

用特征矩阵法计算光子晶体的带隙结构

王 辉¹⁾ 李永平¹⁾²⁾

¹⁾ 中国科学技术大学物理系, 合肥 230026)

²⁾ 中国科学技术大学结构分析开放实验室, 合肥 230026)

(2001 年 3 月 25 日收到, 2001 年 5 月 5 日收到修改稿)

讨论了利用特征矩阵计算一维光子晶体的光子带隙结构的方法. 利用此方法计算了不同介电常量、不同几何结构以及掺杂的晶体结构的带隙特征, 并推广至介质介电常量 ϵ 随入射光波频率 ω 变化的情况.

关键词: 光子带隙, 特征矩阵, 缺陷态

PACC: 4270Q, 7865

1 引 言

光子晶体是一种折射率周期变化的人工微结构材料, 其典型结构为一个折射率周期变化的三维物体, 周期为光波长量级. 光子在这类材料中的行为类似于电子在凝聚态物质中的行为, 可能存在着类似于半导体能带结构中的禁带, 称之为光子带隙. 频率落在光子带隙内的电磁波不能在光子晶体中传播^[1-4]. 光子晶体的这种特性具有极大的理论价值和潜在的应用前景. 光子带隙的发现意味着频率落在带隙内的自发辐射受到抑制, 它修正了原子、分子和激子系统的基本特性^[1-3]. 类比于半导体, 在光子晶体中掺杂后, 会在光子能隙中引入局域模式, 这将给激光技术和非线性光学等带来全新的应用, 如制作零阈值激光器、光滤波器等^[5, 6].

光子晶体的理论计算已相对成熟, 但如何利用较为简单易行的方法去估算制造参数和选取介质仍然是一个很重要的手段和方面. 相对而言, 一维光子晶体在结构上最为简单, 易于制备, 且有多种应用^[7]. 在计算上也最易于提出模型, 进行模拟计算. 本文旨在提出一种相对简单但实用的理论计算方法, 即用特征矩阵法^[8, 9]计算一维光子晶体的带隙结构, 并讨论了一维光子晶体在不同结构参数和成分参数下的光学传输特性.

2 一维光子晶体带隙结构

2.1 一维光子晶体模型

考虑由两种不同相对介电常量(ϵ_a, ϵ_b)、厚度(a, b)的薄介质层交替排列构成的一维周期性结构材料. 如图 1 所示, 空间周期为 $d = a + b$, 一束频率为 ω 的光从左向右正入射到图中所示的一维周期性结构材料中.

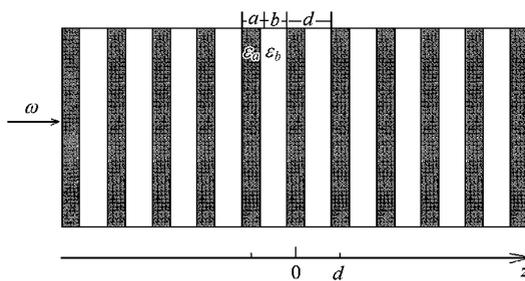


图 1 一维周期性介质结构

计算模型如图 2 所示, 将光波在介质层中的行进看作是正向行进电磁波(下行波)和反向行进电磁波(上行波)的叠加. 介质交界面处的电磁场满足边界条件. 每一介质层与光波的相互作用可由其特征矩阵完全决定. 介质层两边的场矢量 $E_{\perp}, H_{\perp}, E_{\parallel}, H_{\parallel}$ 的模可用特征矩阵联系起来:

$$\begin{bmatrix} E_{\perp} \\ H_{\perp} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

下面就单介质层的情况来导出特征矩阵 M 的表达式.

