

二维金属光子晶体的带结构研究^{*}

路志刚[†] 宫玉彬 魏彦玉 王文祥

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2005 年 7 月 8 日收到, 2005 年 12 月 14 日收到修改稿)

采用一种新的平面波展开法研究金属光子晶体的带结构, 即在传统平面波展开法的基础上, 将“原问题”拓展, 引入一个“新问题”, 通过求解“新问题”得到“原问题”的带结构, 并论证了它们之间的关系. 为了准确求解“新问题”, 引入辅助函数, 将其色散关系等价为一个积分微分本征方程, 求解这个本征方程得到“新问题”的带结构, 从而由此导出“原问题”的带结构. 最后, 以正方晶格二维金属光子晶体为例, 进行数值计算, 得到了满意的结果.

关键词: 金属光子晶体, 平面波展开法, 带结构, 正方晶格

PACC: 7125P, 4270Q

1. 引 言

自 Yablonovitch 提出光子晶体概念以来^[1], 它已成为人们研究的热点, 众所周知, 它的最大特征是存在完全光子带隙(PBG). 电磁波在周期结构中的传播是用能带理论来描述的, 一般来讲, 采用能带理论精确计算带结构是很困难的, 尤其对于金属结构更是如此. 目前, 已经提出了几种分析方法, 如 N 阶法、传输矩阵法和平面波展开法等. N 阶法是基于时域有限差分原理的, 它的优点是计算量与系统的大小成正比, 并且可以得到场分布, 传输矩阵法是一种多散射方法, 适合于计算复杂晶体结构的透射、反射系数, 对光子晶体物理概念的理解帮助不大. 而平面波展开法则能够从物理概念上解释光子晶体的带结构, 是一种重要的方法, 它要求电磁波在倒格矢空间展开, 将麦克斯韦方程转化为一个矩阵本征值问题, 其中本征矢代表了电磁波的本征模式, 本征值代表了相应的本征频率. 这个方法的不足是限定于求解介质光子晶体, 原因是它假定了媒质的介电系数是有限且非色散的, 它的另一个不足是收敛性问题, 尤其对于高介电系数比、高填充率和高工作频率^[2]更为敏感, 这主要与介电系数的不连续性有关, 也就是与电磁场的不连续性有关, 在进行平面波展开时, 这些不连续性引起了相关物理量在介质交界面上的

强烈波动, 为了用平面波展开法比较精确的计算光子晶体的带结构, 需要大量的展开项, 这将给计算带来硬件和软件上的高要求. 对于金属光子晶体, 电磁场的不连续性更为突出, 而且金属柱的介电常数随频率变化, 使得传统的平面波方法失效.

为了从物理上理解金属光子晶体, 本文采用了一种新的方法, 即所谓的以积分方程为基础的混合平面波展开法, 求解二维金属光子晶体的带结构. 下面首先给出这种方法的数学推导, 然后以正方晶格为例进行数值计算, 验证所述方法的正确性.

2. 平面波展开法

考虑二维晶格金属柱, 如图 1 所示, 晶格基矢为 a_1 和 a_2 , 矩形框区域为 WS 晶胞, 用 $\Omega = \{\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 : |\alpha_i| \leq 1/2\}$ 表示, 在单位晶胞内, 金属柱区域用 D 表示, 边界用 ∂D 表示, 相应的外单位法向量用 n 表示. 引入倒格矢量 b_1 和 b_2 , 与晶格基矢的关系为 $a_m \cdot b_n = 2\pi\delta_{m,n}$, 其中 $\delta_{m,n}$ 是 Kronecker 符号. 为了计算电磁本征模式, 设平面波垂直金属柱所在的轴 $z = x_3$ 入射, 对于二维光子晶体, 类似于波导的情况, 可以定义 TE 模式和 TM 模式, 即磁场平行于柱体的 TE 模式和电场平行于柱体的 TM 模式. 二维平面内的点用 $r = (x_1, x_2)$ 表示, 对于 TM 模式, 令 $\psi = E_z$, 而 TE 模式令 $\psi = H_z$, 则 ψ 满足

^{*} 国家自然科学基金重点项目(批准号: 60532010), 霍英东教育基金会高等院校青年教师基金(批准号: 91063), 国家自然科学基金(批准号: 60401005)资助的课题.

