

等效介质理论在光子晶体平面波展开 分析方法中的应用

沈林放 何赛灵 吴 良

(浙江大学光学仪器国家重点实验室, 光与电磁波研究中心, 杭州 310027)

(2001 年 4 月 15 日收到 2001 年 10 月 3 日收到修改稿)

应用等效介质理论, 提出了一种理论分析光子晶体的新平面波展开法, 通过计算光子晶体的能带作收敛性分析, 结果表明, 新方法具有精度高、收敛快的优点, 明显优于目前通用的二种平面波展开法; 与已有的理论方法相比, 新平面波展开法更适用于分析任意介电分布的高维光子晶体结构。

关键词: 光子晶体, 平面波展开法, 禁带

PACC: 7820P, 4270Q

1. 引 言

光子晶体是近年来发展迅猛的科学研究领域^[1-3]。光子晶体是一种介电材料周期性排列结构, 它对光或电磁波存在禁带——频率区间, 光子晶体禁止该频带内的任何电磁波传播。在光子晶体中引入点缺陷, 可制成理想的谐振腔, 这种谐振腔可改变原子的自发辐射^[4,5]; 在光子晶体中引入线缺陷, 可制成新型波导, 这种波导无弯曲损耗^[6]。光子晶体的出现, 不仅引入了光与物质相互作用的新概念和新现象, 而且将在光信息技术上引发一场革命。

光子晶体是一种光波长尺寸上的周期结构, 目前光子晶体的实验技术还未成熟。由于光在光子晶体中的行为可以用 Maxwell 方程精确描述, 理论研究已成为光子晶体研究的重要内容。光子晶体的理论研究通常涉及大规模的数值模拟, 所以寻找精确、快捷的理论方法一直是理论研究的重要课题之一。人们已提出了多种理论分析方法, 如平面波展开法^[7-9], 有限差分时域(FDTD)法^[10,11], 转移矩阵法^[12]等, 其中平面波展开法是提出最早、应用最广的方法, 该方法具有简便直观、结果完整的优点。在实际应用中, 平面波展开法通常又有两种形式, 一是所谓的常规平面波展开法^[7,8], 另一种是 Ho 等人提出的方法^[9]。已有的研究表明, 这两种方法都存在慢收敛的缺点, 从而限制了它们的应用, 如用平面波展

开法难以精确求解光子晶体的缺陷模、光子晶体波导的本征模等。

平面波展开法慢收敛的原因在于光子晶体的介电常数分布存在着间断点。我们认为, 等效介质理论^[13]是解决不连续介质物理问题的有效途径, 把等效介质理论应用到平面波展开法中, 必将大大改善理论方法的收敛性。为了能在微型计算机上进行理论方法收敛性的数值分析, 我们将以计算一维、二维光子晶体的能带为例。本文提出的新方法可以推广到三维光子晶体。

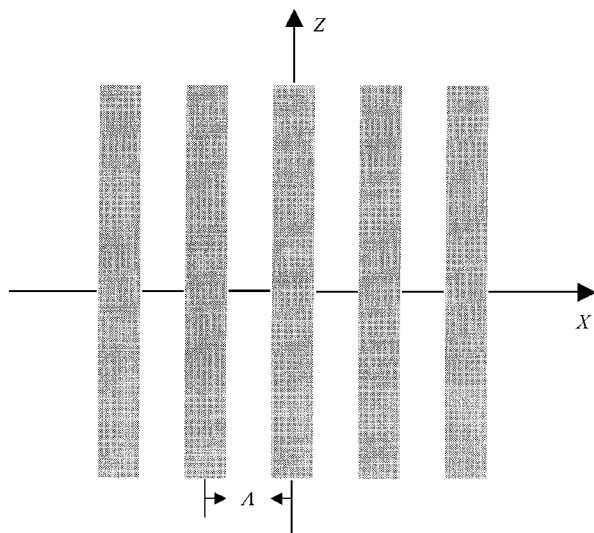


图 1 一维光子晶体结构示意图(Λ 为光子晶体的周期长度)

