

二维正方各向异性碲圆柱光子晶体完全禁带中 缺陷模的 FDTD 计算分析和设计*

庄 飞¹⁾²⁾ 肖三水¹⁾ 何江平¹⁾ 何赛灵¹⁾

¹⁾ 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)

²⁾ 杭州师范学院物理系 杭州 310012)

(2001 年 11 月 11 日收到,2001 年 12 月 23 日收到修改稿)

用 FDTD 方法计算了二维正方晶胞各向异性碲圆柱光子晶体的点缺陷模.为了得到 TE, TM 模式在完全禁带中具有相同共振频率的缺陷模,对中心点缺陷半径 R_d 以及中心附近对称位置的点缺陷半径 R_n 做了一系列微调.计算表明, TM 模对于 R_n 的变化不敏感,而 TE 模随着 R_n 的改变出现了明显的规则的移动趋势.通过计算分析,发现对应于 $f=0.4$ 的背景 ($R=0.3568a$),当 $R_d=0.55a$, $R_n=0.26a$ 时在完全禁带中 TE 和 TM 的缺陷模具有相同的共振频率 $\omega_0=0.2466\omega_c$ (其中 $\omega_c=2\pi c/a$, a 为晶格常数).

关键词:时域有限差分法,光子晶体,缺陷模,各向异性

PACC:7820P, 4270Q

1. 引 言

光子晶体是周期性排列的介质或金属结构.电磁波在光子晶体内部传输的特性类似于电子在晶体中的运动特性.现在人们对二维光子晶体做了许多工作^[1,2].在二维情况下,电磁波可以分解为两个偏振,一个是 E 偏振(TM 模),另一个是 H 偏振(TE 模).对于某些频率范围,如果光子晶体同时反射这两种偏振态的电磁波,光子晶体就被称为有一个完整的光子禁带.频率处在禁带范围内所有模式的光及电磁波都不能在其中传播.如果在一个存在完全禁带的理想光子晶体中引入点缺陷,那么在禁带中将会存在一个或者多个振动模,这称为缺陷模^[3-5],缺陷模的性质在激光器^[6],谐振腔^[7],波分复用^[8]方面有潜在的应用前景.

理论上计算缺陷模有许多方法,包括平面波展开方法^[9-11],格林函数方法^[12-14],矩阵变换方法^[15,16]和时域有限差分法^[17,18](FDTD).在研究缺陷模早期,从简单考虑,一般都是选择单个模式(TM 模)进行计算^[18,19].随着对光子晶体缺陷模的进一步研究,人们希望能够在完全禁带中调出对于 TE, TM

模具有相同频率的缺陷模.设计出在完全禁带中的对于两种极化有相同共振频率的缺陷模并且结合光子晶体线缺陷波导在光通讯的插分复用(optical add drop multiplexing)研究领域有直接应用的价值^[20,21].如果具有 ω_0 频率的电磁波在一个通道中传输,当它通过设计的对于两种偏振具有相同共振频率缺陷模的光子晶体时,可以使得两种偏振电磁波通过谐振腔内的局域共振被同时下载下来,被引导到另一个光子晶体线缺陷波导中,具体的设计如图 1 所示.

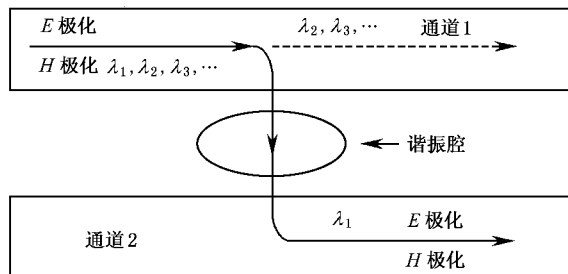


图 1 能对两个极化同时下载的插分复用示意图

但是一般来说,在只存在中心一个点缺陷时 E 极化缺陷频率和 H 极化缺陷频率是不相等的.为了在完全禁带中计算出对于两个不同偏振的具有相同

* 国家自然科学基金重点项目(批准号:90101024),浙江省自然科学基金(批准号:ZD0002)和国家博士后科学基金资助的课题.

