

用紧束缚方法描述光子晶体缺陷耦合的 共振频率移动

蔡旭红 林旭升[†] 石 全 赵年顺

(汕头大学物理系, 汕头 515063)

(2006 年 8 月 18 日收到, 2006 年 9 月 29 日收到修改稿)

通常采用含两个耦合参数的紧束缚近似, 就能很好地描述光子晶体缺陷因耦合而导致的共振频率分裂. 然而, 缺陷耦合造成的共振频率移动, 即包含奇数个缺陷的耦合系统的中央共振频率位置与原来单缺陷时的共振频率位置存在差异, 则只有采用含三个耦合参数的严格紧束缚方法才能正确描述. 根据耦合参数与共振频率的关系, 利用三缺陷耦合系统的模拟计算结果确定了三个耦合参数的具体值, 从而在理论上能够预言由任意个缺陷构成的耦合系统的共振频率的移动和分裂. 理论预言与基于有限时域差分法的数值计算完全相符.

关键词: 光子晶体缺陷耦合, 紧束缚方法, 共振频率分裂, 共振频率移动

PACC: 4270Q, 4280L

1. 引 言

介电常数或折射率具有周期性变化的光子晶体是一个具有广泛应用前景的光子流控制平台^[1]. 作为光子晶体应用的一类固定结构, 光子晶体的点缺陷结构一直受到人们的重视. 然而, 利用多个缺陷之间的耦合效应更能实现单个缺陷所不具有的功能^[2-9]. Yariv 等借用固体物理的紧束缚方法(tight-binding method, TB)来描述光学微腔的耦合特性, 得到由无限多个微腔耦合而成的新型波导的色散关系, 其中包含有三个待定的耦合参数^[2]. 类似于原子结合成分子时产生的能级分裂, 有限个光子晶体缺陷的耦合会导致其透射谱出现多个共振峰, 即所谓的共振频率分裂. Bayindir 等在微波段的光子晶体实验中观测到这种现象, 实验结果与只含有两个耦合参数的近似 TB 方法符合^[4]. 众所周知, 在光子晶体研究中有另一类行之有效的方法, 就是利用各种可靠的数值模拟方法如传输矩阵法(TMM), 时域有限差分法(FDTD)等的计算结果来验证理论分析的有效性^[10-13]. 由于没有了实验时存在的各种因素的干扰, 这种方法显得更有说服力. 如文献[14, 15]等就是用传输矩阵法来说明 TB 的有效性. 就我们所知,

目前涉及此类有效性讨论的文献均采用了只含有两个耦合参数的 TB 近似, 这样的处理对于描述因缺陷耦合而导致的共振频率的分裂是可行的. 然而, 对于说明因耦合导致的共振频率移动, 即是对于含有奇数个缺陷的耦合结构, 其中央共振频率的位置与单缺陷共振频率的位置存在不一致的现象, 只含有两个耦合参数的近似 TB 就无能为力了, 因为由它得到的耦合结构的中央共振频率与单缺陷共振频率是严格相等的. 本文将采用含有三个耦合参数的严格 TB 方法, 重点研究由光子晶体缺陷耦合而产生的共振频率的移动效应. 同时, 我们将用时域有限差分法对二维光子晶体缺陷结构进行模拟计算, 通过比较来验证理论分析和模拟结果的一致性.

2. TB 方法

已经知道, 在完好的光子晶体中引入缺陷, 其出现的光子缺陷模很像半导体中的电子局域态^[16]. 类似于量子力学的能量本征方程, 描述光子晶体缺陷模的本征方程是^[1]

$$-\nabla^2 E_{\Omega}(\mathbf{r}) = \epsilon_0(\mathbf{r}) \left(\frac{\Omega}{c} \right)^2 E_{\Omega}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中 $\epsilon_0(\mathbf{r})$ 是缺陷结构的介电系数分布, Ω 是缺陷模的本征频率或称为共振频率, 而电场强度分布

[†] 通信联系人. E-mail: xslin@stu.edu.cn

$E_{\alpha}(\mathbf{r})$ 称为缺陷的本征模式. 当两个光子晶体缺陷耦合时, 其透射谱会出现两个共振峰, 对应着耦合系统的两个共振频率, 这就是由于耦合导致的共振频率分裂现象, 共振频率的位置可通过实验或模拟计算获得. 由严格 TB 方法可得^[4]

