

非长波极限下二维光子晶体中横电模的等效介质理论*

耿滔[†] 王岩 王新 董祥美

(上海市现代光学系统重点实验室, 教育部光学仪器与系统工程研究中心, 上海理工大学光电信息与计算机工程学院, 上海 200093)

(2014年12月22日收到; 2015年2月4日收到修改稿)

基于Mie散射理论, 推导、建立了适用于非长波极限的二维光子晶体中横电模的等效介质理论. 随后利用该理论探讨了二维光子晶体中横电模的负折射特性和零折射特性, 计算结果与相应的能带结构相符合, 验证了该理论在非长波极限条件下的适用性. 更进一步的是, 使用该理论能得到从能带结构中无法获取的额外信息.

关键词: 等效介质理论, 非长波极限, 光子晶体, 横电模

PACS: 42.70.Qs, 78.20.Bh, 78.20.Ci

DOI: 10.7498/aps.64.154210

1 引言

近年来随着微加工技术的发展, 在二维周期性结构的电介质和金属光子晶体中, 研究者观察到了一系列如负折射率^[1,2]、零折射率^[3,4]以及零介电常数等^[5]普通材料难以实现的新奇物理现象. 这些新颖的超材料能应用于超分辨^[6,7]、生物传感^[8]和非线性相位匹配^[9]等领域, 具有广泛的应用前景. 目前, 研究者通常会使用等效介质理论 (effective medium theory, EMT) 分析人造周期材料的光学特性, 而普通的EMT只能用于长波极限的条件下, 即入射光波波长 λ 远大于材料的晶格结构 a . 但负折射和零折射等新奇的物理现象通常发生在周期晶格能够对光子产生作用的条件下, 此时 λ 与 a 数量级相当, 无法使用普通的EMT探讨此类问题, 因此需要发展、建立一套适用于非长波极限的EMT.

Chui等^[10]从第一性原理出发, 得到了非长波

极限条件下等效介质中波数 k_{eff} 的表达式, 但是无法得到等效阻抗; Sarychev等^[11]利用偶极子近似获得了等效电磁参数, 但其方法只能用于金属超材料; Koschny等^[12]利用实验测量的透射和反射谱, 数值反推材料的等效电磁参数, 因此无法获得解析的表达式. 2006年, Wu等基于Mie散射理论, 建立了非长波极限下二维光子晶体中横磁模 (transverse magnetic mode, TM, 电场平行于介质柱或空气柱的长轴) 的EMT^[13], 随后被进一步发展并成功应用于探讨介质光子晶体中TM模 (电场平行于介质柱或空气柱的长轴) 的负折射率^[14]和零折射率^[3], 以及磁性光子晶体中各向异性的磁效应^[15]等物理现象. 而对于横电模 (transverse electric mode, TE, 磁场平行于介质柱或空气柱的长轴), 目前还未有详细的研究报道. 因此本文将推导、建立适用于非长波极限的TE模EMT, 随后利用该理论探讨二维光子晶体中TE模的负折射和零折射特性, 并与能带理论的计算结果作比较.

* 上海市青年科技启明星计划项目 (批准号: 12QA1402300)、国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 61008044)、上海市自然科学基金 (批准号: 14ZR1428500) 和上海市重点学科项目第三期项目 (批准号: S30502) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: Tao_Geng@hotmail.com

2 理论模型

对于二维光子晶体, 介质圆柱(或空气孔)按一定的周期结构分布在背景介质中, 设介质柱(或空气孔)的介电常数和磁导率分别为 ε_s 和 μ_s , 半径为 r_s , 晶格常数为 a . 背景介质的介电常数和磁导率分别为 ε_h 和 μ_h . 为了便于推导, 本文将使用正方晶格结构为例, 如图 1(a) 所示. 电磁波在这种光子晶体中的传播特性可以等效为在无限大等效介质中对一根带有覆盖层的介质圆柱的散射行为^[13], 对于正方结构, 覆盖层的半径 r_h 由 $\pi r_h^2 = a^2$ 给出, 如图 1(b) 所示. 等效介质的介电常数和磁导率分别设为 ε_{eff} 和 μ_{eff} . 需要说明的是, 该方法对光子晶体的几何周期结构没有限制, 不同的几何结构只是占空比不同. 在取 a 为单位 1 的条件下, 不同的几何结构只会改变 r_h 的值, 例如对于六角结构, r_h 由 $\pi r_h^2 = \sqrt{3}a^2/2$ 给出.

