文章编号: 1001-3806(2021)03-0313-05

二次元多周期1维光子晶体带隙的实质

范希智 (武汉理工大学 物理系,武汉 430070)

摘要:为了讨论1维光子晶体带隙的本质,利用传输特征矩阵法分析了二次元多周期1维光子晶体的反射率,并推导出等效折射率实部的表达式。以氟化镁(MgF₂)和硫化锌(ZnS)构成的二次元多周期的1维光子晶体为例,进行了数值计算,绘制了反射率及等效折射率实部的曲线,并进行了分析。结果表明,反射率为1.0的波长区间与等效折射率实部为零的波长区间相同;对于带隙范围内的光波而言,1维光子晶体的等效折射率的实部等于或趋近于零时,1维光子晶体是虚等效折射率材料。该研究对二次元多周期1维光子晶体的研究是有帮助的。

关键词:物理光学;光子晶体;带隙;虚折射率

中图分类号: 0436

文献标志码: A doi:10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2021.03.008

The essence of the band gap of 1-D photonic crystal with period consisting of two elements

FAN Xizhi

(Department of Physics, Faculty of Science Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: In order to discuss the essence of 1-D photonic crystal band gap, the reflectivity of 1-D photonic crystal consisting of two elements was analyzed, and the expression of the real part of the equivalent refractive index was derived by using the transmission characteristic matrix method. Taking the 1-D photonic crystal composed of magnesium fluoride (MgF_2) and zinc sulfide (ZnS) as an example, the analytical numerical calculations of the reflectivity and the real part of the equivalent refractive index were done and the corresponding curves were drawn. It was the conclusion that, wavelength range with reflectivity of 1.0 is the same as that with real part of equivalent refractive index of zero. For the light waves in the band gap, the real part of the equivalent index material in the extent of band gap. In other words, the optical essence of photonic crystal band gap is that photonic crystal becomes virtual equivalent index material. This study is helpful for the study of 1-D photonic crystal with multi periods consisting of two elements.

Key words: physical optics; photonic crystal; band gap; imaginary refractive index

引 言

1987年,YABLONOVITCH 在研究抑制自发辐射时提出了光子晶体的概念^[1]。几乎同时,JOHN 在讨论光子局域时也独立地提出了这个概念^[2]。光子晶体是将不同介电常数(或折射率)的介质材料在空间按一定的周期排列而形成的一种人为的"晶体"结构。

光子晶体的提出展示了一种新的控制光子的机制,促进了光子技术的进一步研究,给通讯技术、光电

E-mail:phshzh@whut.edu.cn

子技术等领域的发展和应用带来了新的生机和活力, 使得用光子取代电子来传输、处理和存储信息的设想 更有希望实现^[3]。

近些年来,针对 KAVOKIN 等人于 2005 年提出的 光学 Tamm 态^[4],人们对光子晶体-金属、光子金属-石 墨烯光子晶体等复合结构中可能存在的光学 Tamm 态 进行了广泛而深入的研究,获得到许多新颖而有意义 的结果^[5-8]。

光子晶体中的折射率(或介电常数)是空间的周 期函数,与半导体材料中的电子在周期性势场作用下 形成能带结构相类似,在光子晶体中传播的光子能量 也会有能带结构^[9],能带与能带之间会出现光子带隙 (或称禁带),因此,又可将光子晶体称为光子带隙材

作者简介:范希智(1969-),男,硕士,副教授,现主要从事 非线性光子晶体及新型"坏"金属的理论研究。

收稿日期:2020-07-09;收到修改稿日期:2020-11-02

料或光子半导体。频率(波长)落在带隙中的光子不能在光子晶体中传播,这些光不能进入光子半导体即 光子晶体,将被全部反射。

表面看来,1 维光子晶体的原始构成材料的折射 率只在一个方向上呈周期性变化,因而结构简单,实际 上它是一种周期性结构的分层薄膜材料,可采用镀膜 方法制备^[10]。早在光子晶体概念提出之前,人们已经 开始对这种1维周期结构薄膜进行研究,主要用于各 种光学器件的增透、反射等的镀膜领域,因此1维光子 晶体是一种研究较为成熟的光子晶体,可用于可见光 及红外波段。