频率的缺陷模,可以在中心点缺陷附近对称位置设置新的点缺陷,并同时对这两种缺陷半径作微调计算.

虽然,二维各向同性三角排列的介质柱光子晶体存在完全禁带,但是由于在线缺陷波导中,边界区域形成的齿型排列,使得完全禁带中出现一些附加的小带^[22],会影响波导的传输质量,所以用正方排列光子晶体线缺陷做波导更为合适.

已经研究的成果表明,二维正方各向同性介质圆柱光子晶体没有完全禁带,而对于各向异性正方介质碲圆柱光子晶体的研究表明由于在 z 方向与 $x-y$ 平面上介电常数不同,可以调出较大的完全禁带^[23],在 $f=0.4$ 的情况下,可以产生完全禁带的宽度约为 $0.035\omega_c$ (其中 $\omega_c = 2\pi c/a$, a 为晶格常数).虽然二维长方各向异性椭圆可以产生更大一些的禁带^[24],但是由于椭圆的对称性较差,不方便做有直角拐弯的波导.

本文考虑设计二维正方晶胞各向异性碲圆柱光子晶体的线缺陷做波导,在这个光子晶体中合适的位置设置中心位置点缺陷以及中心附近对称位置新的点缺陷,并用 FDTD 方法计算了缺陷共振频率.通过改变中心点缺陷半径 R_d 以及对称位置的缺陷半径 R_n 做了一系列的缺陷共振频率计算.计算表明,对于 $f=0.4$ 的背景 ($R=0.3568a$),在 $\omega=0.219\omega_c$ 到 $\omega=0.254\omega_c$ 之间的完全禁带中,当 $R_d=0.55a$, $R_n=0.26a$ 时存在一个对于 E 和 H 偏振具有相同共振频率的缺陷模 ($\omega=0.2466\omega_c$).

2. 计算缺陷模的 FDTD 方法

用以下方法可以在理想的光子晶体中获得缺陷:1)移去晶胞.2)用不同的介质或者金属替代原来的介质或金属.3)改变一个或几个光子晶体介质柱的形状和大小.注意到仅仅在中心位置设置一个点缺陷时,计算出来的关于 E 极化和 H 极化的缺陷模共振频率并不相等.本文研究由各向异性碲介质柱组成的二维正方晶格结构,为了节约计算区域和计算时间,选取 7×7 作为计算区域(其中 7 表示沿着 x, y 轴方向的晶胞个数).在中心以及中心附近四个对称位置设置新的缺陷,设计的缺陷模型如图 2 所示.在图 2 中,设定二维光子晶体背景材料碲介质柱的半径为 R (根据文献^[23],当填充率 $f=0.4$ 时,

对应的背景半径为 $R=0.3568a$,完全禁带的频率范围为 $0.219\omega_c$ 到 $0.254\omega_c$)中心缺陷的半径为 R_d ,在中心附近对称位置上的四个缺陷半径都为 R_n .为了便于区别,在图 2 中将缺陷部分用灰色表示,而背景圆柱用黑色表示.

