

文章编号: 1001-3806(2007)02-0127-04

## 层状复合介质柱二维光子晶体透射谱研究

汤炳书<sup>1,2</sup>, 殷恭维<sup>3</sup>, 徐健良<sup>1</sup>, 沈廷根<sup>2</sup>

(1. 连云港师范高等专科学校 物理系, 连云港 222006 2 江苏大学 应用物理研究所, 镇江 212003 3 华中科技大学 物理系, 武汉 430074)

**摘要:** 针对用层状复合材料柱体构成二维光子晶体的这一设想, 采用时域有限差分方法数值研究了多层复合介质材料在折射率、厚度、层数、组成次序等因素对组成二维光子晶体透射特性的影响。数值结果表明, 透射谱中出现禁带宽度、中心频率所处位置都与单一介质组成二维光子晶体存在差别, 特别是在多层环柱时变化更明显, 因此在实际应用中, 根据具体要求设计二维光子晶体比设计单一介质有更多的可调因素, 为二维光子晶体的应用奠定了理论依据。

**关键词:** 光电子学; 层状介质; 二维光子晶体; 时域有限差分法; 透射谱

中图分类号: O734 文献标识码: A

### Study on the transmission spectra of two-dimension photonic crystals with layered composite medium cylinder

TANG Bing-shu<sup>1,2</sup>, YIN Gong-wei<sup>3</sup>, XU Jian-liang<sup>1</sup>, SHEN Ting-gen<sup>2</sup>

(1. Department of Physics Lianyungang Teacher's College Lianyungang 222006 China 2 Graduate School of Application Physics, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China 3 Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074 China)

**Abstract** The two-dimensional (2-D) photonic crystal with layered composite medium cylinder was proposed and effect of the refraction indexes, thicknesses, layers and composition sequences on the transmittance of the 2-D photonic crystal composed of multilayered composite medium was studied by means of the finite difference time domain method. The numerical results show that the forbidden band width and the position of central frequency in 2-D photonic crystal with multilayered medium are different from those composed of single medium. Therefore, the adjustable factors for 2-D photonic crystal with multilayered medium are more than those with single medium in application and the above theory can be as a theoretical basis on 2-D photonic crystal design.

**Key words** optoelectronics; layered medium; two-dimensional photonic crystals; finite difference time domain method; transmission spectra

### 引 言

光子晶体最早由 YABLONOVITCH<sup>[1]</sup> 和 JOHN<sup>[2]</sup> 于 1987 年分别独立提出。它不仅是一个全新的物理概念, 而且也是一种新型材料。不同介电常数的材料周期性地在空间排列就构成光子晶体材料, 也叫光子带隙材料。大家熟悉的电子晶体材料中, 反映电子运动的波函数在周期性势场中被调制, 导致电子能量的分立, 从而形成能带、导带、价带、禁带等物理概念。光子(电磁波)在光子晶体中运动(传输)时, 同样由于周期性介电常数的调制, 形成光子能量的分立, 对应于光子频率的分立, 在频域上出现能带结构, 相邻能带之间形成光子带隙 (photonic band gap PBG), 频率位于光

子带隙内的电磁波在光子晶体内将发生强烈反射, 因而不能传输。选取不同材料(介电常数), 改变周期性结构参量(晶格常数、柱体尺寸等等), 构造各种不同空间结构, 能得到多种多样的光子晶体材料, 它们一般具有不同的能带结构和不同的光学性能(电磁性质)。人们正是利用这一点对光子晶体材料展开了大量的应用研究工作, 包括光子晶体传感器、滤波器、低阈值激光器、各种波导、高反射器、微谐振腔等等。美国马萨诸塞理工学院、加州大学、加拿大多伦多大学、英国巴思大学等都在进行这一领域的研究。光子晶体的研究已经成为物理学、电磁学、光学、材料科学等多学科的前沿课题, 是目前国际上的又一研究热点。

目前研究光子晶体能带结构和光学传输特性方法主要有: 平面波展开法<sup>[3]</sup>、有限时域差分法<sup>[4,5]</sup>、转移(传输)矩阵法<sup>[6]</sup>、多重散射法<sup>[7]</sup>等。光子晶体的实际用途中最重要的是如何有效地利用它的能带结构, 能

基金项目: 江苏省自然科学基金资助项目 (BK2004059)

