

低频和高频区域内大禁带的二维各向异性光子晶体*

肖三水 沈林放 何赛灵

(浙江大学现代光学仪器国家重点实验室, 光及电磁波研究中心, 杭州 310027)

(2002 年 2 月 19 日收到, 2002 年 5 月 21 日收到修改稿)

采用一种改进的平面波展开法, 运用一种有效的设计二维各向异性光子晶体的方法, 在低频和高频区域内获得了具有较大禁带的两种二维光子晶体. 低频区域内, 找到具有最大禁带宽度的光子晶体的禁带宽度为 $\Delta\omega = 0.07(2\pi c/a)$, 中心频率为 $0.76(2\pi c/a)$ (这里的 a 为晶格常量). 高频区域内, 找到的光子晶体的最大禁带宽度为 $\Delta\omega = 0.1(2\pi c/a)$, 中心频率为 $1.65(2\pi c/a)$. 同时在低频区域内, 发现一种很简单的正方网格结构, 它的禁带宽度为 $\Delta\omega = 0.057(2\pi c/a)$, 禁带宽度与禁带的中心频率之比为 $\Delta\omega/\omega_c = 11.782\%$.

关键词: 光子晶体, 平面波展开法, 各向异性材料, 完全禁带

PACC: 7820P, 4270Q

1. 引言

20 世纪 90 年代以来, 介质周期结构中的电磁波行为引起了人们广泛的研究. 介质周期结构, 即所谓的光子晶体, 可以存在光子禁带——频率区域, 在该区域内光子晶体禁止任何电磁波在其中传播. 光子晶体的出现展示了许多重要的应用前景, 如新型激光器、新型波导和高度集成化的密集波分复用器等. 这些应用都是基于光子晶体的禁带效应. 虽然三维光子晶体有其更广泛的应用潜力, 但是在可见光和红外波段范围很难制造出光子晶体. 由于二维光子晶体也有许多重要的应用, 如激光二极管反馈镜、光子晶体光纤等, 而且二维光子晶体相对于三维光子晶体更容易制造, 所以, 研究二维光子晶体也有很大的实用价值.

光子晶体的禁带越大, 那么它禁光传播的频率区间就越宽, 所以设计大禁带光子晶体是光子晶体的一个基本研究课题. 对二维光子晶体的设计, 虽然理论上有一个经验法则^[1], 但那只能提供方向性的指导. 目前, 多种二维光子晶体结构已被提出^[2-8], 通过结构参量优化, 这些二维结构都显示了可观的绝对禁带. 为了获得较高的介电常量比, 这些结构大多采用在高介电背景材料上制作周期排列的空气

孔. 先前的研究表明, 光子晶体对称性的破坏是产生大禁带的有效手段, 例如引入两套晶格能增加绝对禁带的宽度^[2], 采用各向异性材料同样能增加绝对禁带的宽度^[9,10]等. 在本文中, 我们运用一种新的方法设计以各向异性材料(以蹄为例, 它是一种各向异性材料, 它的正常光相对介质常量为 $\epsilon^o = 23.04$, 非正常光相对介质常量为 $\epsilon^e = 38.44$)为基础的大(绝对)禁带的正方周期结构的光子晶体.

2. 理论模型与计算方法

考虑两种介质构成的正方周期结构二维光子晶体, 并假定该结构在其周期单元或原胞内具有如下的基本对称性: 相对于 x 轴和 y 轴都反射对称, 绕 z 轴旋转 90° 对称. 这里, 我们对结构的原胞引入了适当的坐标系. 如图 1 所示, 在该坐标系中, 原胞中心在坐标原点, 两基矢为 $a\hat{x}$ 和 $a\hat{y}$. 对原胞作分割, 分割成大小相等的小正方形, 后面将这些小正方形称为像素. 设想每个像素只由一种介电材料构成, 那么每个像素都有两种“填充”可能. 这样, 原胞内不同的像素填充方式将对应不同的光子晶体结构. 原则上, 只要对原胞分割得足够细小, 可以有效地模拟任何介电分布, 包括介质界面是光滑的. 通过上述方式, 可以把寻求介电常量在原胞内的最佳分布改为寻求

* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 90101024)和浙江省自然科学基金重点项目(批准号: ZD0002)资助的课题.