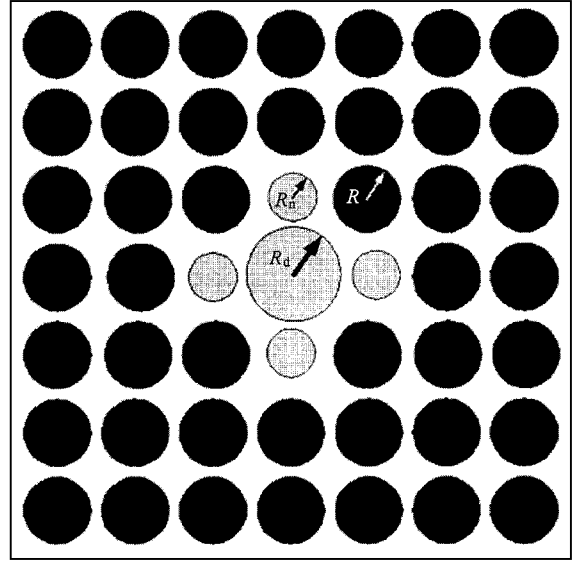


图 2 缺陷设计示意图,其中 R 表示背景圆柱的半径, R_d 表示中心缺陷圆柱的半径, R_n 表示中心附近对称位置缺陷圆柱的半径

随着系统离散格点数量的增加,模拟计算将变得非常耗时.在平面波的情况下计算的耗时量正比于 N^3 ,这里 N 为系统离散格点沿着某一轴向的维数.由于 FDTD 方法计算耗时量正比于 N ,所以在系统计算的格点增加时使用 FDTD 方法比较有效.

以下采用 FDTD 方法^[18,19]计算各向异性碲介质柱组成的正方二维光子晶体的缺陷模.

介质中的 Maxwell 方程如下式所示:

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}, \quad (2)$$

这里 μ_0 为磁导率, $\epsilon(\mathbf{r})$ 为空间 \mathbf{r} 处的介电常数.在各向异性碲介质柱的情况下,假设碲的正常光相对介质常数在 $x-y$ 平面内,即 $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon_o = 23.04$,沿轴方向为非正常光的相对介质常数 $\epsilon_z = \epsilon_e = 38.44$.在二维情况下,电磁场可以简单的被分解为两个偏振极化模,即 E 极化和 H 极化. Maxwell 方程可以用所谓的 Yee-cell 技术进行离散化处理^[25],对于 E 极化,二维 Maxwell 方程离散化的表达式为

$$H_x \Big|_{i,j+1/2}^{n+1/2} = H_x \Big|_{i,j+1/2}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_z \Big|_{i,j+1}^n - E_z \Big|_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \quad (3)$$

$$H_y \Big|_{i+1/2,j}^{n+1/2} = H_y \Big|_{i+1/2,j}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_z \Big|_{i+1,j}^n - E_z \Big|_{i,j}^n}{\Delta x} \right) \quad (4)$$

$$E_z \Big|_{i,j}^{n+1/2} = E_z \Big|_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon_{e_{i,j}}} \left[\frac{H_y \Big|_{i+1/2,j}^{n+1/2} - H_y \Big|_{i-1/2,j}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{H_x \Big|_{i,j+1/2}^{n+1/2} - H_x \Big|_{i,j-1/2}^{n+1/2}}{\Delta y} \right] \quad (5)$$

在 H 极化情况下, 二维 Maxwell 方程离散化的表达式为

$$E_x \Big|_{i,j+1/2}^{n+1/2} = E_x \Big|_{i,j+1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\epsilon_{o_{i,j+1/2}}} \left[\frac{H_z \Big|_{i,j+1}^n - H_z \Big|_{i,j}^n}{\Delta y} \right], \quad (6)$$

$$E_y \Big|_{i+1/2,j}^{n+1/2} = E_y \Big|_{i+1/2,j}^n - \frac{\Delta t}{\epsilon_{o_{i+1/2,j}}} \left[\frac{H_z \Big|_{i+1,j}^n - H_z \Big|_{i,j}^n}{\Delta x} \right], \quad (7)$$

$$H_z \Big|_{i,j}^{n+1} = H_z \Big|_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[\frac{E_y \Big|_{i+1/2,j}^{n+1/2} - E_y \Big|_{i-1/2,j}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{E_x \Big|_{i,j+1/2}^{n+1/2} - E_x \Big|_{i,j-1/2}^{n+1/2}}{\Delta y} \right] \quad (8)$$