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= \Omega \sqrt{\frac{1 + \beta_1}{1 + \alpha_1 + \Delta\alpha}}, \\ \Gamma_2 &= \Omega \sqrt{\frac{1 - \beta_1}{1 - \alpha_1 + \Delta\alpha}},\end{aligned}\quad (2)$$

Γ_1 和 Γ_2 就是缺陷耦合系统的共振频率, Ω 是单个缺陷模即耦合前的共振频率, 而,

$$\alpha_1 = \int \epsilon(\mathbf{r}) E_{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha}(\mathbf{r} - nax) d^3\mathbf{r},$$

$$\beta_1 = \int \epsilon_0(\mathbf{r}) E_{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha}(\mathbf{r} - nax) d^3\mathbf{r},$$

$$\Delta\alpha = \int [\epsilon(\mathbf{r}) - \epsilon_0(\mathbf{r})] E_{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

就是三个待定的耦合参数, 其中 x 为沿耦合方向的单位矢量. 因为(2)式包含了三个待定的耦合系数, 因而由 Γ_1 和 Γ_2 仍不能确定三个耦合参数 α_1 , β_1 和 $\Delta\alpha$, 这恐怕也是文献通常将 $\Delta\alpha$ 忽略的原因之一. 然而, 下面我们会在三个缺陷的耦合结果看到, 如果忽略了 $\Delta\alpha$, 就忽略了实际上存在的共振频率的移动.

对于包含有三个光子晶体缺陷的耦合结构, 存在三个共振频率, 因而通过联立方程求解就能够严格得到三个耦合参数的值. 下面我们推导三个共振频率与三个耦合参数的关系. 对于由相距为 na 的三个完全相同的缺陷 A , B 和 C 耦合而成的结构, 其中 a 为晶格常数, n 为一给定的整数. 由 TB 法可知耦合结构的本征模式 $E_r(\mathbf{r})$ 可以表示为三个单缺陷本征模的线性叠加^[4, 17], 也就是 $E_r(\mathbf{r}) = AE_{\alpha}(\mathbf{r}) + BE_{\alpha}(\mathbf{r} - nax) + CE_{\alpha}(\mathbf{r} - 2nax)$, 其中的 A , B 和 C 称为组合系数. 显然, $E_r(\mathbf{r})$ 的本征方程也应具有(1)式的形式, 但 $\epsilon_0(\mathbf{r})$ 应改为耦合结构的介电系数分布 $\epsilon(\mathbf{r})$, Ω 应改为耦合结构的共振频率 Γ , 将 $E_r(\mathbf{r})$ 代入(1)式, 可得到

$$\begin{aligned}& \epsilon_0(\mathbf{r})\Omega^2 AE_{\alpha}(\mathbf{r}) + \epsilon_0(\mathbf{r} - nax)\Omega^2 BE_{\alpha}(\mathbf{r} - nax) \\ & + \epsilon_0(\mathbf{r} - 2nax)\Omega^2 CE_{\alpha}(\mathbf{r} - 2nax) \\ & = \epsilon(\mathbf{r})\Gamma^2 [AE_{\alpha}(\mathbf{r}) + BE_{\alpha}(\mathbf{r} - nax) \\ & + CE_{\alpha}(\mathbf{r} - 2nax)].\end{aligned}\quad (3)$$

当只考虑最近邻缺陷的耦合并利用本征模式的正交归一条件时, 可得到如下的三个方程:

$$A(\Omega^2 - \Delta\alpha\Gamma^2 - \Gamma^2) + B(\beta_1\Omega^2 - \alpha_1\Gamma^2) = 0, \quad (4a)$$

$$A(\beta_1\Omega^2 - \alpha_1\Gamma^2) + B(\Omega^2 - \Delta\alpha\Gamma^2 - \Gamma^2) + C(\beta_1\Omega^2 - \alpha_1\Gamma^2) = 0, \quad (4b)$$

$$B(\beta_1\Omega^2 - \alpha_1\Gamma^2) + C(\Omega^2 - \Delta\alpha\Gamma^2 - \Gamma^2) = 0, \quad (4c)$$

这是关于组合系数 A , B 和 C 的齐次方程. 要求存在非零解则共振频率 Γ 应取下列值:

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= \Omega \sqrt{\frac{1 + \sqrt{2}\beta_1}{1 + \Delta\alpha + \sqrt{2}\alpha_1}}, \\ \Gamma_2 &= \Omega \sqrt{\frac{1}{1 + \Delta\alpha}}, \\ \Gamma_3 &= \Omega \sqrt{\frac{1 - \sqrt{2}\beta_1}{1 + \Delta\alpha - \sqrt{2}\alpha_1}},\end{aligned}\quad (5)$$

显然 Γ_2 与原共振频率 Ω 存在差异, 这就是共振频率的移动. 如果像通常文献的做法一样认为耦合参数 $\Delta\alpha = 0$, 则 Γ_2 与 Ω 相同, 就会与实际存在着的共振频率的移动矛盾. 而 Γ_1 和 Γ_3 则代表了新出现的两个共振频率, 对应于通常所说的共振频率分裂, 它们一般会位于原共振频率 Ω 的两侧. 显然, 只要通过实验或模拟计算得到耦合系统的三个共振频率 Γ_1 , Γ_2 和 Γ_3 , 就能通过(5)式求得反映缺陷耦合特性的三个耦合参数 α_1 , β_1 和 $\Delta\alpha$. 至于缺陷数目大于 3 的耦合系统, 在不忽略 $\Delta\alpha$ 情况下, 共振频率与耦合参数的关系比较复杂. 例如, 由四个相同缺陷耦合而成的系统, 其共振频率 Γ 满足下式

$$\begin{aligned}& (\Omega^2 - \Delta\alpha\Gamma^2 - \Gamma^2)^2 - (\beta_1\Omega^2 - \alpha_1\Gamma^2)^2 \\ & = \pm(\Omega^2 - \Delta\alpha\omega^2 - \Gamma^2)(\beta_1\Omega^2 - \alpha_1\Gamma^2).\end{aligned}\quad (6)$$

因此, 利用三个缺陷耦合而成的系统求得三个耦合参数应是最简单的选择. 进一步地, 我们利用得到的三个耦合参数, 通过(2)和(6)式就能方便地预言两个或四个缺陷耦合时出现的共振频率分裂结果的确切位置. 如果理论预期与相应的模拟结果符合, 则说明这三个耦合参数是适合于任意多个缺陷的耦合, 通过它们的确可以预测任意多个缺陷耦合的共振频率. 至于通常文献如[3, 4, 14, 15]等假定第三个耦合参量 $\Delta\alpha = 0$, 只用两个参量 α_1 和 β_1 来计算缺陷耦合后共振频率的做法, 可以看到并不能普遍适用. 相对于 α_1 和 β_1 反映相邻缺陷模场的相互叠叠的程度, 耦合参数

$$\Delta\alpha = \int [\epsilon(\mathbf{r}) - \epsilon_0(\mathbf{r})] E_{\alpha}(\mathbf{r}) E_{\alpha}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

实际上代表的是一个缺陷有多少能量耦合到邻近的缺陷中. 只要相邻的缺陷靠得近, $\Delta\alpha$ 值就可能与 α_1, β_1 值可相比拟, 从而不能忽略. 为谨慎起见, 应采用严格的 TB 方法. 应当指出, 光子晶体缺陷的共振频率在一定程度上也依赖于缺陷的限制程度^[18]. 就是说, 当多个缺陷同时存在时, 对于其中任一缺陷的限制将会由于其他缺陷的存在而发生改变, 这对共振频率的移动是有贡献的. 然而系统的模拟计算发现, 这个贡献非常小, 因此在这里没有考虑此因素.

3. FDTD 模拟实验

为了验证上述分析的正确性, 我们采用 FDTD 对光子晶体的缺陷耦合结构进行模拟计算. 图 1 表示由置于空气中的介质柱 (折射率 $n = 3.4$, 半径 $r = 0.2a$) 周期性排列而成的二维光子晶体结构, $a = 1 \mu\text{m}$ 为相邻介质柱的间距, 通过故意改变其中某几个介质柱的半径而引入缺陷. 图 1(a)表示包含有一个缺陷的光子晶体结构, 而图 1(b)包含有两个缺陷, 是两个缺陷的耦合结构. 缺陷介质柱的半径用 R 表示, 缺陷之间的距离固定为 $d = 2a$. 在这里, 我们关注电场方向平行于介质柱的横电波模 (TM). 数值计算所使用的格点在两个方向上均取为 $a/16$, 采用了最佳匹配层的边界条件, 厚度取为 $0.5 \mu\text{m}$. 计算结果表明, TM 模的第一禁带落在 $0.29c/a$ 到 $0.42c/a$ 之间, 其中 c 是真空中光速. 下面我们分别讨论单极缺陷 ($R < 0.2a$) 和双极缺陷 ($R > 0.2a$)^[19] 这两种典型缺陷的耦合情况.