像素的最佳填充方式. 由于原胞内结构的对称性, 只需要确定其中的 $1/8$ 区域的象素填充(如图 1 所示)就完全确定了原胞的结构.

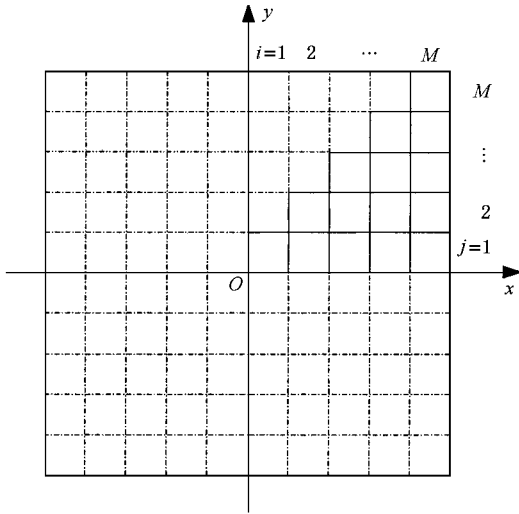


图 1 二维正方周期结构原胞的分割 边线是实线的小正方形为结构的基本象素

设想对原胞作 $2M \times 2M$ 分割, 那么因因素的不同填充方式可构成的光子晶体结构有 $2^{M(M+1)^2}$ 个. 对每一个结构, 可以用一个 $M(M+1)^2$ 位的二进制数来表示. 这个二进制数的大小在区间 $[1, 2^{M(M+1)^2}]$ 内. 如果 $M=5$, 即对原胞作 10×10 分割, 那么就有 32765 种的可能结构可以作筛选. 为了降低巨大的数值计算量, 可以对介质的填充率作一限制范围, 即该范围外的结构予以忽略. 然而, 根本的措施是建立一种快速而又精确的计算二维光子晶体能带的理论方法.

在二维各向异性光子晶体中, 同样电磁波可以分解成两类基本模式, 即 E 偏振波和 H 偏振波, 只是两种偏振对应于不同的介电常量 (ϵ° 和 ϵ° 分别对应于 E 偏振模式和 H 偏振模式, 其中 ϵ° 为正常光的介电常量, ϵ° 为非正常光的介电常量). 已有的研究表明, 用 H_0 等^[11] 的平面波展开法可以精确快速地计算 E 偏振波的能带. 但对 H 偏振波, 无论是 H_0 方法还是常规平面波展开法^[12], 它们的收敛都很慢^[13], 即难以精确快速地计算 H 偏振波的能带. 沈林放等^[14] 曾提出一种等效介质理论的平面波展开法^[14], 但对于我们研究的这个模型不太适合. 尽管要建立一种对 H 偏振波普适的有效算法相当困难, 但对将要研究的二维结构, 建立一种有效的快速平面波展开法则是完全可能的^[15].

对二维系统如图 1 所示, H 偏振波的电场有 $E = E_x \hat{x} + E_y \hat{y}$, 磁场有 $H = H_z \hat{z}$, 各场分量遵从如下 Maxwell 方程:

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z, \quad (1)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x, \quad (2)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega\epsilon_0 \epsilon E_y. \quad (3)$$

应用 Bloch 定理, 对场分量作 Fourier 级数展开,

$$E_x = \sum_{m,n} U_{m,n}^{(1)} e^{i\frac{2\pi}{a}(mx+ny)} \cdot e^{i(k_x x + k_y y)},$$

$$E_y = \sum_{m,n} U_{m,n}^{(2)} e^{i\frac{2\pi}{a}(mx+ny)} \cdot e^{i(k_x x + k_y y)},$$

$$H_z = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{m,n} V_{m,n} e^{i\frac{2\pi}{a}(mx+ny)} \cdot e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (4)$$

这里 $k = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ 为 Brillouin 区内的波矢. 把上述表达式(4)代入方程(1), 不难得到方程(1)在 Fourier 空间的对应形式

$$\left(\frac{2m\pi}{a} + k_x\right) U_{m,n}^{(2)} - \left(\frac{2n\pi}{a} + k_y\right) U_{m,n}^{(1)} = \frac{\omega}{c} V_{m,n}. \quad (5)$$

需要强调的是, 要获得方程(2)(3)在 Fourier 空间的正确形式, 必须要正确地处理两积函数 ϵE_x 和 ϵE_y 的 Fourier 变换. 如果单一地用 Laurant 法则或 inverse 法则^[16]来求解这两个积函数的 Fourier 系数, 那么最后得到的正是 H_0 方法或常规平面波展开法.