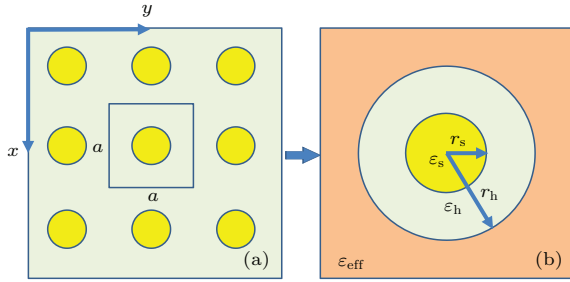


图 1 (网刊彩色) (a) 二维光子晶体结构示意图; (b) 等效介质模型中等效原胞示意图

Fig. 1. (color online) (a) Schematics of a the photonic crystal made of circular cylinders; (b) the equivalent unit cell used in the effective-medium model.

根据 Mie 散射理论, 在图 1(b) 中传播的散射电磁场可以展开成矢量柱面波函数的线性组合^[16]. 对于 TE 偏振, 磁场沿 Z 方向, 电场在 XY 平面内, 此时介质柱中、覆层介质中以及等效介质中的磁场可以分别表示为

$$H_z(k_s, r) = \sqrt{\varepsilon_s \mu_s} \sum_n (-i)^n a_n^s J_n(k_s r) e^{in\phi}, \quad (1)$$

$$H_z(k_h, r) = \sqrt{\varepsilon_h \mu_h} \sum_n (-i)^n [a_n^h J_n(k_h r) + b_n^h H_n^{(1)}(k_h r)] e^{in\phi}, \quad (2)$$

$$H_z(k_{\text{eff}}, r) = \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}}} \sum_n (-i)^n [a_n^{\text{eff}} J_n(k_{\text{eff}} r) + b_n^{\text{eff}} H_n^{(1)}(k_{\text{eff}} r)] e^{in\phi}, \quad (3)$$

其中 k_s, k_h, k_{eff} 分别是介质柱、覆层介质和等效介质中的波数, $J_n(x)$ 和 $H_n^{(1)}(x)$ 分别是第一类贝塞尔函数和第一类汉克函数. 其对应的电场分量可以很容易的通过式 $\mathbf{E} = \frac{i}{\omega \varepsilon_{\{s, h, \text{eff}\}}} \nabla \times \mathbf{H}$ 计算得到.

由 Mie 散射理论, 覆层圆柱体的总散射截面可以表示为 $C_{\text{sca}} = \frac{4}{k_{\text{eff}}} \sum_n |D_n^{\text{eff}}|^2$, 其中 $D_n^{\text{eff}} = b_n^{\text{eff}}/a_n^{\text{eff}}$ 为 Mie 散射系数. 当满足条件 $k_{\text{eff}} r_h \ll 1$ 时, C_{sca} 主要由 $n = 0$ 和 $n = 1$ 决定, 高阶项趋于零. 由于总散射最终在等效介质中消失, 因此有 $D_n^{\text{eff}} = 0$, 即 $b_n^{\text{eff}} = 0$. 然后再考虑电场和磁场应在介质圆柱和覆层材料界面 ($r = r_s$) 以及覆层材料和等效介质界面 ($r = r_h$) 满足各自的边界条件, 经过一系列繁琐的计算和化简可得

$$\begin{aligned} & [-\mu_s k_h J'_n(k_s r_s) J_n(k_h r_s) \\ & + \mu_h k_s J'_n(k_h r_s) J_n(k_s r_s)] \\ & \times [-\mu_h k_s H_n^{(1)'}(k_h r_s) J_n(k_s r_s) \\ & + \mu_s k_h J'_n(k_s r_s) H_n^{(1)}(k_h r_s)]^{-1} \\ & = [-\varepsilon_0 k_{\text{eff}} J'_n(k_{\text{eff}} r_h) J_n(k_h r_h) \\ & + \varepsilon_{\text{eff}} k_h J'_n(k_h r_h) J_n(k_{\text{eff}} r_h)] \\ & \times [-\varepsilon_0 k_{\text{eff}} J'_n(k_{\text{eff}} r_h) H_n^{(1)}(k_h r_h) \\ & + \varepsilon_{\text{eff}} k_h H_n^{(1)'}(k_h r_h) J_n(k_{\text{eff}} r_h)]^{-1}. \quad (4) \end{aligned}$$