2. 平面波展开法

为了简洁地表达等效介质理论在平面波展开法中的应用方法,我们先分析一维光子晶体的光子能带.考虑一维光子晶体如图 1,两种介质沿 x 轴交替周期排列.这种结构存在着两种电磁模式,即 E 偏振和 H 偏振,前者 $E = E_y \hat{y}$,后者 $E = E_x \hat{x} + E_z \hat{z}$.如果电磁波仅沿 x 轴方向传播,则 $E_x = 0$,上述两种模式简并.我们将分析 H 偏振模,这种模式物理内容较为丰富.光子晶体的 H 偏振模式场可用如下 Maxwell 方程组描述

$$i\beta E_x - \frac{\partial}{\partial x} E_z = i\omega\mu_0 H_y, \quad (1a)$$

$$-\beta H_y = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x, \quad (1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} H_y = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_z, \quad (1c)$$

这里 β 是场沿 z 方向的传播常数, ϵ_0 和 μ_0 分别是真空介电常数和真空磁导率.对相对介电常数 $\epsilon(x)$, $E_{x,z}$ 和 H_y 作 Fourier 级数展开

$$\epsilon = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \epsilon_m \exp(iq_m x),$$

$$E_{x,z} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} s_{x,y,m} \exp\{i(q_m + k_x)x\} \exp(i\beta z),$$

$$H_y = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m \exp\{i(q_m + k_x)x\} \exp(i\beta z),$$

这里 $q_m = 2\pi m/\Lambda$, Λ 是光子晶体的周期长度.将上述表达式代入方程(1a)–(1c),可以得到如下代数方程:

$$\beta S_x - \mathbf{K} S_z = \frac{\omega}{c} U,$$

$$\beta U = \frac{\omega}{c} \mathbf{E} S_x,$$

$$\mathbf{K} U = \frac{\omega}{c} \mathbf{E} S_z, \quad (2)$$

其中,向量 U 定义为 $U = (\dots, u_{-m}, \dots, u_0, \dots, u_m, \dots)$.向量 S_x 和 S_z 的定义与 U 类似.矩阵 \mathbf{K} 和 \mathbf{E} 分别定义为 $\mathbf{K}_{m,n} = (q_m + k_x) \delta_{m,n}$, $\mathbf{E}_{m,n} = \epsilon_{m-n}$.从方程(2)可推导出本征值方程

$$(\mathbf{K} \mathbf{E}^{-1} \mathbf{K} + \beta^2 \mathbf{E}^{-1}) U = \frac{\omega^2}{c^2} U. \quad (3)$$

显然,这对应 Ho 方法应用的本征值方程.如果先对方程(1b)和(1c)两边除以 ϵ 函数,再做 Fourier 变换,则得到的本征值方程是

$$(\mathbf{K} \mathbf{A} \mathbf{K} + \beta^2 \mathbf{A}) U = \frac{\omega^2}{c^2} U, \quad (4)$$

这里,矩阵 $\mathbf{A}_{m,n} = a_{m-n}$, a_i 是周期函数 $1/\epsilon$ 的 Fourier 级数展开系数.

方程(4)对应常规平面波展开法的本征值方程,在先前的文献中都是直接从波方程 $\nabla \times [1/\epsilon] \nabla \times \mathbf{H} = (\omega^2/c^2) \mathbf{H}$ 中导出的. Ho 等人认为无穷矩阵 $\mathbf{A} = \mathbf{E}^{-1}$,他们先用这个关系式改写方程(4)而得到方程(3),然而再做平面波截断,以改善常规平面波展开法的收敛性.需要指出的是,由于 ϵ 是个间断函数,实际上无穷矩阵 $\mathbf{A} \neq \mathbf{E}^{-1}$.以上的理论分析表明, Ho 等人的方程实际上可以合理地由 Maxwell 方程组导出.

