

光子晶体理论研究的新方法——混合变分法

陈圆圆 杨盼杰 张玮芝 阎晓娜

A powerful method to analyze of photonic crystals: mixed variational method

Chen Yuan-Yuan Yang Pan-Jie Zhang Wei-Zhi Yan Xiao-Na

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 124206 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.124206

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.124206>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I12>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

偶极子位置及偏振对激发光子晶体 H1 微腔的影响

Effects of location and polarization of a dipole source on the excitation of a photonic crystal H1 cavity

物理学报.2016, 65(13): 134206 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.134206>

一种基于共享孔径 Fabry-Perot 谐振腔结构的宽带高增益磁电偶极子微带天线

Design of a broadband and highgain shared-aperture fabry-perot resonator magneto-electric microstrip antenna

物理学报.2016, 65(13): 134205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.134205>

二维函数光子晶体

Two-dimensional function photonic crystal

物理学报.2016, 65(13): 134207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.134207>

光子晶体理论研究的新方法-----混合变分法

A powerful method to analyze of photonic crystals: mixed variational method

物理学报.2016, 65(12): 124206 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.124206>

表层厚度渐变一维耦合腔光子晶体的反射相位特性及其应用

Reflection phase characteristics and their applications based on one-dimensional coupled-cavity photonic crystals with gradually changed thickness of surface layer

物理学报.2016, 65(7): 074201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.074201>

## 光子晶体理论研究的新方法——混合变分法\*

陈园园 杨盼杰 张玮芝 阎晓娜†

(上海大学理学院, 上海 200444)

(2016年1月11日收到; 2016年4月14日收到修改稿)

利用混合变分法研究了二维光子晶体的能带结构, 得到了通带、禁带和群速度, 并详细分析光子晶体中的电磁场分布和能流密度分布. 该方法方便实用, 理论上能够应用于任意维度任意周期结构的光子晶体的计算.

**关键词:** 二维光子晶体, 能带结构, 变分法

**PACS:** 42.70.Qs, 04.20.Fy

**DOI:** 10.7498/aps.65.124206

## 1 引言

对光子的控制和操纵技术一直是人们的研究热点, 1987年Yablonovitch<sup>[1]</sup>和John<sup>[2]</sup>提出了一种新的控制光子的机制——光子晶体, 将介电常数不同的介质以周期性排列, 通过改变光子晶体结构和介质的介电常数即可调控电磁波在光子晶体中的传输特性. 光子晶体具有的光子禁带、光子局域<sup>[3]</sup>、双稳态<sup>[4]</sup>、光学滤波及抑制自发辐射效应<sup>[5]</sup>等物理特性, 使得光子晶体在光电集成、光传输、通信等领域有很大的应用潜力. 目前人们在光子晶体的带隙计算、设计优化方面做了很多工作<sup>[6-8]</sup>.

在光子晶体理论研究中, 多采用平面波展开法<sup>[9-11]</sup>, 时域有限差分(FDTD)法<sup>[12,13]</sup>、传输矩阵法<sup>[14-16]</sup>等, 各种方法各有利弊. 平面波展开法是光子晶体能带研究中用得较早且较多的方法, 将介电函数根据其周期性展开成傅里叶级数, 并把入射电磁波在倒易空间进行平面波展开, 求解特征方程得到能带结构. 该方法的缺点是计算精度和计算量取决于平面波的数量, 当结构复杂时, 计算量较大且困难. 传输矩阵方法是一种多散射方法, 适合于计算复杂晶体结构的透射和反射系数, 但对光子晶体物理概念的理解帮助不大. 时域有限差分法是将一个单位原胞划分成许多网格单元, 直接用有限

差分式代替Maxwell时域旋度方程中的微分式, 将Maxwell方程组离散化, 形成矩阵形式的特征方程. 它的缺点是遇到特殊形状格点的光子晶体时, 求得精确的解比较困难, 需要大量的存储空间, 计算时间长.

本文将介绍一种新的方法——混合变分法, 这种方法源于UCSD的Sia教授对弹性力学周期结构的研究, 该小组利用力学材料构成了声子晶体, 研究了声子晶体的能带结构等问题<sup>[17-20]</sup>. 该方法能够得到精确的结果, 且收敛速度较快. 我们将其转换到了电磁介质, 可以用于计算任意维度、不同介质构成的任意晶格的周期性结构, 能够得到能带结构、电磁场分布、能流和群速度等参数.

变分法是处理函数中包含函数的数学问题, 和处理数的函数的普通微积分相对应, 变分法最终寻求的是极值函数, 它们使得泛函取得极大或极小值. 变分法的关键定理是欧拉-拉格朗日方程, 它对应于任意的泛函的临界点. 最小作用量原理即是一种变分原理, 是现代物理理论的一个重要源头, 从最小作用量原理出发, 采用拉格朗日形式, 可以将力学、经典场论、量子场论、规范场论贯穿起来, 并伸向物理学的未来. 拉格朗日形式是一种数学化形式, 它揭示了空间-时间的属性与物理运动的规律之间所存在的密切联系, 内容丰富. 由麦克斯韦方

\* 国家自然科学基金(批准号: 11274225)和上海市自然科学基金(批准号: KW-201449732)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xnyan@staff.shu.edu.cn

程, 利用最小作用原理可以导出拉格朗日密度, 本文将从拉格朗日密度着手.