2.2 特征矩阵的推导

如图 2 所示, E_0, H_0 表示界面 I 的 n_a 一侧的场矢量, E_{\perp}, H_{\perp} 表示界面 I 的 n_b 一侧的场矢量, $E_{\parallel}, H_{\parallel}$ 表示界面 II 的 n_c 一侧的场矢量. 在界面 I 上有入射光波 E_{i1} 、反射光波 E_{r1} 、透射光波 E_{t1} 以及由介质 n_b 入射到界面 I 上的光波 E'_{i2} .

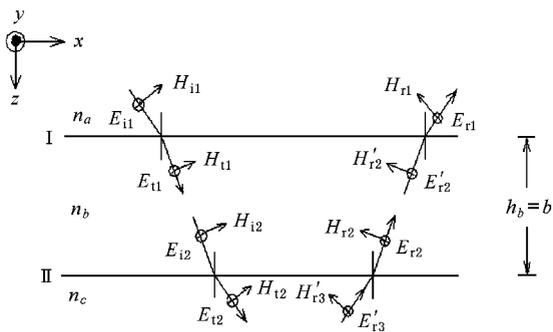


图 2 任一中间介质层中的光传播情况

当介质中无自由电荷或传导电流时,根据电磁场边界条件,界面处的电偏振 E 和磁偏振 H 的切向分量连续. 假设入射光波的电偏振 E 垂直入射面,即先考虑 TE 模. 以 E_n, H_n 表示界面 n 处电偏振 E 和磁偏振 H 的切向分量,因在同一界面两侧,显然有 $E_0 = E_1, H_0 = H_1$ (注:为便于说明,以斜入射模型列式讨论,考虑正入射时只需令所有入射角、透射角、反射角均为零即可.)

对界面 I:

$$\begin{cases} E_1 = E_{i1} + E_{r1} = E_{t1} + E'_{i2}, \\ H_1 = H_{i1} \cos\theta_{i1} - H_{r1} \cos\theta_{r1} = H_{t1} \cos\theta_{t1} - H'_{i2} \cos\theta_{i2}. \end{cases} \quad (2)$$

对界面 II, $E_{\parallel}, H_{\parallel}$ 可有类似公式. 考察界面 I 上的透射场 $E_{t1}(x, y, z=0)$ 与界面 II 上的入射场 $E_{i2}(x, y, z=b)$:

$$\begin{aligned} E_{t1} &= E_{i10} e^{-i(k_x x + k_z z)} \Big|_{z=0}, \\ E_{i2} &= E_{i10} e^{-i(k_x x + k_z z)} \Big|_{z=b} = E_{i1} e^{-ik_z b} = E_{i1} e^{i\delta_b}, \end{aligned} \quad (3)$$

式中

$$\delta_b = -k_z h_b = -\frac{\omega}{c} n_b b \cos\theta_b \quad (\theta_b = \theta_{i1} = \theta_{t2})$$

表示波矢为 k 的平面波在介质层中,垂直横跨过两个界面时的相位差(即在 z 方向上的相位差, x 方向上的相位差当入射角 θ_i 较小的可忽略). 同样,

$$E'_{i2} = E_{i2} e^{i\delta_b}. \quad (4)$$

根据 $H = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} E = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E \sqrt{\epsilon_r}$ (式中已取 $\mu_r \approx 1$),由 (1)–(4) 式可得

$$\begin{cases} E_{\perp} = \cos\delta_b E_{\parallel} - \frac{i}{\eta_b} \sin\delta_b H_{\parallel}, \\ H_{\perp} = -i\eta_b \sin\delta_b E_{\parallel} + \cos\delta_b H_{\parallel}, \end{cases}$$

式中

$$\eta_b = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sqrt{\epsilon_b} \cos^2\theta_b.$$

写为矩阵运算有

$$\begin{bmatrix} E_{\perp} \\ H_{\perp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\delta_b & -\frac{i}{\eta_b} \sin\delta_b \\ -i\eta_b \sin\delta_b & \cos\delta_b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

