含有理想导体的准分形结构光子晶体的能带*

李 岩^{1 2 3}³ 郑瑞生³ 冯玉春³ 牛憨笨^{1 3}

'(中国科学院西安光学精密机械研究所,西安 710068)

²(中国科学院研究生院 北京 100864)

3(深圳大学光电子学研究所,广东省光电子器件与系统重点实验室,深圳 518060)

(2003年11月21日收到 2004年1月18日收到修改稿)

用时域有限差分方法计算了一组具有相似几何结构且包含理想金属材料的准分形光子晶体的能带.数值计算 结果表明,这种准分形结构光子晶体具有绝对带隙,且带隙的宽度会随着分形级数的增大而增大.同时,随着级数 的增大,其能带在整体地趋向于高频端的同时,能带会被快速拉直而形成孤立的能级.

关键词:光子晶体,带隙,分形 PACC:7820P,4270Q

1.引 言

光子晶体是一种新型的人造材料.当这种材料 内部被设计成具有特定的对称性和周期性,且组成 成分之间有足够大的介电常数比时,电磁波在这种 材料中的态密度会呈现出非连续分布的特点;其中 在某些频率范围内,电磁场的态密度为零,这一频率 范围被称为光子晶体的带隙.由于带隙的存在,使得 光子晶体具有与均匀介质不同的光学性质.比如,光 子晶体会完全反射频率处于带隙内的电磁波或者完 全抑制频率处于带隙内的自发辐射¹¹.光子晶体的 这种性质使得它在诸如波导,低阈值激光器等领域 有着良好的应用前景²¹.

经过多年的理论及实验研究,科研工作者对一般晶体结构的光子晶体的性质已有了较为深入的认识^[3-5],而且,其制造方法也逐渐得到了完善^[6,7].随着研究工作的深入,其他一些类型的光子晶体,诸如,准晶结构的光子晶体^[3],无序及非晶结构的光子晶体^[3,10]等,也引起了科研工作者的广泛关注.最近Liu^[11],L^{112]}两个小组利用数值方法分别讨论了具有绝对带隙的准分形结构光子晶体的能带.而付云起小组^[13]的实验研究表明,准分形结构光子晶体的能带目有不同于传统光子晶体能带的双频及多频带隙的特点,而且,其带隙的中心频率可以随着分形结构

单元的调整而得到改变.这种新的能带特点为这种 具有分形特征的光子晶体的应用带来了极大的便 利.由于研究表明^[14-17]金属材料具有负的介电常 数,且在低频范围对电磁波有良好的反射特性,用其 制作光子晶体易于获得大的绝对带隙^[18],因此,我 们利用数值方法讨论了一组有相似几何特征并含有 理想导体材料的准分形结构光子晶体的能带.

2.模型

图 1 是本文所讨论光子晶体构造过程的示意 图 ,它是通过对 Sierpinski 地毯进行改造后得到的 , 其中 ,白、黑(见图 1(b))两种颜色代表两种不同的 介质材料 ,其相对介电常数分别为 ϵ_{r1} , ϵ_{r2} .灰色代表 理想导体材料 ,设其相对介电常数为 ϵ_{r1} .其构造过 程为:

1.图 1(a)将由白色介质组成的正方形区域 9 等分,去掉中间一个小正方形区域的白色介质,并加 入理想导体材料.由此形成第一级准分形结构的光 子晶体,见图 1(a)中的 n = 1部分,对剩余的 8 个白 色小正方形再分别各 9 等分,各自去掉中间一个小 正方形区域的白色介质,并加入理想导体材料.由此 形成第二级准分形结构的光子晶体,如图 1(a)中的 n = 2 所示.重复上述过程,直到无穷.由此构成光子

^{*}国家自然科学基金(批准号 160376003)和深圳市科技计划项目(批准号 2002-K1-65)资助的课题.

^{*}E-mail:g_yjsh@szu.edu.cn , 定话 (0755)26733319.