表征材料光学性能的参量是折射率,而光子带隙 材料即光子晶体的折射率有什么特性?从光学角度 看,光子晶体的带隙是怎样的情况?本文中将利用分 析光学薄膜的干涉矩阵法及相关的概念来讨论二次元 1 维光子晶体的带隙及其对应的折射率之特征。

1 理论分析

构成1维光子晶体的原始材料的折射率只在1维 方向上周期性地变化,一个周期可以由几层不同折射 率的原始材料组成。二次元1维光子晶体的周期是最 简单的,仅由A和B两种原始材料组成,它们的折射 率分别为n_A和n_B,整个光子晶体是由很多个同样的 周期重复排列而成,如ABAB…ABAB,记为(AB)^{*l*},*L* 为周期数。由于原料的折射率变化是严格周期性的, 因此这种光子晶体可称之为1维本征光子晶体或1维 无掺杂光子晶体。目前,这种光子晶体一般附着于玻 璃等透明衬底上而不能独立存在,其结构如图1所示。





分析光子晶体的光学特性的方法有许多^[3,11-18], 而对于1 维光子晶体来说,采用传输特征矩阵法是非 常合适的^[12,15,19],假定光波从折射率为 n₀ 的入射介 质入射到由均匀、各向同性、非磁性的介质组成的1 维 光子晶体(多层膜系)的表面上,光子晶体制作在折射 率为 n_g 的透明衬底上(如图1 中所示的玻璃衬底),则 由传输特征矩阵法得到光子晶体表面的能量反射率 为:

$$R = \left| \frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right|^2 \tag{1}$$

式中, η_0 为入射介质的导纳,Y是光子晶体与衬底的 组合体的等效导纳。

$$Y = \frac{C}{B} \tag{2}$$

式中, B和C构成光子晶体与衬底的组合传输矩阵的 矩阵元素, 表示为:

$$\begin{bmatrix} B\\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{j=1}^{2L} \begin{bmatrix} \cos \delta_j & i \sin \delta_j / \eta_j \\ i \eta_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1\\ \eta_g \end{bmatrix}$$
(3)

式中, η_j 和 η_g 分别是第*j*层膜和衬底介质的导纳。在 垂直入射的情况下,导纳与折射率相等: $\eta_i = c/v_i$ (*i* = 0,*j*,g), v_i 为入射介质中、第*j*层膜中和衬底介质中的 光速,*c*为真空中光速。当 $\eta_g = 1$ 时,*Y*是纯光子晶体的导纳;在可见光、近红外波段,*Y*为光子晶体的折射 率。

$$\boldsymbol{T}_{j} = \begin{bmatrix} \cos\delta_{j} & i\sin\delta_{j}/\eta_{j} \\ i\eta_{j}\sin\delta_{j} & \cos\delta_{j} \end{bmatrix}$$
(4)

式中, T_j 为第j层薄膜的特征传输矩阵, δ_j 为第j层膜的位相厚度,定义为:

$$\delta_j = \frac{2\pi n_j d_j}{\lambda} \cos\theta_j \tag{5}$$

式中, λ 为入射光波的波长, d_j 为第 j 层膜的厚度, θ_j 为夹角, n_i 为第 j 层膜的折射率, $n_i = c/v_i$ 。

对于图1所示的结构,每个周期内有两层膜,则周 期的传输矩阵变为:

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{T}_{\mathrm{A}} \boldsymbol{T}_{\mathrm{B}} = \begin{bmatrix} m_{11} & \mathrm{i} m_{12} \\ \mathrm{i} m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}$$
(6)