[†] E-mail: lzgchun@uestc.edu.cn

$$\nabla^2 \psi + \beta^2 \psi = 0, \quad (1)$$

$$\psi^+ = 0, \mathbf{r} \in \partial D(\text{TM}), \quad (2a)$$

$$\partial \psi^+ / \partial \mathbf{n} = 0, \mathbf{r} \in \partial D(\text{TE}). \quad (2b)$$

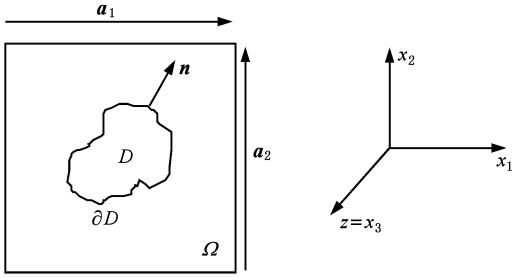


图1 正方晶格单位 WS 晶胞示意图

这里 $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$ 是波矢量, $\partial/\partial \mathbf{n}$ 是法向导数, ∇ 是横向梯度, $\beta = \omega/c$ 是自由空间波数, ω 是辐射电磁波的角频率, c 是真空光速. 根据 Bloch 定理, 函数 ψ 满足

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \exp(\mathbf{j} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n), \quad (3)$$

其中 $\mathbf{R}_n = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2$, l_1, l_2 分别是任意整数下标, 可见函数 ψ 具有平移对称性.

对于 TM 波, ψ 在柱体边界上满足狄利克雷边界条件(2a), 而 TE 波则满足诺埃曼边界条件(2b), 上标“+”表示相关的场量位于边界 ∂D 之外.

对于在倒格矢空间中给定的 \mathbf{k} (1) 式存在无穷平凡解, 表示为 $\beta = \beta(\mathbf{k})$, 这是一个多值函数, 而这个多值函数 $\beta(\mathbf{k})$ 就是所求解的带结构的数学表示.

在(1)式中, ψ 定义在金属柱之外的区域上, 从数学上可以将 ψ 的定义域扩展到金属柱内部, 即在整个空间上求解 ψ . 对于 TM 模式, 只需要在金属柱内定义 $\psi = 0$ 即可, 而对于 TE 模式, 则令 ψ^+ 为 ∂D 外部的解, ψ^- 为 ∂D 内部的解, 它们在边界上连续. 这样 ψ 在单位 WS 晶胞内处处满足(1)(2a)和(2b)式, 求解新定义域内的 ψ 就是所谓的“新问题”. “新问题”与“原问题”的区别是拓展了 ψ 的定义域, 即在“原问题”的基础上引入了金属柱的内部电磁模式. 这些电磁模式是导体内部狄利克雷问题的解^[3,4], 它们在金属柱外部为零, 而且与波矢、极化方向无关, 在带结构图上表现为一些非色散平坦带, 可以用导波场论精确求解. 可见, “新问题”的带结构是由金属光子晶体的带结构和一些非色散带组成的.

根据上面的分析, “新问题”的本征函数在整个单位 WS 晶胞上是连续的(在边界 ∂D 上有 $\psi^+ =$

ψ^-), 但是它的一阶导数在边界上不连续, 这使得在用平面波展开法求解时, 傅里叶序列的收敛速度很慢. 为此, 引入辅助函数, 推导了与“新问题”有着相同带结构的积分微分方程, 它的本征函数将更加光滑, 收敛速度也更快.

ψ 作为“新问题”的解, 它在整个空间上连续. 引入一个辅助函数 ϕ , 使它满足

$$\nabla^2 \phi = -\beta^2 \psi, \quad (4a)$$

$$\phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \phi(\mathbf{r}) \cdot \exp(\mathbf{j} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n). \quad (4b)$$

由 ψ 的连续性和(4a)式知, 在单位 WS 晶胞内, ϕ 具有二阶连续导数(包括在边界上), 下面将证明 ϕ 是某积分微分方程的解.