上述推导是针对 E 偏振与入射面垂直的情况即 TE 模所作,类似地可对 TM 模作推导,得类似于上式的结果,只是在 TM 模情况下(若考虑正入射,则 TE 模与 TM 模情况相同)

$$\eta_i = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{\sqrt{\epsilon_i}}{\cos^2\theta_i},$$

故得单介质层的特征矩阵为(TE 模)

$$M_j = \begin{bmatrix} \cos\delta_j & -\frac{i}{\eta_j} \sin\delta_j \\ -i\eta_j \sin\delta_j & \cos\delta_j \end{bmatrix},$$

式中

$$\begin{cases} \delta_j = -\frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_j} h_j \cos\theta_j, \\ \eta_j = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sqrt{\epsilon_j} \cos^2\theta_j. \end{cases} \quad (6)$$

以上是针对模型图 1 中间各介质层中既有左行波,又有右行波的情况讨论的,而对模型图 1 的最后一个界面而言,将只有右行波,没有左行波. 这相当于 $E'_{rN+2} = 0, H'_{rN+2} = 0$. 此时仍然可以推出上式.

对于一维周期性结构的情况(图 1),可逐层应用 (5) 式的单介质层特征矩阵方程. 对第 N 层介质,其左界面的场矢量为 E_N, H_N ,右界面的场矢量为 E_{N+1}, H_{N+1} 则有

$$\begin{bmatrix} E_N \\ H_N \end{bmatrix} = (M_N) \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix}.$$

依次逐层类推,可得如模型图 1 所示的一维周期性结构:

$$\begin{bmatrix} E_1 \\ H_1 \end{bmatrix} = M_1 M_2 \dots M_N \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 &= M_a M_b M_a \dots M_b M_a \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix} \\
 &= M \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{bmatrix}, \quad (7)
 \end{aligned}$$

式中 $M = M_a M_b M_a \dots M_b M_a$ 就是一维周期性结构的特征矩阵.

2.3 一维周期性结构的反射率、透射率的计算及色散关系(TE模)

分别在第 1 个界面及第 $N + 1$ 个界面上列电磁场分量方程,并将求得的 $E_1, H_1, E_{N+1}, H_{N+1}$ 代入(7)式,展开可求得

$$\begin{aligned}
 \text{反射系数 } r &= \frac{E_{r1}}{E_{i1}} = \frac{A\eta_0 + B\eta_0\eta_{N+1} - C - D\eta_{N+1}}{A\eta_0 + B\eta_0\eta_{N+1} + C + D\eta_{N+1}}, \\
 \text{反射率 } R &= r \cdot r^*, \\
 \text{透射系数 } t &= \frac{E_{tN+1}}{E_{i1}} = \frac{2\eta_0}{A\eta_0 + B\eta_0\eta_{N+1} + C + D\eta_{N+1}}, \\
 \text{透射率 } T &= t \cdot t^*. \quad (8)
 \end{aligned}$$

模型图 1 所示的一维周期性结构的两侧均为空气,故有 $\eta_{N+1} = \eta_0$. 利用(8)式编程运算,可以得到一维光子晶体的反射率(或透射率)随入射光角频率 ω 的变化关系,从而得到一维光子晶体的带隙结构.

对模型图 1 所示的一维周期性结构(当介质层数 N 较大时,可近似看作周期结构),由布洛赫定理,界面处的场矢量满足:

$$\begin{bmatrix} E_{N+2} \\ H_{N+2} \end{bmatrix} = e^{ikd} \begin{bmatrix} E_N \\ H_N \end{bmatrix} \quad (k \text{ 为布洛赫波矢}), \quad (9)$$

又由特征矩阵方法可得

$$\begin{bmatrix} E_N \\ H_N \end{bmatrix} = M_a M_b \begin{bmatrix} E_{N+2} \\ H_{N+2} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

于是

$$\begin{bmatrix} E_N \\ H_N \end{bmatrix} = M_a M_b \begin{bmatrix} E_{N+2} \\ H_{N+2} \end{bmatrix} = e^{-ikd} \begin{bmatrix} E_{N+2} \\ H_{N+2} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