## 2 理论分析

根据经典电动力学, 电磁场的拉格朗日密度  $L_g$  的表达式为<sup>[21]</sup>

$$L_g = -\frac{1}{4\mu_0} \mathbf{F}_{\mu\nu} \mathbf{F}^{\mu\nu} - \mathbf{J}^\mu \mathbf{A}_\mu, \quad (1)$$

$\mathbf{F}_{\mu\nu}$  为电磁张量,

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\mu\nu} &= \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu \\ &= \begin{bmatrix} 0 & E_1/c & E_2/c & E_3/c \\ -E_1/c & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2/c & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3/c & -B_2 & B_1 & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2)$$

矢势  $\mathbf{A}_\mu$  为四维电磁矢量,  $\mathbf{A}_\mu = (\phi/c, \mathbf{A})$ ,  $\phi$  为电势,  $\mathbf{A}$  为三维磁势,  $\mathbf{J}^\mu$  为四维电流密度矢量, 在平直空间, 上下指标可以不做区分. 电场  $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$ , 磁感应强度  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ,  $\mu_0$  是真空中磁导率,  $c$  是光速.

利用 (1) 式计算拉格朗日密度过程较为复杂, 由文献 [22,23] 可以直接得到麦克斯韦方程的拉格朗日总量  $L$  为

$$L = \int_{\Omega} (\mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{H} + \mathbf{H} \cdot \nabla \times \mathbf{E} - i\omega\varepsilon \mathbf{E}^2 + i\omega\mu \mathbf{H}^2) d\Omega, \quad (3)$$

$d\Omega = dx_1 \cdot dx_2$  为面积分元. 若不考虑介质损耗, 则

$$L = \int_{\Omega} (\mathbf{E}^* \cdot \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{H}^* \cdot \nabla \times \mathbf{E} - i\omega\varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^* - i\omega\mu \mathbf{H} \cdot \mathbf{H}^*) d\Omega, \quad (4)$$

其中  $\mathbf{H} = 1/\mu\mathbf{B}$ ,  $\varepsilon, \mu$  是介质中的介电常数和磁导率,  $\omega$  是电磁场角频率. 拉格朗日总量是拉格朗日密度的空间积分.

考虑二维光子晶体结构, 介电材料在  $x_1, x_2$  方向上周期排列, 在  $x_3$  方向上均匀分布. 晶格具有周期性, 介电常数和磁导率的分布函数可以定义为:

$$\varepsilon(x_1, x_2) = \varepsilon(x_1 + ma_1, x_2 + ma_2), \quad (5)$$

$$\mu(x_1, x_2) = \mu(x_1 + ma_1, x_2 + ma_2), \quad (6)$$

$a_1, a_2$  为二维光子晶体在  $x_1, x_2$  方向上的周期常数,  $m$  为任意整数. 以 TE 波为例, 光子晶体中的电

磁场可以表示为:

$$\mathbf{E} = E(x_1, x_2)\mathbf{e}_3, \quad (7)$$

$$\mathbf{H} = H_1(x_1, x_2)\mathbf{e}_1 + H_2(x_1, x_2)\mathbf{e}_2, \quad (8)$$

其中  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$  为  $x_1, x_2, x_3$  方向上的单位矢量. 由 (4) 式可定义拉格朗日密度为

$$\begin{aligned} L_g &= \mathbf{E}^* \cdot \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{H}^* \cdot \nabla \times \mathbf{E} \\ &\quad - i\omega\varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^* - i\omega\mu \mathbf{H} \cdot \mathbf{H}^* \\ &= H_2^* \frac{\partial E}{\partial x_1} - H_1^* \frac{\partial E}{\partial x_2} + E^* \frac{\partial H_2}{\partial x_1} \\ &\quad - E^* \frac{\partial H_1}{\partial x_2} - i\omega\varepsilon E \cdot E^* - i\omega\mu H_1 \cdot H_1^* \\ &\quad - i\omega\mu H_2 \cdot H_2^*, \end{aligned} \quad (9)$$

从而可以将拉格朗日总量的表达式变形为

$$\begin{aligned} L &= \int_{\Omega} L_g d\Omega \\ &= \langle E_{,1}, H_2 \rangle - \langle E_{,2}, H_1 \rangle \\ &\quad + \langle H_{2,1}, E \rangle - \langle H_{1,2}, E \rangle - i\omega \langle \varepsilon E, E \rangle \\ &\quad - i\omega \langle \mu H_1, H_1 \rangle - i\omega \langle \mu H_2, H_2 \rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

其中

$$\langle u, v \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} uv^* d\Omega,$$

$$H_{i,j} = \frac{\partial H_i}{\partial x_j}, \quad E_{,j} = \frac{\partial E}{\partial x_j}, \quad i, j = 1, 2.$$

对  $L$  分别关于  $E^*, H_1^*, H_2^*$  求一阶导数, 可以得到

$$\frac{\partial H_2}{\partial x_1} - \frac{\partial H_1}{\partial x_2} - i\omega\varepsilon E = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x_2} + i\omega\mu H_1 = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x_1} - i\omega\mu H_2 = 0. \quad (13)$$

