

修正的频域有限差分法在二维金属光子晶体分析中的应用*

黎燕林^{1)2)†} 薛谦忠¹⁾ 杜朝海¹⁾²⁾ 郝保良¹⁾²⁾

1) (中国科学院电子学研究所, 中国科学院高功率微波源与技术重点实验室, 北京 100190)

2) (中国科学院研究生院, 北京 100190)

(2009 年 5 月 4 日收到; 2009 年 8 月 3 日收到修改稿)

与介质光子晶体相比, 金属光子晶体的带隙特性在毫米波和亚毫米波波段有着重要的应用价值. 基于 Yee 网格的频域有限差分法推导得出的本征模方程, 求解后能方便而又可靠地得出介质光子晶体的带隙图和场分布. 但由于金属与介质的本质差异, 该方法不能直接应用于金属光子晶体. 文中引入了金属表面边界条件, 推导了二维金属周期结构的光子带隙本征模方程. 通过数值计算, 得出了不同晶格结构(正方/三角格子)下两种模式(TE/TM)的全禁带特性, 并与介质周期结构的禁带特性进行对比, 分析了金属周期结构在模式选择和器件集成方面的优点.

关键词: 金属光子晶体, 频域有限差分法, 全禁带

PACC: 4270Q, 7155D

1. 引言

光子晶体(photonic crystal, PC)^[1,2]是一种由折射率不同的媒质(介质/金属)周期排列构成的人工材料, 其带隙特性使光的传播控制和电磁波的模式筛选成为可能, 该领域的研究已取得了令人瞩目的成果^[3,4], 并且引发了人们更深入的探索. 在毫米波和亚毫米波波段, 金属吸收引起的损耗可以忽略, 金属周期结构在尺寸和重量上优于同一频段的介质周期结构^[5], 同时金属周期结构的带隙更宽, 使得结构参数的选择更自由, 因此金属光子晶体(metallic photonic crystal, MPC)有着重要的应用前景^[6-10].

为了弄清金属周期结构的带隙特性, 人们提出了一些基于 Maxwell 方程的计算方法, 其中包括修正的平面波展开法(plan wave expansion, PWE)^[11,12], 时域有限差分法(finite-difference time-domain, FDTD)^[13,14]和传输矩阵法(transfer matrix method, TMM)^[15-17]. PWE 方法收敛性差, 且难以应用于复杂结构(如缺陷结构); FDTD 方法激励设置复杂, 同 TMM 方法一样, 不能直接得出色

散关系. 近几年发展起来的基于 Yee 网格的频域有限差分法(finite-difference frequency-domain, FDFD)^[18-22], 利用中心差分公式直接将 Maxwell 方程离散化, 建立电磁波在 PC 中传播的本征模方程, 数值求解后能直接得到色散曲线和场分布. 结合等效介质理论(index averaging, IA)^[23,24]和完全匹配层思想(perfectly matched layer, PML)^[25], FDFD 的计算结果达到了很高的精度^[19]和很快的速度^[22].

金属是一种特殊的介质, 其介电常数的虚部很大, 对入射的电磁波产生很强的衰减, 在其表面产生跳变, 内部衰减为零; 而一般介质介电常数虚部为零, 其内部场与入射场保持着连续性. 电磁波在金属与一般介质的边界和内部的传播差异, 使得该方法虽适用于介质光子晶体(dielectric photonic crystal, DPC), 却不能直接应用于 MPC.

本文在二维 DPC FDFD 的基础上, 引入金属表面的边界条件, 推导出二维 MPC 的本征模方程. 分别计算了正方/三角格子 TE 和 TM 模的色散曲线, 与实空间有限差分法(real-space finite-difference, RSFD)^[26]得出的结果进行比较, 二者一致性很好. 在此基础上研究其全禁带特性, 分析了 MPC 和 DPC 在带隙特性和局域特性方面的差异, 进而讨论了

* 国家自然科学基金(批准号: 60871051, 60871047)资助的课题.

† E-mail: lyi.21r@gmail.com

MPC 的重要应用价值.