定义

$$\varphi = \psi - \phi, \quad (5)$$

由(1)–(5)式得到, 对于 $\Omega - \partial D$ 内的任意一点 \mathbf{r} 有

$$\nabla^2 \varphi = 0, \quad (6a)$$

$$\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \varphi(\mathbf{r}) \cdot \exp(\mathbf{j} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n). \quad (6b)$$

由于(6a)式是齐次方程, 固 φ 存在非平凡解. 由 ψ 和 ϕ 的性质知, φ 的法向导数在边界上不连续. 为了获得 φ 的积分表示, 引入晶格格林函数 $\Phi(\mathbf{r} | \mathbf{r}')$, 满足

$$\nabla^2 \Phi_p = -e^{-\mathbf{j} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \sum_I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{r}_I), \quad (7)$$

其中 $\mathbf{r} = (x_1, x_2)$ 是场点, $\mathbf{r}' = (x'_1, x'_2)$ 是源点, $I = (i_1, i_2)$ 为整数复合下标, $\mathbf{r}_I = i_1 \mathbf{a}_1 + i_2 \mathbf{a}_2$ 表示晶格点. 函数 $\Phi_p(\mathbf{r} | \mathbf{r}')$ 具有平移对称性. 晶格格林函数的具体求解参看附录 A. 由(6a)式和(7)式, 得到恒等式

$$\begin{aligned} & \nabla' \cdot (\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi) \\ &= -\varphi(\mathbf{r}') e^{-\mathbf{j} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \sum_I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{r}_I) \end{aligned} \quad (8)$$

梯度符号上的“'”表示对 \mathbf{r}' 作用, 由(6b)式知, 对于每个晶格点有 $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I) \exp(-\mathbf{j} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_I) = \varphi(\mathbf{r})$, 因此(8)式转化为

$$\begin{aligned} & \nabla' \cdot (\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi) \\ &= -\varphi(\mathbf{r}) \sum_I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{r}_I). \end{aligned} \quad (9)$$

在单位 WS 晶胞内对(9)式两边积分, 积分变量为 \mathbf{r}' , 很明显右边的积分结果为 $-\varphi(\mathbf{r})$. 由 φ 的性质, 左边的积分为

$$\begin{aligned} \text{左边} &= \int_{\Omega} \nabla' \cdot (\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi) \mathrm{d}v' \\ &= \int_{\Omega - D} \nabla' \cdot (\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi) \mathrm{d}v' \\ &\quad + \int_D \nabla' \cdot (\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi) \mathrm{d}v' \end{aligned}$$

$$= - \int_{\partial D} (\nabla' \Phi_p(\varphi^+ - \varphi^-) - \Phi_p \nabla'(\varphi^+ - \varphi^-)) ds' + \int_{\partial \Omega} (\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi) ds'. \quad (10)$$

由(6b)式和函数 Φ_p 的性质知,函数 $(\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi)$ 也满足 Bloch 定理,具有平移对称性.由晶格的平移对称性^{5,1}知,函数 $(\nabla' \Phi_p \varphi - \Phi_p \nabla' \varphi)$ 在 WS 晶胞边界上的积分为 0,即(10)式右边第二项为 0,于是(10)式变为

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int_{\partial D} \left(\frac{\partial \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}} \cdot (\varphi^+ - \varphi^-) - \left(\frac{\partial \varphi^+}{\partial \mathbf{n}'} - \frac{\partial \varphi^-}{\partial \mathbf{n}'} \right) \cdot \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \right) ds'. \quad (11)$$

由 φ 的定义知, $\varphi^+ - \varphi^- = 0$ 结合(4a)式得到

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\partial D} f(\mathbf{r}') \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}') ds', \quad (12)$$

$$f(\mathbf{r}') = \frac{\partial \varphi^-}{\partial \mathbf{n}'} - \frac{\partial \varphi^+}{\partial \mathbf{n}'} = \frac{\partial \varphi^-}{\partial \mathbf{n}'} - \frac{\partial \varphi^+}{\partial \mathbf{n}'}. \quad (13)$$