首先, 我们选择 $R = 0.066a$ 作为单极缺陷的代

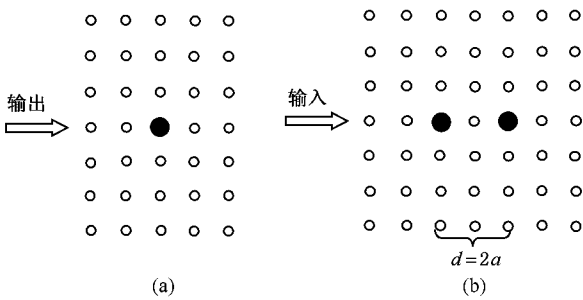


图 1 二维光子晶体缺陷及耦合模型 (a)单缺陷结构 (b)双缺陷耦合结构

表, 其单缺陷的共振频率 $\Omega = 0.3557c/a$, 形状如图 2(a)中的细虚线所示. 与图 1(b)对应的两个缺陷的耦合结构, 其透射谱形状如图 2(a)细实线所示, 是典型的频率分裂, 共振频率出现在 Ω 的两侧, 分别是 $\Gamma_1 = 0.3475c/a$ 和 $\Gamma_2 = 0.3638c/a$. 当我们将缺陷的个数增至三个时 (缺陷间距保持不变), 其透射谱形状变为三峰结构, 如图 2(a)的粗实线所示. 明显地, 我们看到了耦合结构的中央共振峰相对于 Ω 的偏离, 约为 $-0.0004c/a$. 如果采用了含两个耦合参数的 TB, 那么这个偏离就无法体现出来. 三个共振频率依次是 $\Gamma_1 = 0.3442c/a$, $\Gamma_2 = 0.3553c/a$ 和 $\Gamma_3 = 0.3673c/a$. 当耦合缺陷的个数增至四时, 其透射谱形状是四峰结构, 如图 2(a)的粗虚线所示. 四个共振频率依次是 $\Gamma_1 = 0.3426c/a$, $\Gamma_2 = 0.3503c/a$, $\Gamma_3 = 0.3603c/a$, 和 $\Gamma_4 = 0.3691c/a$. 正如我们在第二部分的讨论, 利用含有三个缺陷的耦合结构的共振频率再加上单缺陷的共振频率, 就可由 (5) 式不难算出三个耦合参数的具体值, 依次是 $\alpha_1 =$

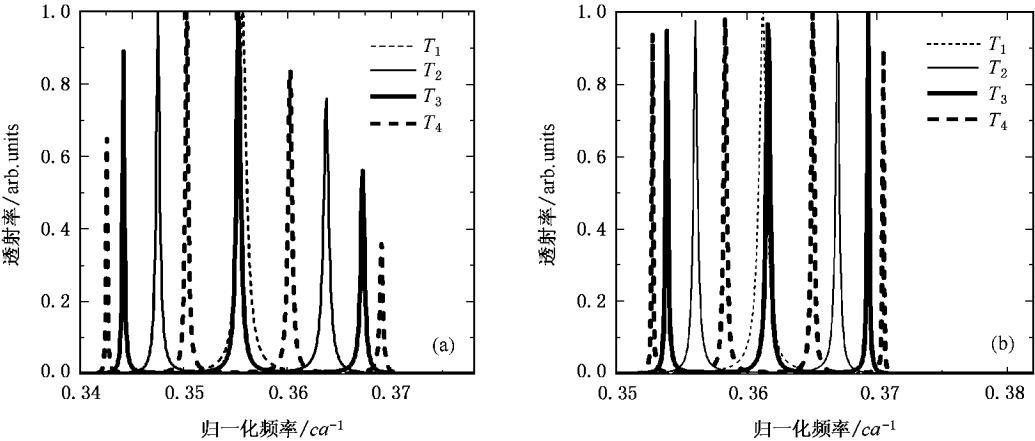


图 2 缺陷耦合距离 $d = 2a$ 的二维光子晶体单一缺陷、两缺陷耦合、三缺陷耦合和四缺陷耦合系统的透射谱的比较 (a)耦合半径 $R = 0.066a$ (b)耦合半径 $R = 0.300a$