由定解条件 $\det(M_a M_b - e^{-ikd}) = 0$, 可得到模型图 1 所示的一维周期性结构的色散关系如下(正入射时, $\theta_a = \theta_b = 0$):

$$\cos kd = \cos\delta_a \cos\delta_b - \frac{1}{2} \left(\frac{\eta_a}{\eta_b} + \frac{\eta_b}{\eta_a} \right) \sin\delta_a \sin\delta_b, \quad (12)$$

式中

$$\begin{aligned}
 \delta_a &= -\frac{\bar{\omega}}{c} \sqrt{\epsilon_a} a, \quad \delta_b = -\frac{\bar{\omega}}{c} \sqrt{\epsilon_b} b, \\
 \eta_a &= \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sqrt{\epsilon_a}, \quad \eta_b = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sqrt{\epsilon_b}.
 \end{aligned}$$

如果将 kd 限制在 $0 \leq kd \leq \pi$ 范围内,可以得到如图 3(a)和图 4(a)所示的一维光子晶体的简约布里渊区图像.

3 计算结果举例

3.1 一维周期性结构情况

用上面讨论的方法,通过计算机编程,可以求出一维光子晶体的特征矩阵 M 中的 A, B, C, D 4 个矩阵元,然后利用(8)式,即可求出一维光子晶体的带隙结构.作为本文理论模型的验证,我们采用文献[6]所用参数,以便对比.介质层 a 为 ZnS , $\epsilon_a =$