先来考虑 ϵE_x 的 Fourier 变换, 函数 ϵ 和 E_x 在介质界面对 x 不连续, 但它们的积 ϵE_x 对 x 是处处连续; 另一方面, E_x 对 y 是处处连续. 可以分两步来完成 ϵE_x 的 Fourier 变换. 首先固定 y 某一任意值, 对 ϵE_x 作对 x 变量的 Fourier 变换, 并应用 inverse 法则, 则可以得到

$$(\epsilon E_x)_m = \sum_{m'} a_{m,m'}^{-1} E_{m'}^{(1)}(y), \quad (6)$$

式中 $(\epsilon E_x)_m$ 和 $E_m^{(1)}$ 分别为周期函数 $\epsilon E_x e^{-i(k_x x + k_y y)}$ 和 $E_x e^{-i(k_x x + k_y y)}$ 对 x 变量的 Fourier 系数, 矩阵 a 定义为

$$a_{m,m'} = \alpha_{m-m'}(y),$$

而

$$\alpha_m = \frac{1}{a} \int_{-2/a}^{2/a} \frac{1}{\epsilon} e^{-i\frac{2\pi}{a}mx} dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^{2/a} \frac{1}{\epsilon} \cos\left(\frac{2\pi}{a} mx\right) dx$$

$$= \frac{2}{a} \sum_{i=1}^M \frac{1}{\epsilon_{i,j}} \cos\left(\frac{\pi}{a} m(2i-1)\Delta\right) \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} m\Delta\right)}{\frac{\pi}{a} m\Delta}$$

$((j-1)\Delta \leq y \leq j\Delta, j = 1, 2, \dots, m)$.

Fourier 系数 α_m 实际上是 y 的函数,但可以用一数组 $\{a_m^j\}$ 来描述它,即 $\alpha_m(y) = a_m^j$, 当 $(j-1)\Delta \leq y \leq j\Delta$. 类似地,也可以用这种方式来描述矩阵 a 和 a^{-1} 对变量 y 的依赖关系. 进一步对方程 (6) 对变量 y 作 Fourier 变换,由 E_x 对 y 的连续性可推断 $E_m^{(1)}(y)$ 对 y 连续,可以运用 Laurent 法则,从而得到

$$(\epsilon E_x)_{m,n} = \sum_{m',n'} r_{m,m';n,n'}^{(1)} U_{m',n'}^{(1)}, \quad (7)$$

式中

$$r_{m,m';n}^{(1)} = \frac{1}{a} \int_{-2/a}^{2/a} a_{m,m'}^{-1} e^{-i\left(\frac{2\pi}{a} y\right)} dy$$

$$= \frac{2\Delta}{a} \sum_{j=1}^M a_{m,m'}^{j-1} \cos\left(\frac{\pi}{a} n(2j-1)\right) \times \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} n\Delta\right)}{\frac{\pi}{a} n\Delta}$$

运用上述类似的技巧,可以求取 ϵE_y 的 Fourier 系数

$$(\epsilon E_y)_{m,n} = \sum_{m',n'} r_{m-m',n,n'}^{(2)} U_{m',n'}^{(2)}, \quad (8)$$

式中

$$r_{m,n,n'}^{(2)} = \frac{2\Delta}{a} \sum_{i=1}^M \beta_{n,n'}^{i-1} \cos\left(\frac{\pi}{a} m(2i-1)\right) \times \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} m\Delta\right)}{\frac{\pi}{a} m\Delta}$$

$$\beta_{n,n'}^i = \beta_{n-n'}^i$$

$$\beta_n^i = \frac{2\Delta}{a} \sum_{j=1}^J \epsilon_{ij} \cos\left(\frac{\pi}{a} m(2j-1)\right) \times \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} n\Delta\right)}{\frac{\pi}{a} n\Delta}$$

