

文章编号: 1001-3806(2009)01-0036-03

## 太赫兹波在光子晶体中的传输特性

梁兰菊

(枣庄学院 物理与电子工程系, 枣庄 277160)

**摘要:** 为了研究太赫兹波在2维正方晶格光子晶体中的传播特性, 利用平面波展开法数值模拟了光子晶体能带结构和态密度分布。计算表明,  $E$  偏振当填充率  $f = 0.6362$  和  $H$  偏振当填充率  $f = 0.7845$  时出现最大光子带隙, 在  $f = 0.7791$  出现最大完全光子带隙; 增加介电常数的差值, 也增加了太赫兹波在正方晶格光子晶体中传输的带隙; 光子晶体态密度的分布验证了存在光子带隙的范围。研究结果为太赫兹波器件的开发提供了理论依据。

**关键词:** 激光技术; 太赫兹波; 平面波展开法; 正方晶格; 光子带隙结构; 光子晶体态密度

中图分类号: O431.1 文献标识码: A

### Propagation characteristics of photonic crystal in THz range

LIANG Lan-ju

(Department of Physics and Electron Engineering, Zaozhuang University, Zaozhuang 277160, China)

**Abstract:** In order to study the propagation characteristics of two-dimension square lattice photonic crystal in THz rang, the band gap structure and density of photon states were calculated by plane-wave expansion method. It was found that the maximum photonic band gap generated when the  $f$  was 0.6362 and 0.7845 in the  $E$  and  $H$  polarization, and the maximum absolute photonic band gap generated when the  $f = 0.7791$ ; and large photonic band gap would generate by increasing difference in value of dielectric constant; the photonic band structure was also shown by the photonic density of states. It turned out that this research provides theoretic basis for the development of THz devices.

**Key words:** laser technique; THz wave; plane-wave expansion method; square lattice; photonic band structure; photon density of states

### 引言

太赫兹(THz)波<sup>[1-3]</sup>是一种介于毫米波与红外光之间的电磁波。THz频段是一个非常具有科学价值的电磁辐射区域, 具有频率高、脉冲短等特性, 太赫兹波检测、太赫兹波成像<sup>[4]</sup>、太赫兹波源、太赫兹波的传输等是现在研究的热点。近年来, 对THz波导的最新研究领域是将光子晶体运用到THz波的传播中<sup>[5-6]</sup>。光子晶体的概念是YABLONVITCH<sup>[7]</sup>和JOHN<sup>[8]</sup>于1987年分别提出的。光子晶体的重要特征是具有光子带隙, 当电磁波的频率落在光子带隙中, 电磁波在光子晶体中的传播就被禁止。利用光子晶体中的这种特性, 就可以制造出对特定波谱范围内有透射或过滤作用的THz波导器件。

基金项目: 山东省教育厅2007年度科研基金资助项目(J07WL05)

作者简介: 梁兰菊(1979-), 女, 硕士, 讲师, 主要从事光子晶体方面的研究。

E-mail: lianglanju123@163.com

收稿日期: 2007-10-24; 收到修改稿日期: 2007-11-21

目前, 计算光子晶体的理论方法有平面波展开法(plane-wave expansion method, PWM)、时域有限差分法(finite difference time domain, FDTD)、传输矩阵法(transfer matrix method, TMM)等, 目前在光子晶体方面的研究工作很多, 但是研究THz波在光子晶体的传输特性较少。作者用PWM研究了THz波在2维正方晶格光子晶体中的带隙结构, 分析了在晶格常数为 $a = 0.1\text{ mm}$ 的2维正方晶格光子晶体介质圆柱中, 改变介质填充率和相对介电常数差的大小, 获得不同THz波范围内的带隙结构, 这些研究结果为THz波器件开发提供了理论依据, 具有潜在的应用价值。

### 1 理论和计算方法

THz波在2维正方晶格光子晶体中的传播特性可用Maxwell方程组来描述:

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\epsilon(x_{11})} \nabla \times \mathbf{E} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} \quad (1)$$

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\epsilon(x_{11})} \nabla \times \mathbf{H} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H} \quad (2)$$

THz波入射到2维光子晶体中可分解为 $H$ 偏振和 $E$

偏振,即磁场平行于介质柱 TE 模和电场平行于介质柱的 TM 模,此时本征函数可表示为:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}_{11}, t) = [0, 0, \mathbf{H}_3(\mathbf{x}_{11}, \omega)] \exp(-i\omega t) \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}_{11}, t) = [\mathbf{E}_1(\mathbf{x}_{11}, \omega), \mathbf{E}_2(\mathbf{x}_{11}, \omega), 0] \exp(-i\omega t) \quad (4)$$