以上方程组为欧拉-拉格朗日方程, 也可由麦克斯韦方程组得到. 为得到该方程组在布洛赫周期条件下的解, 我们考虑如下形式的试解<sup>[17-20]</sup>:

$$E = \sum_{\alpha, \beta = -M}^{+M} E^{(\alpha, \beta)} e^{i[(k_1 + \frac{2\pi\alpha}{a_1})x_1 + (k_2 + \frac{2\pi\beta}{a_2})x_2]}, \quad (14)$$

$$H_1 = \sum_{\alpha, \beta = -M}^{+M} H_1^{(\alpha, \beta)} e^{i[(k_1 + \frac{2\pi\alpha}{a_1})x_1 + (k_2 + \frac{2\pi\beta}{a_2})x_2]}, \quad (15)$$

$$H_2 = \sum_{\alpha, \beta = -M}^{+M} H_2^{(\alpha, \beta)} e^{i[(k_1 + \frac{2\pi\alpha}{a_1})x_1 + (k_2 + \frac{2\pi\beta}{a_2})x_2]}, \quad (16)$$

$k_1, k_2$  为波矢量  $\mathbf{k}$  在  $x_1, x_2$  方向上的分量. 将该试解代入到拉格朗日总量 (10) 式中, 得

$$L = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma = -M}^{+M} \left\{ E^{(\alpha, \beta)} \left[ i \left( k_1 + \frac{2\pi\alpha}{a_1} \right) \right] \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\sigma} H_2^{(\gamma, \sigma)*} - E^{(\alpha, \beta)} \left[ i \left( k_2 + \frac{2\pi\beta}{a_2} \right) \right] \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\sigma} H_1^{(\gamma, \sigma)*} + H_2^{(\alpha, \beta)} \left[ i \left( k_1 + \frac{2\pi\alpha}{a_1} \right) \right] \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\sigma} E^{(\gamma, \sigma)*} - H_1^{(\alpha, \beta)} \left[ i \left( k_2 + \frac{2\pi\beta}{a_2} \right) \right] \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\sigma} E^{(\gamma, \sigma)*} - i\omega \left[ E^{(\alpha, \beta)} \Lambda^{\alpha\gamma}(\varepsilon) \Lambda^{\beta\sigma}(\varepsilon) E^{(\gamma, \sigma)*} + H_1^{(\alpha, \beta)} \Lambda^{\alpha\gamma}(\mu) \Lambda^{\beta\sigma}(\mu) H_1^{(\gamma, \sigma)*} + H_2^{(\alpha, \beta)} \Lambda^{\alpha\gamma}(\mu) \Lambda^{\beta\sigma}(\mu) H_2^{(\gamma, \sigma)*} \right] \right\}, \quad (17)$$

其中函数  $\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$ ,

$$\Lambda^{\alpha\gamma}(f) = \int f e^{i \frac{2\pi}{a_1} (\alpha - \gamma) x_1} dx_1, \quad (18)$$

$$\Lambda^{\beta\sigma}(f) = \int f e^{i \frac{2\pi}{a_2} (\beta - \sigma) x_2} dx_2. \quad (19)$$

接下来, 我们构造一  $N^2 \times N^2$  矩阵:  $\Lambda(f) = \Lambda^{\alpha\gamma}(f) \Lambda^{\beta\sigma}(f)$ , 其中  $\alpha, \beta, \gamma, \delta = 0, \pm 1, \dots, \pm M, N = 2M + 1$ , 且做如下形式的代换:

$$\Psi_1 = \left( k_1 + \frac{2\pi\alpha}{a_1} \right) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\sigma}, \quad (20)$$

$$\Psi_2 = \left( k_2 + \frac{2\pi\beta}{a_2} \right) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\sigma}, \quad (21)$$

$\Psi_1, \Psi_2$  也分别为  $N^2 \times N^2$  矩阵. 则可将 (17) 式转变为矩阵相乘的形式

$$L = \mathbf{E} \cdot i\Psi_1 \cdot \mathbf{H}_2^* - \mathbf{E} \cdot i\Psi_2 \cdot \mathbf{H}_1^* + \mathbf{H}_2 \cdot i\Psi_1 \cdot \mathbf{E}^* - \mathbf{H}_1 \cdot i\Psi_2 \cdot \mathbf{E}^* - i\omega [\mathbf{E} \cdot \Lambda(\varepsilon) \cdot \mathbf{E}^* + \mathbf{H}_1 \cdot \Lambda(\mu) \cdot \mathbf{H}_1^* + \mathbf{H}_2 \cdot \Lambda(\mu) \cdot \mathbf{H}_2^*], \quad (22)$$

这里的  $\mathbf{E}, \mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2$  已转换为由  $E^{(\alpha\beta)}, H_1^{(\alpha\beta)}, H_2^{(\alpha\beta)}$  得到的  $1 \times N^2$  的列向量. 为得到  $L$  的极小值, 对  $L$  关于  $\mathbf{E}^*, \mathbf{H}_1^*, \mathbf{H}_2^*$  求一阶导数, 得

$$\mathbf{H}_2 \cdot \Psi_1 - \mathbf{H}_1 \cdot \Psi_2 - \omega \mathbf{E} \cdot \Lambda(\varepsilon) = 0, \quad (23)$$

$$\mathbf{E} \cdot \Psi_2 + \omega \mathbf{H}_1 \cdot \Lambda(\mu) = 0, \quad (24)$$

$$\mathbf{E} \cdot \Psi_1 - \omega \mathbf{H}_2 \cdot \Lambda(\mu) = 0. \quad (25)$$

