正负折射率材料组成的一维光子 晶体的能带及电场*

王同标 刘念华*

(南昌大学高等研究院,南昌 330031) (2006年11月14日收到,2007年2月2日收到修改稿)

计算了由正负折射率材料交替排列组成的一维光子晶体的能带及电场 发现其能带不同于由普通正折射率材料组成的光子晶体的能带.当选择合适的参数时,由正负折射率材料组成的光子晶体的 TE 模或 TM 模有完全光子带隙出现,这在普通光子晶体中不出现.导带中的电场波函数与普通光子晶体相比具有很强的局域性.对于负折射率材料层为色散介质的情况,计算了在不同的具有正负折射率区域能带.

关键词:光子晶体,负折射率,能带 PACC:4270Q,4110H

1.引 言

在过去的十多年里,由于其独特的光学特性及 潜在的应用价值,光子晶体(photonic crystals)引起了 人们的广泛关注,负折射率材料又称左手系材料 (left-handed materials),最早由 Veselago^[1]在理论上提 出,它是由负的介电常数和负的磁导率组成,电磁波 在负折射率材料中传播时,其波矢量的方向与能量 的传播方向相反,将会出现许多不寻常的现象,例 如,逆 Doppler 效应、逆 Cerenkov 效应,反常光压 等¹¹.但是,由于自然界中不存在这种具有负折射率 的材料 所以负折射率长期以来没有引起人们的重 视.2000 年 Smith 等人^[2]制作了世界上第一块等效 介电常数和等效磁导率同时为负数的介质,负折射 率材料的研究又引起了人们的极大的兴趣,用负折 射率材料做成完美透镜3],可以同时将行波和衰减 波会聚在一起,将负折射率材料应用到光子晶体中 制成新型光子晶体 具有与普通的光子晶体不同的 许多性质.

光子带隙形成的原因是周期性介电结构中 Bragg 散射场的干涉.在光子晶体中引入缺陷会破坏 它的这种周期性结构,在 Bragg 带隙中就会有缺陷 模出现.当光的入射角由垂直入射变为斜入射时,介 质层和缺陷层的有效光学长度都会减小,这就影响 到光子晶体内部的干涉过程,导致 Bragg 带隙和缺 陷模同时向高频方向移动.

人们通过在光子晶体中引入缺陷、非线性、色散 介质等方法^{4→71},可以对光的传播进行调控.目前, 有许多关于负折射率材料光学性质的研究^[8→12].在 普通光子晶体中加入一层负折射率材料缺陷,将使 简并模劈裂,透射谱不随入射角变化,并且在带隙中 有缺陷模出现^[8].在由普通材料和透明负折射率材 料的组成的一维光子晶体中,可以在三维方向上出 现完全光子带隙,因而可以在三维方向上限制光的 传播^[13].文献 14 研究了由正负折射率材料组成的 层状异质结构,得到了不同于 Bragg 带隙的零平均 带隙,设计了一种具有这种带隙的金属结构的光子 晶体,并用 FDTD 方法模拟了它的光学特性.

本文研究由正负折射率材料交替排列组成的一 维光子晶体的能带及带边的电场分布,这种光子晶 体的能带结构与普通光子晶体有很大的差别,当选 择合适的参数时,会出现完全光子带隙(absolute gap)¹⁵¹,这在普通光子晶体中不出现.完全带隙上、 下带边的电场与导带中的电场分布有明显的不同, 并且也不同于普通光子晶体带边的电场分布.当入

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10664002)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail:nhliu@ncu.edu.cn

射能量为一定值时,光会局域在空间特定的区域,形成较强的局域性.

2. 理论模型

考虑由 A ,B 两层介质沿 x 轴方向周期性交替 排列组成的一维光子晶体 ,这种结构在 y 和 z 方向 为各向同性的 .A 层与 B 层的厚度分别为 h_1 , h_2 ,f射率分别为 n_1 , n_2 ,周期为 $L = h_1 + h_2$.在图 1 中示 意出了电磁波在光子晶体中传播的 TE ,TM 两种极 化形式.