将方程 (7) 和 (8) 代入方程 (2) 和 (3), 可以得到方程

$$\left(\frac{2n\pi}{a} + k_y\right) V_{m,n} = -\frac{\omega}{c} \sum_{m',n'} r_{m,m';n,n'}^{(1)} U_{m',n'}^{(1)}, \quad (9)$$

$$\left(\frac{2m\pi}{a} + k_x\right) V_{m,n} = \frac{\omega}{c} \sum_{m',n'} r_{m-m',n,n'}^{(2)} U_{m',n'}^{(2)}. \quad (10)$$

从方程 (5) (9) 和 (10), 可以求得 H 偏振波的正确本征值方程形式

$$\sum_{m',n'} \left\{ \left(\frac{2m\pi}{a} + k_x\right) r_{l,l'}^{(2)-1} \left(\frac{2m'\pi}{a} + k_x\right) + \left(\frac{2n\pi}{a} + k_y\right) r_{l,l'}^{(1)-1} \left(\frac{2n'\pi}{a} + k_y\right) \right\} V_{m',n'}$$

$$= \frac{\omega^2}{c^2} V_{m,n}, \quad (11)$$

式中矩阵 $r^{(1)}$ 和 $r^{(2)}$ 定义为

$$r_{l,l'}^{(1)} = r_{m,m';n,n'}^{(1)},$$

$$r_{l,l'}^{(2)} = r_{m-m',n,n'}^{(2)},$$

$l = (n + N)(2N + 1) + m + N + 1, l' = (n' + N)(2N + 1) + m' + N + 1$, 而 $m, m', n, n' \in [-N, N]$; N 涉及平面波数的截断,即计算中运用的平面波数目为 $(2N + 1)^2$. E 偏振波的本征值方程容易求得,为

$$\sum_{m',n'} \left[\left(\frac{2m'\pi}{a} + k_x\right)^2 + \left(\frac{2n'\pi}{a} + k_y\right)^2 \right] \epsilon_{l,l'}^{-1} U_{m',n'}$$

$$= \frac{\omega^2}{c^2} U_{m',n'}, \quad (12)$$

式中, ϵ 为函数 ϵ 的 Teoplitz 矩阵, l 和 l' 的定义与前面相同.

3. 数值结果与讨论

在如下的计算中,我们选取各向异性材料(蹄介质)作为我们的研究对象.假设介质蹄的正常光介质常量在 $x-y$ 平面内,即 $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon^o = 23.04$, 沿轴方向为非正常光的介质常量 $\epsilon_z = \epsilon^e = 38.44$. 采用本征方程 (11) 和 (12) 来计算两种模式的本征频率,可以发现,当平面波数目大于 361 个时,在 $[0, 2\pi c/a)$ 频率区内,计算结果的相对误差都小于 1%. 取 $M = 5$, 即对原胞作 10×10 分割,这样有 32768 种结构有待计算比较.为了降低计算量,将只考虑蹄介质填充率在 10% 到 50% 之间的结构,因为该区间内的结构才有可能出现大绝对禁带.计算中,同时在两个频率区域上搜索最大绝对禁带结构,即 $0 \leq \omega a/2\pi c \leq 1$ 和 $1 \leq \omega a/2\pi c \leq 2$.

经过大量的数值计算和比较,找到了低频区域上的具有最大绝对禁带结构,见图 2(a) 所示(这里蹄介质的填充率为 24%). 该结构的绝对禁带宽度为 $0.076(2\pi c/a)$, 禁带的中心频率为 $0.769(2\pi c/a)$. 图 2(b) 给出了该结构的能带分布,在能带结构图中,虚线对应 E 偏振波的能带结构,实线对应 H 偏振波的能带结构.