矩阵元分别为:

$$\begin{cases} m_{11} = \cos \delta_{A} \cos \delta_{B} - \frac{\eta_{B}}{\eta_{A}} \sin \delta_{A} \sin \delta_{B} \\ m_{12} = \frac{\cos \delta_{A} \sin \delta_{B}}{\eta_{B}} + \frac{\sin \delta_{A} \cos \delta_{B}}{\eta_{A}} \\ m_{21} = \eta_{A} \sin \delta_{A} \cos \delta_{B} + \eta_{B} \cos \delta_{A} \sin \delta_{B} \\ m_{22} = \cos \delta_{A} \cos \delta_{B} - \frac{\eta_{A}}{\eta_{B}} \sin \delta_{A} \sin \delta_{B} \end{cases}$$
(7)

很明显,关系式 $m_{11}m_{22} + m_{12}m_{21} = 1$ 成立。则对于 结构如图1所示的1维光子晶体,(3)式变为:

$$\begin{bmatrix} B\\ C \end{bmatrix} = M^{L} \begin{bmatrix} 1\\ \eta_{g} \end{bmatrix}$$
(8)

式中,*L*是指数,表示周期,即存在2*L*层膜。令*E*表示 单位矩阵,即:

$$\boldsymbol{E} = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

由(8)式递推得: $M^{L} = U_{L-1}(\chi)M - U_{L-2}(\chi)E$, 从而有:

- -1

$$M^{L} = \begin{bmatrix} m_{11}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi) & im_{12}U_{L-1}(\chi) \\ im_{21}U_{L-1}(\chi) & m_{22}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi) \end{bmatrix}$$
(10)

式中, $U_{L-1}(\chi)$ 、 $U_{L-2}(\chi)$ 是第L-1阶次、第L-2阶次 第2类切比雪夫多项式。于是(3)式变为:

$$\begin{bmatrix} B\\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi) \end{bmatrix} + i\eta_{g}m_{12}U_{L-1}(\chi) \\ im_{21}U_{L-1}(\chi) + \eta_{g}[m_{22}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi)] \end{bmatrix}$$
(11)
代入(2)式得:

$$Y = \frac{C}{B} =$$

$$\frac{\eta_{g}[m_{22}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi)] + im_{21}U_{L-1}(\chi)}{[m_{11}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi)] + i\eta_{g}m_{12}U_{L-1}(\chi)}$$
(12)

由上式可见,等效导纳 *Y* 是复数。而 *Y* 的实部为:

$$Y_{\text{real}} = \frac{\eta_{\text{g}} \left[U_{L-1}^{2}(\chi) - 2\chi U_{L-1}(\chi) U_{L-2}(\chi) + U_{L-2}^{2}(\chi) \right]}{\left[m_{11} U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi) \right]^{2} + \left[\eta_{\text{g}} m_{12} U_{L-1}(\chi) \right]^{2}}$$
(13)

利用第2类切比雪夫多项式通项表示式和各阶次 第2类切比雪夫多项式之间的递推关系^[20],(13)式变 为:

$$\frac{\eta_{\rm real} - \eta_{\rm g} \left[U_{L-1}^{2}(\chi) - U_{L}(\chi) U_{L-2}(\chi) \right]}{\left[m_{11}U_{L-1}(\chi) - U_{L-2}(\chi) \right]^{2} + \left[\eta_{\rm g} m_{12}U_{L-1}(\chi) \right]^{2}}$$
(14)

由上面的讨论可知,等效导纳 Y 及其实部 Y_{real} 都 是波长 λ 的函数,即 $Y = Y(\lambda)$, $Y_{real} = Y_{real}(\lambda)$ 。结合 第 2 类切比雪夫多项式的特性,通过(14)式或(13)式 可见,1 维光子晶体的周期数达到一定数值时,等效导 纳的实部 $Y_{real}(\lambda)$ 在某波长范围内的取值将趋近于或 等于零。