图 1 电磁波在一维光子晶体中传播的 TE ,TM 极化示意图

设电磁波与上述系统的 x 方向成 θ 角入射 ,入 射波的波矢为 $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$,入射频率为 $\omega = c |\mathbf{k}| / n_0$,c 是真空中的光速 , \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y 分别为沿 x ,y 方向的 单位矢量. Bloch 波形的解为

 $E_{K}(x,y) = E_{K}(x)e^{ik_{x}}e^{ik_{y}y}$, (1) 这里 $E_{K}(x,y)$ 是一个场分量,它是以 L 为周期的周 期函数. K 为 Bloch 波数,它的解为

$$K = \frac{\mathrm{i}}{a} \ln \left(\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(U^{(\alpha)} \right) \pm \left\{ \frac{1}{4} \left[\operatorname{Tr} \left(U^{(\alpha)} \right) \right]^{2} - 1 \right\}^{1/2} \right),$$
(2)

其中 U^(a)为 A, B 层的传输矩阵,通过计算(2)式,可 以得到色散关系的表达式^{16]}

$$\cos(k_{z}L) = \frac{1+\Lambda}{2} \cos(k_{x}^{(1)}h_{1} + k_{x}^{(2)}h_{2}) + \frac{1-\Lambda}{2} \cos(k_{x}^{(1)}h_{1} - k_{x}^{(2)}h_{2}), \quad (3)$$

其中

$$\Lambda = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\frac{k_x^{(2)}}{k_x^{(1)}} + \frac{k_x^{(1)}}{k_x^{(2)}} \right), & \text{(TE)} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{n_1^2 k_x^{(2)}}{n_2^2 k_x^{(1)}} + \frac{n_2^2 k_x^{(1)}}{n_1^2 k_x^{(2)}} \right), & \text{(TM)} \end{cases}$$

$$k_x^{(\alpha)} = \sqrt{(\omega n_\alpha / c)^2 - k_y^2}$$
 ($\alpha = 1$,2),Bloch 波数 K 限

制在第一 Brillouin 区 即 – $\pi/L < K < \pi/L$.

由正负折射率材料交替排列组成的 一维光子晶体的能带及电场

在本节的数值计算中,频率以 $\omega_s = 2\pi c/L$ 为单 位,长度以 $\lambda_0 = L/2\pi$ 为单位.考虑由正负折射率材 料交替排列组成的一维光子晶体 利用(3)式给出的 色散关系,给出了能带与界面内波矢 k_y 的关系,如 图 2 所示,其中允许带用阴影部分表示,禁带用空白 区域表示.可以看出,由正负折射率材料组成的光子 晶体具有与普通光子晶体完全不同的能带.相对于 普通光子晶体而言,由正负折射率材料组成的光子 晶体有的带隙会闭合,形成更宽的导带,有的带隙会 变宽.随着波矢分量 k_y (即入射角度的增加)的增 加,导带会突然变窄,导致上、下带边重合在一起,形 成透射峰,从图中可以看出,这些窄带分布于两条光 在均匀介质中的色散曲线(图中的直线)之间.当选 择合适的参数时,这种光子晶体的 TE 模会出现完 全带隙(图 2 中第一个带隙).



图 2 正负折射率材料组成的一维光子晶体的能带 TE 模具有 完全带隙 取正折射率 A 层为真空 ,负折射率 B 层的 $\varepsilon_2 = -0.6$, $\mu_2 = -0.9$,A ,B 的厚度之比 $h_1/h_2 = 0.65/0.35$

在图 2 中,给出的是负折射率材料的 $|n_2| < 1$ 时的能带,在图 3 中,给出的是负折射率材料 $|n_2| > 1$ 时的能带.可以看出,与图 2 相似,窄带也是分布于两条光在均匀介质中的色散曲线之间.同样选择合适的参数,TM 模也会出现完全带隙(图 3 中第一个带隙).

在图4中给出了TE模完全带隙的上、下带边及 上带边附近的导带的电场分布,其中取100个周期. 可以看出,完全带隙的上、下带边电场都是周期性分



图 3 正负折射率材料组成的一维光子晶体的能带 TM 模具有 完全带隙,取正折射率 A 层为真空,负折射率 B 层 $\varepsilon_2 = -1.5$, $\mu_2 = -2.2$, A, B 的厚度之比 $h_1/h_2 = 0.4/0.6$

布的(图4(a,b));上带边附近导带的电场具有很强的局域性(图4(c)).由于光子晶体由正负折射率材料组成,当入射光的能量取一定的值时,由于能量在界面上的多重反射,光子会局域在特定的区域,所以电场会出现局域性.由于光在垂直入射到光子晶体上时,TE模与TM模具有完全相同的性质,所以TM模的电场分布也与图4相似.