$-0.0391c/a$, $\beta_1 = 0.0069c/a$ 和 $\Delta\alpha = 0.0023c/a$. 那么, 这些耦合参数是否也适合于其他数目的缺陷耦合呢? 其实只要简单地把它们代入(2)式, 不难算得两个缺陷耦合结构的共振频率分别应是 $0.3474c/a$ 和 $0.3637c/a$. 这与刚才给出的模拟结果 $0.3475c/a$ 和 $0.3638c/a$ 是非常一致. 同理, 由(6)式也能够算出含有四个缺陷的耦合结构的共振频率应是 $0.3426c/a$, $0.3503c/a$, $0.3604c/a$, $0.3691c/a$, 显然也与相应的模拟结果一致. 这就说明, 采用严格的 TB 求得的耦合参数, 既反映因耦合导致的共振频率移动, 又能准确地描述了因耦合产生的频率分裂.

对于双极型缺陷, 我们选择 $R = 0.300a$ 作为代

表进行模拟计算. 结果如图 2(b)所示. 我们也清楚地看到了含有三个缺陷的耦合结构的中央共振频率相对于单缺陷共振频率的移动, 约为 $0.0003c/a$. 类似于上面的讨论, 由模拟计算可得到单缺陷的共振频率 $\Omega = 0.3613c/a$, 加上三缺陷结构的共振频率 $\Gamma_1 = 0.3539c/a$, $\Gamma_2 = 0.3616c/a$, 和 $\Gamma_3 = 0.3693c/a$, 容易算得 $\alpha_1 = -0.0075c/a$, $\beta_1 = 0.0226c/a$ 和 $\Delta\alpha = -0.0017c/a$. 然后利用相关公式计算二缺陷系统和四缺陷系统的共振频率, 再与相应的模拟计算结果比较. 我们把结果列在表 1. 可以看到, 对于双极型缺陷, 我们的处理方法同样是非常有效的.

在我们所采用的计算模型中, 缺陷间距 d 取得

表 1 TB 方法计算结果和模拟结果比较($R = 0.300a$, $d = 2a$)

	双缺陷耦合共振频率(c/a)		四缺陷耦合共振频率(c/a)			
	Γ_1	Γ_2	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4
TB 方法计算结果	0.3562	0.3670	0.3527	0.3582	0.3649	0.3704
FDTD 模拟结果	0.3561	0.3670	0.3528	0.3583	0.3650	0.3705

比较小, 因而 $\Delta\alpha$ 有较大的值. 当 d 增大如取 $d = 3a$, 由于相邻缺陷能量的耦合程度减弱导致 $\Delta\alpha$ 变小, 这时采用只含有两个耦合参数的近似 TB 可以得到较好的结果. 如果把 d 减为 a , 即当两个缺陷介质柱相邻时, 模拟计算显示此时的共振频率移动非常显著, $\Delta\alpha$ 值甚至大于另外的两个耦合参数. 在这种情况下, 采用只含有两个耦合参数的近似 TB 已经完全无法描述共振频率的移动. 而采用严格的 TB 却发现, 理论结果与模拟结果仍能较好地符合, 但符合程度不如 $d = 2a$ 情形. 主要原因是, 当两缺陷介质柱处在相邻状态时, 其各自的场分布受到对方的强烈影响($\Delta\alpha$ 值很大是很好的说明), 这时仍

把它们看成几乎独立的缺陷而用 TB 方法处理, 就会带来误差.

4. 结 论

用紧束缚方法讨论了光子晶体缺陷耦合而产生的共振频率的分裂和移动, 重点放在如何正确反映耦合结构的共振频率相对于原单缺陷共振频率的移动. 分析表明, 用包含两个耦合参数的紧束缚方法不可能发现这种客观存在着的移动, 只有采用了包含三个耦合参量的严格紧束缚方法才能正确描述, 并且能够准确地得出因耦合而产生的频率分裂.