整理方程组得到:

$$\mathbf{E} [\Psi_2 \Lambda^{-1}(\mu) \Psi_2 + \Psi_1 \Lambda^{-1}(\mu) \Psi_1 - \omega^2 \Lambda(\varepsilon)] = 0, \quad (26)$$

令  $\mathbf{A}_1 = \Psi_2 \Lambda^{-1}(\mu) \Psi_2 + \Psi_1 \Lambda^{-1}(\mu) \Psi_1$ , (26) 式可化简为求解光子晶体能带结构的本征值方程

$$\mathbf{E} [\mathbf{A}_1 - \omega^2 \Lambda(\varepsilon)] = 0. \quad (27)$$

本征值  $\omega$  可由下式得到:

$$\det |\mathbf{A}_1 - \omega^2 \Lambda(\varepsilon)| = 0. \quad (28)$$

对于任一给定的周期结构单元, (28) 式中矩阵  $\mathbf{A}_1, \Lambda(\varepsilon)$  可以由 (18)–(21) 式得到, 则本征值  $\omega$  与波矢量分量  $k_1, k_2$  有关, 由此我们得到了光子晶体的能带结构和第一布里渊区的等频线.

对于某个通带频率  $\omega$ , 求解方程 (27) 式, 再代入到 (14) 式, 可以计算得到光子晶体中的电场分布. 再由 (24) 式和 (25) 式, 亦可得到磁场

$$\mathbf{H}_1 = -\frac{1}{\omega} \mathbf{E} \cdot \Psi_2 \cdot \Lambda(\mu)^{-1}, \quad (29)$$

$$\mathbf{H}_2 = \frac{1}{\omega} \mathbf{E} \cdot \Psi_1 \cdot \Lambda(\mu)^{-1}. \quad (30)$$

对于 TM 波, 利用变分法同样可以得到求解光子晶体能带结构的本征值方程

$$\mathbf{H} [\mathbf{A}_2 - \omega^2 \Lambda(\mu)] = 0, \quad (31)$$

这里  $\mathbf{A}_2 = \Psi_2 \Lambda^{-1}(\varepsilon) \Psi_2 + \Psi_1 \Lambda^{-1}(\varepsilon) \Psi_1$ .

由 (28) 式还可以计算得到相速度  $v_p$  和群速度  $v_g$ ,

$$v_j^p = \frac{\omega k_j}{k_1^2 + k_2^2}, \quad v_j^g = \frac{\partial \omega}{\partial k_j}, \quad j = 1, 2. \quad (32)$$

根据坡印廷矢量  $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*$ , 将电磁场代入, 得到能流密度  $\mathbf{S} = -S_1 \mathbf{x}_1 + S_2 \mathbf{x}_2$ ,  $S_1 = \frac{1}{2} E H_2$ ,  $S_2 = \frac{1}{2} E H_1$ , 且能流密度的方向也可以得到:

$$\beta = \arctan \left( -\frac{S_2}{S_1} \right), \quad (33)$$

可以验证 (32) 式中群速度方向和 (33) 式结果相同, 即群速度方向与能流方向一致.

### 3 计算结果与讨论

接下来, 我们将以二维正方光子晶体为例, 研究光子晶体第一布里渊区内的能带结构. 图 1 为二维正方光子晶体结构示意图, 白色区域为空气, 黑色区域为圆形介质硅柱. 假设  $a_1 = a_2 = 100 \mu\text{m}$ ,  $2r = 60 \mu\text{m}$ , 空气:  $\varepsilon_1 = 1, \mu_1 = 1$ ; 介质柱:  $\varepsilon_2 = 12, \mu_2 = 1$ . 由 (28) 式, 可得到二维正方光子晶体在第一布里渊区的能带结构.

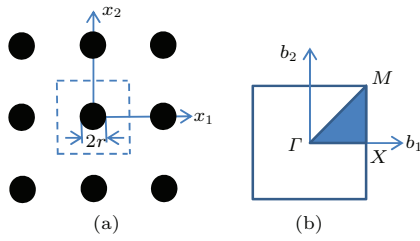


图1 (网刊彩色) (a) 二维正方光子晶体; (b) 第一布里渊区

Fig. 1. (color online) (a) Two dimensional square photonic crystal; (b) the first Brillouin zone.

对于TE波入射, 在图2(a)中我们得到了1—9条允许通过光子晶体的频带, 其中间隔了3个禁带, 如图中阴影部分所示. 这里我们只选取了低频部分通带和禁带, 也可以得到更高频的能带结构. 理论上来说, 光子晶体可以具有无限多条通带, 只是其中有禁带间隔. 对于TM波入射, 在图2(b)中我们也得到了类似的1—9条通带, 但其中只有1个禁带. 文献[24]利用平面波展开法得到了同结构的能

带结构, 我们的结果与其完全相同. 改变介质柱的介电常数也可以得到文献[25]利用FDTD方法得到的结果. 若将二维光子晶体的介质与空气互换, 即构成二维圆孔结构[26], 选用文献[26]的参数, 也可以得到相同的能带结构, 如图3所示. 由此, 可以验证本方法的准确性.