联立(2a)(2b)和(12)式得到⁶

$$0 = \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\partial D} f(\mathbf{r}') \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}') ds', \quad (14)$$

$$0 = \frac{\partial \varphi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} + \int_{\partial D} f(\mathbf{r}') \frac{\partial \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}} ds' - \frac{1}{2} f(\mathbf{r}). \quad (15)$$

在这里,定义如下积分算符:

$$L f = \int_{\partial D} f(\mathbf{r}') \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}') ds', \quad (16)$$

$$M_{\pm} f = \int_{\partial D} f(\mathbf{r}') \frac{\partial \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}} ds' - \frac{1}{2} (\pm f(\mathbf{r})). \quad (17)$$

假设算符 L, M 可逆,则(14)和(15)式可以转化为

$$f = -L^{-1} \varphi \quad (\text{TM 模式}), \quad (18)$$

$$f = -M_+^{-1} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \quad (\text{TE 模式}). \quad (19)$$

联立(4a)和(12)式得到

$$\nabla^2 \varphi + \beta^2 (\varphi + \int_{\partial D} f \Phi_p ds') = 0, \quad (20)$$

其中函数 $\phi_{\text{exp}}(\mathbf{j}\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ 具有平移对称性,从波矢空间的角度,很容易说明(20)式的 φ 对应于“新问题”的 ψ .进一步分析知, ψ 是“新问题”的解的充分必要条件是 φ 是(20)式的一个非平凡解,即 φ 和 ψ 是等价的,它们有着相同的带结构.方程(20)就是所求的积分微分方程,它是一个本征值问题,对于给定的波矢 k ,有无穷多个波数 β 与其对应.正如上面所指出

的,由(20)式不仅可以导出“新问题”的本征方程,而且求得的本征函数将更加光滑,有着二阶连续导数,可以展开为快速收敛的傅里叶序列,它的带结构可以用平面波展开法快速求解.下面将推导(20)式对应的本征方程.

将 φ 展开为傅里叶级数

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_J A_J(\mathbf{k}) g_J(\mathbf{r}), \quad (21)$$

其中 $J = (j_1, j_2)$ 是整数复合下标, A_J 是关于波矢的函数, g_J 是一个平面波,表示为

$$g_J(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_c}} e^{-\mathbf{j}k_J \cdot \mathbf{r}}, \quad (22)$$

其中 $\mathbf{k}_J = k + j_1 \mathbf{b}_1 + j_2 \mathbf{b}_2$, $V_c = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$ 是晶胞的面积.将(21)式代入(20)式,并且同乘以 g_I^* (I 是整数复合指标),在单位 WS 晶胞内,对方程两边积分得到

$$-\frac{1}{\beta^2} A_I |k_I|^2 + A_I + \int_{\partial D} f g_I |\Phi_p| ds' = 0 \quad (23)$$

其中

$$g_I |\Phi_p| = \frac{1}{\sqrt{V_c}} \int_{\Omega} \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}') e^{\mathbf{j}k_I \cdot \mathbf{r}} d^2 \mathbf{r} \quad (24)$$

根据附录 A 将(22)式代入(24)式中,并求解积分得到

$$g_I |\Phi_p| = \frac{1}{|k_I|^2} g_I^*(\mathbf{r}'). \quad (25)$$

将(25)式代入(23)式得到

$$\frac{1}{|k_I|^2} A_I + \frac{1}{|k_I|^4} g_I |f|_{\partial D} = \frac{1}{\beta^2} A_I. \quad (26)$$

在上述方程中,定义了内积 $g |f|_{\partial D} = \int_{\partial D} g^* h ds$,其中 g 和 h 是任意函数,且定义在边界 ∂D 上.联立(18)(19)(20)和(21)式得到