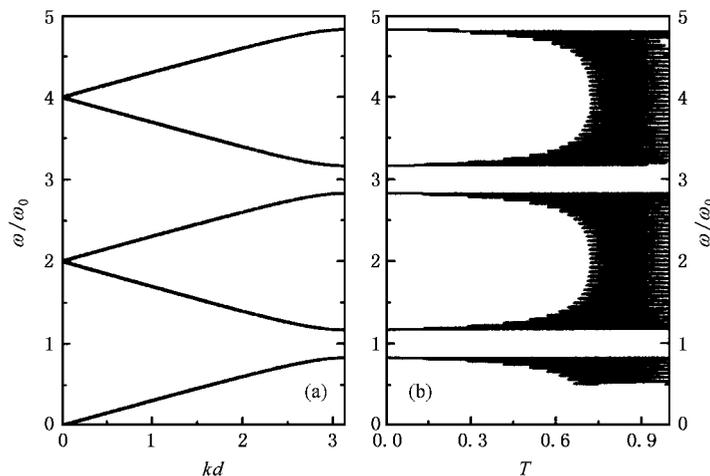


图 3 $n_a a = n_b b$ 时的光子带隙结构 (a)为色散关系 (b)为透射率-频率依赖关系

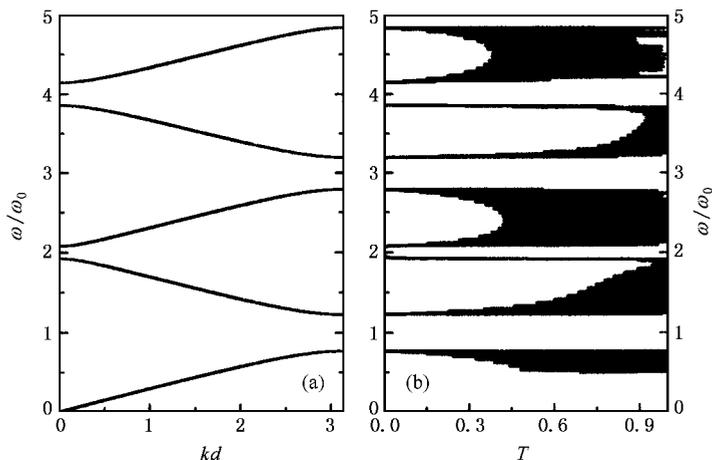


图 4 $n_a a \neq n_b b$ 时的光子带隙结构 (a) 为色散关系 (b) 为透射率-频率依赖关系

5.5225 , 介质层厚度 $a = 740\text{nm}$; 介质层 b 为 MgF_2 , $\epsilon_b = 1.9044$, 介质层厚度 $b = 1260\text{nm}$. 空间周期 $d = a + b = 2000\text{nm}$. 一维周期性结构的周期数为 10 , 共 21 层介质 , 介质层 a 的填充率因子 $f = a/d = 0.37$. 基频 ω_0 (即第一禁带的中心频率) 由

$$\begin{cases} n_a = \sqrt{\epsilon_a} , & n_b = \sqrt{\epsilon_b} , \\ n = (n_a a + n_b b) / d , & k_0 = \pi / d , \\ \omega_0 = ck_0 / n = \frac{c\pi}{n_a a + n_b b} \end{cases} \quad (13)$$

决定(按上述参数 , 可求得 $\omega_0 \approx 271\text{THz}$, 对应的光波段波长为 6955.6nm). 因此 , 通过改变一维光子晶体的空间周期 d (或 a , b) 或者用不同介电常量的介质 , 可以得到不同的带隙基频 ω_0 , 进而得到不同的倍频带隙 .

通过计算得到如图 3 和图 4 所示的一维光子晶体的带隙结构 . 图 3(a) 为由模型图 1 描述的一维周期性结构的色散关系 . 图 3(b) 为透射率 T 与入射光波频率 ω 的关系 , 正入射时 TE 模与 TM 模的情况相同 . 作为与文献 [6] 的对比较证 , 图 3 中取 $n_a a = n_b b$, 发现基频 ω_0 的偶数倍频处的禁带消失 ; 而当取 $n_a a \neq n_b b$ 时 , 将得到如图 4 所示的带隙结构 , 基频 ω_0 的偶数倍频处的禁带保留 , 结果与文献 [6] 完全相同 , 这也就从一个侧面佐证了本文方法的可靠性 . 偶数倍频处的禁带是否保留可从 (12) 式的色散关系加以解释 : 当 $\omega = 2m\omega_0$ 时 , 若 $n_a a = n_b b$, 则可以得到 $\cos kd = 1$, 这样的 k 存在 , 故无带隙 ; 而当 $n_a a \neq n_b b$ 时 , 由色散关系式可以得到 $\cos kd < -1$ 或 $\cos kd > 1$, 这样的 k 不存在 , 即为禁带 .

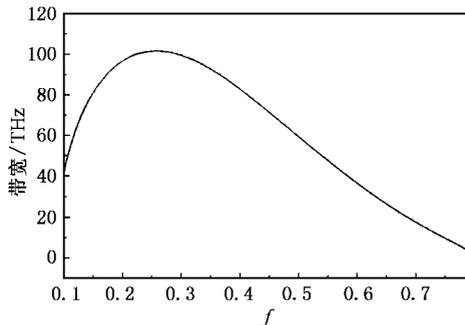


图 5 第一带隙宽度随 a 介质填充率因子 f 变化曲线

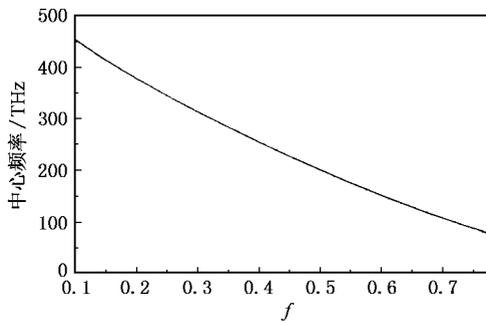


图 6 第一带隙中心频率随 a 介质填充率因子 f 变化曲线

利用本文方法 , 讨论了第一带隙的宽度及中心频率随介质 a 的介电常量 ϵ_a 的变化规律 , 得到与文献 [6] 相同的结果 , 进一步证明了本文方法的可信性 . 在此基础上 , 还讨论了第一带隙的宽度及中心频率随介质层 a 的填充率因子 f 的变化关系 , 如图 5 和图 6 所示 . 发现其与第一带隙的宽度及中心频率随 ϵ_a 的变化规律大体相同 .