这里上标 n 表示离散的时间步长, 下标 i, j 表示在 $x-y$ 平面上的离散格点的位置, Δt 为时间间隔, $\Delta x, \Delta y$ 分别为沿着 x, y 方向相邻离散点的间隔。

如果知道了在每一个离散格点上的介电常数和电磁场的初始分布, 就可以根据离散的 FDTD 时间离散步长公式(3)–(8)式获得电磁场的时间演化规律, 所以这个方法可以应用推广到任意形状的内含物, 介质或者金属。

为了使解得到稳定, 时间步长 Δt 必须满足^[26]

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2}}}, \quad (9)$$

这里 c 为光速, 先设置一个电磁场初始分布, 在经过 FDTD 的时间演化计算后, 只有真正的缺陷模会保留下来, 而非缺陷模的电磁波会随着计算过程自动向外扩散而消失。

初始场的选取应该满足以下条件: 1) 在整个计算区域保持光滑和连续; 2) 在缺陷外部几乎为零; 3) 为了产生所有可能的缺陷模, 选取低对称性。

在所有的数字模拟计算中, 对 E 极化可以使用如下的初始场分布:

$$E_z = -\exp(-((5x/a) + 1)^2 - (5y/a)^2) \times 3 + \mathfrak{X}(1 - 5x/a)^2 \exp(-((5x/a)^2 - (5y/a + 1)^2) - 10(x/a - (5x/a)^3 - (5y/a)^5))$$

$$\times \exp(-((5x/a)^2 - (5y/a)^2)), \quad (10)$$

$$H_x = H_y = 0, \quad (11)$$

这里 a 是晶格常数, 缺陷位于 $x-y$ 平面中。方程(10)就是在 MATLAB 中的库函数 PEAKS 函数。同理也可以得到对应于 H 极化的初始场分布函数

$$H_z = -\exp(-((5x/a) + 1)^2 - (5y/a)^2) \times 3 + \mathfrak{X}(1 - 5x/a)^2 \exp(-((5x/a)^2 - (5y/a + 1)^2) - 10(x/a - (5x/a)^3 - (5y/a)^5)) \times \exp(-((5x/a)^2 - (5y/a)^2)), \quad (12)$$

$$E_x = E_y = 0, \quad (13)$$

最后, 为了获得谱信息, 通过 Fourier 变换将计算的场从时域转换为频率区域, 而每一个 Fourier 变换的谱峰位置对应于这个缺陷的本征频率。

3. FDTD 计算结果与讨论

起初人们用传统的 FDTD 方法, 即通过平面波传输谱方法^[5,9]计算缺陷模。这种方法有两个缺点: 1) 计算区域比较大, 其计算区域不仅包括了 7×7 的光子晶体区域, 还要加上传播区域和接受区域(如图 3(a)所示); 2) 使用这个方法, 由于对称性不匹配, 某些局域振动模对入射平面波不敏感, 从而会漏掉一些缺陷模。在现在的数字模拟计算中, 为了节约计算区域, 使内部的电磁波被边界区域完全吸收, 模拟无穷空间, 可以引入 PML 技术(完全吸收层)。这样就会在很小的空间里不仅计算出所有的具有对称性的缺陷模, 还可以找到由于对称性不匹配而遗漏的所有缺陷模。为了加以比较, 同时将两种计算方法示意图画在图 3 中。图 3(a)表示平面波传输谱 FDTD 方法的示意, 图 3(b)表示现在 FDTD 计算方法。

在具体的 FDTD 计算过程中, 设计计算区域为 7×7 的正方晶胞, 缺陷位于计算区域中心以及中心附近四个对称位置上(见图 2), 每一个晶胞包含 168(41×41)个离散格点, 计算区域用 12 层晶胞包围做成 PML。计算中取 30000 个时间步长, 每一个时间步长为 $\Delta t = 1/c \sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2}}$ 。