当满足条件 $k_{\text{eff}} r_h \ll 1$, 且不对 $k_s r_s$ 和 $k_h r_h$ 做出任何限制时, 对 (4) 式引入如下的合理近似 $J_0(x) \approx 1$, $J_1(x) \approx x/2$, $J'_0(x) \approx -x/2$, $J'_1(x) \approx 1/2$, $H_0^{(1)}(x) \approx 1 + i(2/\pi) \ln(x)$, $H_1^{(1)}(x) \approx (x/2) - i[2/(\pi x)]$, $H_0^{(1)'}(x) \approx -(x/2) + i[2/(\pi x^2)]$ 和 $H_1^{(1)'}(x) \approx 1/2 + i[2/(\pi x^2)]$, 其中 $x = k_{\text{eff}} r_h$, 可得

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{eff}} &= [J_1(k_h r_h) + D_1 J_1(k_h r_h) \\ & + i D_1 Y_1(k_h r_h)] \sqrt{\varepsilon_h} \\ & \times \{k r_h [J'_1(k_h r_h) + D_1 J'_1(k_h r_h) \\ & + i D_1 Y'_1(k_h r_h)] \sqrt{\mu_h}\}^{-1}, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_{\text{eff}} &= -2[J'_0(k_h r_h) + D_0 J'_0(k_h r_h) \\ & + i D_0 Y'_0(k_h r_h)] \sqrt{\mu_h} \\ & \times \{k r_h [J_0(k_h r_h) + D_0 J_0(k_h r_h) \\ & + i D_0 Y_0(k_h r_h)] \sqrt{\varepsilon_h}\}^{-1}, \quad (6) \end{aligned}$$

其中

$$D_n = \{-\mu_s k_h J'_n(k_s r_s) J_n(k_h r_s)$$

$$\begin{aligned}
 & + \mu_h k_s J'_n(k_h r_s) J_n(k_s r_s) \} \\
 & \times \{ -\mu_h k_s H_n^{(1)}(k_h r_s) J_n(k_s r_s) \\
 & + \mu_s k_h J'_n(k_s r_s) H_n^{(1)}(k_h r_s) \}^{-1},
 \end{aligned}$$

$Y_n(x)$ 为第二类贝塞尔函数 (诺伊曼函数). 比较文献 [13] 中的 TM 模结果可知, TE 和 TM 模的 EMT 并不能简单的将 E 和 H , 或 ε 和 μ 互换得到. 对于 TE 模和 TM 模, 其各自的散射系数 D_n 的表达式完全不一样. 另外, 对于 TM 模, 计算 ε 时取 $n = 0$, 计算 μ 时取 $n = 1$, 对于 TE 模则正好相反.

从上述推导可知, 该理论只需要满足 $k_{\text{eff}} r_h \ll 1$ 的条件, 对 $k_s r_s$ 和 $k_h r_h$ 没有任何要求. 与之相比, 通常的 EMT 需要同时满足 $k_{\text{eff}} r_h \ll 1$, $k_s r_s \ll 1$ 和 $k_h r_h \ll 1$. 而在实际应用中, 该理论对 $k_{\text{eff}} r_h \ll 1$ 的要求其实也不是十分苛刻. 在这里需要强调的是, EMT 是将光子晶体作为各向同性介质做等效的, 即需要等频线近似为圆形. 但光子晶体在处于弱周期调制状态时会表现出各向异性特性, 甚至在某些频段能同时激发出多种模式 [17,18], 此时入射

光在光子晶体中的传播行为已经不能等效为通常的折射行为, 在这些情况下 EMT 已经不再适用.

3 应用及分析

3.1 TE 模的负折射特性分析

我们将使用以前工作中讨论过的全角度折射率为 -1 的二维光子晶体为例 [19] 分析 TE 模的负折射特性. 光子晶体采用了正六边形的晶格结构, 介质柱为圆柱形, 周期性的排列在空气中, 使用了介电常数为 12.96 磁导率为 1 的电介质材料, 例如 GaAs 或 Si. 介质柱的半径 $r = 0.45a$, 其中 a 为晶格常数. TE 模的能带结构由平面波展开法计算得到, 如图 2 (a) 所示. 其中纵坐标为标准化频率 f , 定义为 a/λ , λ 为真空中的波长. 从图可以看到禁带出现在 $f = 0.22$ 到 $f = 0.25$ 之间, 由于全角度负折射发生在能带边缘, 且要求等频面中心的频率高于第一布里渊区边缘的频率, 因此负折射的研究通常集中在第二能带 [15].