图 1 准分形结构光子晶体模型

晶体的一个单胞.我们称这个结构为 m₁₁结构的光 子晶体 ,m₁₁结构是一个严格的 Sierpinski 地毯结构. 在上述构造过程中 ,如果去掉的是中间小正方形内 切圆部分的白色介质 ,并加入理想导体材料.由此构 成的光子晶体 ,称其为 m₁₂结构的光子晶体.同样 , 若去掉的是中间小正方形外接圆部分的白色介质 , 并加入理想导体材料.由此构成的光子晶体 称其为 m₁₃结构的光子晶体.

2.图 ((b)将由白色介质组成的正方形区域 9 等分,去掉中间一个小正方形外接圆区域的白色介 质,并在小正方形的内切圆区域加入理想导体材料, 而在内切圆与外接圆之间的区域加入黑色的介质. 由此形成第一级准分形结构的光子晶体,见图 ((b) 中 *n* = 1 的部分;同理,对剩余的 8 个白色小正方形 做同样的处理,形成第二级准分形结构的光子晶体, 如图 ((b)中的 *n* = 2 所示.重复上述过程,直到无 穷.我们称这种结构的光子晶体为 *m*₂₁结构的光子 晶体.在上述构造过程中,如果我们用小正方形区域 代替内切圆区域并加入理想导体材料,我们称这种 结构的光子晶体为 *m*₂₂结构的光子晶体.

这里要注意,当 $n \ge 3$ 时, m_{13} , m_{21} 及 m_{22} 结构光 子晶体所加入材料的区域有重合的部分.由于图 1 中方形区域构成了光子晶体的一个单胞,同时,由 m_{13} , m_{21} 及 m_{22} 结构单胞的构造过程知道,它们不是 一种严格的 Sierpinski 规则分形,因此,我们称这组 光子晶体为准分形结构的光子晶体.

3. 计算方法

我们使用 Ward 和 Pendry^[19]的一般坐标系下的 时域有限差分方法的计算程序来计算光子晶体的能 带.本文在计算空间随机选取了 200 个点的电磁场 量用于能带的计算.

在光子晶体能带结构的计算中,为了使初始时 刻的场分布满足 Bloch 理论,我们采用如下的伪周 期平面波的初始场分布^[20]:

$$Q(\mathbf{r}) = \sum_{c} q_{0}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) e^{(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}},$$

$$q_{0}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \mathbf{v} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}),$$

$$P(\mathbf{r}) = 0,$$
(1)

其中,对于横磁波,Q(r), P(r)分别为r处的磁场 强度及电场强度矢量, q_0 为磁场平面波的振幅矢 量,对于横电波,Q(r), P(r)分别为r处的电场强 度及磁场强度矢量, q_0 为电场平面波的振幅矢量. 矢量 Q(r), P(r), q_0 的方向均垂直于二维光子晶 体的周期面; v_k ,G分别为二维光子晶体周期面 内的矢量,波矢量及倒格子矢量.

由于光子晶体是一个周期结构,因此,在光子晶体的能带计算中,可以只选择光子晶体的一个单胞 作为计算区域,而在计算区域的边界上采用如下的 周期边界条件²¹¹:

$$Q(r+R) = e^{ik\cdot R}Q(r),$$

$$P(r+R) = e^{ik \cdot K} P(r), \qquad (2)$$

其中 R 为二维光子晶体点阵的正格子矢量.

由于电磁波对导体的趋肤深度可表示为 $\delta = \sqrt{2/\omega\mu\sigma}$,其中 ω 为电磁波的圆频率 , μ , σ 分别为导体的磁导率和电导率.因此,对于理想导体材料,可以合理地认为电磁波对它的趋肤深度为零,即理想导体材料内不存在电磁场.所以,在数值计算中,令图1中灰色理想导体区域的电场强度及磁场强度为零.

我们采用如下方法给出上述准分形结构二维光 子晶体的网格划分 将单胞计算区域的每个边 N 等 分.令 $N = 3^n \cdot m$.其中 n 为级数 ,m 为 $1/3^n$ 份边长 上所取的网格数.

在本文的计算中,令单胞的边长 *a* = 999nm.各 级准分形结构的网格划分及网格间距等参数如表1 所示.