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|k_I|^2} A_I - \frac{1}{|k_I|^4} \sum_J A_J g_I |L^{-1} g_J|_{\partial D} \\ &= \frac{1}{\beta^2} A_I \quad (\text{TM 波}), \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|k_I|^2} A_I - \frac{1}{|k_I|^4} \sum_J A_J g_I |M^{-1} \frac{\partial g_J}{\partial \mathbf{n}}|_{\partial D} \\ &= \frac{1}{\beta^2} A_I \quad (\text{TE 波}). \end{aligned} \quad (28)$$

方程(27)和(28)就是“新问题”的本征方程,本征值为 $1/\beta^2$,为了从数值上求解之,对(21)式的傅里叶展开序列进行截断,并对(18)和(19)式的积分方程进行离散化处理,这里采用 Nystrom 方法^{6,7,1}.

如前所述,金属光子晶体的带结构包含于“新问

题”的带结构之中,而“新问题”的带结构可以通过求解本征方程(27)和(28)得到.我们知道非色散带是与金属柱内部电磁模式的谐振频率相关的,当填充比很小,即金属柱截面很小时,金属柱内部电磁模式的谐振频率很高,即非色散带对光子晶体的低通带是没有影响的,也就是说在仅研究低通带时,可以不考虑非色散带的影响,“新问题”的色散关系近似为金属光子晶体的色散关系.

从“新问题”的带结构中提取“原问题”的带结构理论上很简单,但是实际操作却很不好掌握,常用的方法有两种:一是在计算带结构的过程中检验是否为非色散带,这种方法比较有效,但是当“原问题”的带结构比较平坦时,就容易混淆,产生错误;二是根据金属柱内部电磁模式在金属柱外部为零的事实,预先计算金属柱内部电磁模式的谐振频率,对于金属柱截面为规则形状的情形,可以用导波场论的方法解析求得^[8],下面具体介绍这种方法.

由于金属柱内部电磁模式与极化无关,这里以 TM 模式为例,对于任意的波矢 k ,由本征方程(27)和(28)求得满足方程(20)的本征函数,设 ϕ 是其中的一个本征函数,其对应的波数为 β ,检验 β 是否为导体内部电磁模式的波数,由(12)式和(18)式得到

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) - \int_{\partial D} L^{-1} \phi \cdot \Phi_p(\mathbf{r}|\mathbf{r}') ds'. \quad (29)$$

波数 β 对应于金属导体内部电磁模式的波数的充分必要条件是(29)式中的 ψ 在金属柱外面区域上为 0,由文献 6 知, ψ 在边界上的法向导数为

$$\frac{\partial \psi^\pm}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} - M_\pm L^{-1} \phi, \quad (30)$$

其中 $\partial \psi^+ / \partial \mathbf{n}$ 为金属柱外部的法向导数, $\partial \psi^- / \partial \mathbf{n}$ 为金属柱内部法向导数,若 β 对应于金属柱内部谐振模式,则 $\partial \psi^+ / \partial \mathbf{n} = 0$, $\partial \psi^- / \partial \mathbf{n} \neq 0$,类似地,若 β 不是金属柱内部模式的波数时,则有 $\partial \psi^+ / \partial \mathbf{n} \neq 0$, $\partial \psi^- / \partial \mathbf{n} = 0$.鉴于上面的分析,提出如下方法来鉴别是否为内部模式,当 $\partial \psi^+ / \partial \mathbf{n}$ 的范数远大于 $\partial \psi^- / \partial \mathbf{n}$ 的范数时,为外部模式,反之为内部模式,但是当它们相差不大时,却很难区分,这就是常说的简并,为了避免简并,必须增加平面波的展开项数.一般来讲,我们只对光子晶体的低通带感兴趣,所以只需要确定金属柱内部电磁模式的几个低谐振频率就可以了.

对于布里渊区内的任意波矢 k ,代入(27)和(28)式求解其对应的本征值,得到金属光子晶体的带结构,然后从计算得到的带结构中去掉因金属柱

内部模式而形成的非色散带就可以了.这里需要指出的是由于涉及到数值近似,前面计算得到的金属柱内部电磁模式并非确切地与带结构中所包含的内部模式相同.实际上去掉的是那些接近于内部模式的非色散带.