2. FDFD 算法

2.1. 本征模方程

图 1 所示为二维 PC 横截面示意图,常见的结构为图 1(a)中的正方格子和图 1(b)中的三角格子,晶格常数为 a ,圆柱媒质的半径为 r ,虚线所围区

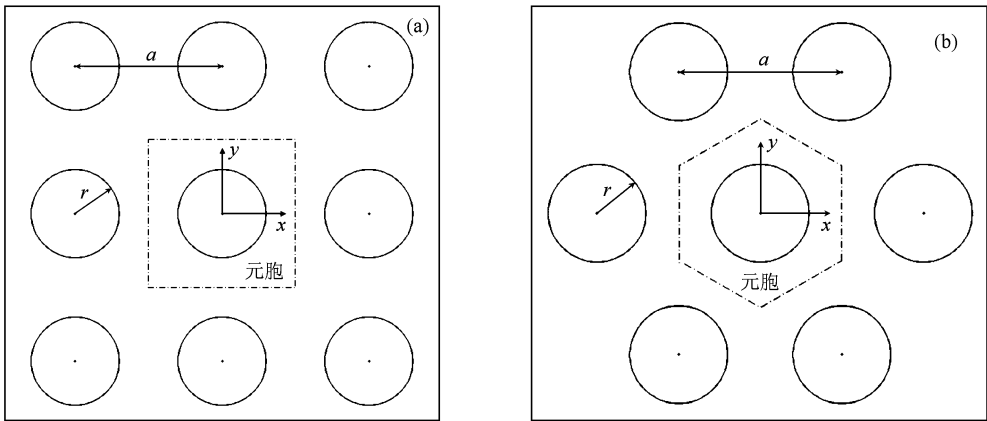


图 1 二维 PC 横截面 (a) 正方格子, (b) 三角格子

若媒质为金属, σ 很大, $\mu = 1$. 在毫米波和亚毫米波波段, 其趋肤深度 δ_s 远小于微米量级, 绝大部分电流都集中于接近导体表面极薄的区域内, 可以认为金属柱内 $\mathbf{E} = 0$. 在整个元胞区域内, (1), (2) 式可写为

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu_0\mathbf{H}, \tag{3}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega\varepsilon_0\mathbf{E}. \tag{4}$$

考虑 PC 结构的平面传播 (z 向波数 $k_z = 0$) 特性, 电磁波可以分解为 TE (电磁分量为 $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$, $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$) 和 TM (电磁分量为 $\mathbf{E} = (0, 0, E_z)$, $\mathbf{H} = (H_x, H_y, 0)$) 两种模式, 根据图 2 所示的 Yee 网格, 利用中心差分公式将 (3), (4) 式离散化可得

TE 模式时,

$$\begin{aligned} -j\omega\mu_0 H_{z,(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})} &= \frac{E_{y,(i+1,j+1/2)} - E_{y,(i,j+1/2)}}{\Delta x} \\ &\quad - \frac{E_{x,(i+1/2,j+1)} - E_{x,(i+1/2,j)}}{\Delta y}, \\ j\omega\varepsilon_0 E_{x,(i+\frac{1}{2},j)} &= \frac{H_{z,(i+1/2,j+1/2)} - H_{z,(i+1/2,j-1/2)}}{\Delta y}, \\ j\omega\varepsilon_0 E_{y,(i,j+\frac{1}{2})} &= -\frac{H_{z,(i+1/2,j+1/2)} - H_{z,(i-1/2,j+1/2)}}{\Delta x}. \end{aligned} \tag{5}$$

域为晶体的元胞 (unit cell).

假设时间因子为 $e^{j\omega t}$, 一般媒质的频域 Maxwell 旋度方程可写为

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu_0\mu\mathbf{H}, \tag{1}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega\varepsilon_0\varepsilon\mathbf{E} + \sigma\mathbf{E}, \tag{2}$$

其中 μ, ε 和 σ 分别为媒质的相对磁导率、相对介电常数和电导率, μ_0 和 ε_0 为真空的磁导率和介电常数.

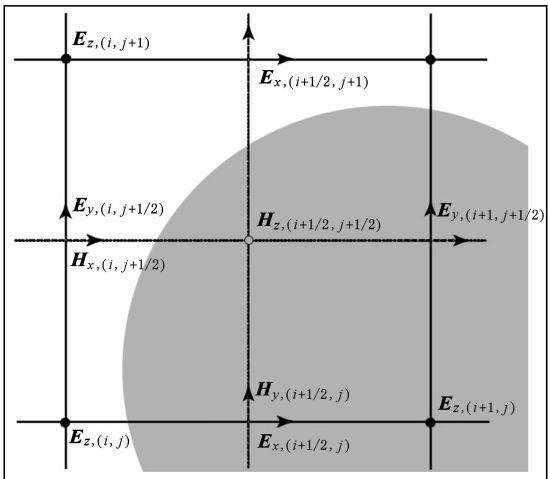


图 2 二维 Yee 网格

TM 模式时,

$$\begin{aligned} -j\omega\varepsilon_0 E_{z,(i,j)} &= \frac{H_{y,(i+1/2,j)} - H_{y,(i-1/2,j)}}{\Delta x} \\ &\quad - \frac{H_{x,(i,j+1/2)} - H_{x,(i,j-1/2)}}{\Delta y}, \\ -j\omega\mu_0 H_{x,(i,j+\frac{1}{2})} &= \frac{E_{z,(i,j+1)} - E_{z,(i,j)}}{\Delta y}, \end{aligned}$$

$$-j\omega\mu_0\mathbf{E}_{y,(i+\frac{1}{2},j)}=-\frac{\mathbf{E}_{z,(i+1,j)}-\mathbf{E}_{z,(i,j)}}{\Delta x}.\tag{6}$$