表1 网格划分及相关参数

级数	<i>m</i> 值	网格数 N	网格间距/nm	频率轴间隔
1	20	60	16.65	0.00183
2	10	90	11.10	0.00275
3	5	135	7.40	0.00742

各级准分形结构中理想导体及黑色介质的占空 比如表 2 所示.

表 2 材料的占空比

级数	m_{11} 结构理想导体	m ₁₂ 结构理想导体	_{<i>m</i>13} 结构理想导体	m ₂₁ 结构理想导体	m ₂₁ 结构黑色介质	₂₂ 结构理想导体	₂₂ 结构黑色介质
1	0.111	0.087	0.175	0.087	0.087	0.111	0.063
2	0.210	0.165	0.330	0.165	0.165	0.210	0.120
3	0.298	0.234	0.468	0.234	0.234	0.298	0.170

在本文的计算中,令 $\varepsilon_{r1} = 1$, $\varepsilon_{r2} = 13$. 频率以 $\omega a(2\pi c)$ 为单位. c 为真空中的光速,时间间隔以秒 为单位.在计算中使用了 2^{16} 个时间步,因此光子晶 体能带频率轴上的间隔如表 1 所示.同时,对于简约 布里渊区中沿 $\Gamma \rightarrow X$, $\Gamma \rightarrow M$, $X \rightarrow M$ 方向的波矢,将 其各分成 20 个等分点进行计算.

4. 计算结果及讨论

图 1(a)所示为 m₁₁结构光子晶体.计算结果表 明 横磁波与横电波有相同的能带结构.当级数 n = 3 时,能带已超出计算区域.计算结果如图 2 所示.



图 2 m₁₁结构光子晶体的能带

图 χ a) (b) 分别表示级数 n = 1.2 时, m_{11} 结构 光子晶体能带的计算结果. 当级数 n = 1 时, 由图 2 (a) μ_{11} 结构光子晶体存在三个绝对带隙, 带隙的 中心频率分别为 0.18402, 0.68940, 1.10413. 带宽分 别为 0.36804, 0.03845, 0.02197. 当级数 n = 2 时,由 图 χ b) μ_{11} 结构光子晶体存在四个绝对带隙,带 隙的中心频率分别为 0.58365, 1.27304, 1.46668, 1.68228. 带宽分别为 1.1673, 0.03021, 0.02747, 0.11261.

由图 ((a)(b)可以看出,级数 1 和 2 的能带有 一个共同的特点,即第一带隙均是从零频率开始的. 由于 m₁₁结构光子晶体的横磁波与横电波有相同的 能带,因此,该计算结果与实际金属材料^{21]}或色散 介质材料^{15-17]}横磁波的计算结果有相同的特点.但 由文献21,15-17 可知,实际金属或色散介质光子 晶体横电波能带的低频部分是导带.这一点与理想 导体材料的计算结果不同.由此,可以看出,电导率 的大小在能带的形成过程中对横磁波的影响要大于 对横电波的影响.

由图 2 可以看到,随级数 n 的增大,能带的频 率在迅速、整体地趋向于高频端.这一点与文献 11] 及我们所讨论的由介质构成的类分形结构光子晶体 的能带(另文发表)的计算结果正相反.同时,由图 2 还注意到 随级数 n 的增大,在能带频率迅速地趋 向于高频端的同时,这种 m₁₁结构光子晶体原来弯 曲的能带在不断地被"拉直",环状的能带在不断地 被"压扁".

对于 m₁₂及 m₁₃两个准分形结构光子晶体能带 的计算结果表明,它们与 m₁₁结构光子晶体有相似 的能带.因此,在 m₁₂及 m₁₃结构光子晶体的能带中, 除带隙位置及带宽与 m₁₁结构有差别外,其他特点 m₁₂及 m₁₃结构的光子晶体均具备.同时,通过对比 m₁₁,m₁₂及 m₁₃结构光子晶体的能带发现,随理想导 体材料占空比的加大,一方面使得能带频率上升的 更快,另一方面也使得带隙更宽.

对于图 1(b)所示 m_{21} 结构的准分形光子晶体, 其能带的计算结果如图 3 所示,图 3(a)(b)(c)分 别是级数 n = 1,2,3 时该结构光子晶体的能带.而 (TM)(TE)分别表示横磁波和横电波的计算结果.