作者简介: 汤炳书 (1963), 男, 副教授, 研究方向为计算凝聚态物理。

E-mail: tbs6363@163.com

收稿日期: 2006-03-06 收到修改稿日期: 2006-07-26

有效地根据具体情况控制带隙的位置与宽度是目前光子晶体应用领域的的一个重要研究课题。CHAN 等人用平面波展开法计算出金刚石结构具有较大的完全带隙,该结果与实验符合得很好。上述有关实验与理论研究的都是一种介质(球或柱)植入基质中的情形,作者用时域有限差分法就植入基质中的散射体是复合介质结构情形进行数值研究,得到了一些有意义的结果,为实验制作和应用提供理论依据。二维光子晶体较三维容易制备,且计算工作量小,因此,仅以二维光子晶体为例进行计算,该方法及相应计算程序经调整后,可推至三维情况。

### 1 基本理论与计算公式

#### 1.1 介质中的麦克斯韦方程

假设二维圆柱光子晶体在  $(x, y)$  面内周期排列,本底介电常数为  $\epsilon_0$  (折射率为  $n_0$ ) 的电介质中周期排列介电常数为  $\epsilon_1$  (折射率为  $n_1$ ) 直径为  $d$ , 半径为  $R_0$  的另一种介质柱,沿  $z$  方向无限且均匀,如图 1 所示,

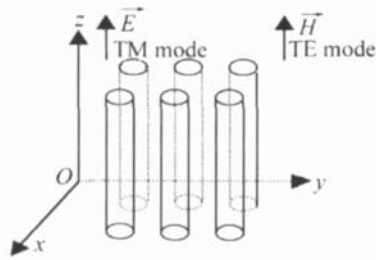


Fig 1 2-D photonic crystal

$x, y$  面内晶格常数为  $a$ , 介质中的麦克斯韦方程是:

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

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

式中,  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$  是哈密顿算符,  $\vec{E}, \vec{H}$  分别是

光子晶体中电磁波中的电场矢量与磁场矢量,  $\epsilon$  是光子晶体介质柱的介电常数,是空间坐标的函数,  $\mu$  是磁导率。TEM 电磁波有两种偏振状态: TE 模(M 偏振),  $\vec{H}$  与  $z$  轴平行, 电磁分量分别是  $(E_x, E_y, 0), (0, 0, H_z)$ 。代入 (1) 式、(2) 式得到麦克斯韦方程(标量式):

$$\partial H_z / \partial x = \epsilon(r) \partial E_y / \partial t \quad (3)$$

$$\partial H_z / \partial y = \epsilon(r) \partial E_x / \partial t \quad (4)$$

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

对 TM 模(E 偏振)可以得到与 (3) 式 ~ (5) 式类似的方程,在此从略。本文中用 E 偏振研究。

#### 1.2 时域有限差分法

时域有限差分法 (finite-difference time-domain method FDTD) 是用对空间和时间的差分代替微分,采用 YEE 最早提出的二维时域有限差分方法<sup>[8]</sup>,将光子

晶体单元网格化(E 偏振分布见图 2),用  $\Delta x, \Delta y$  表示  $x, y$  方向的空间步长,  $\Delta t$  表示时间步长,  $n \Delta t$  表示时

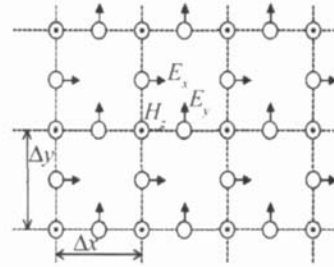


Fig 2 YEE's 2-D difference lattice

间。采用中心差分代替上述 (3) 式 ~ (5) 式微分,就可将麦克斯韦方程转化为迭代形式的 FDTD 形式方程:

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

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

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

$i, j$  分别为网格中  $x, y$  方向的节点序数,对 TM 模式同样可以得到类似的关于  $H_x, H_y, E_z$  计算式。

如果知道了在每一个离散格点上的介电常数与电磁场的初始分布,就可以根据离散了的 FDTD 时间离散步长公式 (6) 式 ~ (8) 式获得电磁场的时间演化规律。为了保证迭代收敛得到稳定解,  $\Delta x, \Delta y, \Delta t$  的选择必需满足稳定条件<sup>[9]</sup>:

