

文章编号: 1001-3806(2009)01-0050-03

SiO₂/Si 光子晶体透射特性的数值研究

闫明宝, 周萍, 王海龙*

(曲阜师范大学 物理工程学院, 曲阜 273165)

摘要: 为了了解电磁波在2维三角晶格 SiO₂/Si 光子晶体的传输特性, 利用时域有限差分方法进行了数值模拟和计算, 并研究了 SiO₂ 介质柱的形状和入射波模式的变化对晶体透射特性的影响。计算后得到多种情况下该光子晶体的透射率与入射光频率的关系曲线。结果表明, 禁带的宽度和位置与构成光子晶体中 SiO₂ 的形状有关, SiO₂ 柱半径变大则禁带变宽且禁带中心频率变大, 半径为 0.4a 时, 禁带宽度达到最大值。与 TM 模相比, TE 模入射时, 光子晶体更易形成禁带。这为光子晶体的实验制作和应用提供了理论依据。

关键词: 物理光学; 光子晶体; 透射率; 时域有限差分方法; 禁带

中图分类号: O734 **文献标识码:** A

Numerical analysis of transmission properties of SiO₂/Si photonic crystal

YAN Ming-bao, ZHOU Ping, WANG Hai-long

(College of Physics and Engineering, Qufu Normal University, Qufu 273165, China)

Abstract: The finite difference time domain method was used to simulate the transmission characteristics of 2-D triangular lattices SiO₂/Si photonic crystal. Furthermore, it was also studied how the change of the shape of SiO₂ and the mode of incident wave affect transmission properties of photonic crystal. The curves of transmissivity versus frequency of the incident wave in the different conditions were obtained. The calculated results obviously show that the band gap width and position are related to the shape of SiO₂ in photonic crystal. With the increase of the radius of SiO₂ cylinder, the band gap is widened and the central frequency is enhanced, but the largest band gap appears when $R = 0.4a$. Compared with TM wave, the band gap appears more easily under the TE wave. The study provides the theory basis of the manufacture and application of photonic crystal.

Key words: physical optics; photonic crystal; transmissivity; finite difference time domain; band gap

引言

光子晶体是近年来深受关注的一个新兴研究方向^[1]。光子晶体的出现展示了许多重要的应用前景, 如微腔激光器、滤波器、光开关、新型波导、光子晶体偏振器件^[2]等, 这些应用都与光子晶体的禁带特征密切相关。虽然3维光子晶体具有更为广泛的应用潜力, 但是在可见光和红外波段制作这样的微型结构还是相当困难的。相比较而言, 2维光子晶体既有着重要的应用^[3,4], 又相对比较容易制造。

计算光子晶体的理论方法有传输矩阵法^[5-7]、平面波展开法^[8]、时域有限差分法^[9-13]等。作者把时域有限差分方法用于 SiO₂/Si 光子晶体的透射特性研究, 计算后得到多种情况下该光子晶体的透射率与入射光频率的关系曲线, 结果表明, 禁带的宽度和位置, 在晶

格结构不变时, 与光子晶体中 SiO₂ 的形状有关, SiO₂ 柱半径变大则禁带变宽且禁带中心频率变大, 半径为 0.4a (a 为晶格常数) 时, 禁带宽度达到最大值相同情况下, 入射波模改变, 禁带的宽度和位置, 也随之发生变化。这些都为光子晶体的实验制作和应用提供了重要的理论依据。

1 基本理论和计算公式

1.1 介质中的 Maxwell 方程

假设光子晶体在 x - y 面内周期排列, Si 为本底材料, 其介电常数为 12, 半径为 R 的 SiO₂ 介质柱, 其介电常数为 3.78。 x - y 面内晶格常数为 a , 电磁波在 x - y 面内传播。介质中的麦克斯韦方程如下:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu \partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) / \partial t \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = -\varepsilon(\mathbf{r}) \partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) / \partial t \quad (2)$$

式中, $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k}$ 是哈密顿算符, $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ 为单位矢量, $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ 分别是光子晶体中电磁波的电场矢量和磁场矢量, ε 是晶体中介质的介电率, $\mathbf{r}$ 是空间坐标的函