3. 数值计算与分析

下面,以正方晶格正方形截面金属柱光子晶体为例进行计算,设晶格常数为 b ,金属柱边长为 $2a$,在计算中截取了 49 个平面波项,积分计算采用 Nystrom 方法离散,在正方边界上取 32 个点数值求积分.对于布里渊区里的每个 k 求得其对应的本征值 $1/\beta^2$,在奔腾 IV 2.4GHz 处理器上,计算时间不到 20min,计算速度比文献 9 所用方法快得多.

首先,计算了三种不同填充比的金属光子晶体的带结构,如图 2、图 3 和图 4 所示,它们的填充比分别为 $a/b = 0.26$, $a/b = 0.34$ 和 $a/b = 0.45$,其中虚线为 TM 模式,实线为 TE 模式,阴影区域为禁带.横坐标 Γ 为 k 空间的原点, $X = 0.5b_1$, $M = 0.5(b_1 + b_2)$ 纵坐标 $\beta a/\pi$ 为归一化波数.从图中可以看出,金属光子晶体一般不存在绝对光子带隙,这是与介质光子晶体^[10-13]不同的.

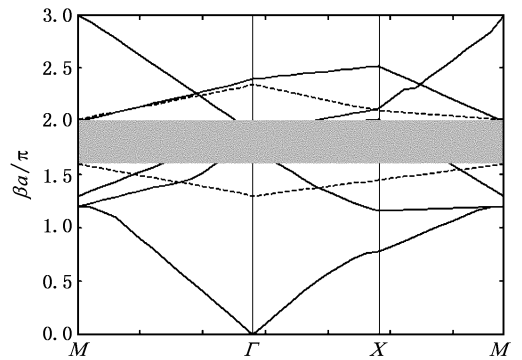


图 2 填充比为 $a/b = 0.26$ 时的带结构

从以上图形看出,对于 TM 模式,不仅存在截止频率,而且禁带宽度随填充比的增大而增大;对于 TE 模式,则不存在截止频率,禁带是在填充比增加到一定值后才出现的.

下面,计算了 TM 模式的截止波长(λ_0/b)随填充比(f)的变化情况,如图 5 所示,从图中看出,截止波长随着填充比的增大而变小,这从物理上是很容易解释的,当金属柱很密时,电磁波的传输空间变小,使得截止波长变短.从而也间接地说明了所用方

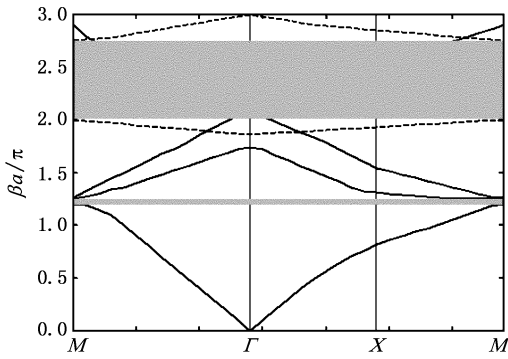


图3 填充比为 $a/b = 0.34$ 时的带结构

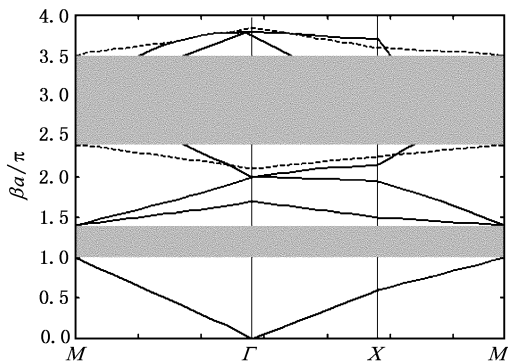


图4 填充比为 $a/b = 0.45$ 时的带结构

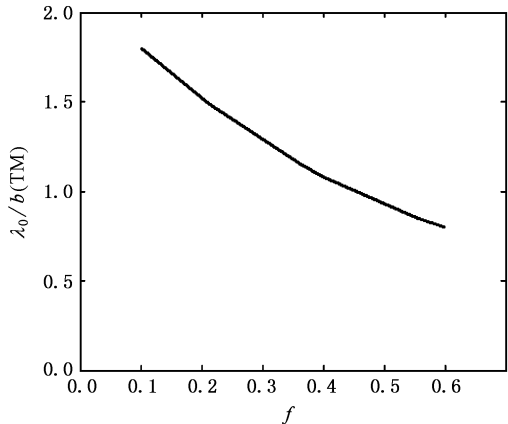


图5 TM 模式截止波长随填充比的变化

法的正确性.