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

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时,关心的计算区域是有限的,即光子晶体的体积所占有的空间。当然也可以将所关心的计算区域通过一定的方式无限扩展,形成一个无限的空间。但是,计算机的存储空间和计算速度却不是无限的,而要处理的问题空间却是有限的,是有边界的。用时域有限差分求解电磁场问题时假定问题空间是无限大的,即是开放的系统。为了解决这种矛盾,让这种有限的空间和无限的空间等效,需要对有限空间的周围边界做特殊处理,使得

向边界行进的波在边界处保持“外向行进”的特征,无明显的反射,就像被一个巨大的“黑洞”吸收一样。具有这种功能的边界条件,称之为吸收边界条件 (absorbing boundary condition, ABC)。在计算程序中,采用完全匹配层 (perfectly matched layer, PML) 边界条件<sup>[9]</sup>。

对单个元胞进行  $20 \times 20$  个分割离散,对每个面上的介电常数作平均取样。在 TE 模的演化计算中采用满足  $H_z$  的零散度要求与周期性 (布洛赫定理) 的初始场为:

$$\begin{cases} H_z = -\exp[-(5x/a+1)^2 - (5y/a)^2]/3 + \\ 3(1-5x/a)^2 \exp[-(5x/a)^2 - (5y/a+1)^2] - \\ 10[x/a - (5x/a)^3 - 5(y/a)^5] \times \\ \exp[-(5x/a)^2 - (5y/a)^2] \\ E_x = E_y = 0 \end{cases} \quad (10)$$

## 2 计算结果与讨论

开始计算时建立如图 1 所示模型。线光源向  $y$  轴正向入射,  $y$  方向 16 行,圆柱在  $z$  方向无限长,  $x$  方向同样取 16 列,正方晶格。本底介电常数为  $n_0 = 3.24$  (InP/GaN 介电常数  $\epsilon_0 = 10.5$ ), 原始介质柱是无损耗的空气柱,介电常数取 1.0, 折射率 1.0 半径  $R_0$ 。具体研究时的复合介质同样用无损耗介质,复合介质柱体截面见图 3。为了不失一般性,在数据处理作图

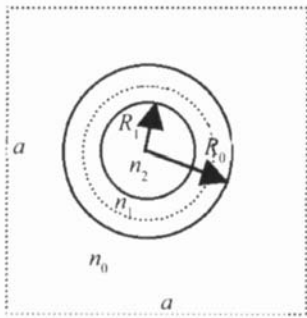


Fig 3 Section of composite medium cylinder

时,横轴采用归一化频率,纵轴采用归一化透射系数,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  $\Delta x = \Delta y = 0.05a, \Delta t = 0.95$

### 2.1 空气环柱时的透射谱

在原来空气柱内同心地放置与基质相同折射率  $n_2 = n_0 = 3.24$  的圆柱,构成折射率是  $n_0 = 1.0$  的空气环柱的二维光子晶体,取不同内柱半径  $R_1$  (即相当是不同厚度的空气环柱) 计算得透射谱如图 4 所示。图中实线表示柱体介质是空气时的透射谱,相当于图 3 中  $R_1 = 0, n_2 = n_0 = 1.0, R_0 = 0.36a$ 。虚线相当于图 3 中  $R_1 = 0.26a, n_2 = 3.24, R_0 = 0.36a$  情况下的透射谱。点划线是相当于图 3 中  $R_1 = 0.16a, n_2 = 3.24, R_0 = 0.36a$  情况下的透射谱。从图中相比较看出,内半径小

(空气环柱厚)透射禁区的范围就宽,这一结果是与带宽跟填充率有关的结论一致<sup>[10]</sup>。

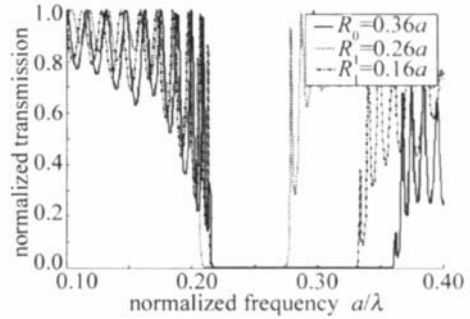


Fig 4 Transmission spectra of air circle pole with different thicknesses

如果保持环内半径不变取  $R_1 = 0.26a$ , 变化内柱介质的折射率计算得到图 5 所示透射特性曲线。图中

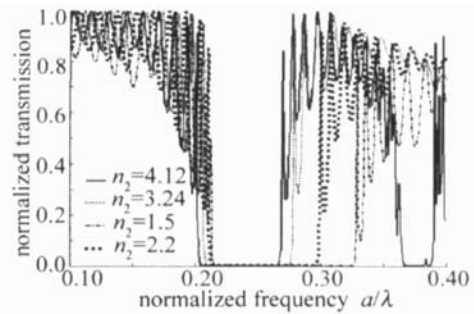


Fig 5 Transmission spectra of inner air circle pole with different refraction indexes