图4(a)和图4(b)为TE波入射到图1所示正方光子晶体得到的第一和第二通带的等频线, 图5(a)和图5(b)对应于TM波入射情况. 图中坐标 $K_1, K_2$ 为归一化波矢量分量,  $K_1 = k_1 a, K_2 = k_2 a$ . 图中的箭头方向为群速度方向, 亦可代表能流方向, 可以看到群速度方向都是垂直于等频线的. 图4(a)和图4(b)中显示的等频线可以明显看出对于TE波, 第一能带和第二能带间有较大的频率跳跃, 即有禁带间隔. 而在图5(a)和图5(b)中, 对于TM波, 第一能带和第二能带间没有频率间隔, 即不存在禁带.

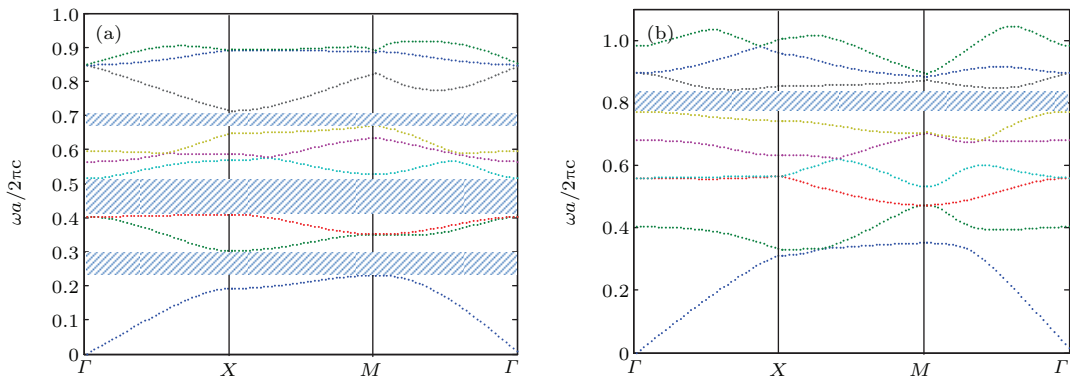


图2 (网刊彩色) 二维正方光子晶体的能带结构 (a) TE波; (b) TM波

Fig. 2. (color online) Bandgaps of the two dimensional photonic crystal: (a) TE wave; (b) TM wave.

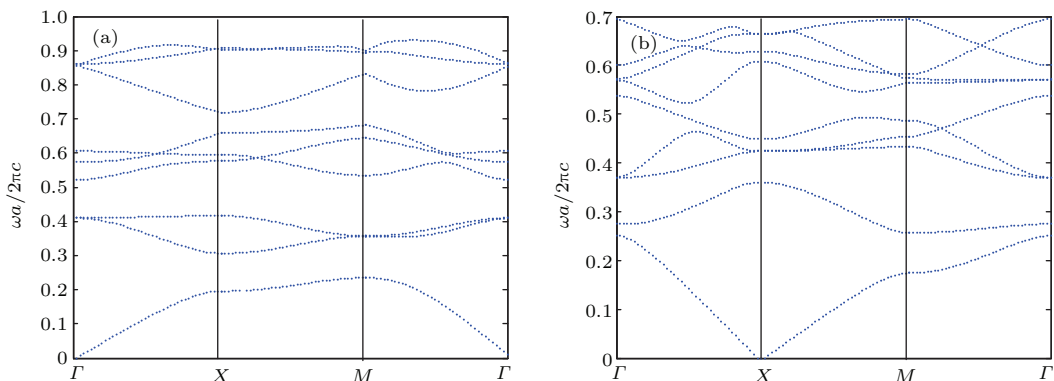


图3 (a) TE波: 介质柱结构,  $\epsilon_2 = 11.6$ , 能带结构与文献[25]结果相同; (b) TM波: 空气孔结构,  $\epsilon_2 = 10.5$ , 能带结构与文献[26]结果相同

Fig. 3. (a) TE wave, medium-rod,  $\epsilon_2 = 11.6$ , the bandgap is the same as that of Ref. [25]; (b) TM wave, air-hole,  $\epsilon_2 = 10.5$ , the bandgap is the same as that of Ref. [26].



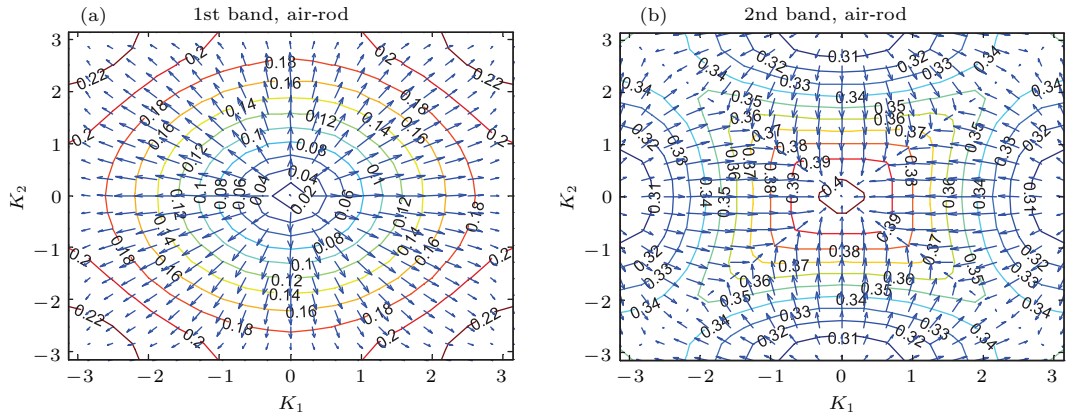


图4 (网刊彩色) TE波: 第一通带 (a) 和第二通带 (b) 的等频线和群速度方向

Fig. 4. (color online) TE wave: Constant-frequency contours and direction of group velocity in the first passband (a) and the second passband (b).