作者简介: 闫明宝 (1981-), 男, 硕士研究生, 主要从事光子晶体和电磁场理论的研究。

* 通讯联系人。E-mail: phyhlwang71@126.com

收稿日期: 2007-11-02; 收到修改稿日期: 2008-05-07

数, μ 是磁导率, t 为时间。入射波有 TE 波模和 TM 波模两种偏振态, 在 TE 波模中, 麦克斯韦方程可分解为:

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = \varepsilon(r) \frac{\partial E_x}{\partial t} \quad (3)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = -\varepsilon(r) \frac{\partial E_y}{\partial t} \quad (4)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_y}{\partial y} = -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} \quad (5)$$

式中, E_x, E_y, H_z 分别为电场矢量在 x, y 方向和磁场矢量在 z 方向的分量。

1.2 时域有限差分方法

时域有限差分法是将对空间和时间的微分用差分代替, 采用 YEE 于 1966 年提出的时域有限差分方法, 将光子晶体单元网格化, 用 $\Delta x, \Delta y$ 表示空间步长, Δt 表示时间步长, $n\Delta t$ 表示时间。采用中心差分代替(3)式~(5)式中的微分, 就可将麦克斯韦方程转化成时域有限差分方程:

$$E_x^{n+1}(i, j) = E_x^n(i, j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i, j)} \cdot \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} \quad (6)$$

$$E_y^{n+1}(i, j) = E_y^n(i, j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i, j)} \cdot \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j)}{\Delta x} \quad (7)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j) + \frac{\Delta t}{\mu} \cdot \left[\frac{E_x^n(i, j + \frac{1}{2}) - E_x^n(i, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i + \frac{1}{2}, j) - E_y^n(i - \frac{1}{2}, j)}{\Delta x} \right] \quad (8)$$

式中, i, j 分别代表网格中 x, y 方向的节点序数, n 为时间步数。对 TM 模式同样可以得到关于 H_x, H_y, E_z 的计算式。

如果知道了在每一个格点上的介电常数和电磁场初始分布, 就可以根据时域有限差分方程(6)式~(8)式, 得到计算区域电磁场的时间演化规律。为了保证迭代收敛得到稳定解, $\Delta x, \Delta y, \Delta t$ 的选择需满足稳定性条件^[14]:

$$\Delta t \leq \frac{1}{c} \left[\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (9)$$

式中, c 为真空中光速。

1.3 边界条件与初始场选择

用时域有限差分法研究光子晶体的传输特性, 计算区域是有限的, 同时, 受到计算机存储空间和计算速

度的影响, 所处理问题的空间是有限的, 这就要求对计算区域边界做特殊处理, 使得向边界传播的波在边界处无明显反射。在计算中, 电磁波沿 y 方向入射, 在该方向采用完全匹配层边界条件, 在 x 方向采用周期性边界条件。

2 理论模型与计算结果分析

2.1 理论模型

在计算时采用如图 1 所示正三角形晶格模型, 线

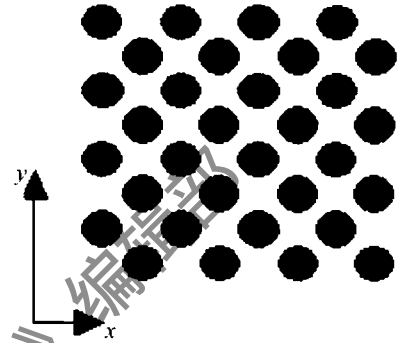


Fig. 1 The diagram of lattice structure

光源向 y 轴正向入射, 介质柱设为 8 行, 由于在 x 轴方向采用了周期性边界条件, 只设了 8 列。Si 作基底材料, 介质柱为 SiO₂。为不失一般性, 在数据处理作图时横轴采用归一化频率, 纵轴采用归一化透射率, 程序设计时长度以晶格常数 a 为基准。 x, y 方向步长设定为 $\Delta x = \Delta y = 0.05a$, $\Delta t = 0.95$, 三角晶格边长为 a 。

