第 55 卷 第 4 期 2006 年 4 月
1000-3290/2006/55(04)/1862-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.55,No.4,April,2006
©2006 Chin.Phys.Soc.

二维非正交坐标斜方格金属光子带隙结构*

郝保良[1)2)]　刘濮鲲[2)†]　唐昌建[1)]

1)(四川大学物理科学与技术学院,成都　610065)

2)(中国科学院电子学研究所,北京　100080)

(2005 年 7 月 3 日收到;2005 年 10 月 18 日收到修改稿)

金属光子带隙结构在高能加速器、微波真空电子器件和太赫兹波源等方面具有重要的应用前景.基于实空间传输矩阵理论,详细研究了非正交坐标系下二维斜方格金属光子带隙结构,给出了计算横电模、横磁模完全带隙结构的一般公式,并分析了填充系数、任意斜角及金属柱横截面对带隙结构的影响.计算结果在退化为正方格情况下时,与其他方法的计算结果取得很好的一致.

关键词:光子晶体,金属光子带隙,传输矩阵法,微波真空电子器件

PACC:4270Q,5270G

1.引　　言

1987 年,Yablonovitch[1] 和 John[2] 在讨论周期介质对光传播的影响时,分别提出了光子带隙晶体的概念.通过人工周期排列介电材料形成光子晶体,当介电常数的变化幅度较大且变化周期与光的波长可比时,介质的布拉格色散形成光子带隙.频率落在“禁带”中的光是被严格禁止传播的,而其他频率的光能够在“通带”中传播.随着光子晶体研究的深入,光子带隙的应用延伸到微波和毫米波领域.如同光子晶体中形成能带结构一样,在微波波段周期排列介质结构也可能出现带隙结构,并且形成带隙的周期尺寸与禁带的中心频率对应的波长可比拟.微波波段的带隙结构比光学波段更易于实现.目前,国外基于光子带隙结构的微波电路和微波天线[3] 已开始走向商业应用,而国内在微波波段的带隙结构方面也开展了一些初步的研究工作[4,5].

鉴于金属光子带隙结构具有较大的尺寸和良好的模式选择性,Kroll 等[6,7] 提出可将其应用于 17 GHz 以上高能加速器的加速腔.Newsham 等[8] 在 2002 年又提出了光子带隙多注速调管的概念,为微波真空电子器件的发展开辟了新的发展方向.最近,美国麻省理工学院等离子体科学与聚变中心的研究小组报道了光子带隙回旋管的实验结果[9],通过周期排列金属柱形成光子带隙谐振腔取代传统的圆柱腔结构,这种优秀的模式选择结构成功地解决了过模工作的高功率回旋管中的模式竞争难题,并且具有结构尺寸大、功率容量大、输入耦合器简单及腔体易于加工等优点,因而具有重要的发展潜力.此外,太赫兹波源的研究也促使人们研究金属光子带隙结构[10].目前,金属光子带隙结构已逐渐成为人们研究的热点之一.金属光子带隙结构研究的主要理论有修正平面波展开法[11]、传输矩阵法[12—14]、时域有限差分(FDTD)法[15] 和精确的多次散射法[16—19] 等.其中,电磁计算中常用的 FDTD 方法在计算带隙结构上被广泛采用;KKR 方法在研究各种复杂光子晶体中的带隙结构及传递系数是最准确的;而基于金属等离子体模型的修正平面波法,由于傅里叶展开式的收敛性较差,只能用于研究填充系数非常小的带隙结构,而实际的金属光子带隙晶体的带隙结构填充系数较大.本文采用的实空间传输矩阵(TMM)理论,可以用于研究任意斜坐标系下不同填充系数和不同横截面的金属光子带隙结构.它与 FDTD 法和多次散射法相比较,不需要给定初始电磁场,并且简单明了,在程序上更容易实现.

由于斜方格的角度变化对系统的带隙结构及传输系数影响很大,因此给出计算普适的二维金属光子带隙的理论,对于微波真空电子器件(如回旋管)

* 国家杰出青年科学基金(批准号:60125104)资助的课题.

† E-mail:pkliu@ieee.org

“禁带”的选取和光子带隙微波电路传输系数的优化都是很有必要的. 本文采用实空间有限差分离散非正交坐标系下的 Helmholtz 方程，在第一 Brillouin 区内求解本征值系数矩阵，得到了正方格及任意斜方格横电模（TE 模）和横磁模（TM 模）的金属光子全局带隙结构.