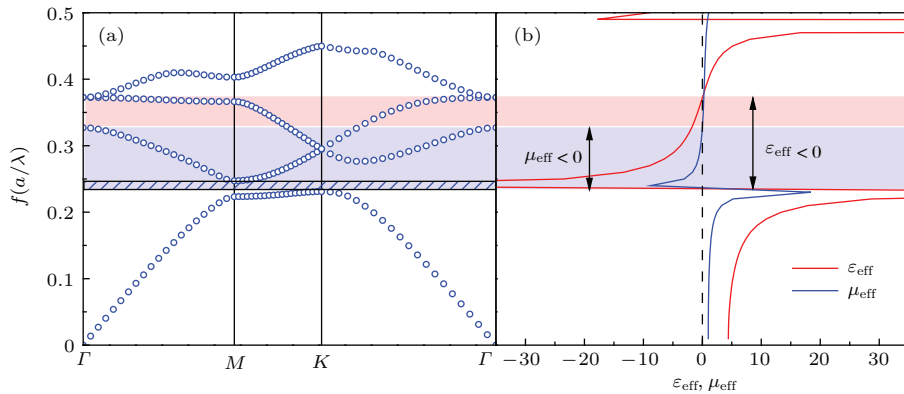


图 2 (网刊彩色) (a) 光子晶体 TE 模的能带结构 (图 (a) 中的阴影区域表示禁带范围); (b) 光子晶体 TE 模的等效介电常数 ε_{eff} 和等效磁导率 μ_{eff}

Fig. 2. (color online) (a) The band structure of TE mode, (b) effective permittivity ε_{eff} and permeability μ_{eff} of the sample. In (a), the shadow area indicates the band gap.

图 2 (b) 给出了利用 (5) 式和 (6) 式计算得到的等效介电常数 ε_{eff} 和等效磁导率 μ_{eff} . 从图 2 (b) 中可以清楚地看到, ε_{eff} 和 μ_{eff} 均表现出洛伦兹型色散, 电场共振强度远大于磁场共振. 禁带出现在共振频率处, 此时电磁场被局域化在每根介质柱中, 彼此之间几乎不产生相互作用, 使得电磁波无法在光子晶体中传播, 与图 2 (a) 中的禁带位置符合. $\varepsilon_{\text{eff}} < 0$ 和 $\mu_{\text{eff}} < 0$ 的区域分别出现在 $0.22 \leq f \leq 0.32$ 和 $0.22 \leq f \leq 0.37$, 因此在 $0.25 \leq f \leq 0.32$ 之间满足 ε_{eff} 和 μ_{eff} 同时为负, 对

应第二能带 (如图 2 (a) 所示), 在此频段内光子晶体表现出负折射特性.

图 3 (a) 分别给出了利用能带结构算得的 ΓM 方向的第二能带的等效折射率以及利用 (5) 和 (6) 式算得第二能带的等效折射率. 从图中可以看出, 在 $f \geq 0.3$ 的频段范围内两者的计算结果符合得很好. 但当 $f < 0.3$ 时, 两者随频率变化的趋势虽然相同, 但数值的差别逐渐增大. 这是因为随着 f 增大, 周期结构对光子晶体的调制作用逐渐减弱, 光子晶体的各向异性特性逐渐显现, 当 $f < 0.3$

时, 等频线已不能保持为圆形, 如图 3(b) 所示. 虽然当 $f < 0.3$ 时, 利用 (5) 和 (6) 式算得的具体数值已经不再可信, 但通过对图 2 的分析比较可知, 此时该理论仍然可以很准确的预测禁带出现的位置.