2.2 计算结果分析

2.2.1 透射率与组成光子晶体介质柱的粗细之间的关系 采用图 1 的模型, 计算了透射率与组成光子晶体介质柱的粗细之间的关系。改变 SiO₂ 柱的半径 R ,

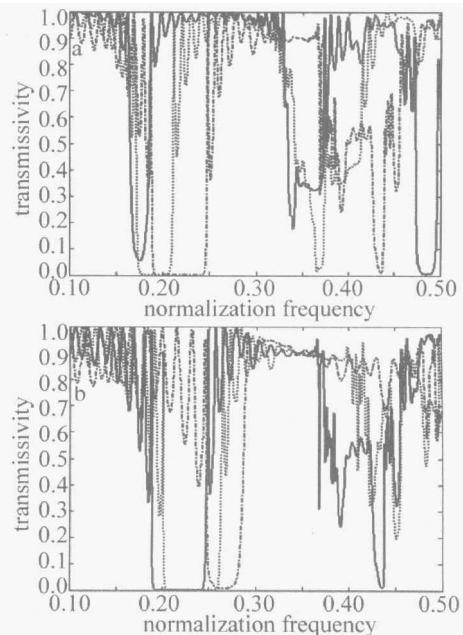


Fig. 2 The transmittance of different radius of SiO₂

可以得到不同的透射谱,计算结果如图2所示。

从图2a中可以看出, $R=0.16a$ (实线)时,尚没有形成完全禁带,随着半径的变大,禁带变宽,并且禁带的中心频率也随着变大,如虚线($R=0.26a$)、点划线($R=0.36a$)所示。图2b中,实线代表 $R=0.36a$ 的透射谱,当 $R=0.4a$ (虚线)时,禁带的宽度达到了最大值,此后,随着半径的继续增大,尽管中心频率仍不断增大,但是禁带逐渐变窄, $R=0.48a$ (点划线)时,完全禁带几乎消失。

2.2.2 椭圆形 SiO_2 柱状的情况 把原来圆柱形 SiO_2 柱换成椭圆形状的柱体进行了计算。

x 轴方向为长半轴, y 轴方向为短半轴,计算了 $R_x=0.36a, R_y=0.16a$ 和 $R_x=0.26a$ 的情况并与 $R=0.36a$ 的圆柱形晶体结果进行比较,如图3所示。其中实线、虚线、点划线分别代表 $R_y=0.16a, R_y=0.26a$ 和 $R_y=0.36a$ 时的结果。

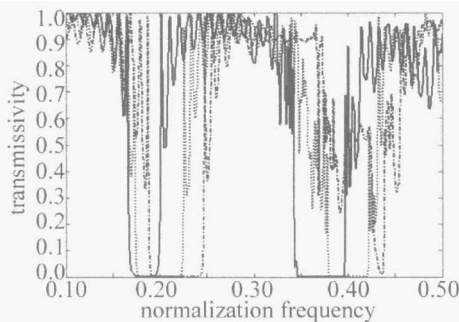


Fig.3 The transmittance of different R_y

从图中可以明显看出,椭圆形柱光子晶体,可以出现两禁带,并且随着 R_x 的变大,禁带的中心频率变大,低频禁带变宽,高频禁带变窄。当 $R_x=0.36a$ (圆柱形)时,高频禁带已经消失。

x 轴方向为短半轴, y 轴方向为长半轴,计算了 $R_y=0.36a, R_x=0.16a, R_x=0.26a$ 和 $R_x=0.36a$ 的情况,对应结果如图4中的实线、虚线、点划线所示。从

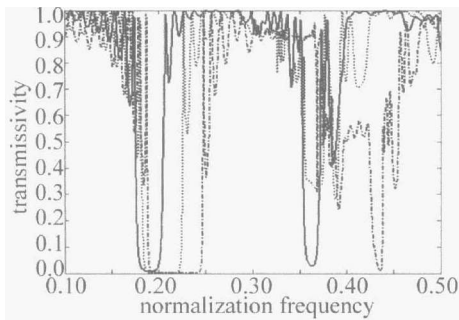


Fig.4 The transmittance of different R_x

图中可以看出, R_y 不变时,随着 R_x 的增大,禁带变宽,禁带的中心频率变大。

为了更好地研究椭圆形介质柱光子晶体的禁带情

况,又计算了椭圆柱 $R_x=0.46a, R_y=0.36a$ (实线); $R_x=0.36a, R_y=0.46a$ (点划线)的情况并与 $R=0.36a$ (虚线)的圆柱形光子晶体作比较,比较结果见图5。