电磁分量下标数值即所在网格的编号,(5),(6)两式可记为

TE 模
$$\begin{cases} j\omega\mu_0\mathbf{H}_z=\mathbf{U}_y\mathbf{E}_x-\mathbf{U}_x\mathbf{E}_y, \\ j\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_x=\mathbf{V}_y\mathbf{H}_z, \\ j\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_y=-\mathbf{V}_x\mathbf{H}_z. \end{cases}\tag{7}$$

TM 模
$$\begin{cases} j\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_z=-\mathbf{V}_y\mathbf{H}_x+\mathbf{V}_x\mathbf{H}_y, \\ j\omega\mu_0\mathbf{H}_x=-\mathbf{U}_y\mathbf{E}_z, \\ j\omega\mu_0\mathbf{H}_y=\mathbf{U}_x\mathbf{E}_z. \end{cases}\tag{8}$$

其中 $\mathbf{E}_z$ 和 $\mathbf{H}_z$ 为向量,分别包含了两种模式下所有格点垂直于柱体方向的电/磁场分量, $\mathbf{U}_x, \mathbf{U}_y, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y$ 为方阵,由 Maxwell 旋度方程的差分形式和 Bloch 边界条件所决定.(7),(8)式消元后可简化为 TE 模式时,

$$-(\mathbf{U}_y\mathbf{V}_y+\mathbf{U}_x\mathbf{V}_x)\mathbf{H}_z=\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\mathbf{H}_z,\tag{9}$$

TM 模式时,

$$-(\mathbf{V}_y\mathbf{U}_y+\mathbf{V}_x\mathbf{U}_x)\mathbf{E}_z=\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\mathbf{E}_z.\tag{10}$$

此即为二维 MPC 本征模方程.根据 Yee 网格的中心差分公式和 Bloch 边界条件可知,DPC 与 MPC 本征模方程的 $\mathbf{U}_x, \mathbf{U}_y, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y$ 具有相同的矩阵形式,不同的是后者介电常数为 1 (不考虑吸收损耗),不显含于本征模方程中.介电特性转变为导电特性,这是 MPC 与 DPC 的区别之一.

另外,MPC 除了满足 Bloch 定理^[19],其电/磁场在金属柱表面 S 还满足的边界条件为

$$\left.\frac{\partial\mathbf{H}_z}{\partial\mathbf{n}}\right|_s=0\quad(\text{TE 模}),\tag{11}$$
$$\mathbf{E}_z|_s=0\quad(\text{TM 模}),$$

其中 $\mathbf{n}$ 为金属柱表面法向单位矢量.入射场在金属表面发生跳变且在内部衰减为零,而在介质表面保持连续,这使得二者本征模方程系数矩阵的结构产生了变化,不能将现有的 FDFD 算法直接应用于 MPC.

综上所述,必须在 DPC 本征模方程的基础上,

根据(9)—(11)式做出相应修改,才能将 FDFD 应用于 MPC 特性的计算和分析.对于 TE 模式而言,若(9)式左边的某一点位于金属柱内,则将该点的场等效于其系数所在矩阵行的对角元素对应点的场.例如,若系数矩阵的第 j 行为 $(\cdots a_i \cdots a_j \cdots a_k \cdots)$,对应 $\mathbf{H}_z$ 分量为 $(\cdots H_{zi} \cdots H_{zj} \cdots H_{zk} \cdots)'$,若 H_{zi} 位于金属柱内,则将其等效为 H_{zj} ,修改后该行变为 $(\cdots 0 \cdots a_i + a_j \cdots a_k \cdots)$.这样,当 Yee 网格的边长 $\Delta x \rightarrow 0, \Delta y \rightarrow 0$ 时,(11)式得到满足.对于 TM 模式而言,若(10)式左边的某一点在金属柱内,则直接将其系数设置为零.