在低频区域搜索结构的时候,发现了一个很有意思的结构,见图 3(a), 该结构的绝对禁带宽度为

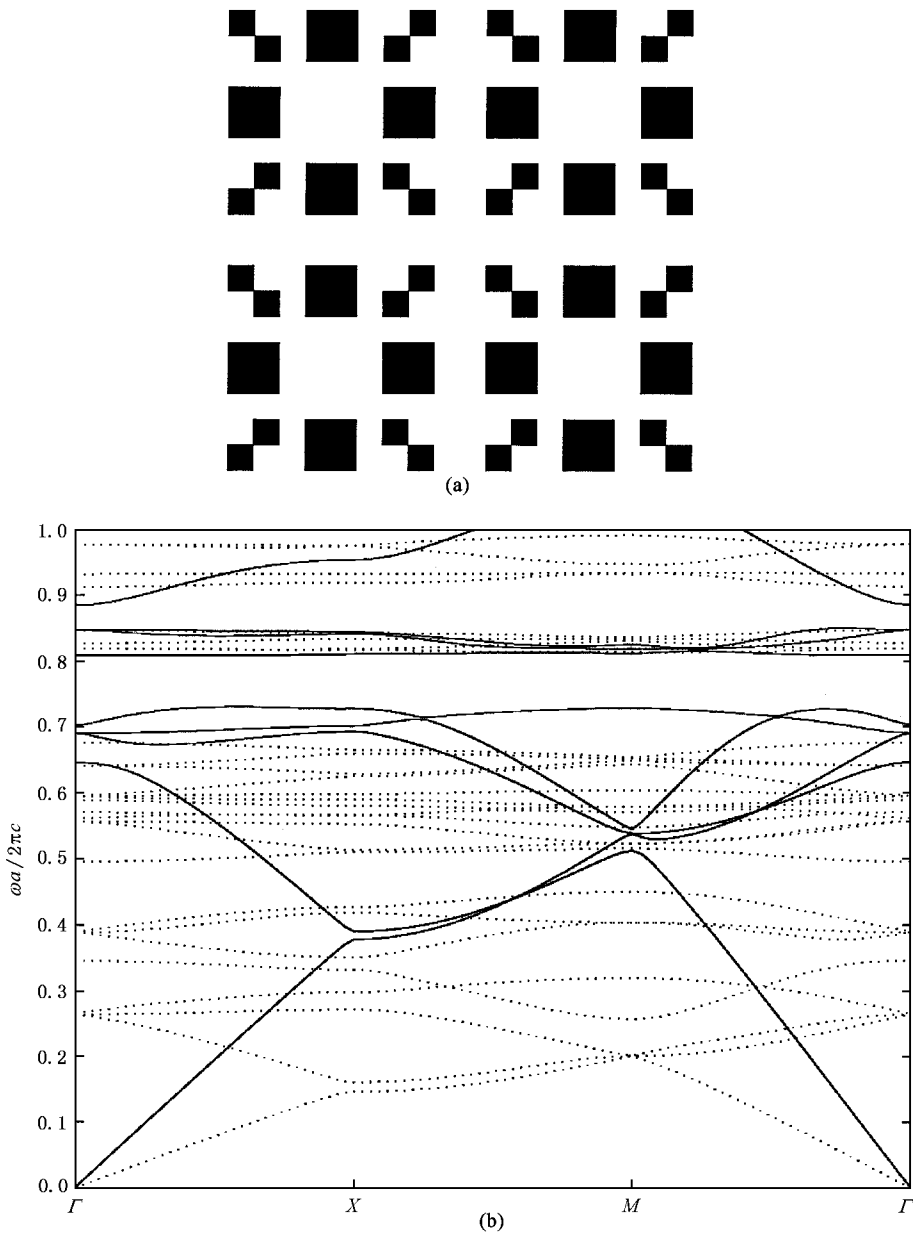


图2 (a)为低频区域上具有最大绝对禁带的结构;(b)为该结构的能带分布

$0.058(2\pi c/a^*)$, 禁带的中心频率为 $0.774(2\pi c/a^*)$. 如果换个方向看, 实际上, 这是一个用棒堆积成的一个正方网格结构, 见图 3(b). 事实上, 图 3(a) 我们选取的原胞并不是最小的可重复单元, 如果选取如图 3(b) 虚线框作为原胞, 那么这种结构的绝对禁带就变为原来的 $2^{-1/2}$ 倍, 即 $0.041(2\pi c/a)$, 这里 $a = 2^{-1/2} a^*$. 由于这种结构很简单, 不难在实验室加工, 因此我们对这个结构很感兴趣.