3. 等效介质理论的应用

下面给出等效介质理论在平面波展开法中的应用途径.在一个光子晶体结构周期内对 E 和 ϵ 取样,为此把周期单元 $[-\Lambda/2, \Lambda/2]$ 均匀分成 $2N+1$ 个小区域,每个小区域中心的场 E_m ($m = -N, -N+1, \dots, 0, \dots, N-1, N$) 用该区域的平均场来表示.应用等效介质理论^[13],小区域的介电性质可用如下等效介电张量来表示

$$\vec{\epsilon}_m = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp m} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\parallel m} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel m} \end{pmatrix},$$

这里 $\epsilon_{\perp m} = \epsilon_1 \epsilon_2 (f_{1,m} \epsilon_2 + f_{2,m} \epsilon_1)$, $\epsilon_{\parallel m} = f_{1,m} \epsilon_1 + f_{2,m} \epsilon_2$, $f_{1,m}$ 和 $f_{2,m}$ 分别为小区域 m 内介质 ϵ_1 和 ϵ_2 的填充率,有 $f_{1,m} + f_{2,m} = 1$.

磁场 H_y 是连续函数,我们用有限个平面波来近似,即

$$H_y = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \sum_{n=-N}^N u_n \exp\{i(q_n + k_x)x\} \exp(i\beta z) \quad (5)$$

将(5)式代入(1b)和(1c)式(注意 ϵ 用 $\vec{\epsilon}$ 来替代),可求得

$$E_{x,m} = \frac{c}{\omega} \beta \epsilon_{\perp m}^{-1} \sum_{n=-N}^N u_n \exp\{i(q_n + k_x)x_m\} \exp(i\beta z),$$

$$E_{z,m} = -\frac{c}{\omega} \epsilon_{\parallel m}^{-1} \sum_{n=-N}^N (q_n + k_x) u_n \times \exp\{i(q_n + k_x)x_m\} \exp(i\beta z),$$

$$(m = -N, -N+1, \dots, 0, \dots, N-1, N). \quad (6)$$

用平面波拟合 E_x 和 E_z ,即

$$E_x(x, z) = \frac{c}{\omega} \beta \sum_{n=-N}^N R_n \exp\{i(q_n + k_x)x\} \exp(i\beta z),$$

$$E_z(x, z) = -\frac{c}{\omega} \sum_{n=-N}^N T_n \exp\{i(q_n + k_x)x\} \exp(i\beta z),$$
(7)

则有

$$R_n = \frac{1}{2N+1} \sum_{i=-N}^N \left[\sum_{m=-N}^N \epsilon_{\perp m}^{-1} \exp(-iq_{n-i}x_m) \right] u_i,$$

$$T_n = \frac{1}{2N+1} \sum_{i=-N}^N \left[\sum_{m=-N}^N \epsilon_{\parallel m}^{-1} \exp(-iq_{n-i}x_m) \right] u_i.$$

将(7)式代入(1a)经整理可得到新本征方程

$$(\mathbf{K}\mathbf{A}'\mathbf{K} + \beta^2\mathbf{A}'')\mathbf{U} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{U}. \quad (8)$$

这里, 向量 \mathbf{U} 和矩阵 \mathbf{K} 的定义与先前一致, 矩阵 \mathbf{A}' 和 \mathbf{A}'' 定义为

$$\mathbf{A}'_{ij} = \frac{1}{2N+1} \sum_{m=-N}^N \epsilon_{\parallel m}^{-1} \exp(-iq_{i-j}x_m),$$

$$\mathbf{A}''_{ij} = \frac{1}{2N+1} \sum_{m=-N}^N \epsilon_{\perp m}^{-1} \exp(-iq_{i-j}x_m).$$

这里 $i, j = -N, -N+1, \dots, 0, \dots, N-1, N$; $q_{i-j} = 2\pi(i-j)\Lambda, x_m = m\Lambda(2N+1)$.