图 4 对应图 2 的电场分布 (a) $\omega/\omega_0 = 1.189508$; (b) $\omega/\omega_0 = 1.341507$ (c) $\omega/\omega_0 = 1.13$

在计算能带的过程中,选择了与文献 15]不同 的参数,这说明 TE 模或 TM 模出现完全带隙的条件 并不是特别严格,在计算中发现介电常数和磁导率 选定以后,A,B 层的厚度之比在一个较小的范围内 都有完全带隙出现.但是无论如何选择参数,都不能 使得 TE 模和 TM 模同时出现完全带隙. 在图 5 给出了当平均折射率为零,即 $n = (n_1h_1 + n_2h_2)L = 0$ 时的 TE 模的能带与透射谱.当 光垂直入射时,禁带会变得很宽,在禁带内有一些完 全透射的透射峰出现,各透射峰之间的频率差几乎 相等,当入射角度增大到一定的值时(即 k_y 增大一 定的值时),会形成完全透射,如图中灰色区域所示. 当入射角继续增大时,又出现新的禁带,并且在两条 均匀介质中的色散曲线之间,上、下带边重合在一 起,形成透射峰.但是禁带和透射峰的位置相对于垂 直入射时出现了很大的变化.



图 5 平均折射率为零时的透射谱及 TE 模的能带

图 6 给出当这种光子晶体的周期数取为 80 时, 对应 图 5 中 的 第 六 个 透 射 峰(频 率 为 $\omega =$ 4.732001 ω_0)的电场.可以看出电场分布在整体上是 扩展的 加图 ((a)所示 将 (a)图放大以后,可以看 到电场是局域化的,如图 (b)(c)所示,并且由(c) 图可以看出,在空间分布上与普通光子晶体的电场 分布相比,电场的局域性更强,且局域在负折射率的



图 6 对应图 5 的透射峰频率为 $\omega/\omega_0 = 4.732001$ 的电场分布

一层,在正折射率层中电场呈现正弦式的微小变化.

4. 负折射率层为色散介质的一维光子 晶体的能带

自然界中不存在负折射率介质,负折射率采用 常数也只是一个理想化的模型.一般来说,负折射率 材料的折射率是与频率 ω 有关的量,所以我们采用 色散介质来代替负折射率层,它的介电常数和磁导 率可以用下面的式子表示^[17]:

$$\varepsilon_{2} = 1 - \frac{\omega_{p}^{2}}{\omega^{2}}, \mu_{2} = 1 - \frac{F\omega^{2}}{\omega^{2} - w_{r}^{2}}, \quad (5)$$

其中 ω_p 为等离子体频率 , ω_r 为共振频率 ,F 为填充 指数.为计算方便 ,在这里频率以 $\omega_0 = c/L$ 为单位. 取 $\omega_p = 10\omega_0$, $\omega_r = 4\omega_0$,F = 0.56 , $h_1 = h_2 = 0.5$.采 用传输矩阵的方法 ,可以计算这种光子晶体的透射 谱 ,如图 7 所示.它的透射谱与普通光子晶体相比 , 具有更多的带隙 ,并且带隙宽度变化也比较大 ,有许 多带隙密集在共振频率附近 ,如图 $\chi \in M$ 示.



图 7 负折射率层为色散介质的光子晶体的透射谱 其中(b)和 (c)是改变了频率范围的(a)的局部放大图

通过计算(3)式,得到这种光子晶体的能带,如 图 8 所示.可以看到在色散曲线(直线)1的上方,它 的能带与普通光子晶体的相似,这是因为在这条曲 线的上方 ϵ_2 和 μ_2 都为正值.在色散曲线(直线)2 的下方,能带与普通光子晶体很有很大差别.将色散 曲线 2 下面的能带进行局部放大后,可以发现这与 正负折射率材料交替排列组成的光子晶体有相似的 能带,因为在这条曲线的下方 ϵ_2 和 μ_2 同时为负值. 并且在共振频率附近,能带十分密集,这与图7(c) 的透射谱符合的很好.在色散曲线1与2之间的区 域色散介质为单负情况,即 ϵ_2 和 μ_2 其中之一为负 值,波在这个区域是倏逝波.