2.2. 色散关系及场分布

通过解本征模方程,可以得出 PC 中能存在的电磁波频率和对应频率下 $\mathbf{H}_z/\mathbf{E}_z$ 的相对大小.当 $\mathbf{k}$ 取遍不可约 Brillouin 区边界时,便得到归一化频率 $\omega a/(2\pi c)$ 随 $\mathbf{k}$ 变化的轨迹,即色散关系.色散图上的每一条曲线,都对应着一个电磁场模式.当 $\mathbf{k}$ 为某一定值时,该模式的场分布可以通过解对应本征值 $\omega a/(2\pi c)$ 的本征向量得到.

计算时,为了平衡精度和速度这一对矛盾,选取合适的网格数目非常必要.通过多次尝试,当网格数增加到某一数时,色散曲线不再发生变化,则此时的网格数可以保证计算精度.同时,注意到本征方程的系数矩阵为稀疏矩阵,运用稀疏矩阵的存储和运算法则,可以大大减少占用内存和计算时间.

3. 数值计算结果

3.1. FDFD 与 RSFD 计算结果比较

设置划分元胞的网格数 $= 41 \times 41$,将 FDFD 计算的结果(圆圈)与文献[26]的结果(虚线)进行比较,二者符合得很好,如下图 3 所示.

表 1 记录了 FDFD 结果相对于 RSFD 结果的最大误差,由算法和网格点数不同带来的误差在可接受的范围之内.

表 1 FDFD 与 RSFD 计算结果比较

样本	绝对误差	相对误差/%
正方形子 TE 模	0.0270	1.96
正方形子 TM 模	0.0188	4.02
三角形子 TE 模	0.0259	1.68
三角形子 TM 模	0.0325	5.26

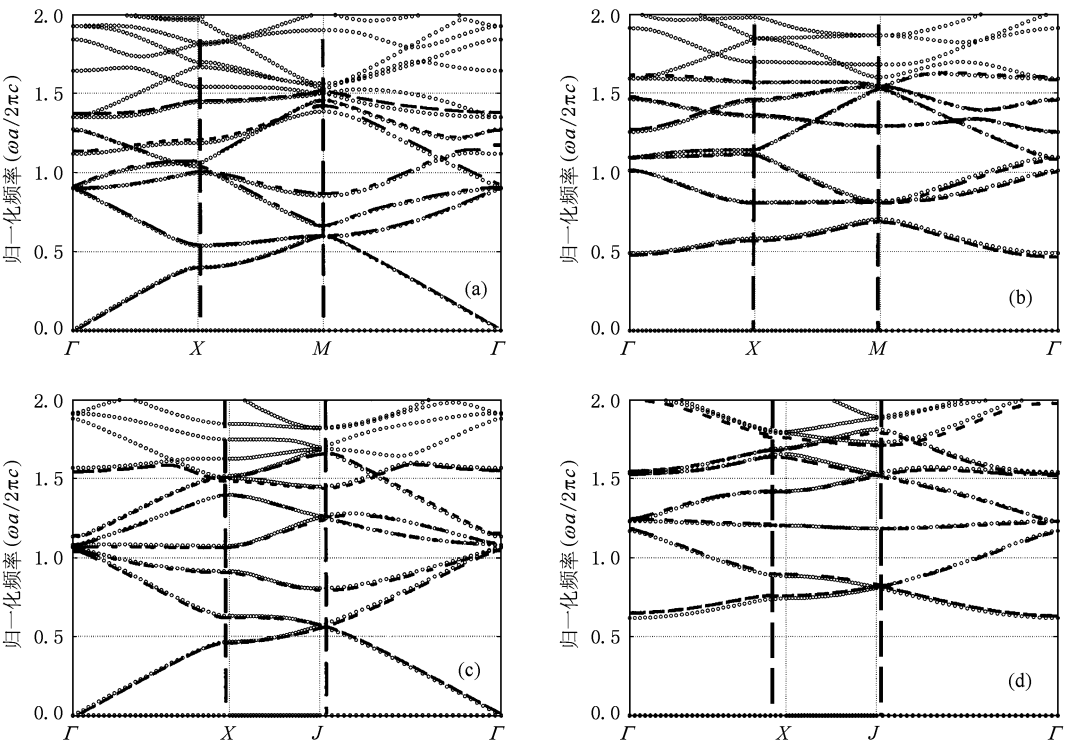


图3 FDFD与RSFD计算结果比较 (a) 正方格子TE模PBG, (b) 正方格子TM模PBG, (c) 三角格子TE模PBG, (d) 三角格子TM模PBG