同时我们还可以计算得到, $f = 0.3$ 时光子晶体的阻抗 $Z = \sqrt{\mu_{\text{eff}}/\epsilon_{\text{eff}}} \approx 3.4$, 与空气阻抗不匹配, 导致高反射、低透射, 而这一信息无法从能带结构中获

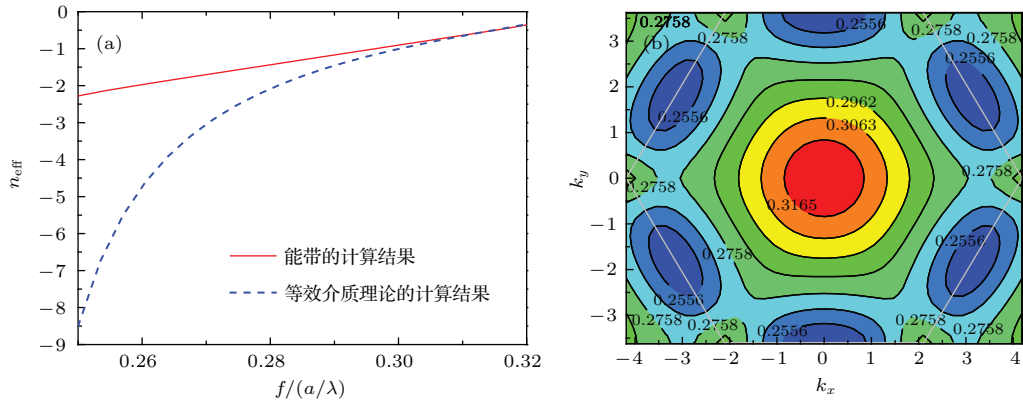


图 3 (网刊彩色) (a) 由不同方法算得的光子晶体 TE 模第二能带的等效折射率 (其中实线表示由能带结构算出的 ΓM 方向的等效折射率, 虚线表示由 (5) 和 (6) 式算出的等效折射率); (b) 光子晶体 TE 模第二能带的等频线 (图中的灰线表示第一布里渊区的边界)

Fig. 3. (color online) (a) The calculated effective index in the second band for TE mode using different methods. Solid line shows the calculated results along ΓM direction based on the band structure, and dash line shows the calculated results based on Eq. (5) and (6); (b) The equipfrequency surface contours of the system at several relevant frequencies in the second band. The gray line shows the first Brillouin zone.

3.2 TE 模的零折射率特性分析

这里我们仍然使用二维六角结构的介质圆柱光子晶体, 介质柱的介电常数为 2.2 磁导率为 1 (例如 SiO_2), 周期性分布在空气中. 介质柱的半径 $r = 0.19a$, 其中 a 为晶格常数. 图 4(a) 给出了 TE 模的能带结构, 从图中可以看到, 此时 TE 模在 Γ 点形成了狄拉克锥 (Dirac cone). 狄拉克锥由三重简并态构成, 这种情况被称之为偶然简并引发的狄拉克点 (accidental-degeneracy-induced Dirac point), 在此频率处 ($f = 1.06$) 的等效折射率为 0,

当晶格结构发生变化时, 三重简并态将退简并 [3], 如图 5(a) 所示.

利用 (5) 式和 (6) 式可算出 $f = 1.06$ 附近的等效介电常数 ϵ_{eff} 和等效磁导率 μ_{eff} , 如图 4(b) 所示. 从图可以看到, 在 $f = 1.06$ 处 ϵ_{eff} 和 μ_{eff} 同时为零, 使得等效折射率 $n_{\text{eff}} = 0$, 且阻抗 $Z = 1$ 与空气阻抗匹配良好. 这里需要强调的是, 在这种情况下, a/λ 大于 1, 普通等效介质理论已完全失效, 但由于 k_{eff} 趋于零, 仍然满足 $k_{\text{eff}}r_{\text{h}} \ll 1$ 的条件, 因此 (5) 式和 (6) 式依然适用.