当级数 n = 1 时,由图 X a)可知,该结构光子晶 体存在一个绝对带隙,带隙的中心频率为 0.07508, 带宽为 0.15015. 当级数 n = 2 时,由图 X b)可知,该 结构光子晶体存在三个绝对带隙.带隙的中心频率 分别为 0.20737,0.63721,1.38428,带宽分别为 0.41473 0.00549,0.02197. 当级数 n = 3 时,由图 3 (c)可知,该结构光子晶体存在七个绝对带隙.带隙 的中心频率分别为 0.44907,0.95787,1.06705, 1.14121,1.23596,1.33690,1.48109,带宽分别为 0.89813, 0.11948, 0.09888, 0.04944, 0.00824, 0.01236, 0.02060.

分别对比图 3(a)(b)(c)中的(TM)与(TE)部 分可以发现,随着级数 *n* 的增大,横磁波能带频率 的升高速度要比横磁波的更快.

由图 3 可以看到, m₂₁ 准分形结构光子晶体与 m₁₁, m₁₂, m₁₃结构光子晶体有相似的能带特点, 即第 一带隙从零频率开始;随着级数 n 的增大,能带频 率在迅速趋向于高频端的同时,这种结构光子晶体 的能带也被'拉直"了.

对 m22 结构准分形光子晶体的计算表明,其能



带具有与上述 m₂₁结构准分形光子晶体相同的特 点,只是在 m₂₂结构中,由于理想导体占空比的增 大,使得该结构与 m₂₁结构相比,能带频率上升得更 快,而且方形理想导体柱较圆形理想导体柱更易"拉 直"能带.

对比图 2 与图 3 我们不难发现,完全由理想导体材料构成的准分形光子晶体的能带与理想导体外包介质层构成的准分形光子晶体的能带相比,前者的能带频率更高,且随级数的增大,能带频率提高的速度也更快;而后者的能带较前者更易"拉直",从而使能带变成孤立的能级,同时,后者能带多频带隙的特点也更明显.

由图 2 和图 3 知 ,m₁₁ ,m₁₂ ,m₁₃结构光子晶体的 横磁波与横电波有相同的能带 ,而 m₂₁ ,m₂₂结构光 子晶体的横磁波与横电波的能带不同 . 由菲涅尔公 式不难理解上述计算结果 :由于 m₂₁及 m₂₂结构的光 子晶体存在有相对介电常数分别为 є₁₁ , є₂的两种介 质 ,由菲涅尔公式 ,在这两种介质的分界面上横磁波 与横电波所产生的反射及折射不相同 ,由此形成的 横磁波与横电波的能带也会不同 . 而在 m₁₁ ,m₁₂ , m₁₃结构中 ,由于只存在相对介电常数为 є₁₁的一种 介质 ,在理想导体内部假设电场与磁场强度均为零 , 这使得理想导体表面对横磁波及横电波产生的反射 是一样的 ,因此 ,其能带也将是相同的 .

而对于随着级数 n 的增大,这种含有理想导体 材料的准分形光子晶体的能带会整体地趋向于高频 端,且光子晶体的能带会被拉直为能级的现象,可以 作如下的定性解释.

对于理想导体,由于 σ →∞,所以理想导体的相 对介电常数可以写为 $\varepsilon_r = 1 - \omega_p^2/\omega^2$,其中, ω_p 为导 体的等离子体频率.

对于 m_{11} , m_{12} 及 m_{13} 结构的准分形光子晶体,若 令理想导体材料的占空比为 η ,则这种结构的平均 介电常数可以写为 $\bar{\epsilon} = \eta \epsilon_r + (1 - \eta) \epsilon_{r1}$.利用均匀介 质的色散关系,可以给出 m_{11} , m_{12} , m_{13} 结构光子晶 体能带的平均频率为