应用等效介质理论, 我们推导出了一维光子晶体的新本征方程. 在二维光子晶体情形, 同样可以对一个周期单元进行均匀分割取样, 这时小区域的等效介电张量通常有非零非对角项. 先设定 \mathbf{H} 的平面波表达式, 从方程 $(\nabla \times \mathbf{H})_{mm} = -i\omega\epsilon_0 \vec{\epsilon}_{mm} \mathbf{E}_{mm}$ 可推导出 \mathbf{E}_{mm} 表达式, 然而拟合 \mathbf{E} 场的分布, 再代入方程 $(\nabla \times \mathbf{E})_{mm} = i\omega\mu_0 \mathbf{H}_{mm}$, 便可导出二维光子晶体的新本征方程. 三维光子晶体的相应本征方程也可以类似得到.

4. 数值分析

我们以文献[14]中的一维光子晶体结构为例进行数值分析, 基本参数为 $\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 13; \Lambda_1 = \Lambda_2 = \Lambda/2$. 这里 Λ_1 和 Λ_2 分别是介质层 ϵ_1 和 ϵ_2 的厚度. 文献[14]给出了在 $\beta = 0$ 情形该结构的带隙结构. 下面通过计算这个光子晶体的(光子)能带来分析三种平面波展开法的收敛性. 为不失一般性, 我们将固定 $k_x = \pi/2\Lambda$.

首先考虑 $\beta = 0$ 特殊情形, 这时光仅沿垂直介质层方向传播. 图 2(a)(b) 分别给出了第一、第二能带上对应 $k_x = \pi/2\Lambda$ 点的归一化频率(对应光子能量)的收敛性. 我们看到, Ho 方法和本文提出的新方

法的收敛性都显著优于常规平面波展开法. 数值分析表明, 在第一能带上, 归一化频率的相对误差要小于 1%, 则常规平面波展开法要求平面波个数大于 41, 而另两种只要求大于 3 个; 在第二能带上, 相应的要求是常规平面波展开法是 81 个, Ho 方法是 5 个, 而新方法是 7 个. $\beta = 0$ 是一个特殊情况, 这时的电场分布是连续的.

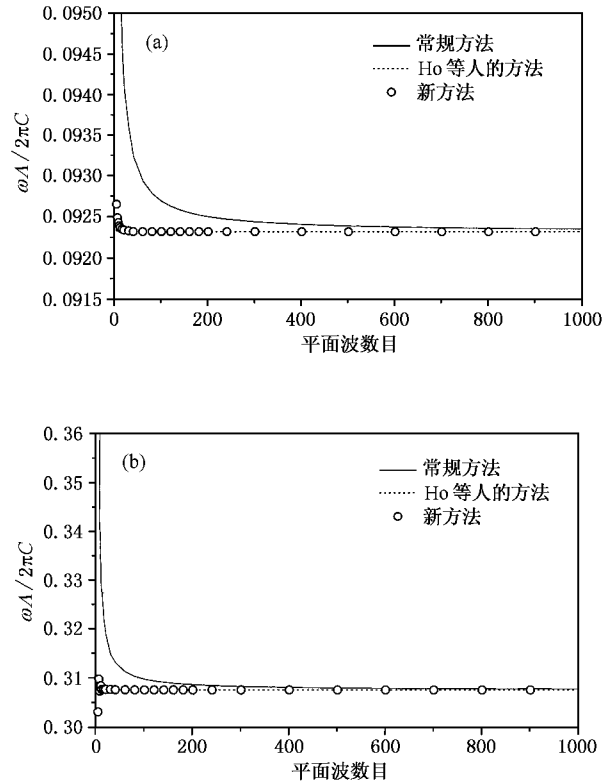


图 2 用三种不同平面波展开法计算得到的归一化频率随平面波数目的变化 (a) 在第一能带上 (b) 在第二能带上; $\beta = 0, k_x = \pi/2\Lambda$