式中,  $\mathbf{x}_{11}$  为由  $x_1, x_2$  坐标轴构成的平面上的矢量。先把(2)式展开,然后把(3)式和(4)式代入,消去  $\mathbf{E}_1$  和  $\mathbf{E}_2$ ,得到  $\mathbf{H}_3$  的表达:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{x}_{11})} \frac{\partial \mathbf{H}_3}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{x}_{11})} \frac{\partial \mathbf{H}_3}{\partial x_2} \right] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_3 \quad (5)$$

由 2 维光子晶体的周期性,可把  $\varepsilon^{-1}(\mathbf{x}_{11}), \mathbf{H}_3(\mathbf{x}_{11}, \omega)$  展开成傅里叶级数:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{x}_{11}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{K}(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{x}_{11}) \quad (6)$$

$$\mathbf{H}_3(\mathbf{x}_{11}, \omega) = \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{K} + \mathbf{G})\mathbf{x}_{11}] \quad (7)$$

把(6)式和(7)式代入(5)式得:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{K}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{K} + \mathbf{G}') (\mathbf{K} + \mathbf{G}) \times \\ A(\mathbf{K} + \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} A(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \end{aligned} \quad (8)$$

对于  $\mathbf{E}$  偏振(或 TM 模),同理可得如下方程:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{K}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{K} + \mathbf{G}')^2 B(\mathbf{K} + \mathbf{G}') = \\ \frac{\omega^2}{c^2} B(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \end{aligned} \quad (9)$$

考虑每个原胞由介质常数分别为  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  的两种材料组成,此时(8)式和(9)式中的系数可表为:

$$\mathbf{K}(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_1} f + \frac{1}{\varepsilon_2} (1-f), & (\mathbf{G} = 0) \\ \left( \frac{1}{\varepsilon_1} - \frac{1}{\varepsilon_2} \right) f \frac{2J_1(r\mathbf{G})}{r|\mathbf{G}|}, & (\mathbf{G} \neq 0) \end{cases} \quad (10)$$

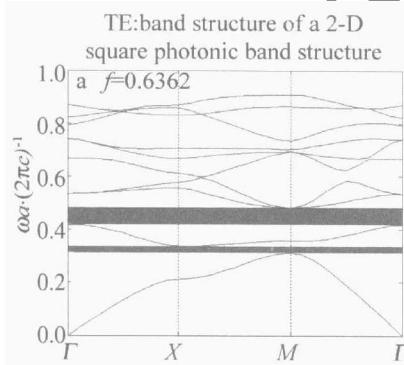
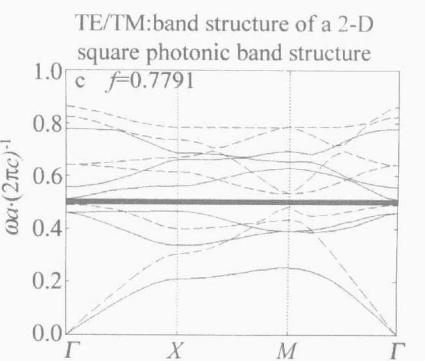
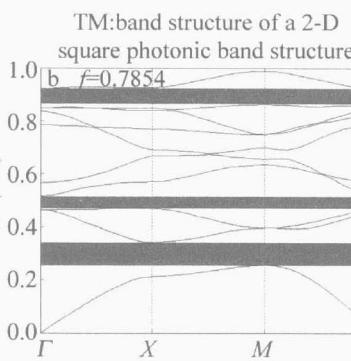


Fig. 2 Band gaps structure of 2-D square Lattice photonic crystal



## 2.2 介电常数对绝对带隙的影响

选用的晶格常数  $a = 0.1\text{mm}$ , 填充率  $f = 0.7719$ 。图 3a 中介电常数  $\varepsilon_a = 1.0, \varepsilon_b = 8.9$ ; 图 3b 中  $\varepsilon_a = 1.0, \varepsilon_b = 11.6$ ; 图 3c 中  $\varepsilon_a = 1.0, \varepsilon_b = 12$ , 并采用 961 个平面波对介电常数进行展开计算,在  $0\text{THz} \sim 1.5\text{THz}$  频段范围内,分析在介电常数变化情况下 THz 波段绝对带隙