最后,计算了 TM 模式和 TE 模式禁带相对宽度 (%) 随填充比 (f) 的变化情况,如图 6 所示.从图中看出, TM 模式的禁带相对宽度随填充比变化缓慢,且一开始就存在禁带;而 TE 模式的禁带相对宽度随填充比的增大急剧上升,一开始并不存在禁带,而是当填充比达到某一数值才出现的.

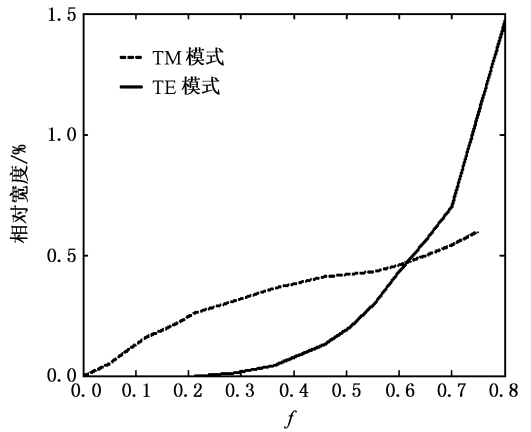


图6 禁带相对宽度随填充比的变化

4. 结 论

采用新型平面波展开法推导并分析了二维金属光子晶体的带结构.首先从数学上对这种方法进行了严格的推导,导出了一个积分微分本征方程,由于这个本征方程的本征函数很光滑,使得用平面波展开法求解,傅里叶序列收敛速度很快,只需要几项就可以得到精确的结果,并且它较文献 [9] 所述的方法更加高效,计算时间和准确度都很高.最后以正方晶格二维金属光子晶体为例,进行了数值计算,得到了令人满意的结果.此外,本文所用的方法可以用于求解金属光子晶体的三维问题以及介质光子晶体,这将是我們下一步的工作.

附录 A

在这里,给出(7)式中晶格格林函数的解.考虑普遍情形,方程形式如下:

$$\begin{aligned} &\nabla^2 \Phi_p + \beta^2 \Phi_p \\ &= -e^{-jk \cdot (r-r')} \sum_J \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{r}_J), \end{aligned} \quad (A1)$$

其中函数 $\Phi_p \exp(j\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))$ 具有平移对称性, β 是给定波数,当 $\beta = 0$ 时 (A1) 就自动变为(7)式.如果把 Φ_p 看作是晶格格林函数,那么根据晶格格林函数的性质, Φ_p 可以表示为^[7]

$$\Phi_p(\mathbf{u}) = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_J \frac{e^{-j\mathbf{k}_J \cdot \mathbf{u}}}{|\mathbf{k}_J|^2 - \beta^2}, \quad (A2)$$

其中 $\mathbf{k}_J = \mathbf{k} + j_1 \mathbf{b}_1 + j_2 \mathbf{b}_2$, $\mathbf{u} = (u_1, u_2) = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $J = (j_1, j_2)$ 是复合整数下标, V_{cell} 是单位晶胞面积.分析 (A2) 式知,它的收敛速度并不是最佳的,但是,用于求解本文所述金属光子晶体的带结构已经足够了.