现在来考虑一般情形, 即 $E_x \neq 0$. 取 $\beta = \pi/\Lambda$, 这时在介质界面上有 $E_x/E_z \approx 1$, 电场在光子晶体中的分布不再是连续. 图 3(a)(b) 给出了第一、第二能带上归一化频率的收敛性. 数值分析表明, 在较高的能带上, Ho 方法的收敛性并不优于常规平面波展开法, 这一点可以从图 3(b) 看出, 而新方法仍具有快收敛性. 在第二能带上, 我们发现, 归一化频率的相对误差要小于 1%, 则已有的两种平面波展开法都要求平面波的个数大于 31, 而新方法在 7 个平面波时的相对误差仅为 0.6%. 在第一能带上, 新方法相应要求的平面波个数是 13, 略优于 Ho 方法, 但明显优于常规平面波展开法.

以上数值分析表明, 应用等效介质理论, 可以显

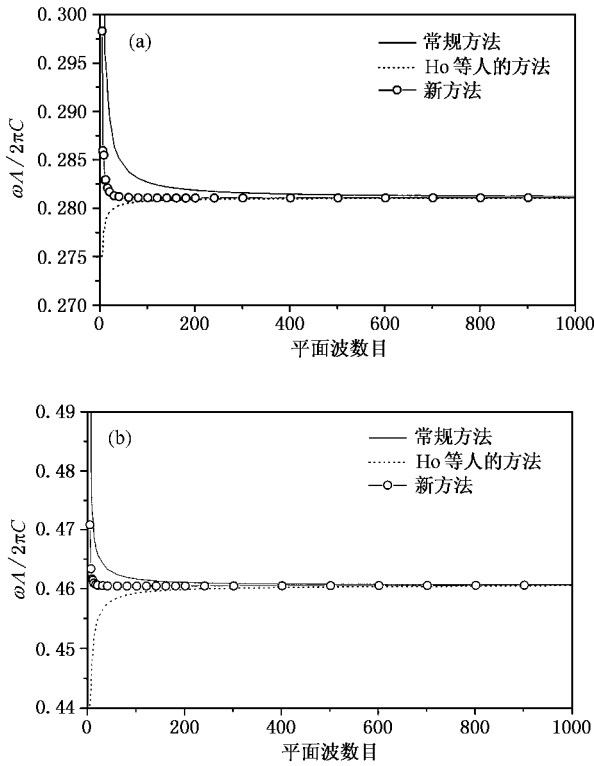


图 3 用三种不同平面波展开法计算得到的 H 偏振模归一化频率随平面波数目的变化 (a) 在第一能带上 (b) 在第二能带上; $\beta = \pi/\Lambda, k_x = \pi/2\Lambda$

著地改善平面波展开法的收敛性. 然而一维光子晶体比较特殊, 在二维和三维光子晶体情形, 等效介电理论给出的垂直方向和水平方向的有效介电常数和一维情况不同, 这时的等效介电张量通常有非零非对角项. 为了表明这种情况下, 等效介电理论在平面波展开法中的应用仍然有效, 我们计算了二维光子晶体(圆介质柱在空气中正方排列)的 H 偏振模(或 TE 模)在 M 点的本征频率. 等效介电张量在二维情形有形式

$$\vec{\epsilon}_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} n_1^2 \epsilon_{\perp} + n_2^2 \epsilon_{\parallel} & n_1 n_2 (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) & 0 \\ n_1 n_2 (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) & n_1^2 \epsilon_{\parallel} + n_2^2 \epsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel} \end{bmatrix},$$

这里 $\epsilon_{\perp} = \epsilon_1 \epsilon_2 (f_1 \epsilon_2 + f_2 \epsilon_1)$, $\epsilon_{\parallel} = f_1 \epsilon_1 + f_2 \epsilon_2$, f_1 和 f_2 分别为介质 ϵ_1 和 ϵ_2 在小面元内的填充率, 两种介质界面法向的单位矢量为 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, 0)$. 类似于已有的平面波展开法, 对磁场 \mathbf{H} 的平面波展开采用如下形式:

$$\mathbf{H} = \sum_{m, n = -N}^N \mathbf{U}_{mn} \exp(i2\pi(m\hat{x} + n\hat{y})/a) \exp(i\mathbf{k}r), \quad (9)$$