在各向同性的介质中, 仇昱等^[17] 计算过这种光子晶体, 发现不存在绝对禁带. 正是由于各向异性材料产生的对称性破坏的影响, 这种结构才具有绝对

禁带. 由于我们研究的晶体具有如下的对称性: 相对于 x 轴和 y 轴都反射对称, 绕 z 轴旋转 90° 对称. 这种结构就只有一个变量就是棒的宽度 $2w$ (见图 3(b)). 通过优化得到这种结构具有最大禁带的结构参量. 图 4(a) 表示的是禁带宽度与棒的半宽度的关系, 发现当 $w = 0.0168a$ 时, 该结构具有最大的禁带宽度 $\Delta\omega = 0.0574(2\pi c/a)$, 同时从图 4(b) 看到, 当 $w = 0.0168a$ 时, 禁带宽度与禁带的中心频率之比也最大 $\Delta\omega/\omega_c = 11.782\%$ (ω_c 为禁带的中心频率), 这种结构非常的简单而且不难在实验室加工.

事实上, 同时让我们感兴趣的是, 能否在高频范

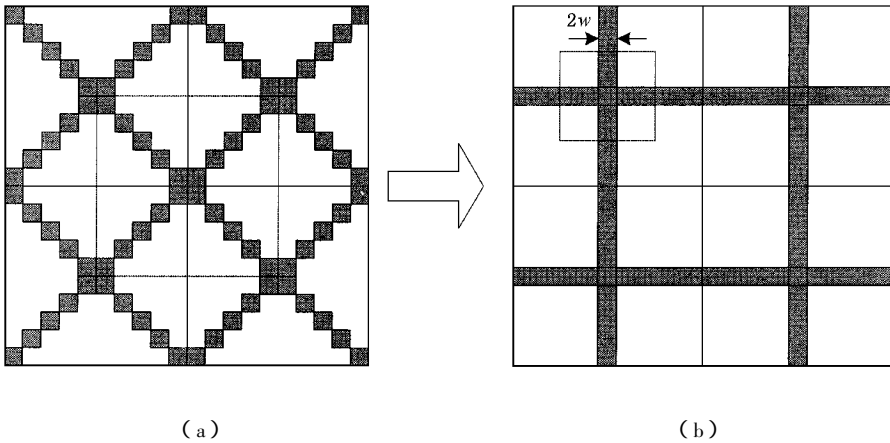


图 3 一个很简单的正方网格状的光子晶体 虚线框为我们选取的原胞的大小

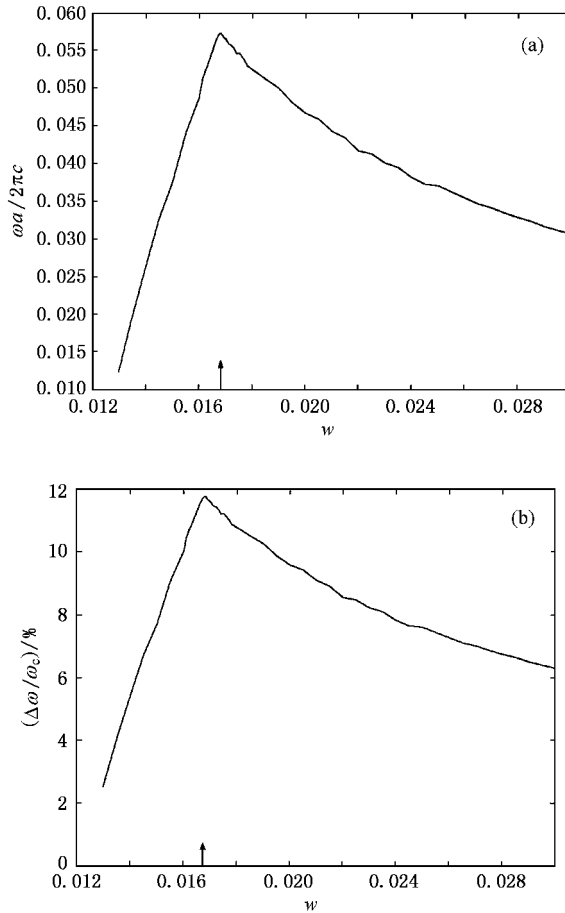


图 4 (a)为禁带宽度 w 与棒的半宽度 $\omega a/2\pi c$ 的关系 (b)为禁带宽度 w 与禁带的中心频率之比 $\Delta\omega/\omega_c$ 的关系