在实际应用过程中,总是希望设计出的器件具有较宽的“禁带”,以抑制无序涨落的影响,从而带来更多的应用^[5,6].从上面的分析可以看出,可以利用光子晶体的理论指导设计具有宽“禁带”的人工材料,而且使得设计出的材料具有尽可能大的禁带宽度.

3.2 掺杂影响

类似于电子结构的掺杂,半导体中掺杂形成的施主能级或受主能级产生许多新的现象,使得现代集成电路迅速发展.同样在光子晶体中掺杂后,会在光子能隙中引入新的电磁波模式,形成掺杂能级

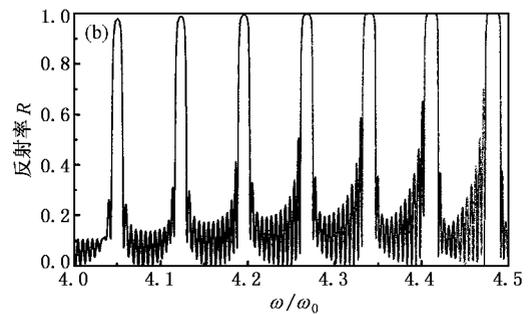
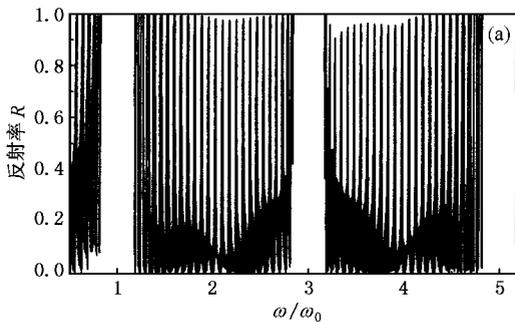


图7 (a)为图1所示的一维周期性结构的最中间及两端掺入杂质层时的反射率-入射光波频率 ω 关系 (b)为(a)的局部放大

3.3 介电常量随入射光波频率 ω 变化时的情况

以上讨论都是基于介电常量 ϵ 与频率 ω 无关的前提下进行的,即认为 ϵ 为常量.本文所提出的特征矩阵法也适用于介质的介电常量 ϵ 随入射光波频率 ω 变化的情况,只需在以上各式中用 $\epsilon(\omega)$ 代替 ϵ 即可,前提是必须知道 ϵ 对 ω 的显式依赖关系.

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (14)$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}. \quad (15)$$

如果考虑一种由金属薄层与空气层相间排列的一维周期性结构,金属薄层 a 的厚度取为700nm,介电常量 $\epsilon(\omega)$ 由(14)式所示的自由电子金属模型决定,其中 ω_p 为导带电子等离子体频率^[4];空气层厚度 b 取为6300nm,介电常量 $\epsilon = 1.0$, $d = 7000$ nm,填充率因子 $f = 0.1$,可以得到其带隙结构,如图8所示.可以发现随入射光波频率的增大,带隙宽度逐

(频率)^[5,6],这将给激光技术和非线性光学带来全新的应用.此类问题用完整晶体能带理论计算相当复杂,但用本文方法计算掺杂则要相对简单得多,而且当改变掺杂方式时操作十分方便.

文献[6]考虑了在如图1所示的一维周期性结构的最中间一层掺入杂质层的情况.如果改变掺杂方式,在一维周期性结构的最中间及两端都掺入杂质层,发现带隙结构将发生很大变化,基本的主带隙的位置及宽度大体不变,而在主带隙的边缘出现掺杂缺陷模式,在主带隙之间出现了一系列的等间距窄带隙(见图7).