各线表示透射曲线是在同一半径  $R_1 = 0.26a$  对应各折射率情形,实线表示  $n_2 = 4.12$ ,虚线表示  $n_2 = 3.24$ ,粗虚线表示  $n_2 = 2.2$ ,点划线表示  $n_2 = 1.5$ 。从图例可明显地看出,圆柱折射率越高禁带宽度越窄,特别是当内柱折射率高过基质折射率时会出更多宽度较小的禁带。

### 2.2 介质环柱时的透射谱

把上面计算的空气环带用实心介质环代替,组成同样晶格二维光子晶体进行研究。保持图 3 中参数  $n_2 = n_0 = 3.24, R_0 = 0.36a, n_1 = 5.6$  不变,  $R_1$  分别取  $0.26a, 0.16a$  计算。结果见图 6 所示。图中实线表示

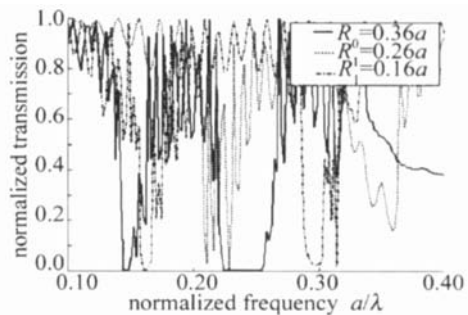


Fig 6 Transmission spectra of medium circle pole with different thicknesses

无内柱  $R_1 = 0$ , 只是把原来的空气柱换成折射率是 5.6 的介质柱计算结果,与图 4 中实线比较可发现禁带变窄得多,这正说明了人们在研究二维、三维光子晶体时大都采用在基质中打孔的方式而很少应用填充介质的

原因。从图例中看出,在介质环柱折射率高于基质折射率情况下,环柱的厚度越小,越不易形成所谓的禁带,图中虚线对应  $R_1 = 0.26a$ ,点划线对应  $R_1 = 0.16a$ ,这样可以通过调节内半径方法获得极窄禁带。

与 2.1 节相同,在保持环柱内半径与内折射率不变  $n_2 = n_0 = 3.24$ ,  $R_0 = 0.36a$ ,  $R_1 = 0.26a$ , 变化环柱折射率  $n_1$  计算结果如图 7 所示。从图中看出,当环带折

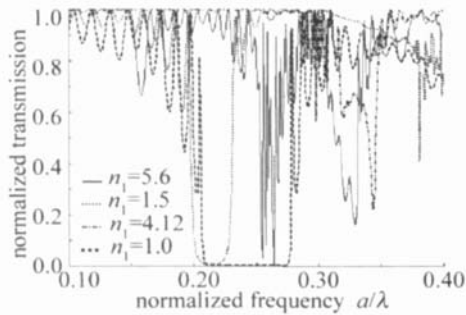


Fig 7 Transmission spectra of medium circle pole with different refraction indexes

射率高于基质折射率时不易形成禁带,与基质折射率差值较大,即使形成也是很窄的宽度。当环带折射率低于基质折射率时较易形成禁带,而且与基质折射率相差越大,禁带越宽。图中各透射曲线对应的折射率分别是实线表示  $n_1 = 5.6$ ,虚线表示  $n_1 = 1.5$ ,点划线表示  $n_1 = 4.12$ ,粗虚线表示  $n_1 = 1.0$ 。

### 2.3 多层环柱时的透射谱

前面研究的都是由两种介质构成柱体情况,由多种介质构成柱体,相当于用层状布光子晶体光纤<sup>[11]</sup>或称全向波导 (omni guide OG)<sup>[12]</sup>作为柱体,如图 3 中虚线示加一半径为  $R_2$ ,即原来的整个空气柱由 3 种介质构成介质柱,从内向外半径分别是  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_0$ , 3 个区域折射率分别表示是  $n_3$ ,  $n_{12}$ ,  $n_{10}$ 。半径不变即  $R_1 = 0.16a$ ,  $R_2 = 0.26a$ ,  $R_0 = 0.36a$ , 改变 3 个区域折射率大小次序进行计算得到结果如图 8 所示。实线为柱体介