围内找到较大的禁带. 因为对于一定的工作波长(例如光通讯波长 $1.55\mu\text{m}$), 如果能在高频范围内找到较大的禁带, 这样, 对应于光子晶体的晶格常量将变大, 有利于我们实验制造. 同样, 运用上述的方法我们在高频带区域上找到具有最大绝对禁带的结构见

图 5(a) (这里蹄介质的填充率为 20%). 这个结构的绝对禁带宽为 $0.1(2\pi c/a)$, 它的中心频率为 $1.653(2\pi c/a)$. 该结构的能带分布为图 5(b) 所示, 同样虚线对应 E 偏振波的能带结构, 实线对应 H 偏振波的能带结构.

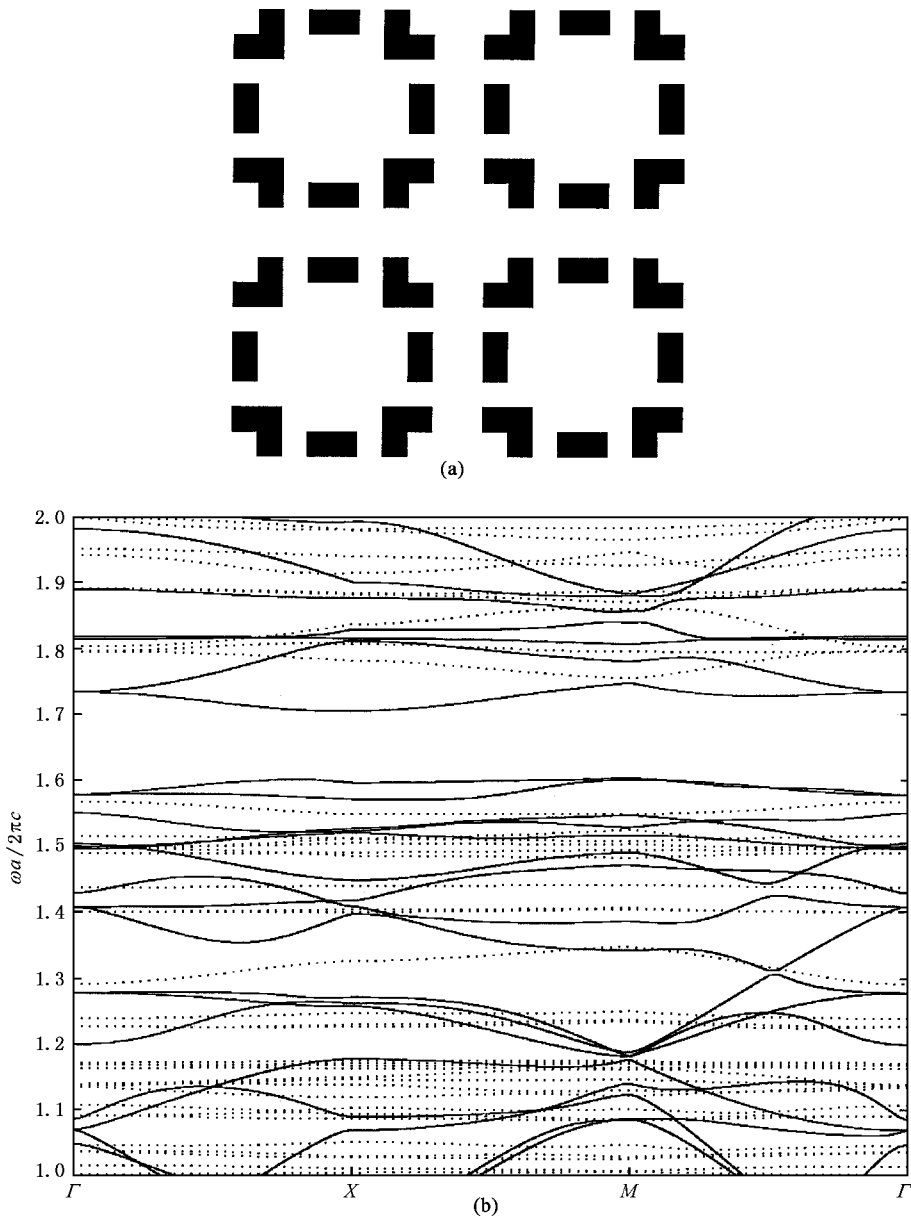


图5 (a)为高频区域上具有最大绝对禁带的结构 (b)为该结构的能带分布

总之,我们采用一种设计大的绝对禁带正方形结构二维光子晶体的有效途径,运用一种改进的平面波展开法,在低、高频区域上获得了具有绝对禁带宽度分别为 $0.076(2\pi c/a)$ 和 $0.1(2\pi c/a)$ 的两种二维光子晶体结构。据我们所知,这是目前设计出的较宽

的绝对禁带的结构,尤其是高带上的那种结构。同时我们在低频区域发现一种很容易加工的正方形网格结构的光子晶体,通过优化,找到它的最大禁带光子晶体的禁带宽度为 $\Delta\omega = 0.0574(2\pi c/a)$,禁带宽度与禁带的中心频率之比为 $\Delta\omega/\omega_c = 11.782\%$ 。

[1] Joannopoulos J D, Villeneuve P R and Fan S 1997 *Nature* **386** 143

[2] Anderson C M and Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949

[3] Kee C S, Kim J E and Park H Y 1997 *Phys. Rev. E* **56** R6291

[4] Qiu M and He S L 1999 *Phys. Rev. B* **60** 10610

[5] Villeneuve P R and Piche M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4969

[6] Cassagne D, Jouanin C and Bertho D 1995 *Phys. Rev. B* **52** R2217

- [7] Wang R Z , Wang X H , Gu B Y and Yang G Z 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 4307
- [8] Wang X H , Gu B Y , Li Z Y and Yang G Z 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11417
- [9] Zhuang F *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 355 (in Chinese) 庄飞等 2002 *物理学报* **51** 355]
- [10] Li Z Y , Gu B Y and Yang G Z 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2574
- [11] Ho K M , Chan C T and Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152
- [12] Pihlal M and Maradudin A A 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8565
- [13] Shen L F and He S L 2002 *J. Opt. Soc. Am. A* (in press)