3.2. MPC与DPC带隙特性比较

为了进一步研究结构参数对带隙的影响^[27],需要画出PC的全禁带,即 k 取遍不可约Brillouin区边界时,归一化频率 $\omega a/2\pi c$ 随半径周期比 r/a 变化的轨迹.同时为便于MPC与DPC带隙特性的比较,给

出了运用FDFD方法得到的DPC($\varepsilon=8.9$)全禁带. 由图4和图5对比可以看出,无论是正方格子还是三角格子,MPC TE模的带隙均宽于DPC TE模,前者两种结构的最大归一化宽带 $\Delta\omega_{\max}$ 分别为0.3381和0.3241,后者两种结构的 $\Delta\omega_{\max}$ 分别为0.0520和0.0807,显然前者禁带比后者宽得多.

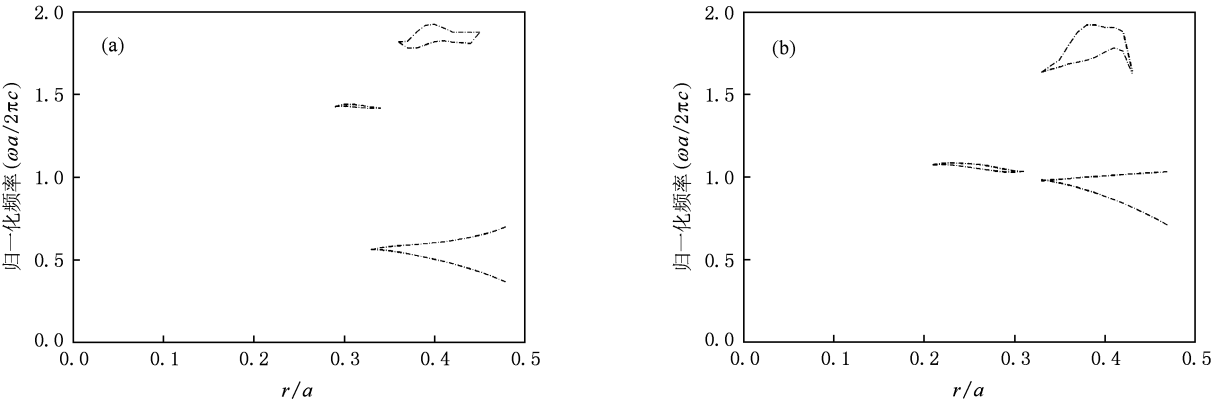


图4 MPC TE模全禁带 (a) 金属正方格子TE模全禁带, (b) 金属三角格子TE模全禁带

由图6和图7对比可以看出,MPC TM模的带隙宽于DPC TM模,且存在截止频率,低于该频率的频段不存在任何模式,即出现了第一禁带. MPC TM

模两种结构的 $\Delta\omega_{\max}$ 分别为1.3070和2.0210,远远大于DPC TM模对应的 $\Delta\omega_{\max}$.当 $r/a \rightarrow 0.5$ 时,禁带几乎覆盖了所有频率,此时MPC呈现“电壁”的特