鉴于文章的完整性以及作者阅读参考文献的收获, 在这里给出了 Φ_p 的另一种表示形式^[14]:

$$\Phi_p(\mathbf{u}) = \frac{1}{|\mathbf{a}_1|} \sum_n \frac{e^{-j\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{u}}}{2\gamma_n} \times \left(e^{-\gamma_n |u_\perp|} + \sum_{\pm} \frac{e^{\pm\gamma_n u_\perp}}{e^{|a_{2\perp}|(\gamma_n \pm j\mathbf{k}_{n,\perp})} - 1} \right), \quad (A3)$$

其中 $\gamma_n = \sqrt{|\mathbf{k}_{n,\parallel}|^2 - \beta^2}$, $\mathbf{k}_n = k + n\mathbf{b}_1$, $\mathbf{k}_{n,\parallel}$ 是 \mathbf{k}_n 在 \mathbf{a}_1 方向上的投影, $\mathbf{k}_{n,\perp}$, $\mathbf{a}_{2,\perp}$, \mathbf{u}_\perp 分别是 \mathbf{k}_n , \mathbf{a}_2 , \mathbf{u} 在 \mathbf{a}_1 垂直方向上的投影, “ \pm ”号是两部分求和的缩写. 经过分析知道, (A3)式具有指数收敛速度, 但是它的适用范围是 $|u_\perp| < |a_{2\perp}|$. 这个公式的具体分析已远远超出了本文的研究范围.

- [1] Yablonovitch E, Gmitter T J, Leung K M 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 2295
- [2] Villeneuve P R, Piche M 1994 *J. Mod. Opt.* **41** 241
- [3] Silveirinha M, Fernandes C A 2002 *Proc. IEEE AP-S/URSI Symp.* **4** 352
- [4] Conciauro G, Arcioni P, Bressan M, Perregini L 1996 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **44** 1057
- [5] Yan S S 2000 *Solid-state Physics* (Beijing: Beijing University Press) Chapter 3
- [6] Colton D, Kress R 1992 *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory* (Berlin: Springer-Verlag) Chapter 6
- [7] Nicorovici N A, McPhedran R C, Ke-Da B 1995 *Phys. Rev. E. Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat. Interdiscip. Top.* **51** 690
- [8] Collin R E 1991 *Field Theory of Guided Waves* (New York: IEEE Press) Chapter 5
- [9] Nicorovici N A, McPhedran R C, Botten L C 1995 *Phys. Rev. E. Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat. Interdiscip. Top.* **52** 1135
- [10] Zhuang F, He S L, He J P, Feng S S 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 355 (in Chinese)[庄飞、何赛灵、何江平、冯尚申 2002 物理学报 **51** 355]
- [11] Feng S S, Shen L F, He S L 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1540 (in Chinese)[冯尚申、沈林放、何赛灵 2004 物理学报 **53** 1540]
- [12] He Y J, Su H M, Tang F Q, Dong P, Wang H Z 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 96 (in Chinese)[何拥军、苏惠敏、唐芳琼、董鹏、汪河洲 2001 物理学报 **50** 96]
- [13] Wang H, Li Y P 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 124 (in Chinese)[王辉、李永平 2001 物理学报 **50** 124]
- [14] Jorgenson R, Mitra R 1990 *IEEE Trans. Antennas Propagat.* **38** 633

Study of 2D metallic photonic band gap structures^{*}

Lu Zhi-Gang Gong Yu-Bin Wei Yan-Yu Wang Wen-Xiang

(College of Physical Electronics , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 , China)

(Received 8 July 2005 ; revised manuscript received 14 December 2005)

Abstract

In order to study 2D metallic photonic crystal , a new plane-wave expansion method was proposed. Based on traditional plane wave expansion method , the “ original problem ” to be solved was extended to a “ new problem ”. First , the relation between them were given , second , the “ new problem ” was transformed to an integral-differential eigen equation through an auxiliary function. The eigen equation was solved to obtain the band gap structures of the “ new problem ”. The band gap structures of the “ original problem ” were deduced according to “ new problem ”. Finally , numerical computations were done for 2D square-lattice square metallic rods photonic crystal , and excellent results were achieved.

Keywords : metallic photonic crystal , plane wave expansion method , band gap structure , square lattice

PACC : 7125P , 4270Q

^{*} Project supported by the State Key Program of National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60532010) , the Fok Ying-Tong Education Foundation for Young Teachers in the Higher Education Institutions of China (Grant No. 91063) , the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60401005) .