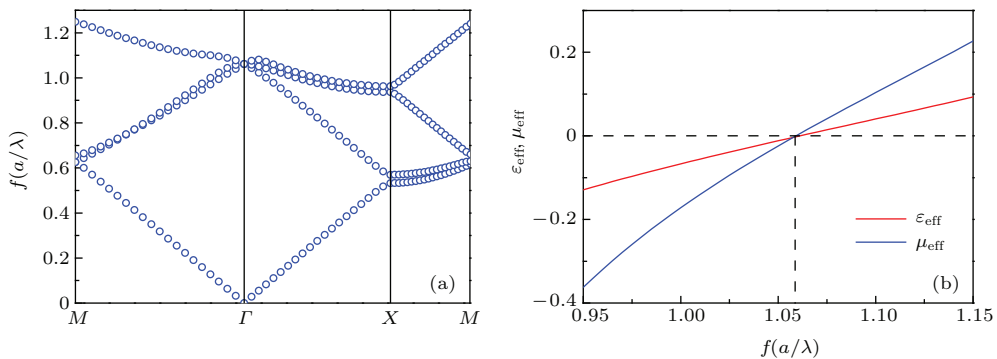


图 4 (网刊彩色) (a) 光子晶体 TE 模的能带结构 ($r = 0.19a$); (b) $f = 1.06$ 附近光子晶体 TE 模的等效介电常数 ϵ_{eff} 和等效磁导率 μ_{eff}

Fig. 4. (color online) (a) The band structure of TE mode ($r = 0.19a$); (b) effective permittivity ϵ_{eff} and permeability μ_{eff} of the sample around $f = 1.06$.

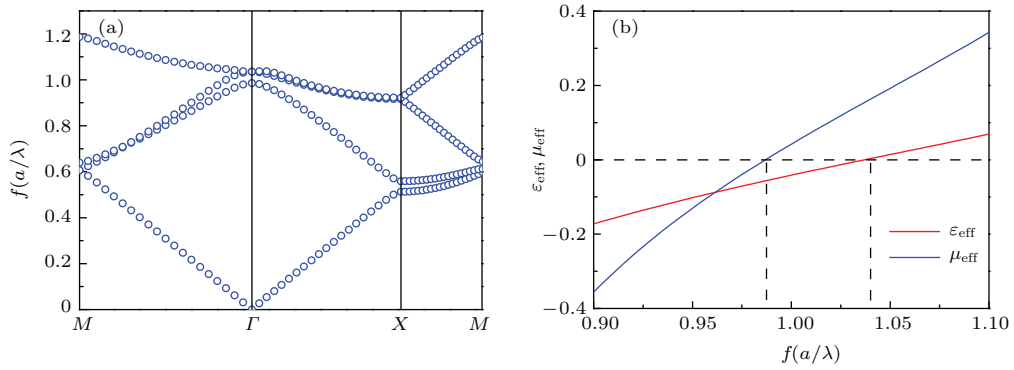


图5 (网刊彩色) (a) 光子晶体 TE 模的能带结构 ($r = 0.24a$); (b) $f = 1$ 附近光子晶体 TE 模的等效介电常数 ϵ_{eff} 和等效磁导率 μ_{eff}

Fig. 5. (color online) (a) The band structure of TE mode ($r = 0.24a$); (b) effective permittivity ϵ_{eff} and permeability μ_{eff} of the sample around $f = 1$.

其实能带结构能够在 Γ 点形成狄拉克锥并不是 $n_{\text{eff}} = 0$ 的必要条件. 图 5(a) 给出了其他条件都不变的情况下, $r = 0.24a$ 时光子晶体的能带结构. 此时 Γ 点的三重简并态退简并, 分裂成能级较高的二重简并态 ($f = 1.04$) 和能级较低的单重态 ($f = 0.99$), 狄拉克锥消失. 图 5(b) 给出了相应的等效介电常数 ϵ_{eff} 和等效磁导率 μ_{eff} , 从图中可以看到, 在 $f = 1.04$ 处由于 $\epsilon_{\text{eff}} = 0$ 使得 $n_{\text{eff}} = 0$, 而在 $f = 0.99$ 处由于 $\mu_{\text{eff}} = 0$ 使得 $n_{\text{eff}} = 0$, 但由于这两种情况下, 光子晶体阻抗与空气阻抗不再匹配, 使得入射光的大部分能量被反射, 材料性能大大下降.

4 结 论

本文基于 Mie 散射理论, 建立了非长波极限下二维光子晶体中 TE 模的等效介质理论, 并将其应用于负折射特性和零折射特性的探讨, 计算结果与能带结构相符合, 证明了该理论的正确性. 与此同时, 该理论能提供从能带结构中无法获得的阻抗信息, 有助于研究者加深对此类新奇物理现象的研究和理解.