2. 非正交坐标系下的 Helmholtz 方程

考察任意斜角的非正交二维坐标系如图 1 所示，

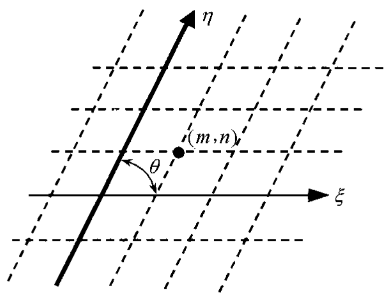

图 1　二维非正交坐标系下的斜方格的划分
坐标轴用 ξ，η 表示，斜角为 θ

图中的交点代表了一个具有某类横截面的金属柱，坐标 ξ，η 与正交直角坐标 x，y 有如下关系：

$$\begin{aligned} x &= \xi + \eta\cos\theta, \\ y &= \eta\sin\theta. \end{aligned} \tag{1}$$

斜坐标系下的协变基矢量[20,21]为

$$[g_{i,j}] = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta & 0 \\ \cos\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{2}$$

逆变基矢量为

$$[g^{i,j}] = \frac{1}{\sin^2\theta}\begin{bmatrix} 1 & -\cos\theta & 0 \\ -\cos\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3}$$

金属柱中心间距为 a，晶格点位置为

$$\boldsymbol{R}_{m,n} = (m + n\cos\theta)a\boldsymbol{e}_x + (n\cos\theta)a\boldsymbol{e}_y, \tag{4}$$

式中 m，n 为正整数. 倒格子矢量[22,23]

$$\boldsymbol{G} = h_1\boldsymbol{b}_1 + h_2\boldsymbol{b}_2. \tag{5}$$

这里，h_1 和 h_2 为整数，倒格子基矢量

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y\,\mathrm{ctan}\theta), \\ \boldsymbol{b}_2 &= \frac{2\pi}{a\sin\theta}\boldsymbol{e}_y. \end{aligned} \tag{6}$$

考虑真空中金属周期结构的斜方格，假定金属为理想导体，导电率为无穷大，电磁场不能进入导体内部. 在线形、各向同性无源介质中，非正交坐标系下的 Helmholtz 方程为

$$\begin{aligned} \nabla^2\varphi &= \frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial u^i}\left(g^{i,j}\sqrt{g}\,\frac{\partial\varphi}{\partial u^j}\right) \\ &= \frac{1}{\sin^2\theta}\Big[\frac{\partial^2\varphi}{\partial\xi^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial\mu^2} \\ &\quad - \cos\theta\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial\xi\partial\eta} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial\eta\partial\xi}\right)\Big] + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} \\ &= \mu_0\varepsilon\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}, \end{aligned} \tag{7}$$

式中，ε，μ_0 分别为介电常数和真空中的磁导率，φ 代表电场 E_z 或磁场 B_z.

3. 传输矩阵法得到 Helmholtz 方程的本征模

具有晶格周期特性的金属光子带隙结构中，Helmholtz 方程的解满足布洛赫定理，

$$\varphi(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_n) = \varphi(\boldsymbol{r})\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n), \tag{8}$$

式中，$\boldsymbol{k}$ 为任意波矢量，$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{R}_n$ 分别为斜坐标系下的空间位置及晶格位矢量. 因此只需对单位原胞求本征值，限制在 $|\xi| \leqslant a/2$，$|\eta| \leqslant a/2$ 空间. 对原胞划分网格点，网格长度为 $\Delta l = \Delta\xi = \Delta\eta$. 如图 2 所示，定义离散后的空间点

$$(i, j) = (i\Delta\xi, j\Delta\eta). \tag{9}$$

这里 i，j 取整数. Helmholtz 方程的二阶偏导数采用两边求导的方法减小误差，如

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\varphi_{i,j}}{\partial\xi^2} &\approx \frac{\partial}{\partial\xi}(\varphi'_{i,j} - \varphi'_{i-1,j}) \\ &= \frac{\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j} - 2\varphi_{i,j}}{(\Delta\xi)^2}. \end{aligned} \tag{10}$$