[1] Joannopoulos J D , Meade R D , Winn J N 1995 *Photonic Crystals : Molding the flow of Light*(Princeton University Press)

[2] Yariv A , Xu Y , Lee R K , Scherer A 1999 *Opt . Lett .* **24** 711

[3] Bayer M , Gutbrod T , Forchel A , Reinecke T L , Knipp P A , Werner R , Reithmaier J P 1999 *Phys . Rev . Lett .* **83** 5374

[4] Bayindir M , Temelkuran B , Ozbay E 2000 *Phys . Rev . Lett .* **84** 2140(2000 *Phys . Rev . B* **61** R11855 ; 2000 *Appl . Phys . Lett .* **77** 3902)

[5] Bayindir M , Ozbay E 2000 *Phys . Rev . B* **62** R2247

[6] Bayindir M , Ozbay E , Temelkuran B , Sigalas M M , Soukoulis C M , Biswas R , Ho K M , 2001 *Phys . Rev . B* **63** 081107

[7] Lan S , Nishikawa S , Wada O 2000 *Appl . Phys . Letter .* **78** 2101

[8] Lan S , Nishikawa S , Ishikawa H , Wada O 2001 *J . Appl . Phys .* **90** 4321

[9] Lin X S , Chen X W , Lan S 2005 *Chin . Phys . Lett .* **22** 1698

[10] Wang H , Li Y P 2001 *Acta Phys . Sin .* **50** 2172(in Chinese) 王辉、李永平 2001 物理学报 **50** 2172]

[11] Zhuang F , Xiao S S , He J P , He S L 2002 *Acta Phys . Sin .* **51** 2167(in Chinese) 庄 飞、肖三水、何江平、何赛灵 2002 物理学报 **51** 2167]

[12] Lin X S , Chen X W , Lan S 2005 *Chin . Phys .* **14** 2034

[13] Feng L J , Jiang H T , Li H Q , Zhang Y W , Chen H 2005 *Acta Phys . Sin .* **54** 2103(in Chinese) 冯丽娟、江海涛、李宏强、张治文、陈 宏 2005 物理学报 **54** 2103]

- [14] Huang X Q , Cui Y P 2003 *Chin . Phys . Lett .* **20** 1721
[15] Liu D D , Chen G D , Xu Z F 2006 *Chin . Phys . Lett .* **23** 591
[16] Yablonovitch E , Gmitter T J , Meade R D , Rappe A. M. , Brommer K D , Joannopoulos J D 1991 *Phys . Rev . Lett .* **67** 3380
[17] Huang K 1985 *Solid State Physics* (Beijing : Heigher Education press) p189—193 in Chinese [黄 昆 1985 固体物理学(北京 : 高等教育出版社)第 189—193 页]
[18] Lan S , Nishikawa S , Sugimoto Y , Ikeda N , Asakawa K , Ishikawa H 2002 *Phys . Rev . B* **65** 165208
[19] Villeneuve P R , Fan S , Joannopoulos J D 1996 *Phys . Rev . B* **54** 7837

Resonant frequency shift in coupled photonic crystal defects described by the tight-binding method

Cai Xu-Hong Lin Xu-Sheng Shi Quan Zhao Nian-Shun

(*Department of Physics , Shantou University , Shantou 515063 , China*)

(Received 18 August 2006 ; revised manuscript received 29 September 2006)

Abstract

The resonant frequency splitting caused by photonic crystal (PC) defect coupling can be well described by the tight-binding (TB) approximation in which only two coupling parameters are used. However , the description of the resonant frequency shift that represents the difference between the center resonant frequency of the coupled structure containing odd number of defects and the resonant frequency of a single defect , requires the employment of the rigorous TB that involves three coupling parameters. By using the relation between the coupling parameters and the resonant frequencies , we extract the values of the three coupling parameters from the simulation of a three-coupled-defect structure and use them to predict the resonant frequency shift and splitting of the coupled structures consisting of arbitrary number of PC defects. They are in good agreement with the simulation results based on the finite-difference time-domain method.

Keywords : photonic crystal defect coupling , tight-binding method , resonant frequency splitting , resonant frequency shift

PACC : 4270Q , 4280L