$$\overline{\omega}^2 = k^2 c^2 + \omega_p^2 \eta. \qquad (3)$$

同理,对于 m_{21} 及 m_{22} 结构的准分形光子晶体, 若令介质 ϵ_{r1} , ϵ_{r2} 及理想导体的占空比分别为 η_1 , η_2 , η_3 则有关系 $\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 = 1$. 同样, m_{21} 及 m_{22} 结构的平均介电常数可以写为 $\overline{\epsilon} = \eta_1 \epsilon_{r1} + \eta_2 \epsilon_{r2} + \eta_3 \epsilon_r = 1 + (\epsilon_{r2} - 1)\eta_2 + (\epsilon_r - 1)\eta_3$. 其能带的平均频 率可以写为

$$\bar{\omega}^{2} = \frac{k^{2}c^{2} + \omega_{p}^{2}\eta_{3}}{1 + (\varepsilon_{r2} - 1)\eta_{2}}.$$
 (4)

由表 2 知,在 m_{11} , m_{12} 及 m_{13} 结构的光子晶体 中 理想导体的占空比随级数的增大而增大.因此, 由(3)式可知,这种结构光子晶体能带的平均频率会 随级数的增大而迅速提高;对于 m_{21} , m_{22} 结构的光 子晶体,由表 2 及(4)式可知,由于同样原因,该结构 光子晶体能带的平均频率也会随级数的增大而提 高,但由于介质 ϵ_{12} 的存在,使得这种结构光子晶体 能带频率提高的速度不如 m_{11} , m_{12} 及 m_{13} 结构光子 晶体的快.

另外,由图1准分形光子晶体的构造过程可以 看出,随着级数 n 的增大,理想导体柱的数量在迅 速增多,光子晶体内作为理想反射体的理想导体柱 的分布越来越密集,同时也越来越均匀,这使得波长 较大的光子难于透射过光子晶体,表现在光子晶体 的能带中,即为该能带结构随分形级数的增大而丧 失了方向性,从而形成了能级结构.由此,也可以看 出,这种能带随级数加大而变为能级的特点是这种 含有理想导体材料的类分形结构光子晶体的特有 能带.

由上述讨论可以看出,由于所讨论的这组含有 理想导体的准分形光子晶体具有相似的几何结构, 因此,其能带也具有如下的相似特性:

 1. 这类含有理想导体的准分形光子晶体具有 大的绝对带隙,且带隙的宽度随级数的增大而增大.

2. 第一带隙的频率均是从零频率开始的.

3. 这类含有理想导体的准分形光子晶体具有 多频带隙的特点,且随着级数的增大,带隙的多频特 性也更明显.

4. 完全由理想导体构成的准分形光子晶体的

能带具有能带频率高,随级数的增大,能带频率上升 更快的特点;而由理想导体外包介质层材料所构成 的准分形光子晶体的能带随着级数的增大更易被拉 直,特别是理想导体为方形柱的结构,即 m22结构准 分形光子晶体,它的能带随着级数的增大更易形成 能级结构.

5. 这组准分形光子晶体的能带在相同级数下, 理想导体的占空比越大,则能带的频率也越高,且带 隙的宽度也越大.

 6. 对于理想导体外包介质层材料所构成的准 分形光子晶体 随级数的增大 横电波的能带频率上 升的速度比横磁波的快。

另外,通过与实际金属材料所构成的光子晶体 的能带相比较可以发现,电导率在光子晶体带隙的 形成过程中对横磁波能带的影响要大于对横电波能 带的影响。

5.结 论

我们给出了一组含有理想导体材料且有相似几 何结构的准分形光子晶体.计算结果表明,这组光子 晶体的能带具有一些相同的特点:第一带隙均为从 零频率开始的带隙;随级数 n 的增大,能带整体快 速地趋向于高频部分,且能带被'拉直",从而形成能 级结构.分析表明,这种能级特点也是含有理想导体 材料的准分形光子晶体所特有的.同时,随着级数的 增大,这类具有准分形特征光子晶体带隙的多频特 性也更明显.能带趋向于高频端的特点使得这种结 构的光子晶体更易制造.而且,能级的形成以及多频 带隙的特点不但对于滤波器件的设计会带来很大的 好处,而且在制造单色发光器件,DWDM,以及光敏 传感器等领域也有着广泛的应用前景.