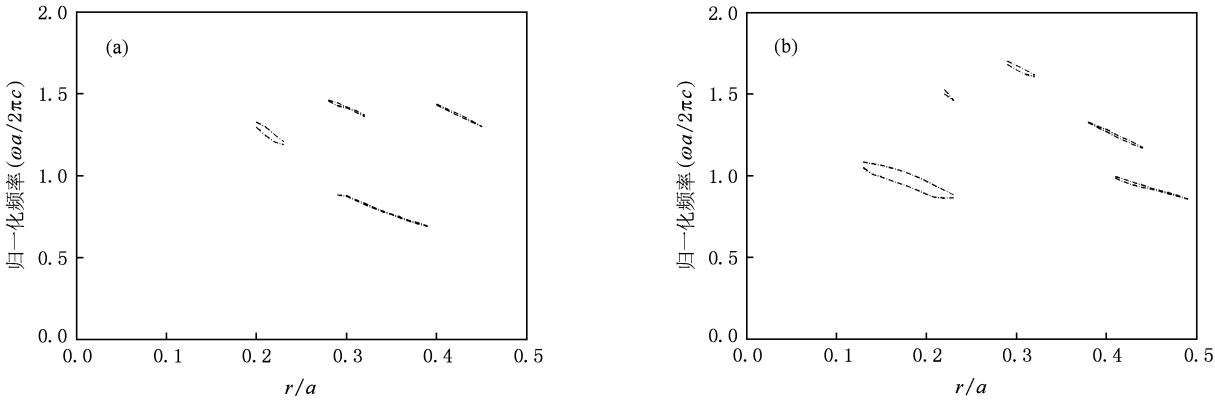


图5 DPC TE 模全禁带 (a)介质正方格子 TE 模全禁带,(b)金属三角格子 TE 模全禁带

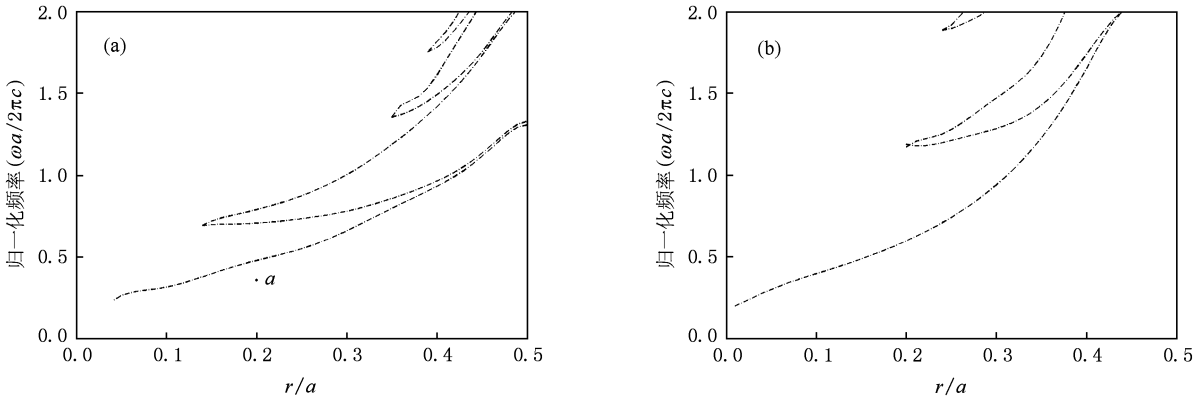


图6 MPC TM 模全禁带 (a)金属正方格子 TM 模全禁带,(b)介质三角格子 TM 模全禁带

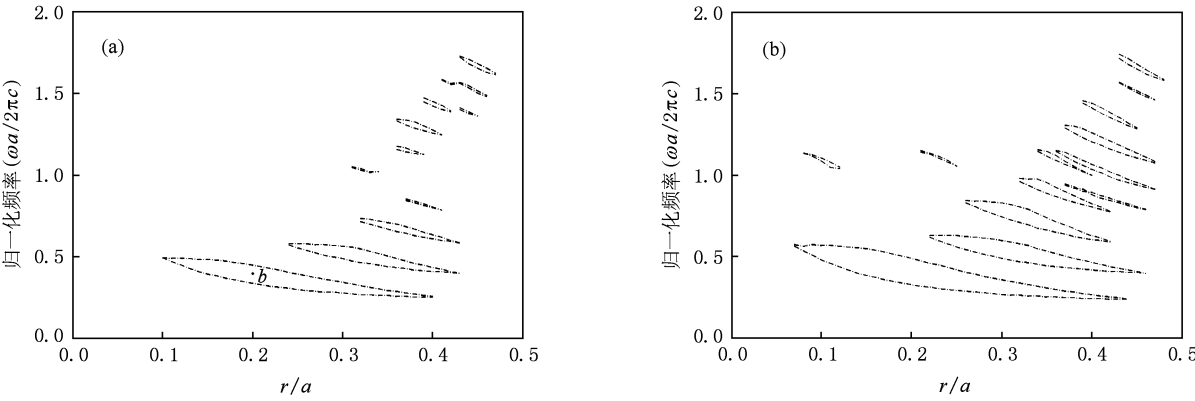


图7 DPC TM 模全禁带 (a)介质正方格子 TM 模全禁带,(b)介质三角格子 TM 模全禁带

性,这是由于当电磁波频率低于金属柱填充比决定的等离子体频率时,电子运动屏蔽了平行于金属柱的电场^[28].这再次证明了修正 FDFD 的可靠性.

同时,运用 FDFD 还能方便地计算出某一模式的场分布,通过场分布的对比,可以看出 MPC 与 DPC 局域特性的差异.图 8 给出了图 6(a)和图 7(a)中圆点标注的缺陷模在 5×5 点缺陷超晶格中的场分布.

从图 6—8 可以看出,由于缺陷模 a 处于比较宽的禁带范围内,其场分布比较紧凑,而且金属柱内不存在电磁场,即 MPC 对电磁波的局域特性比较好,其中传播的电磁波能量耗散少,处于禁带的模式能很好地在缺陷中传播.