式中,  $J_1$  为 Bessel 函数,  $f$  为填充因子,即空气圆柱占整个晶胞的百分比,对于正方晶格,  $f = S_a/S_a = \pi r^2/a^2$ 。将(10)式代入(8)式和(9)式,即可求出  $\mathbf{H}$  偏振和  $\mathbf{E}$  偏振的本征频率。

## 2 带隙结构计算

模型如图 1 所示,图 1a 中圆柱内由介电常数为  $\varepsilon_a$  的物质填充,背景空间由  $\varepsilon_b$  的物质构成;图 1b 为圆柱组成正方晶格单位晶格,半径为  $r$ ,晶格常数为  $a$ ,填充率为  $f$ ;图 1c 为  $\Gamma MX$  围成正方晶格的第 1 布里渊区。

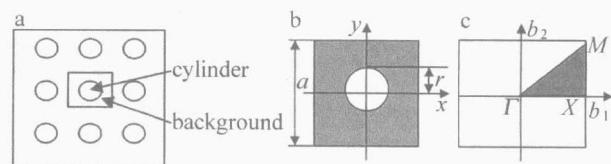


Fig. 1 a—square lattice photonic crystal of circular column b—square lattice photonic crystal of column c— $\Gamma MX$  composition of the first Brillouin region

### 2.1 填充率对带隙的影响

由图 1a 和(10)式知道,填充率  $0 < f \leq 0.7854$ ,晶格常数  $a = 0.1\text{mm}$ , 空气  $\varepsilon_a = 1.0$ , 硅  $\varepsilon_b = 11.6$ 。数值计算发现,当  $0.0314 < f \leq 0.6362$  时,TE 模对应带宽逐渐增大,当  $f = 0.6362$  时,带宽为  $0.0653\text{THz}$ ,达到最大(见图 2a)。当  $0.6362 \leq f \leq 0.7854$  时,带宽逐渐减小,对 TM 模,随着填充率的增大带宽增大,当  $f = 0.7854$  时,带宽为  $0.0863\text{THz}$ ,达到最大(见图 2b)。当  $f = 0.7791$  时达到最大完全带隙,带宽为  $0.021\text{THz}$ (见图 2c)。对于完全带隙的宽度同样受到填充率的影响,不过影响不是很大。

结构的变化规律,发现介电常数差值增大相应的绝对带隙也增大了,不过变化不是太明显。图 3a 在  $0\text{THz} \sim 1.5\text{THz}$  波段之间,没有出现绝对带隙结构。图 3c 中出现一个带隙,带隙位于  $0.5071\text{THz} \sim 0.4805\text{THz}$ ,中心频率为  $0.4938\text{THz}$ ,带宽是  $0.0266\text{THz}$ 。图 3b 中出现一个带隙,带隙位于  $0.5114\text{THz} \sim 0.4904\text{THz}$ ,中心频率为

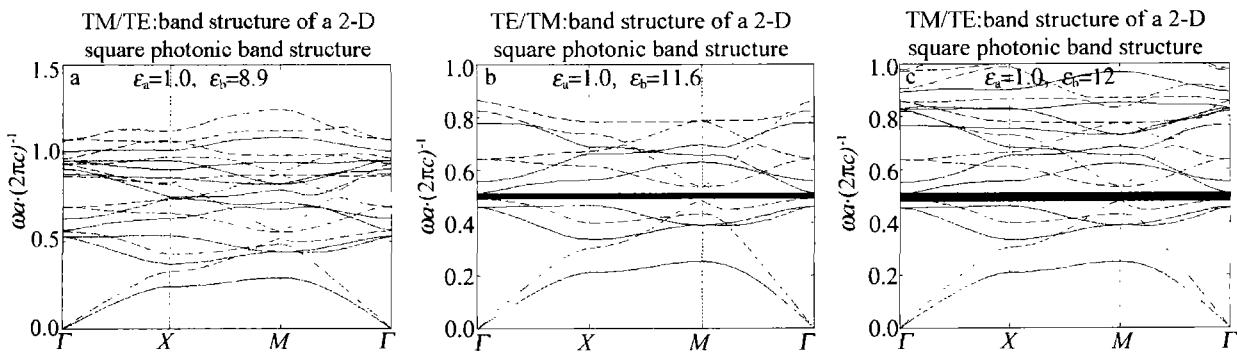


Fig. 3 Band gaps structure of 2-D square lattice photonic crystal

0.290THz, 带宽是0.5009THz。

### 3 光子晶体态密度对带隙结构的验证

光子态密度(density of states, DOS)为单位频率下所存在的能态数目, 它与光子晶体的透射率及许多实验上观察到的光学性质有密切的关系, 数学表达式为:

$$N_{\text{DOS}} = \sum_{\text{IBZ}} \delta[\omega - \omega(\vec{k})] \quad (11)$$