2 实验讨论

设构成 1 维光子晶体周期的两种介质 A 和 B 分 别是氟化镁(MgF₂)和硫化锌(ZnS),它们的折射率分 别为 $n_A = 1.38(MgF_2), n_B = 2.35(ZnS)$ 。每个介质层 的光学厚度均为某一参考波长 λ_0 的 1/4,即 $n_A d_A = n_B d_B = \lambda_0/4, d_A$ 和 d_B 是介质层的几何厚度,与波长 λ_0 对应的频率是 ω_0 。晶体由有限个周期组成,设周期数 为10,即介质层的总数为20层。将1维光子晶体制 作在折射率 n_g = 1.0的衬底上,并设光从真空垂直入 射到光子晶体表面,则入射介质的折射率 n_0 = 1.0 (n_g = 1.0即为真空,如前所述,光学薄膜型光子晶体不能独 立存在,一般附着于玻璃等衬底上,这样会形成光子晶 体与衬底的组合体,这里设 n_g = 1.0是为了讨论纯光子 晶体的情况)。图2a中为这种1维光子晶体的 $Y_{real}(\lambda)$ 曲线。该曲线是根据(14)式或(13)式利用数值计算 而绘制的,此时取 λ_0 = 510nm,由图可见,大约在 440nm~630nm的范围内,等效导纳实部 $Y_{real}(\lambda)$ 是等 于零(趋近于零)的。



Fig. 2 The curve of real part of the effective admittance and the reflectivity of 1-D photonic crystal with MgF_2/ZnS

当实部等于零时,等效导纳 Y 即变成纯虚数,在 此情况下,(1)式中的 Y 就是纯虚数,这样反射率 R = 1.0,在相应波长范围内的入射光被全部反射,按照光 子晶体带隙的定义,这个波长范围就是带隙。图 2b 中 的光子晶体的反射率曲线是根据(1)式~(5)式进行 数值计算而绘制的。由图可见,反射率 R = 1.0,波长 范围也是大约在 440nm~630nm 之间。

这里讨论的是光学薄膜型的1维光子晶体,如前 所述,其等效导纳即为其等效折射率,在光垂直入射时 即为光子晶体的折射率^[10]。在带隙范围内1维光子 晶体的(等效)折射率是虚(等效)折射率。正是由于 虚(等效)折射率的出现,处于带隙内的入射光被全部 反射,实现光子晶体的功用。

虚折射率的情况在金属中有近似的体现。金属的

折射率是复数: $n_{\rm m} = n_{\rm Re} - ik$,其中 k 为消光系数, $n_{\rm Re}$ 为 实折射率,但有些金属的 k 值比其 n 值大很多^[21-22],因 此它们的折射率可以看作: $n_{\rm m} \approx -ik$,即虚折射率,当 光垂 直入射于金属表面时,其反射系数 r 近似为 $\frac{n_1 + ik}{n_1 - ik}$,反射率 $R \approx 1$,所以这些金属的反射率很高,接 近 1.0。

等效折射率的情况在全反射中真正出现^[19]。当 光斜入射于光学界面时,界面两侧介质的折射率可以 用其等效折射率来代替表示,对于*s*光来说,入射介 质、折射介质的等效折射率为 $\eta_j = n_j \cos\theta_j (j = 1, 2)$,其 中 $n_1 \ n_2 \ D$ 别为入射介质、折射介质的折射率, $\theta_1 \ n$ $\theta_2 \ D$ 别为入射角和折射角。而对于*p*光来说,两种介 质的等效折射率则为 $\eta_j = n_j / \cos\theta_j$,则界面的反射系数 可写成统一的形式: $r = \frac{\eta_1 - \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}$ 。当发生全反射时,折 射角 θ_2 不再是实数角,相应的 $\cos\theta_2$ 也不是实数,根据 折射定律可知 $\cos\theta_2 = i \sqrt{\frac{n_1^2}{n_2^2} \sin^2\theta_1 - 1}$,无论是*s*光还是 *p*光,其对应的等效折射率 η_2 都是虚数,因而反射率 *R*=1.0,入射光100%反射回入射介质内,折射介质内 没有光。