PC 的应用基于其禁带对电磁波的选模及传播控制,所以大禁带是设计 PC 结构的基本要求^[29],而且随着器件的规模急剧增大,集成度对器件的尺寸和重量

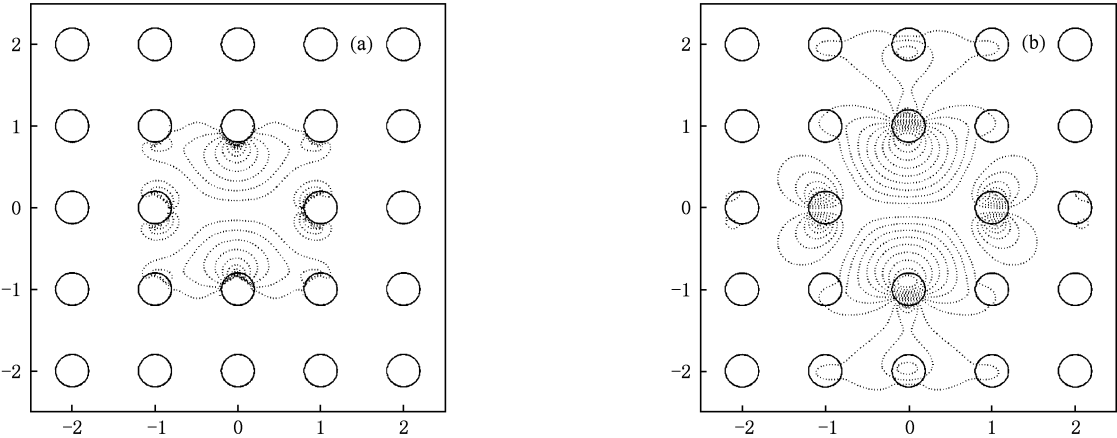


图 8 E_z 场分布 (a) MPC 缺陷模 ($\omega a/2\pi c=0.3775$), (b) DPC 缺陷模 ($\omega a/2\pi c=0.3941$)

的要求也愈加苛刻^[30]. 由上述计算结果可见, DPC 的禁带狭窄, 难以从中找到稳定的工作模式; 而 MPC 在模式选择上有更大的自由, 处于宽带隙中的模式抗干扰能力也更强. 同时, 对于 TM 模而言, 若选取相同的工作频率, 通过合理设计, 可以使 MPC 的填充比比 DPC 的填充比小很多, 因此前者尺寸更小、重量更轻.

表 2 记录了 MPC 与 DPC 的 $\Delta\omega_{\max}$ 和最大归一化中心宽带 $\Delta\omega_{m,\max}$ 及分别对应的 r/a .

表 2 FDFD 与 RSFD 计算结果比较

媒质	晶格	模式	$(\Delta\omega_{\max}, r/a)$	$(\Delta\omega_{m,\max}/\%, r/a)$
金属	正方格子	TE	(0.3381, 0.48)	(63.53, 0.48)
		TM	(1.3070, 0.50)	(200, 0.50)
	三角格子	TE	(0.3241, 0.47)	(37.38, 0.47)
		TM	(2.0210, 0.45)	(200, 0.45)
介质 ($\varepsilon=8.9$)	正方格子	TE	(0.0520, 0.21)	(4.09, 0.21)
		TM	(0.1104, 0.20)	(29.71, 0.22)
	三角格子	TE	(0.0807, 0.18)	(8.65, 0.20)
		TM	(0.1704, 0.17)	(39.54, 0.19)

4. 结 论

本文运用修正的 FDFD 研究了 MPC 的带隙特性, 并与 DPC 的带隙特性进行比较, 发现 MPBG 比 DPBG 宽得多, 且 MPC TM 模的第一禁带位于 0 频率与截止频率之间, 使得 MPC 具备了一些 DPC 不能取

代的优点: 禁带宽度大, 局域特性好, 便于模式选择和提高工作模式稳定性; 尺寸小, 重量轻, 便于集成.

修正的 FDFD 方法将是 MPC 毫米波和亚毫米波器件设计的有力工具, 本文计算得到的 MPBG 特性, 为毫米波和亚毫米波真空器件的应用提供了理论依据. 利用 MPBG 特性, 三角格子 MPC 已经很好地应用于 17 和 140 GHz 谐振腔中^[8,9].