图 8 负折射率层为色散介质的光子晶体的能带 图(b)为图 (a)的局布放大图

5.结 论

本文研究了由正负折射率材料交替排列组成的 一维光子晶体的能带及电场,发现这种光子晶体与 普通光子晶体具有不同的能带.并且当选择合适的 参数时,TE模或TM模会出现完全光子带隙,这在 普通光子晶体中是难以实现的.完全带隙的上、下带 边的电场是周期性的,导带中的电场分布具有较强 的局域性.当这种光子晶体的平均折射率为零时,禁 带会变得很宽,在禁带中会出现一些几乎均匀分布 的透射峰,这些透射峰的电场都具有很强的局域性. 还讨论了负折射率材料层为色散介质的情况,得到 了在不同的正负折射率区域的复杂的能带.

- [1] Veselago V G 1968 Sov. Phys. Usp. 10 509
- [2] Smith D R, Padilla W J, Vier D C, Nemat-Nasser S C, Schultz S 2000 Phys. Rev. Lett. 84 4184
- [3] Pendry J B 2000 Phys. Rev. Lett. 85 3966
- [4] Liu N H 1997 Phys. Rev. B 55 4097
- [5] Liu N H , Zhu S Y , Chen H 2001 Phys. Rev. B 64 165105
- [6] Liu N H , Zhu S Y , Chen H , Wu X 2002 Phys. Rev. E 65 046607
- [7] Zhou J G , Du G Q , Zhang Y W , Liu N H 2005 Acta Phys. Sin.
 54 3703 (in Chinese) [周金苟、杜桂强、张亚文、刘念华 2005 物理学报 54 3703]
- [8] Xu K Y , Zheng X G , Li C L , She W L 2005 Phys. Rev. E 71 066604
- [9] Dong H X, Jiang H T, Yang C Q, Shi Y L 2006 Acta Phys. Sin.
 55 1000 (in Chinese)[董海霞、江海涛、杨成全、石云龙 2006

物理学报 55 1000]

- [10] Shi H Y , Jiang Y Y , Sun X D , Guo R H , Zhao Y P 2005 Chin . Phys. 14 1571
- [11] Jiang T , Chen Y , Feng Y J 2006 Chin . Phys. 15 1009
- [12] Dong Z G , Zhu S N , Liu H 2006 Chin . Phys . 15 1772
- [13] Shadrivov I V, Sukhorukov A A, Kivshar Y S 2005 Phys. Rev. Lett. 95 193903
- [14] Li J, Zhou L, Chan C T, Sheng P 2003 Phys. Rev. Lett. 90 083901
- [15] Bria D , Rouhani B D , Akjouj A , Dobrzynski L , Vigneron L , El Boudouti E H , Nougaoui A 2004 Phys. Rev. E 69 066613
- [16] Fink Y, Winn JN, Fan SH, Chen CP, Michel J, Joannopoulos J D, Thomas E L 1998 Science 82 1679
- [17] Ruppin R 2000 Phys. Lett. A 277 61

Band structures and electric fields of one-dimensional photonic crystals composed of alternate layers of left-handed and right-handed materials *

Wang Tong-Biao Liu Nian-Hua[†]

(Institute for Advanced Study, Nanchang University, Nanchang 330031, China)
 (Received 14 November 2006; revised manuscript received 2 February 2007)

Abstract

We theoretically studied the band gap structure of one-dimensional photonic crystals constituted by alternate layers of lefthanded and right-handed materials, and found that the band gap structure is different from the usual photonic crystals. With an appropriate choice of the parameters, we show that it is possible to realize an absolute band gap for either TE or TM polarization of the electromagnetic waves, which can not be found in normal photonic crystals. The wave function of electric field in the pass band is strongly localized compared with the normal photonic crystals. And we give an example in which we substitute the lefthanded materials with dispersion materials, and get different energy bands in different areas.

Keywords: photonic crystals, negative refraction, energy band **PACC**: 4270Q, 4110H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10664002).

[†] Corresponding author. E-mail : nhliu@ncu.edu.cn