图 2 是 1 维 10 周期的 MgF₂/ZnS 光子晶体在光垂 直入射下出现带隙与虚折射率(复折射率的实部为 零)相对应的情形。同样,根据(14)式或(13)式利用 数值计算 而绘制这种光子晶体光在斜入射下的 $Y_{real}(\lambda)$ 曲线,取入射角为 $\theta_0 = 30^\circ$,如图 3a 和图 3b 所 示。在相同的入射角下,根据(1)式~(5)式进行数值 计算而绘制光子晶体斜入射时的反射率 $R(\lambda)$ 曲线, 如图 3c 和图 3d 所示。

光在斜入射情形下,可分成 p 光和 s 光分别进行 讨论,图 3a 和图 3b 中分别是 p 光和 s 光的 $Y_{real}(\lambda)$ 曲 线: $Y_{p,real}(\lambda)$, $Y_{s,real}(\lambda)$;图 3c 和图 3d 中分别是 p 光和 s 光的 $R(\lambda)$ 曲线: $R_p(\lambda)$, $R_s(\lambda)$ 。由图中 $R(\lambda)$ 曲线 可见,无论 s 光还是 p 光,都出现反射率是 100% 的波 长区域,即出现带隙,p 光和 s 光的带隙范围大约在 420nm ~ 580nm 和 410nm ~ 600nm,而在对应的波长区 域内, $Y_{p,real}(\lambda) = 0$, $Y_{s,real}(\lambda) = 0$,如图 3a 和图 3b 中 的 $Y_{real}(\lambda)$ 曲线所示,这说明在带隙内,光子晶体表现 出具有虚等效折射率的情况,这表明在斜入射下,也会 出现带隙与虚折射率(复折射率的实部为零)相对应 的情形。

由此可见,光子晶体出现带隙,其复折射率的实部



Fig. 3 The curve of real part of the effective admittance and the reflectivity of 1-D photonic crystal with MgF₂/ZnS at incident angle of θ₀ = 30°
为零,即折射率成为虚折射率。至于光子晶体带隙大小,它与构成光子晶体的原始材料的折射率及光子晶体
之虚等效折射率材料的关系,要根据(1)式~(10)式和
第2类切比雪夫多项式的定义出发进行详细的讨论,限
于篇幅,作者将于另文发表分析和结果,这里从略。

3 结 论

1 维光子晶体在能带结构上存在着带隙,频率或 波长处于带隙的光波不能通过或进入1 维光子晶体而 被全部反射。1 维光子晶体的等效折射率(等效导纳) 是复数,随入射光波波长而变化,对于带隙范围内的光 波而言,1 维光子晶体的等效折射率的实部等于或趋 近于零,此时变成虚等效折射率,在垂直入射下即是虚 折射率。

作者以氟化镁(MgF₂)和硫化锌(ZnS)构成的多 周期的二次元1维光子晶体为例,分析了这种情况,可 以知道,对于频率或波长处于带隙的光波而言,1维光 子晶体表现为其等效折射率是虚等效折射率,换言之, 1维光子晶体是虚等效折射率材料。金属可以近似看 作虚折射率材料,全反射发生时,光疏媒质看作是虚等 效折射率材料,而这里讨论的1维光子晶体可以既是 虚折射率材料,又是虚等效折射率材料,前者是光垂直 入射的情形,后者则是斜入射下的情形。无论哪种,都 是处于1维光子晶体的带隙范围内,由此看来,光子晶 体带隙的光学本质是:在带隙范围内光子晶体变成虚 等效折射率材料。