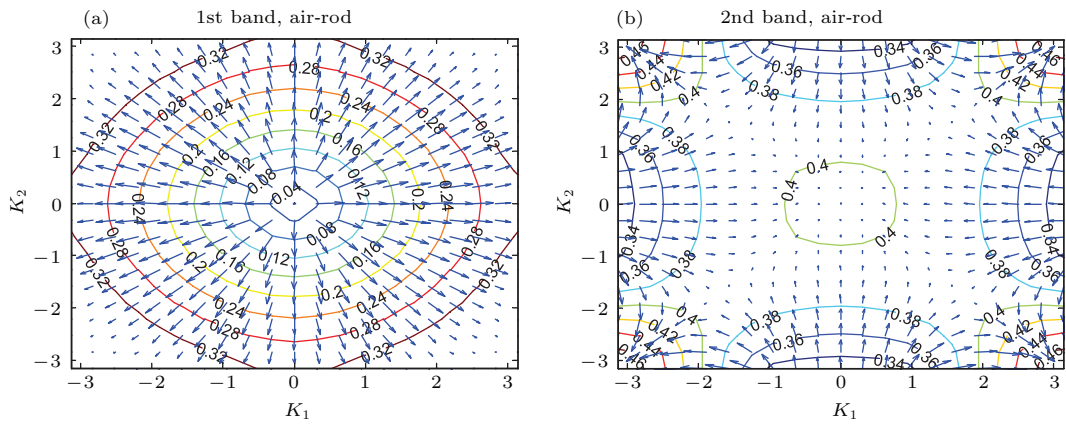


图5 (网刊彩色) TM波: 第一通带 (a) 和第二通带 (b) 的等频线和群速度方向

Fig. 5. (color online) TM wave: Constant-frequency contours and direction of group velocity in the first passband (a) and the second passband (b).

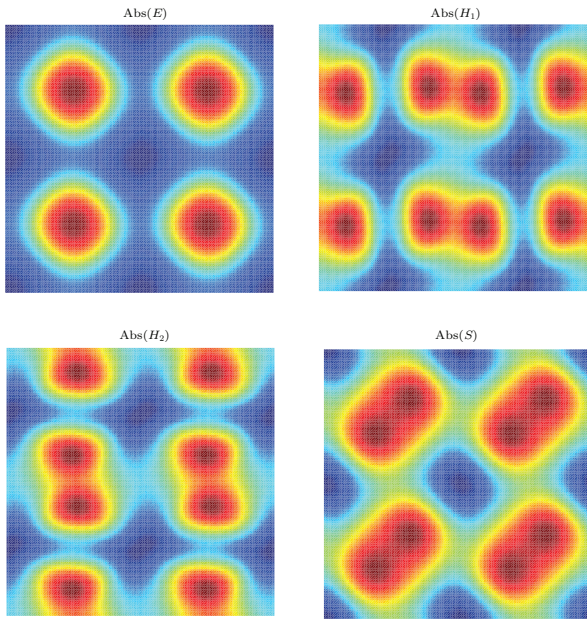


图6 (网刊彩色)  $2 \times 2$  晶格中的电磁场分布和能流密度分布

Fig. 6. (color online) Electric and magnetic field and energy flow density in  $2 \times 2$  lattices.

我们在图4(a)中第一通带上任选取一点, 入射场频率FRQ为:  $\omega a/2\pi c = 0.1481$ ,  $K_1 = 1.4137$ ,  $K_2 = 1.4137$ , 根据(27), (29)和(30)式, 可以得到光子晶体中的电场、磁场分布和能流密度分布, 如图6所示. 图7中还给出了由(33)式得到不同通带频率入射场的能流方向, 各子图中的波矢量分量和频率取值不同: (a)  $K_1 = 0.7854$ ,  $K_2 = 0$ ,  $FRQ_1 = 0.0612$ ; (b)  $K_1 = 0.7854$ ,  $K_2 = 0.3142$ ,  $FRQ_2 = 0.0658$ ; (c)  $K_1 = 0.7854$ ,  $K_2 = 0.7854$ ,  $FRQ_3 = 0.0858$ ; (d)  $K_1 = 0$ ,  $K_2 = 0.7854$ ,  $FRQ_4 = 0.0612$ . 图7中的能流方向与图4中群速度的方向是一致的.