渐减小至趋于零,即在高频波段无带隙存在.另外,由于没有考虑金属的吸收,所以在图8中高频波段的透射率为1.

如果考虑由一种简单立方双原子极性半导体或离子晶体如GaAs与空气层相间排列的一维周期性结构,参量与上述自由电子金属模型相同,只是GaAs的介电常量 $\epsilon(\omega)$ 由(15)式决定,其中 ϵ_∞ 是高频(光频)介电常量, ω_T 和 ω_L 分别为晶格长光学波横波频率和纵波频率,对GaAs晶体, $\epsilon_\infty = 10.9$, $\omega_T = 8.12$ THz, $\omega_L = 8.75$ THz^[4].得到其带隙结构如图9所示.从图中透射率与入射光波频率的 $T-\omega$ 关系和色散关系的对比中可以看出,两者在很符合程度上都预示出了带隙的位置及宽度.

同样,若考虑有损耗介质(如金属)时,直接将表征有损耗介质性质的复介电常量代入上述各式进行复数运算即可.限于篇幅,在此不另作举例,但有损耗介质也是制造实际器件时要考虑的一个极为重要的因素.

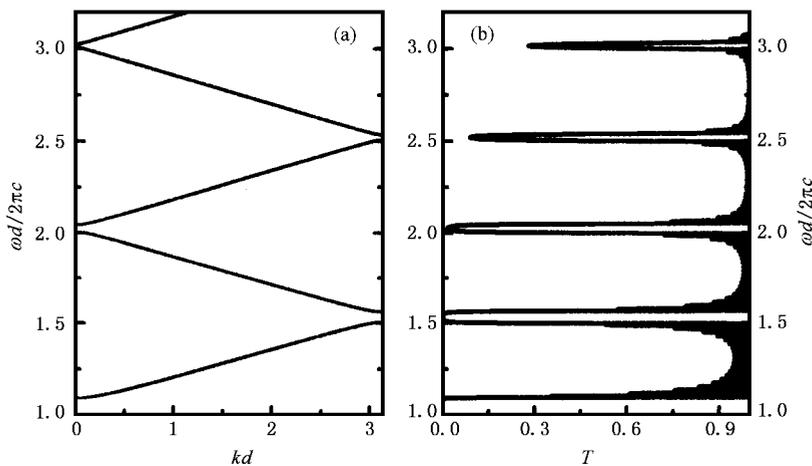


图8 (a)为图1所示的一维周期性结构的色散关系,取 a 介质为金属层,介电常量由(14)式决定, b 介质为空气层, $\omega_p d/2\pi c = 1$, $f = 0.1$; (b)为图1所示的一维周期性结构的透射率-频率依赖关系,计算中金属层数取为20, $\omega_p d/2\pi c = 1$, $f = 0.1$