- [14] Shen L F *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1133 (in Chinese) 沈林放等 2002 *物理学报* **51** 1133]
- [15] Lalanne P 1998 *Phys. Rev. B* **58** 9801
- [16] Li L 1996 *J. Opt. Soc. Am. A* **13** 1870
- [17] Qiu M and He S L 2000 *J. Opt. Soc. Am. B* **17** 1027

Large complete band gap at low and high frequencies in a two-dimensional anisotropic photonic crystal^{*}

Xiao San-Shui Shen Lin-Fang He Sai-Ling

(*State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation , Centre for Optical and Electromagnetic Research , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China*)

(Received 19 February 2002 ; revised manuscript received 21 May 2002)

Abstract

A revised plane-wave expansion method for calculating the band structure of photonic crystals is presented. Using an effective method for designing two-dimensional anisotropic photonic crystals of square lattice , we have found two structures which have a large absolute band gap in the low and high frequencies. The sizes of the absolute bandgap are $\Delta\omega = 0.076(2\pi c/a)$ with a midgap frequency of $0.769(2\pi c/a)$ and $\Delta\omega = 0.1(2\pi c/a)$ with a midgap frequency of $1.653(2\pi c/a)$ in the low and high frequencies respectively , where a is the lattice constant. Moreover , we have found a simple photonic crystal consisting of dielectric veins in air in the low frequency. The size of the absolute bandgap is $\Delta\omega = 0.0574(2\pi c/a)$ and the ratio of the bandgap width to the centre frequency of the bandgap is $\Delta\omega/\omega_c = 11.782\%$.

Keywords : photonic crystal , plane-wave expansion method , anisotropic material , complete band gap

PACC : 7820P 4270Q

^{*} Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 90101024) and by the Key Program of the Natural Science Foundation of Zhejiang Province , China (Grant No. ZD0002) .