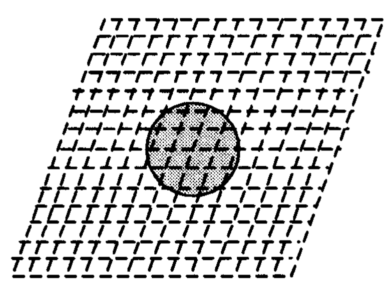

图 2　二维斜方格晶格周期结构原胞网格点划分

假定电磁波的纵向变化和时间因子满足 $\exp[\mathrm{i}(\omega t - k_z z)]$，(7) 式实空间有限差分得到

$$\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\varphi_{i+1,j}+\varphi_{i-1,j}+\varphi_{i,j+1}+\varphi_{i,j-1}-4\varphi_{i,j}\right]$$
$$-\frac{\cos\theta}{2\sin^2\theta}\left[\varphi_{i+1,j+1}+\varphi_{i-1,j-1}-\varphi_{i+1,j-1}-\varphi_{i-1,j+1}\right]$$
$$=-\Delta l^2\left(\varepsilon_{i,j}\frac{\omega^2}{c^2\varepsilon_0}-k_z^2\right)\varphi_{i,j}. \quad (11)$$

这里,c 为光速,$\varepsilon_{i,j}$ 为相对介电常数.如果(11)式中网格点 $\varphi_{i,j}$ 在原胞边缘,离散后左边的空间点超过原胞,可以通过布洛赫定理折射到原胞内部.金属表面的边界条件满足 Maxwell 方程,

$$E_z|_{侧面}=0 \quad (\text{TM 波}), \quad (12)$$
$$\frac{\partial B_z}{\partial n}\Big|_{侧面}=0 \quad (\text{TE 波}). \quad (13)$$

对于(12)式的边界条件,落进导体内网格点对应(11)式的系数直接赋为零.磁场在金属表面连续,因此金属内部靠近表面的磁场不能直接赋为零.当满足网格间距 $\Delta l\to 0$,由(13)式将靠近表面的点转化为导体外部点的对应系数.这样,具有规则横截面的周期金属柱组成的金属光子带隙的 Helmholtz 方程的系数矩阵具有很好的对称性.

4. 计算结果及讨论

本文的传输矩阵法可以用于计算任意斜角的二维金属光子带隙结构.金属柱选取圆柱、正方柱和正三角形柱三种具有良好对称性的周期结构,三者对应的填充系数分别为 $f=\pi R^2/a^2\sin\theta$,$D^2/a^2\sin\theta$,$\sqrt{3}C^2/4a^2\sin\theta$.这里,$R$,$D$,$C$ 和 a 分别为对应的圆柱半径、正方形边长、正三角形边长及斜方格的边长.圆柱、正方形柱周期结构的原胞网格划分 41 × 41,正三角形柱为 51 × 51,结果表明继续增加网格数不影响系统的带隙结构.