首先, 用 FDTD 方法计算了当填充率 $f = 0.4$ ($R = 0.3568a$) 时, 二维正方各向异性碲圆柱构成的光子晶体的禁带, 计算结果如图 4 所示。在图 4 中, 黑点为 E 极化的能带, 圆圈表示 H 极化的能带。可以看到在频率从 $0.219\omega_c$ 到 $0.254\omega_c$ 的范围内存在一个完全禁带, 计算结果与文献[23]的结果完全一致。下面, 在已经计算出的完全禁带中计算缺陷模。

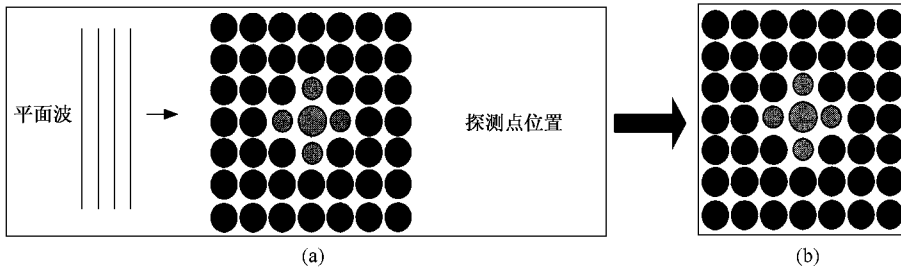


图 3 不同 FDTD 计算方法的比较 (a)表示平面波传输方法 (b)表示现在的计算方法,其中边界用 PML 技术

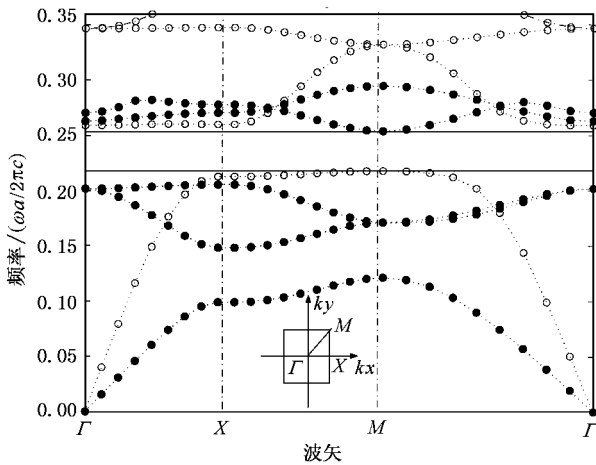


图 4 用 FDTD 方法计算出来的 $f = 0.4$ 时的二维正方各向异性碲圆柱光子晶体完全禁带(黑点表示 E 极化计算能带,圆圈表示 H 极化计算能带.计算表明,在 $\omega = 0.219\omega_c$ 到 $\omega = 0.219\omega_c$ 之间存在一个完全禁带)

一般来说,在光子晶体中,当只存在中心一个点缺陷时, E 极化, H 极化所对应的缺陷模的共振频率并不相符.为了得到在完全禁带中具有相同共振频率的缺陷模,可以扩大缺陷的范围,在中心缺陷附近对称位置上设置新的缺陷(见图 2).固定中心缺陷的半径 R_d ,然后改变其附近的四个缺陷半径 R_n 的值并作微扰计算,观察 R_n 变化时所对应的 E 极化, H 极化缺陷模共振频率的变化规律,将计算结果画在图 5 中.在图 5 中计算了当固定 $R_d = 0.55a$ 时, R_n 从 $0.2a$ 变化到 $0.3a$ 时, E 极化, H 极化缺陷模共振频率的变化规律.计算发现, R_n 从 $0.2a$ 变化到 $0.3a$ 时 E 极化缺陷模共振频率从 $0.2483\omega_c$ 变化到 $0.2455\omega_c$,而 H 极化缺陷模共振频率从 $0.2515\omega_c$ 变化到 $0.2379\omega_c$;当 $R_n = 0.26a$ 时 E 极化和 H 极化缺陷模共振频率趋向于同一个值 $\omega_0 = 0.2466\omega_c$.从图 5 中可以看出由于 E 极化缺陷模共振频率对于 R_n 的改变不太敏感,而 H 极化缺陷模共振频率随着