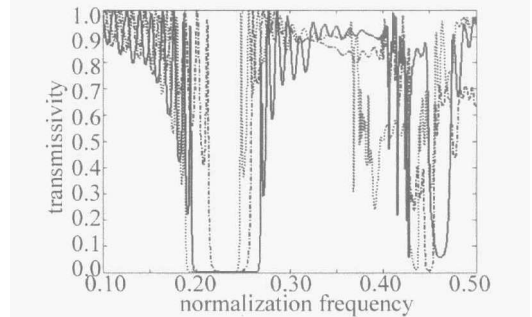


Fig.5 The transmittance of changing values of R_x and R_y

从图5可明显看出, $R_x=0.46a, R_y=0.36a$ 时的禁带宽于其内切圆 $R=0.36a$ 的禁带,且禁带的中心频率要高, $R_x=0.36a, R_y=0.46a$ 的禁带最窄。

2.2.3 入射波源偏振态 采用频率、脉冲宽度分别与TE波相同的TM波源进行计算,计算结果表明,相同介质柱情况下,TM波入射时,光子晶体的禁带变窄,中心频率变小,甚至难以形成完全光子禁带。

3 结论

用时域有限差分法对2维三角晶格 SiO_2/Si 光子晶体的透射率进行了详细的数值分析与研究。可知2维三角晶格的 SiO_2/Si 光子晶体的透射特性与 SiO_2 柱的粗细、形状有关。对圆柱形晶体,半径变大,禁带也变宽, $R=0.40a$ 时,达到最宽,中心频率在不断变大。对于椭圆形晶体,长半轴垂直于入射方向时,在计算区域内有明显的两禁带,随着椭圆柱扁心率变小,禁带中心频率变大,低频禁带变宽,高频禁带变窄,甚至消失;长半轴平行于入射方向时,只出现单一禁带,扁心率变小,禁带变宽,禁带中心频率变大。同时,研究了TM波情况下的透射特性,结果表明,与TM波相比较,TE模下相对更容易得到光子禁带。这种结构的光子晶体有望在多通窄带滤波技术中得到广泛的应用。

参考文献

- [1] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(20): 2059-2062.
- [2] PANY, ZHANG G J, HU G. Photonic crystal fiber and laser [J]. Laser Technology, 2004, 28(1): 45-51 (in Chinese).
- [3] CORREIA D, JIN J M. 3D-FDTD-PML analysis of left-handed materials [J]. Microwave and Optical Technology Letters, 2004, 40(3): 201-205.
- [4] WAN J, ZHANG Ch, WANG L J, et al. Photonic crystal and their applications [J]. Physics, 1999, 28(7): 393-398 (in Chinese).

(下转第70页)

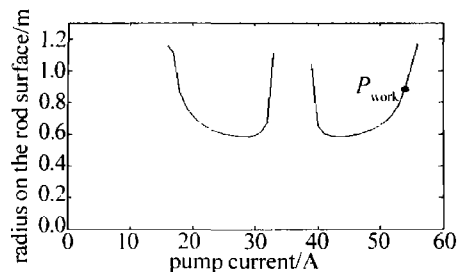


Fig. 6 Radius of the basic mode on the Nd:YAG rod surface with the pump current

除以激光介质上基模半径平方。因此,实验中 1064nm 激光光束质量 $M^2 \approx 2^2/0.9^2 = 4.93$ 。为验证理论计算结果,在实验中当抽运输入电流为 55A 时,得到绿光输出功率为 49.5W,重复频率为 15kHz,光束质量 $M^2 = 10.2$ 。由此可见,当基频光束为高阶模时,倍频光束质量急剧下降。例如基模半径为 0.9mm 光束质量 $M^2 = 4.99$ 的 TEM_{22} 的基频光由 2 阶矩理论计算,可得倍频光光束质量 $M^2 = 9.55$ 。实验结果与理论基本符合。为获得更优光束质量的高功率绿光激光器输出,进一步采用了热效应补偿技术及倍频晶体控温专利技术,已获得 50.6W 的绿光光束质量 $M^2 = 5.25$,将另外报道。

3 结 论

针对典型的高阶高斯光束,通过理论计算给出倍频过程中光束空间分布变化,讨论了不同阶数的基频光束对倍频光光束质量的影响。随着基频光束模式变差,倍频光束质量严重恶化。对于相同光束质量的基频基模光束,倍频光光束质量随着入射在倍频晶体上