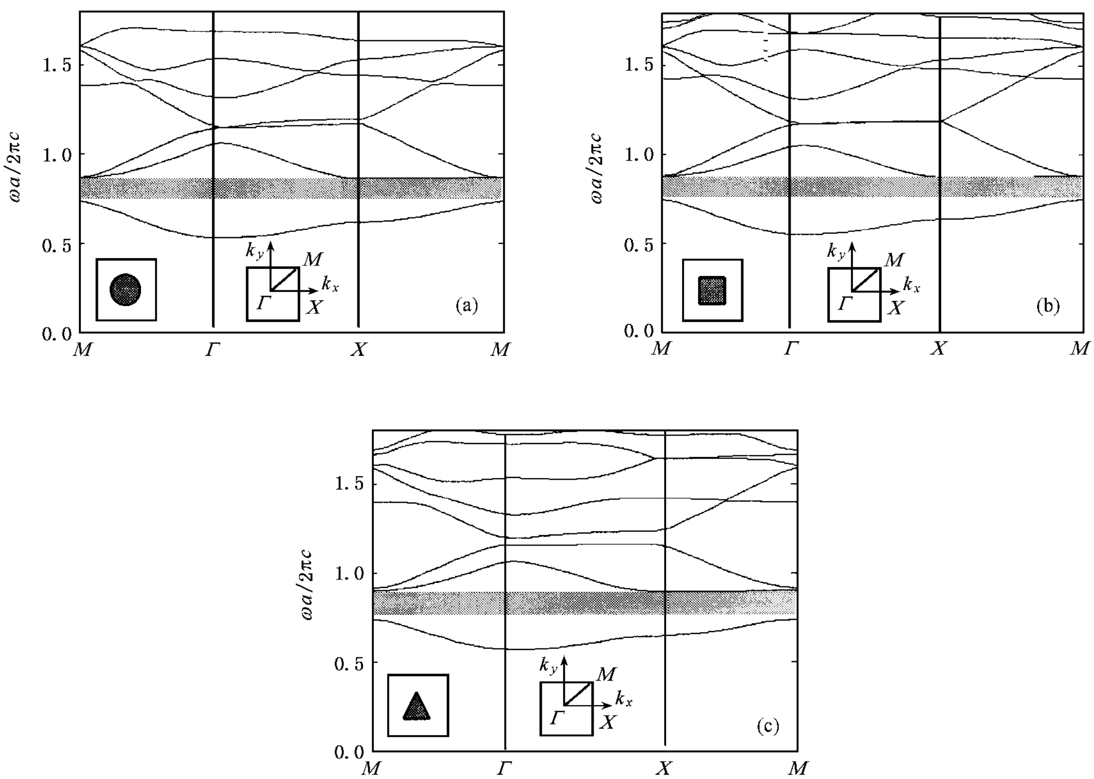

图 3 填充系数 $f=0.1257$ 的正方格($\theta=\pi/2$)TM 波在三种金属柱下的带隙结构 (a)圆柱,(b)正方形柱,(c)正三角形柱

考虑三种不同截面的金属柱,在相同填充系数 $f=0.1257$ 下研究 TM 波的色散结构,如图 3 所示.正方格的 Brillouin 区具有很好的对称结构,因此只需要研究波矢量沿着八分之一 Brillouin 的边缘求模式.TM 模的第一个禁带很宽,出现在第一个模式下面,其禁带宽度 $\Delta\omega=0.533(2\pi c/a)$.第二个禁带出现在第一模式与第二模式之间,在图 3(a),(b)中,禁带宽度为 0.128$(2\pi c/a)$,而在图 3(c)中略宽.图 3(a)的计算结果与采用 FDTD 的带隙结构一致[15].三种金属柱的最低三个模式基本相同,高次模式三者

具有较大差异.因此,相同斜角度下等填充系数的金属横截面的形状对低次模带隙结构的影响不大.并且,横截面的对称性越好,网格数越少,系数矩阵越小,因此经常采用金属圆柱周期结构研究光子带隙的禁带特征.

研究表明,金属光子带隙的 TE 波出现禁带的填充系数大于 TM 波.图 4(a),(b)分别是正方格和三角格($\theta=\pi/3$)TE 波圆柱金属光子带隙,填充系数均为 $f=0.5$.图 4(a)中禁带出现在正方格第一与第二模式之间,禁带宽度 $\Delta\omega=0.125(2\pi c/a)$.三角格的 Brillouin 区为正六边形,这种对称结构同样只需研究 Brillouin 区内的部分波矢量变化.图 4(b)中有两个禁带,第一个禁带宽度 $\Delta\omega=0.079(2\pi c/a)$,中心频率 $\omega=0.965(2\pi c/a)$;第二个禁带较宽,$\Delta\omega=0.202(2\pi c/a)$,出现在第六和第七本征频率之间,禁带中心频率 $\omega=1.793(2\pi c/a)$.