R_n 的改变出现了明显的规则的移动.这使得两种极化的缺陷模共振频率在微调对称位置缺陷半径 R_n 后,可以做到趋于一致.实现了在完全禁带中调出对于两种偏振具有不同缺陷共振频率的设计.对于以上的计算结果,可以找到定性的物理解释.由于 TE 模 E 矢量处于 $X-Y$ 平面上,而介质面上 E 矢量的 $x-y$ 切向分量要求连续,这使得共振频率对缺陷的形状很敏感.对于 TH 模, E 矢量沿着圆柱的方向(Z 方向), E 矢量在介质面 Z 方向切向连续的要求使得共振频率对于缺陷形的状变化就不太敏感.

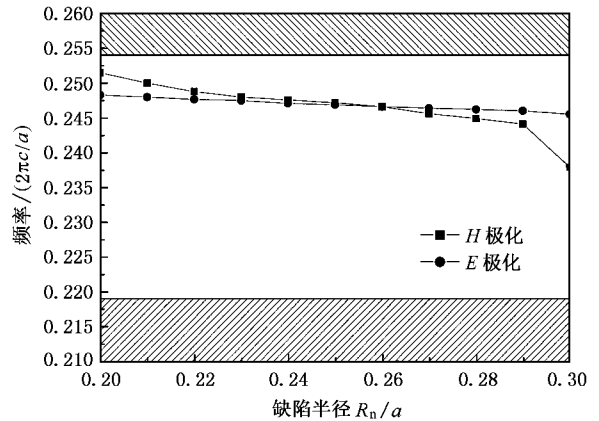


图 5 固定 $R_d = 0.05a$ 的情况下,变化 R_n 的缺陷共振频率计算图(其中 R_n 的变化范围从 $0.20a$ 到 $0.30a$.当 $R_n = 0.26a$ 时, E 极化缺陷共振频率与 H 极化缺陷共振频率相同,为 $\omega_0 = 0.2466\omega_c$.其中圆点表示 E 极化,方块表示 H 极化)

4. 结 论

为了设计出对于 E 极化和 H 极化具有相同共振频率的缺陷膜,采用二维正方晶胞各向异性碲圆柱光子晶体的线缺陷做波导,在这个光子晶体中设置中心缺陷和中心附近对称位置点缺陷,并同时改变这两种半径作微调计算;在计算中采用了 FDTD

方法和 PML 技术. 通过改变中心点缺陷半径 R_d 以及对称位置的缺陷半径 R_n 做了一系列的缺陷共振频率计算. 计算表明, 对于 $f = 0.4$ 的背景 ($R = 0.3568a$) 在 $\omega = 0.219\omega_e$ 到 $\omega = 0.254\omega_e$ 之间的完全禁带中, 当 $R_d = 0.55a$, $R_n = 0.26a$ 时存在一个对

于 E 和 H 偏振具有相同的共振频率 $\omega_0 = 0.2466\omega_e$ (其中 $\omega_e = 2\pi c/a$, a 为晶格常数), 实现了在完全禁带中调出对于两种偏振具有相同共振频率缺陷模的设计.