- [1] Liu X D , Xu X S , Wang Y Q , Zhang D Z and Cheng B Y 2003 Chin . Phys. 12 992
- [2] Joannopoulos J D, Villeneuve P R and Fan S H 1997 Nature 386 143
- [3] Scalora M, Bloemer M J, Pethel A S, Dowling J P, Bowden C M and Manka A S 1997 J. Appl. Phys. 83 2377
- [4] Kushwaha M S and Djafari R B 2000 J. Appl. Phys. 88 2877
- [5] Zhang W Y, Lei X Y, Wang Z L, Zheng D G, Tam W Y, Chan C T and Ping S 2000 Phys. Rev. Lett. 84 2853
- [6] Rowson S , Chelnokov A and Lourtioz J M 1999 Electronics Letters

35 753

- [7] Yamamoto Noritsugu and Noda Susumu 1999 Jpn. J. Appl. Phys.
 38 B 1282
- [8] Jin C J , Cheng B Y , Man B Y and Li Z L 2000 Phys. Rev. B 61 10762
- [9] Li Z Y , Zhang X D and Zhang X Q 2000 Phys. Rev. B 61 15738
- [10] He Y J, Su H M, Wang H Z, Tang F Q and Dong P 2001 Acta Phys. Sin. 50 892[何拥军、苏惠敏、汪河洲、唐芳琼、董 鹏 2001 物理学报 50 892]
- [11] Liu Z , Xu J J and Lin Z F 2003 Chin . Phys . Lett . 20 516

- [12] Li L, Xie Y C, Wang Y Q and Hu X Y 2003 Chin. Phys. Lett. 20 1767
- [13] Fu Y Q, Zhang G H and Yuan N C 2002 Acta Electroica Sinica 30 913(in Chinese)[付云起、张国华、袁乃昌 2002 电子学报 30 913]
- [14] Pendry J B , Holden A J , Stewart W J and Youngs I 1996 Phys. Rev. Lett. 76 4773
- [15] Sigalas M M, Chan C T, Ho K M and Soukoulis C M 1995 Phys. Rev. B 52 11744
- [16] Sakoda K , Kawai N Ito T Chutinan A Noda S Mitsuyu T and Hirao K

2001 Phys. Rev. B 64 045116

- [17] Jin C J , Cheng B Y , Man B Y , Zhang D Z , Ban S Z , Sun B and Li L M 1999 Applied Physics Letters 75 1201
- [18] Zhou P, You HY, Wang SY, Li HY, Yang YM and Chen LY 2002 Acta Phys. Sin. 51 2276[周 鹏、游海洋、王松有、李合 印、扬月梅、陈良尧 2002 物理学报 51 2276]
- [19] Ward A J and Pendry J B 2000 Computer Physics Communications 128 590
- [20] Chan C T , Yu Q L and Ho K M 1995 Phys. Rev. B 51 16635
- [21] Qiu M 2000 J. Appl. Phys. 87 8268

Photonic band in quasi-fractal photonic crystal structure including idealized metal *

Li Yan^{1,2,3,)} Zheng Rui-Sheng^{3,)} Feng Yu-Chun^{3,)} Niu Han-Ben^{1,3,)}

¹) (Xi 'an Institute of Optics and Precision Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Xi 'an 710068 , China)

² (Graduate School of the Chinese Academy of Sciences ,Beijing 100864 ,China)

³ (Institute of Optoelectronics , Shenzhen University. Key Laboratory of Optoelectronics Devices and Systems Guangdong Province , Shenzhen 518060 , China)

(Received 21 November 2003; revised manuscript received 18 January 2004)

Abstract

The photonic band of a set of quasi-fractal photonic crystals, which have similar structure and include idealized metal, is computed by finite-difference time-domain method. The result shows that there are photonic band gaps in this kinds of quasi-fractal photonic crystals. It is found that, with increasing fractal series, the width of the photonic band gap is enlarged, the frequency of the photonic band totally trends to high frequency quickly, at the same time, the photonic band is quickly hauled to line and become a energy level.

Keywords : photonic crystal , photonic band gap , fractal PACC : 7820P , 4270Q

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60376003) and by the Shenzhen Science and technology Foundation of China (Grant No. 2002-KI-65).