不同的基频光光斑半径基本不变。实验采用了平平对称 L 型腔,在抽运电流 55A 时,得到输出功率为 49.5W,重复频率为 15kHz,光束质量 $M^2 = 10.2$ 的绿光,与理论计算结果基本符合。

参 考 文 献

- [1] XU D G, YAO J Q, GUO L, *et al.* 104W laser diode-pumped intracavity frequency-doubled Nd:YAG green light laser [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, 24(7): 925-928 (in Chinese).
- [2] JIANG D Sh, ZHAO H, WANG J J, *et al.* 120W diode-pumped green Nd:YAG laser [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2005, 17(s0): 7-10 (in Chinese).
- [3] JIANG D Sh, ZHAO H, WANG J J, *et al.* 68W green-beam operation of a diode-pumped Nd:YAG rod laser [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2002, A29(s1): 102-104 (in Chinese).
- [4] YAO Zh Y, JIANG J F, TU B, *et al.* 162W laser diode-pumped Nd:YAG intracavity-doubled laser [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2005, 32(11): 1459-1462 (in Chinese).
- [5] KONNO S, KOJIMA T, FUJIKAWA S, *et al.* High-brightness 138W green laser based on an intracavity frequency-doubled diode-side-pumped Q-switched Nd:YAG laser [J]. *Opt Lett*, 2000, 43(1): 105-107.
- [6] SHI Sh X, CHEN G F, ZHAO W, *et al.* Nonlinear optics [M]. Xi'an: Xi'an Electron Scientific University Press, 2003: 132-139 (in Chinese).
- [7] NIU Y X, WANG Y F, LIU X, *et al.* Laser beam quality factor M^2 and its measurement [J]. *Laser Technology*, 1999, 23(1): 38-41 (in Chinese).
- [8] LÜ B D. *Laser optics* [M]. Chengdu: Sichuan University Press, 1992: 65-68 (in Chinese).
- [9] HODGSON N. Landolt-Börnstein-group VIII advanced materials and technologies [M]. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2006: 194.
- [10] UPADHYAYA B N, MISRA P, RANGANATHAN K, *et al.* Beam quality considerations of high power Nd:YAG lasers [J]. *Optics & Laser Technology*, 2002, 34(3): 193-197.

(上接第 52 页)

- [5] JIN Y, HUANG Sh Y, CHEN X F, *et al.* Study on polarization properties of the photonic crystal defect mode [J]. *Laser Technology*, 2007, 31(3): 277-280 (in Chinese).
- [6] JIANG M, JIANG X, SHEN X, *et al.* Study on the polarization property of 1-D photonic crystal [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2005, 22(4): 612-616 (in Chinese).
- [7] SU X Y, GAO Y, WANG H F. Optical transmission properties of one-dimensional ferromagnetic material photonic crystal [J]. *Acta Sinica Quantum Optica*, 2007, 13(2): 134-137 (in Chinese).
- [8] MALDIVAN M, THOMAS E L, CARTER W C. Layer-by-layer diamond-like woodpile structure with a large photonic band gap [J]. *A P L*, 2004, 84(2): 362-364.
- [9] TANG B Sh, YIN G W, XU J L, *et al.* Study on the transmission spectra of two-dimension photonic crystals with layered composite medium cylinder [J]. *Laser Technology*, 2007, 31(2): 128-130 (in Chinese).
- [10] QIU M B, JASKOZYNSKA M, BENISTY H. Time-domain 2-D modeling of slabwaveguide based photonic crystal devices in the presence of out-of-plane radiation losses [J]. *Microwave Optical Technology Letters*, 2002, 34(5): 387-393.

- [11] GE D B, YAN Y B. Finite-difference time-domain method for electromagnetic waves [M]. Xi'an: Xidian University Press, 2005: 35-37 (in Chinese).
- [12] TANG B Sh, SHEN T G. Study on transmission property of two-dimension doped photonic crystals with triangular lattices [J]. *Laser Technology*, 2006, 30(5): 526-528 (in Chinese).
- [13] ZHUANG F, XIAO S Sh, HE J P, *et al.* A FDTD method for calculating defect modes in a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic cylinders [J]. *Acta Physica Sinica*, 2002, 51(9): 2167-2171 (in Chinese).
- [14] FANG Y T, SHEN T G, TAN Y L. The design and study of a layered photonic crystal fiber [J]. *Laser Journal*, 2004, 25(1): 50-52 (in Chinese).