- [1] Shen L F , He S L and Wu L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1133 [in Chinese] 沈林放、何赛灵、吴 良 2002 物理学报 **51** 1133]
- [2] Wang H *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2172 [王 辉等 2001 物理学报 **50** 2172]
- [3] Yablonovitch E , Gmitter T J , Meade R D , Rappe A M , Brommer K D and Joannopoulos J D 1990 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3380
- [4] McCall S L , Platzman P M , Dalichaouch R , Smith D and Schultz S 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 2017
- [5] Gadot F , de Lustrac A , Lourtioz J M , Brillat T , Ammouche A and Akmansoy E 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 8499
- [6] Painter O , Lee R K , Scherer A , Yariv A , O 'Brien J D , Dapkus P D and Kim I 1999 *Science* **284** 1819
- [7] Berggren M , Dodabalapur A , Slusher R E , Bao Z , Timko A and Nalamasu O 1998 *Electron. Lett.* **34** 90
- [8] Fan S , Villeneuve P R , Joannopoulos J D and Haus H A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 960
- [9] Villeneuve P R , Fan S and Joannopoulos J D 1996 *Phys. Rev. B* **54** 7837
- [10] Kee C , Kim J , Park H Y and Chang K J 1998 *Phys. Rev. B* **58** 7908
- [11] Meade R D , Rappe A M , Brommer K D and Joannopoulos J D 1993 *Phys. Rev. B* **48** 8434
- [12] Leung K M 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 303
- [13] Algul H G , Khazhinsky M , McGurn A R and Kapenga J 1995 *J. Phys. : Condens. Matter.* **7** 44
- [14] Sakoda K and Shirota H 1997 *Phys. Rev. B* **56** 4830
- [15] Sigalas M M , Soukoulis C M , Chan C T and Ho K M 1994 *Phys. Rev. B* **49** 11080
- [16] Sigalas M M , Soukoulis C M , Economou E N , Chan C T and Ho K M 1993 *Phys. Rev. B* **48** 11080
- [17] Kuzniak V and Maradudin A A 1998 *Phys. Rev. B* **57** 11080
- [18] Qiu M and He S 2000 *Phys. Rev. B* **61** 12871
- [19] Xiao S S , He S L and Zhuang F 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 1363
- [20] Fan S , Pierre Villeneuve R , Joannopoulos J D and Haus H A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 960
- [21] Fu J , He S and Xiao S 2000 *J. Phys. A : Math. Gen.* **33** 7761
- [22] Oliver S , Smith C , Rattier M , Benisty H , Weisbuch C , Krauss T , Hondré R and Oesterle U 2001 *Opt. Lett.* **13** 1019
- [23] Li Z Y , Gu B Y and Yang G Z 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2574
- [24] Zhuang F , He S L , He J P and 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]
- [25] Yee K S 1996 *IEEE Trans. Antennas and Propagation* **14** 302
- [26] Taflove A 1995 *Computational Electrodynamics : The Finite-Difference Time-Domain Method* (Norwood : Artech House INC)

A FDTD method for calculating defect modes in a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic cylinders^{*}

Zhuang Fei^{1,2)} Xiao San-Shui¹⁾ He Jiang-Ping¹⁾ He Sai-Ling¹⁾

¹⁾(Center for Optical and Electromagnetic Research ,State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation ,Zhejiang University ,Hangzhou 310027 ,China)

²⁾(Department of Physics , Hangzhou Teacher 's College ,Hangzhou 310012 ,China)

(Received 11 November 2001 ; revised manuscript received 23 December 2001)

Abstract

A finite difference in time domain (FDTD) method is employed to calculate defect modes in a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic cylinders of tellurium. In order to obtain a defect mode inside the complete band gap , we adjust the radius R_d of the central defect and radius R_n of the neighboring defects. It is shown that the defect modes for the E-polarization are not sensitive to R_n , while the resonance frequency for H-polarization varies regularly as R_n changes. When the filling fraction $f = 0.4$ ($R = 0.3568a$) , $R_d = 0.55a$ and $R_n = 0.26a$, the defect mode has the same resonance frequency $\omega_0 = 0.2466\omega_c$ (where $\omega_c = 2\pi c/a$, a , c being lattice constants) for both E- and H-polarization.

Keywords : FDTD , photonic crystal , defect mode , anisotropic

PACC : 7820P , 4270Q

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