以上是二维结构的讨论, 本方法还可以推广到三维光子晶体, 接下来我们将介质球在三维空间中排列, 构成简立方结构光子晶体. 对于三维结构, 电场和磁场需考虑三个方向的分量, 利用拉格朗日量(4)式, 经过公式推导, 我们可以得到类似于(28)

式的求解本征值  $\omega$  的方程

$$\det |\mathbf{A}_3 - \omega^2 \mathbf{A}(\varepsilon)| = 0, \quad (34)$$

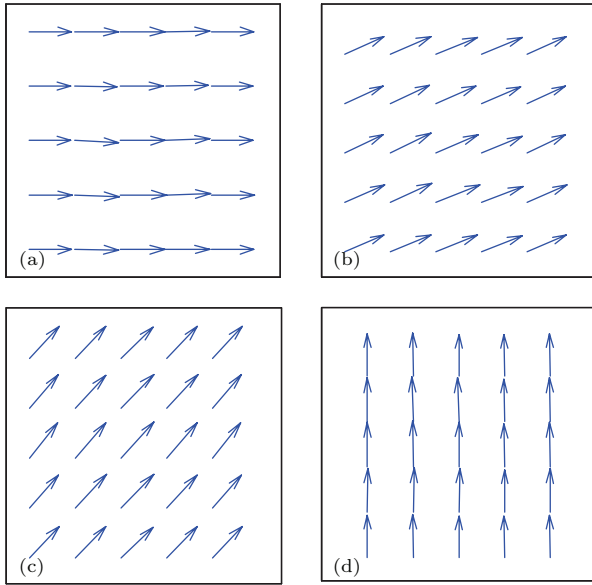


图7 单个晶格中的能流方向

Fig. 7. Direction of energy flow in a single lattice.

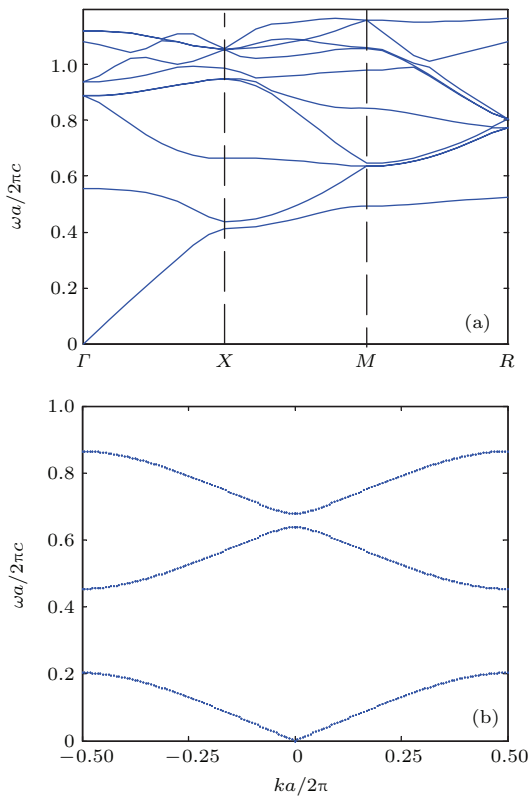


图8 (a) 三维介质球结构,  $\varepsilon_2 = 11.6$ , 能带结构与文献 [27] 类似; (b) 一维介质/空气结构,  $\varepsilon_2 = 13$ , 能带结构与文献 [28] 相同

Fig. 8. (a) Three dimensional sphere,  $\varepsilon_2 = 11.6$ , the bandgap is similar that of Ref. [27]; (b) one dimensional media/air slab,  $\varepsilon_2 = 13$ , the bandgap is the same as that of Ref. [28].

这里  $\mathbf{A}_3 = \Psi_3 \mathbf{A}^{-1}(\mu) \Psi_3 + \Psi_2 \mathbf{A}^{-1}(\mu) \Psi_2 + \Psi_1 \mathbf{A}^{-1}(\mu) \Psi_1$ . 由 (34) 式得到的能带结构如图 8 (a) 所示, 与文献 [27] 类似, 对于简立方结构的光子晶体没有光子带隙存在. 图 8 (b) 为利用本方法得到的一维光子晶体的能带结构, 与文献 [28] 结果相同.

## 4 结 论

本文利用混合变分法研究了二维正方光子晶体, 不仅得到了光子晶体的能带结构、等频线和群速度, 还可以得到光子晶体中的电磁场分布和能流密度等参数. 并且利用该方法得到了一维和三维光子晶体的能带结构. 本方法在理论上可以适用于任意维度的光子晶体的计算, 只要给定一个晶格结构即可, 可任意设定多种介质分布, 计算非常方便实用, 是光子晶体理论计算、优化设计的有力工具.