这里 a 为光子晶体周期; $\mathbf{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$, $k_x, k_y \in [-\pi/a, \pi/a]$. 数值计算采用的二维光子晶体参数为^[14] $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 8.9$ (介质柱), $R/a = 0.1$ (R 为介质柱半径).

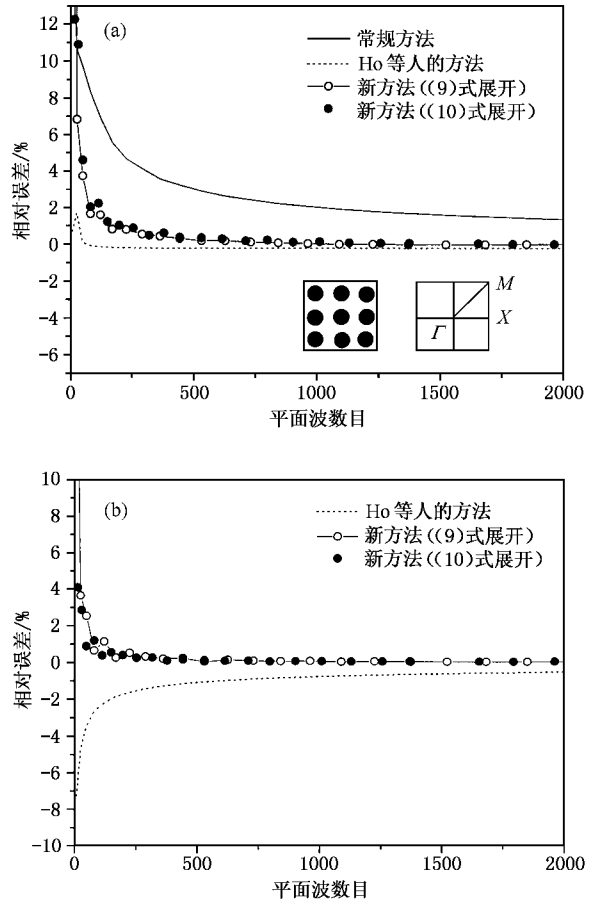


图 4 二维光子晶体情形下三种平面波展开法的收敛速度比较 (波矢 \mathbf{k} 固定在 M 点) (a) 在第一能带上 (b) 在第二能带上

图 4 (a) 给出了三种平面波展开法的相对计算误差随平面波数目的变化关系. 可以看出, 常规平面波展开法的收敛性很差, 相对误差小于 1% 要求平面波数目大于 3249 个; Ho 等人的方法与本文的新方法则表现了很好的收敛性. 但是, Ho 等人方法的快收敛性只是表现在第一能带上 (M 点), 在第二能带上则收敛很慢, 相对误差 1% 对应的所需平面波数目为 625, 见图 4 (b). 相比之下, 本文提出的新方法在二个带上都表现了良好的收敛性, 相对误差小于 1% 分别要求平面波数目大于 169 个 (第一带) 和 121 个 (第二带).

需要指明的是, 上述计算中采用的场的平面波展开形式 (9 式), 似乎没有很好地遵循低价平面波优先的原则. 从低价平面波优先出发, 场的平面波展开似乎应采用如下形式:

$$\mathbf{H} = \sum_{n=-N}^N \sum_{|m| \leq \sqrt{N^2 - n^2}} \mathbf{U}_{mn} \exp\{i2\pi(m\hat{x} + n\hat{y})\} a \} \times \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (10)$$

对上述二维算例,我们分析了在(10)式平面波展开形式下新方法(应用了等效介质理论)的收敛性质,结果表明,新方法仍表现出了快收敛性,如在前面的例子中,在第一、第二带上(k 在 M 点)相对误差小于1%分别要求平面波数目大于197个和81个(见图4(a)和(b)).综合先前的结果,可以肯定本文的新方法确实优于已有平面波展开法.