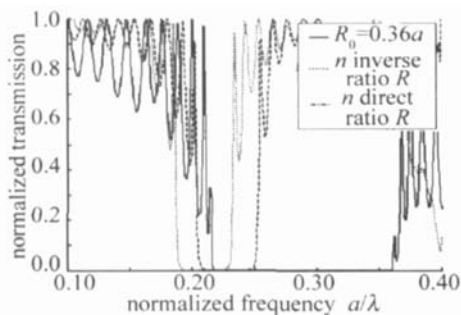


Fig 8 Transmission spectra of multilayered circle pole

质是空气时的透射谱,虚线为  $n$  随  $R$  正比的层状柱;点划线为  $n$  随  $R$  反比的层状柱。从图中看出两种情况下的禁带宽度几乎没有变化,当然与空气柱体比较窄了很多,但禁带中心位置变化比较明显,因此,在需

要相同带宽不同禁带位置时,可通过此法调节。

## 3 结论

用 FDTD 方法数值研究柱体由复合介质构成的二光子晶体传输特性,数值研究结果表明,在改变复合介质柱体的组成因素如半径大小、折射率大小、折射率组成次序等,都可调节光子晶体禁带的宽度与中心频率的位置,从而得到实际应用所需的光子晶体。由于复合介质有较多的可调因素,比如构成柱体的材料类型,是无损介质、金属、甚至是负折射率材料,材料相同时组成介质的几何尺寸、层数等,因此,在实际的应用中就要选择不同的方法进行调节,本文中提到的方法就可以为光子晶体的应用提供理论依据,如在图 4 图 5 图 8 所示情况下,带隙变化就比较明显,说明可以由图中所给方法进行调节。总之,由复合介质柱构成的光子晶体与单一介质柱体构成光子晶体相比,其带隙位置与宽度的变化更明显。虽然上述研究方法是建立在二维光子晶体的基础上的,但只要对上述方法作一些改进就可以应用于三维光子晶体。

### 参考文献

- [1] YABLOONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics [J]. Phys Rev Lett 1987, 58(20): 2059~2062
- [2] JOHN S. Strong localization of photon in certain disordered dielectric super lattice [J]. Phys Rev Lett 1987, 58(23): 2486~2489.
- [3] FANG Y T, SHEN T G, TAN X L. Absolute photonic band gaps of 2-D cubic compound lattice [J]. Laser Technology, 2004, 28(4): 344~351 (in Chinese).
- [4] QIU M. Effective index method in heterostructure slab waveguide based two dimensional photonic crystals [J]. A P L, 2002, 81(7): 1163~1165.
- [5] HE Y Z, SHI F G. Finite-difference in aginary-distance beam propagation method for modeling modeling of the fundamental mode of photonic crystal fibers [J]. Opt Commun 2003, 225: 151~156
- [6] TANG B Sh. Study of disorder by numerical method in the two dimensional photonic crystal [J]. Journal of Quantum Optics 2001, 7(3): 108~112 (in Chinese).
- [7] CHAN C T, YU Q L, HO K M. Order N spectral method for electromagnetic waves [J]. Phys Rev 1995, B51(23): 16635~16642.
- [8] YEE K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. IEEE Transaction of Antennas and Propagation 1996, 14(3): 302
- [9] WANG B Zh. Calculation electromagnetic [M]. Beijing Science Press 2002: 52~56 (in Chinese).
- [10] ZHAN X Y, AN W J, ZHANG L et al. Main factors for affecting complete forbidden band of 2-D air cylindrical photonic crystal [J]. Optoelectronic Engineering 2004, 31(3): 16~18 (in Chinese).
- [11] FANG Y T, SHEN T G, TAN X L. The design and study of a layered photonic crystal fiber [J]. Laser Journal 2004, 25(1): 50~52 (in Chinese).
- [12] BANESCU M, FNK Y, FAN S et al. An all-dielectric coaxial waveguide [J]. Science 2000, 289(21): 415~419.