## 参考文献

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [3] John S 1991 *Phys. Today* **44** 32
- [4] Lidorikis E, Buseh K, Li Q M, Chan C T, Soukoulis C M 1997 *Phys. Rev. B* **56** 15090
- [5] Sabarinathan J, Bhattacharya P, Yu P C, Krishna S, Cheng J, Steel D G 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 3876
- [6] Deng X H, Yuan J R, Liu J T, Wang T B 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 74101 (in Chinese) [邓新华, 袁吉仁, 刘江涛, 王同标 2015 物理学报 **64** 74101]
- [7] Zhang Z J, Shen Y F, Zhao H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 147802 (in Chinese) [张中杰, 沈义峰, 赵浩 2015 物理学报 **64** 147802]
- [8] Tang Z X, Yang X B, Lu J, Liu C Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 44207
- [9] Kuzmiak V, Maradudin A A, Pincemin F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 16835
- [10] Sakoda K 1999 *Opt. Rev.* **6** 381
- [11] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3152
- [12] Chan C T, Yu Q L, Ho K M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 16635
- [13] Yee K S 1966 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14** 302
- [14] Pendry J B, MacKinnon A 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2772
- [15] Pendry J B 1996 *J. Phys. Condens. Matter* **8** 1085
- [16] Bell P M, Pendry J B, Moreno L M, Ward A J 1995 *Comput. Phys. Commun.* **85** 306
- [17] Nemat-Nasser S 1972 *J. Elast.* **2** 73
- [18] Nemat-Nasser S, Srivastava A 2011 *J. Mech. Phys. Solids* **59** 1953
- [19] Nemat-Nasser S, Willis J R, Srivastava A, Amirkhizi A V 2011 *Phys. Rev. B* **83** 104103

- [20] Srivastava A, Nemat-Nasser S 2014 *Mech. Mater.* **74** 67
- [21] Electromagnetic tensor, [https://en.wikipedia.org/wiki/Electromagnetic\\_tensor](https://en.wikipedia.org/wiki/Electromagnetic_tensor) [2016-3-11]
- [22] Vassallo C 1991 *Optical Waveguide Concepts* (Amsterdam: Elsevier)
- [23] Hammer M 2007 *J. Lightwave Technol.* **25** 2287
- [24] Cheng C 2009 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Lanzhou University) (in Chinese) [程川 2009 硕士学位论文 (兰州: 兰州大学)]
- [25] Zhang X F 2004 *M. S. Thesis* (Tianjin: Tianjin University) (in Chinese) [张晓帆 2004 硕士学位论文 (天津: 天津大学)]
- [26] Zhou L B, Hu M L, Chen X 2010 *Science Technology* **28** 55 (in Chinese) [周利斌, 忽满利, 陈幸 2010 科技导报 **28** 55]
- [27] Feng C S 2007 *Ph. D. Dissertation* (Jinan: Shangdong University) (in Chinese) [冯传胜 2007 博士学位论文 (济南: 山东大学)]
- [28] John D J, Steven G J, Joshua N W, Robert D M 1995 *Photonic Crystals-Molding the Flow of Light* (New Jersey: Princeton University Press) p42



# A powerful method to analyze of photonic crystals: mixed variational method\*

Chen Yuan-Yuan Yang Pan-Jie Zhang Wei-Zhi Yan Xiao-Na<sup>†</sup>

(Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

( Received 11 January 2016; revised manuscript received 14 April 2016 )

## Abstract

Photonic crystal has drawn much attention because of its application in molding the flow of light, which can be used in optical communication, optical storage and computing. In theory, plane wave expansion method, finite difference time domain (FDTD) method and transfer matrix method are widely used methods to study photonic crystal, and each of them has its own advantages and disadvantages.

Here, a new method i.e. mixed variational method is introduced to study the photonic crystals, which is from the work of anti-plane shear waves in periodic layered elastic composites. The calculations of this method are direct and require no iteration, which accurately and efficiently produce the entire band structure of the composite and other field characteristics. Moreover, the composite cell in this method may consist of any number of units of any variable permittivity and permeability.

Firstly, based on the variational principle, the Lagrangian density of electro-magnetic field is obtained. Then through the surface integral of the Lagrangian density in the unit cell, the Lagrangian is acquired. The first variation of Lagrangian with respect to electric field and magnetic field yields a set of Euler-Lagrange equations. Approximate solutions in explicit series expressions subject to the Bloch periodicity are substituted into the above equations. Minimization of Lagrangian with respect to the electric field and magnetic field results in an eigenvalue problem, and to solve it, the band structure of the composite is yielded. Electrical field, magnetic field, group velocity and energy flux density are also calculated. Secondly, we use the above method to study a two dimensional air-rod unit cell system. Bandgaps with respect to different structural parameters are plotted, which are the same as the results from the plane wave expansion method and FDTD method. In theory, the entire band structure can be calculated with our method. There are more gaps for TE wave than for TM case. By constant frequency contours, it is shown that there is a gap between the first and the second pass band for TE wave, however, there is no a gap for the corresponding TM wave. The directions of group velocity for the first and the second bands are shown in the contours. Electrical field, magnetic field and energy flux in cells illustrate the energy distribution, and the energy-flux directions and the group-velocity directions are also essentially the same. Lastly, we apply this mixed variational method to one-dimensional media-air slab and three dimensional sphere-air structure. The obtained band results accord with those reported previously former, which demonstrates that our method is universal and correct.

In the present work, a mixed variational approach is proposed to produce the entire band structure of the composite for unit cells with any arbitrary properties. Explicit expressions are developed for the band, electrical field, magnetic field, group velocity and energy flux.

**Keywords:** two-dimensional photonic crystal, photonic band, variational method

**PACS:** 42.70.Qs, 04.20.Fy

**DOI:** 10.7498/aps.65.124206

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274225) and the Natural Science Foundation of Shanghai, China (Grant No. KW-201449732).

† Corresponding author. E-mail: [xnyan@staff.shu.edu.cn](mailto:xnyan@staff.shu.edu.cn)