5. 总结与讨论

应用等效介质理论,我们提出了一种新平面波展开法,通过计算一维、二维光子晶体的能带,结果表明,新方法具有精度高、收敛快的优点,明显优于目前通用的二种平面波展开法.根据平面波展开算法的特点,平面波数目降低到 $1/N$ 倍,则内存需要降低到 $1/N^2$ 倍,计算时间降低到 $1/N^3$ 倍,所以新平

面波展开法有利于在微型计算机上进行复杂的光子晶体数值分析.我们的理论工作也表明,这种新方法容易推广到三维光子晶体,结合超胞技术,这种新方法可以用于分析光子晶体的缺陷模和光子晶体波导的本征模.新平面波展开法具有快收敛性,主要在于应用等效介质理论较好地处理了光子晶体的物理边界问题,而已有的平面波展开法在这个问题上没有做任何努力.

已有的平面波展开法在计算三维光子晶体能带结构以及光子晶体缺陷模和光子晶体波导本征模(包括二维情形)时,通常遇到了较严重的收敛性或计算精度问题.我们没有在这种情况下做新方法与已有平面波展开法的收敛性比较,主要是用已有平面波展开法难于获得数值问题的收敛点.我们认为,本文所示的数值分析足以表明,与已有的平面波展开法相比,新平面波展开法具有非常可靠的快收敛性,更适于分析三维光子晶体以及光子晶体缺陷模和光子晶体波导.

- | | |
|---|---|
| <p>[1] Krauss T F and De La Rue R M 1999 <i>Progress in Quantum Electronics</i> 23 51</p> <p>[2] Scherer A , Doll T , Yablonovitch E <i>et al</i> 1999 <i>IEEE J. Lightwave Tech.</i> 17 1928</p> <p>[3] He Y J <i>et al</i> 2001 <i>Acta Phys. Sin.</i> 50 892 [何拥军等 2001 <i>物理学报</i> 50 892]</p> <p>[4] John S 1987 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 58 2486</p> <p>[5] Yablonovitch E 1987 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 58 2059</p> <p>[6] Mekis A 1996 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 77 3787</p> <p>[7] Plihal M and Maradudin A A 1991 <i>Phys. Rev. B</i> 44 8565</p> | <p>[8] Jin C J <i>et al</i> 1999 <i>Chin. Phys. Lett.</i> 16 20</p> <p>[9] Ho K M , Chan C T and Soukoulis C M 1991 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 67 2295</p> <p>[10] Chan C T , Yu Q L and Ho K M 1995 <i>Phys. Rev. B</i> 51 16635</p> <p>[11] Qiu M and He S 2000 <i>J. Appl. Phys.</i> 87 8268</p> <p>[12] Pendry J B and Mackinnon A 1992 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 69 2772</p> <p>[13] Aspnes D E 1982 <i>Am. J. Phys.</i> 50 704.</p> <p>[14] Joannopoulos J D , Meade R D and Winn J N 1995 <i>Photonic Crystals</i> (Princeton NJ :Princeton University Press)</p> |
|---|---|

The application of effective-medium theory in the plane-wave expansion method for analyzing photonic crystals

Shen Lin-Fang He Sai-Ling Wu Liang

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

(Received 15 April 2001 ; revised manuscript received 3 October 2001)

Abstract

By applying the effective-medium theory a new plane-wave expansion method is presented. It is shown that through calculating the frequency bands of a photonic crystal the new method has the advantages of fast convergence and high accuracy over the two plane-wave expansion methods commonly used. The new method is more suitable than other methods for analyzing high-dimensional photonic crystals with an arbitrary shape of inclusions.

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

PACC : 7820P , 4270Q