[1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059

[2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486

[3] Attila M, Chen J C, Kurland I, Fan S H, Villeneuve P R, Joannopoulos J D 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3787

[4] Brechet F, Marcou J, Pagnoux D, Roy P 2000 *Opt. Fiber Technol.* **6** 181

[5] Sigalas M M, Chan C T, Ho K M, Soukoulis C M 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11744

[6] Sievenpiper D F, Sickmiller M E, Yablonovitch E 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2480

[7] Pendry J B, Holden A J, Stewart W J, Youngs I 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4773

[8] Shapiro M A, Brown W J, Mastovsky I, Sirigiri J R, Temkin R J 2001 *Phys. Rev. Special Topics: Accelerators and Beams* **4** 042001

[9] Sirigiri J R, Kreischer K E, Machuzak J, Mastovsky I, Shapiro M A, Temkin R J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5628

[10] Dong J W, Hu X H, Wang H Z 2007 *Chin. Phys.* **16** 1057

[11] Kuzimiak V, Maradudin, Pincemin F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 1683

[12] Gong Y B, Lu Z G, Wang W X, Wei Y Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3590 (in Chinese) [宫玉彬、路志刚、王文祥、魏彦玉 2006 物理学报 **55** 3590]

[13] Qiu M, He S L 2000 *J. App. Phys.* **87** 8268

[14] Chen H B, Chen X S, Li H J, Lu W, Wang L L, Wang S W, Xia H, Zeng Y, Zhang J B, Zhou R L 2006 *Acta Phys. Sin.* **57** 3506 (in Chinese) [陈洪波、陈效双、李宏建、陆 卫、王玲玲、王少伟、夏 辉、曾 勇、张建标、周仁龙 2006 物理学报 **57** 3506]

[15] Pendry J B, Mackinnon A 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2772

[16] Sigalas M, Soukoulis C M, Economou E N 1993 *Phys. Rev. B* **48** 14121

[17] Hao B L, Liu P K, Tang C J 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1862 (in Chinese) [郝保良、刘濮鲲、唐昌建 2006 物理学报 **55** 1862]

[18] Zhu Z M, Brown T G 2002 *Opt. Express* **10** 853

[19] Yu C P, Chang H C 2004 *Opt. Express* **12** 1397

[20] Chang H C, Yu C P 2004 *Opt. Express* **12** 6165

[21] Ando T, Nakayama H, Numata S, Yamauchi J, Nakano H 2002 *J. Lightwave Technol.* **20** 1627

[22] Guo S P, Wu F, Albin S 2004 *Opt. Express* **12** 1741

[23] Shen L F, He S L, 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]

[24] Guo J Y, Chen H, Li H Q, Zhang Y W 2008 *Chin. Phys.* **17** 2544

[25] Berenger J P 1994 *J. Comput. Phys.* **114** 185

[26] Smirnova E I, Chen C, Shapiro M A, Sirigiri J R, Temkin R J 2002 *J. App. Phys.* **91** 960

[27] Cai X H, Zheng W H, Ma X T, Ren G, Xia J B 2005 *Chin. Phys.* **14** 2507

[28] Arriaga J, Ward A J, Pendry J B 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1874

[29] Xiao S S, Shen L F, He S L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2858 (in Chinese) [肖三水、沈林放、何赛灵 2002 物理学报 **51** 2858]

[30] Chen X W, Lin X S, Lan S 2005 *Chin. Phys.* **14** 366

Modified finite-difference frequency-domain method for two-dimensional metallic photonic crystal analysis^{*}

Li Yan-Lin^{1)2)†} Xue Qian-Zhong¹⁾ Du Chao-Hai¹⁾²⁾ Hao Bao-Liang¹⁾²⁾

1) (Key Laboratory of High Power Microwave Sources and Technologies, Institute of Electronics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

2) (Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 4 May 2009; revised manuscript received 3 August 2009)

Abstract

In contrast to dielectric photonic crystals, the propagation characteristics of metallic photonic crystals are of great importance in millimeter wave and submillimeter wave applications. It is convenient and reliable to get the band diagrams and field distributions of photonic crystals after solutions of the eigenmode equations, which is derived from the Yee-mesh-based finite-difference frequency-domain method. However, this method cannot be used for the analysis of metallic photonic crystals because of the essential distinctions between metal and dielectric. Based on this method, we derive eigenmode equations for two-dimensional metallic photonic crystals by introducing the metal surface boundary conditions. And then, after some numerical calculations, the transverse electric mode and the transverse magnetic mode global band gaps of different lattice structures are obtained, including both square lattice and triangular lattice. Finally, we discuss the advantages of metallic periodic structures in mode selection and device integration by the comparison between metallic photonic band gap and dielectric photonic band gap.

Keywords: metallic photonic crystal, finite-difference frequency-domain, global band gaps

PACC: 4270Q, 7155D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60871051, 60871047).

[†] E-mail: lyl.21r@gmail.com