feng, S., Yang, G.J., Li, Y.X., et al. (2012) Tunable Slow-Light Multi-Mode Photonic Crystal Waveguides Based on the Coupling of Square Cavities. *Science China Physics*, **55**, 1769-1775. <https://doi.org/10.1007/s11433-012-4837-z>
- [5] Liang, Q.X., Li, D.C. and Yang, G. (2012) Fabrication of Diamond-Structured Multicrystalline Coupling Photonic Crystal and Its Ultra-Wide Bandgap Properties. *Microwave and Optical Technology Letters*, **54**, 2569-2572. <https://doi.org/10.1002/mop.27134>
- [6] Pendry, J.B. (1994) Photonic Band Structures. *Journal of Modern Optics*, **41**, 209-229. <https://doi.org/10.1080/09500349414550281>
- [7] Susa, N. (2002) Large Absolute and Polarization-Independent Photonic Band Gaps for Various Lattice Structures and Rod Shapes. *Applied Physics*, **91**, 3501-3505. <https://doi.org/10.1063/1.1450022>
- [8] 黄毅, 陈永胜. 石墨烯的功能化及其相关应用[J]. 中国科学(B辑: 化学), 2009, 39(9): 887-896.
- [9] 丁涛, 刘占芳, 宋恺. 三维光子晶体的制备[J]. 化学进展, 2008, 20(9): 1283-1293.
- [10] 李成凤. 不同结构光子晶体的带隙特性[J]. 光谱实验室, 2011, 28(3): 1382-1384.
- [11] 寸焕尧, 谭仁兵, 王荣丽, 柏晗, 张茜, 胡家光, 张晋. 用平面波展开法计算二维方形光子晶体的带隙[J]. 半导体学报, 2006, 27(z1): 64-67.
- [12] 万勇, 付凯, 云茂金, 郭月, 夏临华. 调整圆弓形散射元参数实现低群速和低色散的慢光效应[J]. 中国激光, 2013, 40(1): 163-169.