参考文献

[1] Jin L, Zhu Q Y, Fu Y Q 2013 *Chin. Phys. B* **22** 094102
 [2] Li Y N, Gu P F, Zhang J L, Li M Y, Liu X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4918 (in Chinese) [厉以宇, 顾培夫, 张锦龙, 李明宇, 刘旭 2006 物理学报 **55** 4918]

[3] Huang X, Lai L, Hang Z H, Zheng H, Chan Z T 2011 *Nat. Mater.* **10** 582
 [4] Zhao H, Shen Y F, Zhang Z J 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 174204 (in Chinese) [赵浩, 沈义峰, 张中杰 2014 物理学报 **63** 174204]
 [5] Ginzburg P, Fortuño F J R, Wurtz G A, Dickson W, Murphy A, Morgan F, Pollard J R, Iorsh I, Atrashchenko A, Belov P A, Kivshar Y S, Nevet A, Ankonina G, Orenstein M, Zayats A V 2013 *Opt. Express* **21** 14907
 [6] Li G J, Kang X L, Li Y P 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6403 (in Chinese) [李国俊, 康学亮, 李永平 2007 物理学报 **56** 6403]
 [7] Jin L, Zhu Q Y, Fu Y Q, Yu W X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 104101
 [8] Kabashin A V, Evans P, Pastkovsky S, Hendren W, Wurtz G A, Atkinson R, Pollard R, Podolskiy V A, Zayats A V 2009 *Nat. Mater.* **8** 867
 [9] Suchowski H, O'Brien K, Wong Z J, Salandrino A, Yin X, Zhang X 2013 *Science* **342** 1223
 [10] Chui S T, Hu L 2002 *Phys. Rev. B* **65** 144407
 [11] Sarychev A K, McPhedran R C, Shalaev V M 2001 *Phys. Rev. B* **64** 079904
 [12] Koschny T, Economou E N, Smith D R, Vier D C, Soukoulis, C M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 245105
 [13] Wu Y, Li J, Zhang Z Q, Chan C T 2006 *Phys. Rev. B* **74** 085111
 [14] Chern R L, Chen Y T 2009 *Phys. Rev. B* **80** 075118
 [15] Jin J, Liu S, Lin Z, Chui S T 2009 *Phys. Rev. B* **80** 115101
 [16] Bohren C F, Huffman D R 1983 *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Canada: John Wiley & Sons, Inc) p195
 [17] Notomi M 2000 *Phys. Rev. B* **62** 10696
 [18] Tang Z, Zhang H, Peng R, Ye Y, Shen L, Wen S, Fan D 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235103
 [19] Geng T, Liu T Y, Zhuang S L 2007 *Chin. Opt. Lett.* **5** 361

Effective medium theory of two-dimensional photonic crystal for transverse electric mode beyond the long-wavelength limit*

Geng Tao[†] Wang Yan Wang Xin Dong Xiang-Mei

(Shanghai Key Lab of Modern Optical System, Engineering Research Center of Optical Instrument and System, Ministry of Education, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

(Received 22 December 2014; revised manuscript received 4 February 2015)

Abstract

An effective medium theory of two-dimensional photonic crystal for TE mode beyond the long-wavelength limit has been established based on the Mie scattering theory. First, the proposed theory has been used to study the negative-refractive-index photonic crystals for TE mode. This theory can be used to calculate the effective indices and the effective impedance, and to predict the position of the band gap. Results agree well with the band structures, especially when the equifrequency surface contours are almost circular. Then the proposed theory is used to study the zero-refractive-index photonic crystals for TE mode. It can be seen a triply-degenerate point at Γ point, forming a Dirac cone in the band structures. It has been called an “accidental-degeneracy-induced Dirac point”, where the effective index is zero and the effective impedance is 1. Results calculated using the proposed theory agree well with the band structures. This means that the theory can be used well beyond the long-wavelength limit. Furthermore, the additional impedance information, which cannot be obtained by band structures, can be derived from the proposed theory.

Keywords: effective medium theory, beyond long-wavelength limit, photonic crystal, transverse electric mode

PACS: 42.70.Qs, 78.20.Bh, 78.20.Ci

DOI: [10.7498/aps.64.154210](https://doi.org/10.7498/aps.64.154210)

* Project supported by the Shanghai Rising-Star Program, China (Grant No. 12QA1402300), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61008044), the Basic Research Program of Shanghai, China (Grant No. 14ZR1428500), and the Shanghai Leading Academic Discipline Project, China (Grant No. S30502).

[†] Corresponding author. E-mail: Tao_Geng@hotmail.com