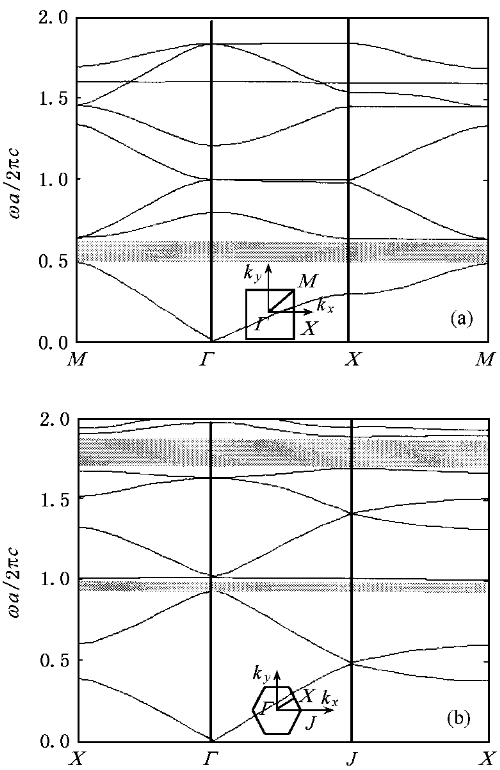

图 4　TE 波正方格(a)与三角格(b)的金属圆柱光子带隙结构填充系数 $f=0.5$

本文的方法可以计算任意斜角度的二维光子带隙结构,只有正方格和三角格的 Brillouin 区具有很好的对称结构,一般情况下的 Brillouin 区不具有对称性.如图 5 所示,斜角 $\theta=\pi/4$ 金属圆柱光子带隙结构的第一 Brillouin 区为不规则六边形结构.为了得到完全带隙,波矢量的变化沿 3 个直角三角形边 $M\to P\to\Gamma\to M\to X\to\Gamma\to N\to T\to\Gamma$.图 6(a)中,TE 波填充系数 $f=0.5$,第一个禁带中心频率 $\omega=0.5825(2\pi c/a)$,宽度 $\Delta\omega=0.0384(2\pi c/a)$;第二个禁带较宽,$\Delta\omega=0.0523(2\pi c/a)$,出现在第二和第三本征频率之间,禁带中心频率 $\omega=1.0259(2\pi c/a)$.图 6(b)计算了 TM 波带隙结构,第一个模式下大带隙 $\Delta\omega=1.3291(2\pi c/a)$,上面有 4 个禁带,带宽分别为 $0.2209(2\pi c/a)$,$0.1335(2\pi c/a)$和 $0.2662(2\pi c/a)$.

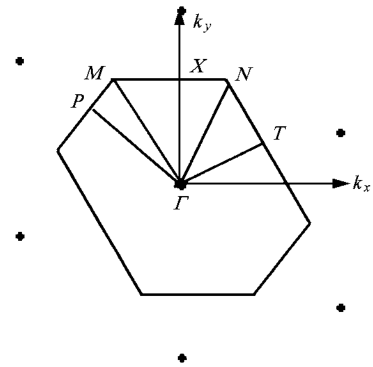

图 5　$\theta=\pi/4$ 斜方格倒格子空间与第一 Brillouin 区

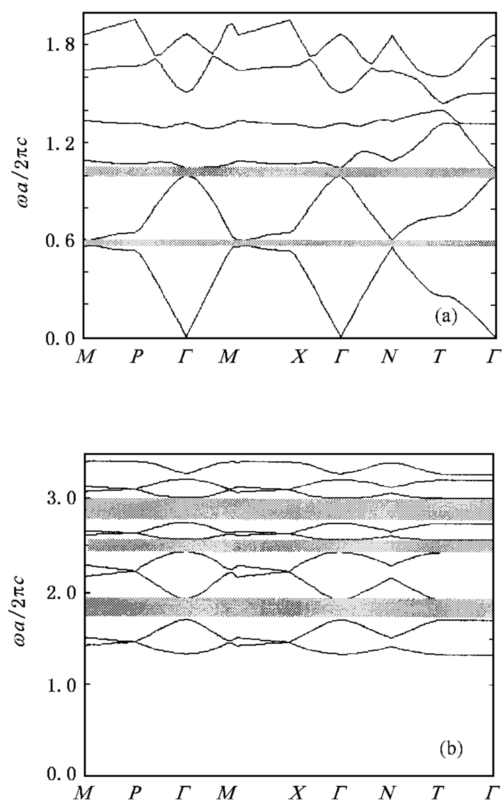

图 6　填充系数 $f=0.5$,$\theta=\pi/4$ 的金属圆柱光子带隙结构 (a)TE 波,(b)TM 波

5. 结　论

本文采用实空间有限差分传输矩阵法，Helmholtz 方程离散后的场系数组成一个厄密共轭矩阵，求出本征值得到金属光子带隙的全局带隙结构. 此方法不需要给定初始电磁场，程序上更容易实现，可以用于研究 TE 波、TM 波不同柱截面任意斜方格二维金属光子带隙结构. 通过选取不同柱截面、周期斜角及填充系数获得全局带隙，对设计各种类型光子带隙微波真空电子器件具有实际的指导意义. 此外，实空间传输矩阵法还为研究介质-金属混杂周期带隙结构提供了一个新的思路.