IBZ为约化布里渊区。根据(11)式, 先对第1布里渊区取样Bloch向量<sup>[9]</sup>, 以PWM对(8)式和(9)式用961个平面波进行展开, 然后统计模态数目对能量的分布, 即可求得光子态密度。

图4为 $f=0.6362$ 时磁场极化下的光子态密度分布图, 从图中可以看到出现两个带隙, 较大带隙为

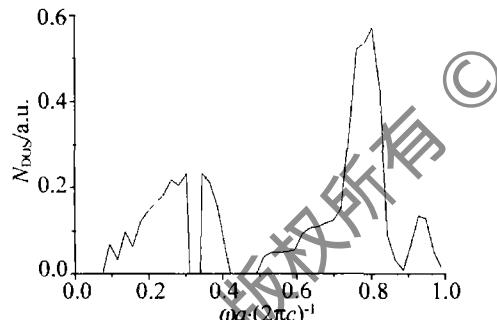


Fig. 4 Under magnetical poling the density of square lattice photonic crystals  
0.4198THz ~ 0.4896THz, 带宽为0.0698THz, 另一个带隙0.31THz ~ 0.3385THz, 带宽为0.0285THz, 与图2a中0.3127THz ~ 0.3375THz, 0.4176THz ~ 0.4829THz的两个带隙比较, 带隙范围符合得较好。图5为 $f=$

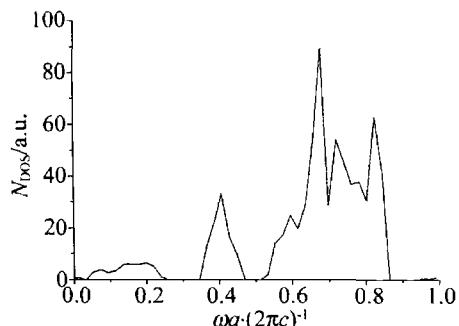


Fig. 5 Under electrical poling the density of square lattice photonic crystals

0.7854时电场极化下的光子态密度分布图, 图中出现3个带隙, 频率在0.2604THz ~ 0.3438THz, 0.4688THz ~ 0.5204THz, 0.8644THz ~ 0.9271THz有带隙存在, 与图2b中3个带0.2546THz ~ 0.3409THz, 0.4677THz ~ 0.5196THz, 0.8629THz ~ 0.9210THz比较, 带隙范围符合得较好, 因此, 光子晶体态密度的分布为其存在的能带结构提供了有力的依据。

### 4 结论

研究了THz波段的2维正方晶格光子晶体的禁带结构, 理论研究发现, 在特定晶格常数下, THz波段的光子带隙宽度随着填充率和介电常数差值的变化而变化, 并通过计算光子晶体态密度的分布验证了其带隙结构的分布。这些为设计THz波段光子晶体滤波器、反射器等方面具有实际应用价值。

### 参考文献

- [1] SIEGEL P H. Terahertz technology [J]. Microwave Theory and Techniques, 2002, 50(3): 910-928.
- [2] CAO J C. Interband impact ionization and nonlinear absorption of terahertz radiation in semiconductor heterostructures [J]. Phys Rev Lett, 2003, 91(23): 237401/1-237401/4
- [3] LIU H C, SONG C Y, WASILEWSKI Z R, et al. Coupled electron-phonon modes in optically pumped resonant intersubband lasers [J]. Phys Rev Lett, 2003, 90(7): 077402/1-077402/4.
- [4] WANG Q, CHI X, LI Q. Imaging theory and development of THz free electron lasers[J]. Laser Technology, 2006, 30(6): 643-646 (in Chinese).
- [5] BINGHAM A, ZHAO Y G, CRISCHKOWSKY D. THz parallel plate photonic waveguides [J]. A P L, 2005, 87(5): 051101/1-051101/3.
- [6] LIU H, YAO J, XU D, et al. Propagation characteristics of two-dimensional photonic crystals in the terahertz range [J]. Appl Phys, 2007, B 87(1): 57-63.
- [7] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(20): 2059-2062.
- [8] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(23): 2486-2489.
- [9] BUSCH K, JOHN S. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems [J]. Phys Rev, 1998, E58(3): 3896-3908.