参考文献

- YABLONOVICH E. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics [J]. Physical Review Letters, 1987, 58 (20): 2059-2061.
- [2] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. Physical Review Letters, 1987, 58 (23): 2486-2489.
- [3] JOANNOPOULOS J D, MEADE R D, WINN J N. Photonic crystals: Molding the flow of light [M]. Princeton, USA: Princeton University Press, 1995:7.
- [4] KAVOKIN A V, SHELYH I A, MALPUEC H A. Lossless interface modes at the boundery between two periodic dielectric structures[J]. Physics Review, 2005, B72(23); 233102.
- [5] JIANG Y, ZHANG W L, ZHU Y Y. Optical Tamm state theory study on asymmetric [J]. Acta Physica Sinica, 2013,62(16):167303(in Chinese).
- [6] CHEN Y, DONG J, LIU T, et al. Study on the sensing mechanism of photonic crystal containing metal layer based on the coupling analysis of optical Tamm state [J]. Chinese Journal of Lasers, 2015, 42 (11):111400(in Chinese).
- [7] SHUKLA M K, DAS R. Tamm-plasmon polaritons in one-dimensional photonic quasi-crystals[J]. Optics Letters, 2018, 43(3): 362-365.

- [8] CHEN X F, LI Sh J, ZHANG Y, et al. The wide-angle perfect absorption based on the optical Tamm states [J]. Optoelectronics Letters, 2018, 10(4):317-320.
- [9] ALBERT J P, JOUANIN C, CASSAGE D. Photonic crystal modeling using a tight-binding Wannier function method [J]. Optical and Quantum Electronics, 2002, 34(1/3); 251-263.
- [10] TANG J F, GU P F, LIU X, et al. Modern optical thin film technology[M]. Hangzhou: Zhejiang University Press, 2006:20-33 (in Chinese).
- [11] ALIVIZATOS E G, ALIVIZATOS E G, CHREMMOS I D, et al. Green's-function method for the analysis of propagation in holey fibers[J]. Journal of the Optical Society of America, 2004, A21 (5): 847-857.
- [12] YABLONOVITCH E, GMITTER T J, LEUNG K M. Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms[J]. Physical Review Letters, 1991, 67(17/21): 2295-2297.
- [13] PENDRY J B. Calculation of photon dispersion relations [J]. Physical Review Letters, 1992, 69(19): 2772-2776.
- [14] WANG H, LI Y P. An eigen matrix method for obtaining the band structure of photonic crystals [J]. Acta Physica Sinica, 2011, 50 (11): 2172-2178(in Chinese).
- [15] WU X Y, MA J, LIU X J, et al. Quantum theory of photonic crystals[J]. Physica, 2014, E59(5): 174-180.
- [16] FAN X Zh, YI Y Y, CHEN Q M, et al. On the equivalence of the transfer matrix method for investigating one dimensional photonic crystal with the fresnel coefficient matrix method for analyzing optical thin film[J]. Laser Journal, 2014, 35(7): 26-29 (in Chinese).
- [17] ZHU H X, YE T, ZHANG K F. Study on high sensitivity pressure sensing characteristics of photonic crystal fiber[J]. Laser Technology, 2019, 43(4):511-516(in Chinese).
- [18] PENG R R, LIU B, CHEN J. Study on side-hole surface plasmon resonance refractive index sensing based on single-core photonic crystal optical fiber[J]. Laser Technology, 2018, 42(5):713-717 (in Chinese).
- [19] BORN M, WOLF E. Principles of optics [M]. 7th ed. London, UK: Cambridge University Press, 1999; 38-74.
- [20] SHI B J. Determinants of RFPrLrR circulant matrices of the Chebyshev polynomials [J]. Pure and Applied Mathematics, 2016, 32 (3): 304-317(in Chinese).
- [21] JOHNSON P B, HRISTY R W C. Optical constants of the noble metals[J]. Physics Review, 1972, B6(12): 4370-4379.
- [22] ORDAL M A, LONG L L, BELL R J, et al. Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared [J]. Applied Optics, 1983, 22(7): 1099-1120.