感谢中国科学院电子学研究所肖刘博士、赵鼎博士及理论物理研究所曹觉先博士的有益讨论.

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

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

[3] El-Kady I F 2002 *Ph. D. Dissertation* (Ames Iowa: Iowa State University)

[4] Liu H W, Sun X W, Li Z F *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 3082 (in Chinese) [刘海文、孙晓玮、李征帆等 2003 物理学报 **52** 3082]

[5] Liu S B, Zhu C X, Yuan N C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2804 (in Chinese) [刘少斌、朱传喜、袁乃昌 2005 物理学报 **54** 2804]

[6] Kroll N, Smith D R, Schultz S *et al* 1992 *The Proceedings of the Advanced Accelerator Concepts Workshop* (New York: Port Jefferson) p2559

[7] Smith D R, Schultz S, Kroll N *et al* 1995 *The Proceedings of the Advanced Accelerator Concepts Workshop* (New York: Port Jefferson) p761

[8] Newsham D, Smirnov A, Yu D 2002 *The Conferences Digest of the 27th Int. Conf. IR & MM Waves* (San Diego: IEEE) p109

[9] Sirigiri J R, Kreischer K E, Machuzak J *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5628

[10] Wang H J, Bi G, Yang D X *et al* 2005 *J. Microwaves* **21** 31 (in Chinese) [王华娟、毕　岗、杨冬晓等 2005 微波学报 **21** 31]

[11] Kuzmiak V, Maradudin A A, Pincemin F 1994 *Phys. Rev.* B **50** 16835

[12] Pendry J B, MacKinnon A 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2772

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

[14] Smimova E I, Chen C, Shapiro M A *et al* 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 960

[15] Qiu M, He S L 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 8268

[16] Nicorovici N A, McPhedran R C 1995 *Phys. Rev.* E **52** 1135

[17] Li L M, Zhang Z Q, Zhang X D 1998 *Phys. Rev.* B **58** 15589

[18] Zhang X D, Zhang Z Q 2000 *Phys. Rev.* B **61** 9847

[19] Zhang X D, Li L M, Zhang Z Q 2001 *Phys. Rev.* B **63** 125114

[20] Huang K Z, Xue M D, Lu M W 2003 *Tensor Analysis* (Beijing: Tsinghua University Press) (in Chinese) [黄克智、薛明德、陆明万 2003 张量分析(北京 清华大学出版社)]

[21] Holland R 1983 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30** 4589

[22] Huang K 1988 *Solid State Physics* (Beijing: Higher Education Press) (in Chinese) [黄　昆 1988 固体物理学(北京 高等教育出版社)]

[23] Stratton J A 1941 *Electromagnetic Theory* (New York: McGraw-Hill) p38

The two-dimensional metal photonic band gap structure consisting of a skew lattice in a nonorthogonal coordinate system*

Hao Bao-Liang[1)2)] Liu Pu-Kun[2)] Tang Chang-Jian[1)]

1)(*College of Physical Science and Technology*, *Sichuan University*, *Chengdu* 610065, *China*)

2)(*Institute of Electronics*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100080, *China*)

(Received 3 July 2005; revised manuscript received 18 October 2005)

Abstract

The metal photonic band gap structure has potentialities in the areas of high-energy accelerators, microwave vacuum electron devices, and terahertz radiation sources etc. The real space transfer matrix method in a nonorthogonal coordinate system is used to study the two-dimensional metal photonic band gap structure consisting of a skew lattice. A general formula for calculating the complete band gap structure is derived for transverse-electric and transverse magnetic modes, and the influences of the filling fraction, skew angle and cross section of the metal rod on band gap are analyzed. The results are in good agreement with results of other methods in some special cases.

Keywords: photonic crystal, metal photonic band gap, transfer matrix method, microwave vacuum electronic devices

PACC: 4270Q, 5270G

* Project supported by the National Natural Science Fundation for Distinguished Young Scholars of China (Grant No.60125104).