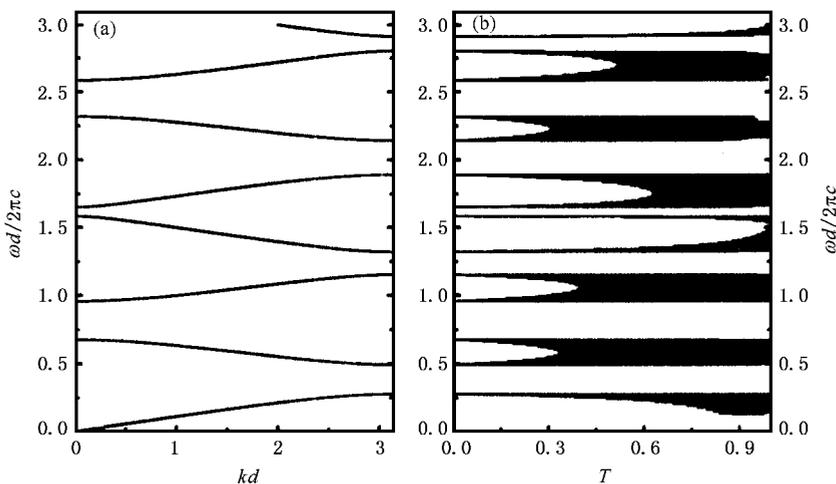


图9 (a)为图1所示的一维周期性结构的色散关系,取 a 介质为 GaAs,介电常量由(15)式决定, b 介质为空气层, $f = 0.1$, $d = 7000\text{nm}$; (b)为图1所示的一维周期性结构的透射率-频率依赖关系,计算中 GaAs 介质层数取为20, $f = 0.1$, $d = 7000\text{nm}$

4 结 论

本文详细推导了一种计算一维光子晶体带隙结构的方法——特征矩阵法,并可推广到介电常量 ϵ 随入射光波频率 ω 变化的介质层的情况和复介电常量介质层的情况.通过计算讨论了一维光子晶体的光学传输特性,如色散关系、带隙结构及分布;还讨论了在一维光子晶体中掺入杂质层时,引入新的电磁波模式的情况.本文方法所得结果与用其他方

法如本征值方法、FDTD 等方法所得结果完全符合,表明本文方法的正确性和可信性.但本文方法的计算速度明显高于本征值方法、FDTD 等方法,而且本文方法更容易进行各种参数调节,便于作出各种参数变化曲线,因而本文方法是一种能考虑到多种结构和成分等物理参数实际情况的简单易行的设计理论,它为高维器件的制作提供了初级估算.值得指出的是本文方法可以较易扩展至二维情况,将在另文发表.

- [1] E. Yablonovitch , *Phys. Rev. Lett.* , **58**(1987) , 2059 .
- [2] S. John , *Phys. Rev. Lett.* , **58**(1987) , 2486 .
- [3] E. Yablonovitch , J. Gmitter , *Phys. Rev. Lett.* , **63**(1989) , 1950 .
- [4] C. M. Soukoulis , *Photonic Band Gap Materials*(Kluwer Academic , Dordrecht , 1996) .
- [5] S. John , J. Wang , *Phys. Rev.* , **B43**(1991) , 12772 .
- [6] G. C. Gu , H. Q. Li *et al.* , *Acta Opt. Sin.* , **20**(2000) , 728(in Chinese) 顾国昌、李宏强等 , *光学学报* , **20**(2000) , 728] .
- [7] X. Y. Liu , *Acta Phys. Sin.* , **49**(2000) , 189(in Chinese) 刘新芽 , *物理学报* , **49**(2000) , 189] .
- [8] J. Chen , *Modern Optics and Technology*(Electromagnetics Section) (Zhejiang University Press , Hangzhou , 1996) (in Chinese) 陈军 *现代光学及技术*(电磁篇) 浙江大学出版社 , 杭州 , 1996] .
- [9] Y. Q. Jin , *Electromagnetic Waves in Complicated Systems*(Fudan University Press , Shanghai , 1995) (in Chinese) 金亚秋 , *复杂系统中的电磁波*(复旦大学出版社 , 上海 , 1995)] .

AN EIGEN MATRIX METHOD FOR OBTAINING THE BAND STRUCTURE OF PHOTONIC CRYSTALS

WANG HUI¹⁾ LI YONG-PING^{1,2)}

¹⁾ *Department of Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China*)

²⁾ *Structure Research Laboratory , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China*)

(Received 25 March 2001 ; revised manuscript received 5 May 2001)

ABSTRACT

An eigen matrix method is reported to obtain the band structure of one-dimensional(1D) photonic crystals . Using this method , we have calculated the band structures of 1D crystals consisting of components with different dielectric constants and geometric structures . It can also be extended to a case where the dielectric constant is dependent on the frequency of the incident light .

Keywords : photonic band gap , eigen matrix , doped mode

PACC : 4270Q , 7865