

文章编号: 1000-7032(2009)01-0025-06

二维正方晶格各向异性光子晶体缺陷模

余建立^{1,2}, 沈虹君²

(1. 安徽省巢湖学院 物理系, 安徽 巢湖 238000; 2. 宁夏大学 物理系, 宁夏 银川 750021)

摘要: 为了得到对 TM 和 TE 模具有相同缺陷模的共振微腔, 通过在完整各向异性确介质柱二维正方光子晶体中, 引入各向同性的介质圆柱作为点缺陷, 利用超胞平面波展开法计算该光子晶体的缺陷模, 系统计算了在同时改变点缺陷介质柱介电常数和半径两种情况下的两种偏振缺陷模的变化规律。结果表明, 在完全禁带中, 缺陷介质柱介电常数从 5.44 变化到 38.44、半径与晶格常数的比从 0.05 变化到 0.50 的整个区域, 均会出现对 TM 和 TE 模具有相同缺陷模, 且随着介电常数的减小, 缺陷模随着缺陷半径的变化趋于缓慢, 归一化共振频率在 0.241 8 ~ 0.243 2 之间可调, 在引入 $\epsilon_c < \epsilon_o$ 的各向异性介质柱缺陷时, 亦可得到对 TM 和 TE 模具有相同缺陷模, 且共振频率的可调范围增大, 该研究为光子晶体器件的设计提供了理论依据。

关键词: 光子晶体; 各向异性; 缺陷模; 平面波展开法

中图分类号: O431 **PACC:** 4220 **文献标识码:** A

1 引 言

光子晶体是一种介质折射率呈空间周期性变化的新型微结构材料^[1,2], 电磁波在光子晶体内部传输的特性类似于电子在半导体中的运动特性, 光子晶体最根本的特性就是存在光子禁带 (Photonic Band Gap, PBG), 频率处于禁带范围内的电磁波将被禁止传播, 现在人们对二维光子晶体做了许多工作^[3~7]。在二维情况下, 电磁波可以分解为两种偏振模, 即 TM 模和 TE 模。对于某些频率范围, 如果光子晶体同时存在 TM 和 TE 两种偏振的光子带隙, 就称该光子晶体具有完全带隙, 频率处于禁带范围内的所有模式的光都不能在其中传播。如果在一个存在完全带隙的理想光子晶体中引入点缺陷, 那么在禁带中会存在一个或多个缺陷模^[8,9], 缺陷模的性质在激光器^[10]、谐振腔^[11]、波分复用^[12]等方面具有潜在的应用前景。

目前, 利用光子晶体缺陷模设计的光子晶体器件, 一般都是选择单个模式 (TM 模) 进行计算设计^[13~15]。随着对光子晶体进一步的研究, 希望能够在具有完全禁带的光子晶体中, 能得到对于 TM 和 TE 模具有相同频率的缺陷模, 设计出对于两种偏振有相同缺陷模的共振微腔; 并针对光子

晶体线缺陷波导应用于光波分复用器, 设计出可以同时使得两种偏振模的电磁波通过共振微腔的局域共振下载到另一个光子晶体线缺陷波导中, 具体的设计框架图如图 1 所示。已有研究表明, 二维各向同性三角晶格光子晶体存在完全光子带隙^[16], 但是器件的制作中, 边界区易形成锯齿状, 使完全禁带中会出现一些附加的微带, 影响波导的传输质量, 所以在光子晶体器件的设计中通常用正方晶格光子晶体为宜。文献^[17]表明, 二维正方晶格各向同性介质柱光子晶体不存在完全光子禁带, 而对于各向异性确介质柱正方光子晶体在填充率 $f=0.4$ 时可以产生带隙宽度约为 0.035

图 1 能对两种偏振模同时下载的波分复用器结构图
Fig. 1 Scheme of wavelength division multiplexing dropping two polarizations synchronously

收稿日期: 2008-08-25; 修订日期: 2008-11-24

基金项目: 安徽省巢湖学院科学研究基金资助项目 (XLY200814)

作者简介: 余建立 (1976 -), 男, 安徽歙县人, 主要从事光子晶体理论的研究。

E-mail: yjlclc@163.com, Tel: (0565)2361425

ω_e ($\omega_e = 2\pi c/a$, a 为晶格常数) 的完全带隙, 文献 [18] 表明二维各向异性椭圆柱光子晶体可以产生更大的完全带隙, 但是由于椭圆的对称性较差, 不利于做成直角弯波导。

因此, 对二维正方晶格各向异性碲介质圆柱光子晶体缺陷模的研究具有重要的意义, 文献 [19] 利用设置中心位置点缺陷和中心附近对称位置新的点缺陷的方法, 设计出了在完全禁带中对 TM 和 TE 模具有相同共振缺陷模频率的缺陷结构。但是该结构的点缺陷结构较为复杂, 禁带内会产生多个相近的缺陷模, 且不利于器件的设计与制作。

本文通过在完整的各向异性碲介质圆柱光子晶体中, 引入各向同性的介质圆柱作为点缺陷, 利用超胞平面波展开法计算该光子晶体的缺陷模, 系统计算了在同时改变点缺陷介质柱介电常数和半径两种情况下缺陷模的变化规律, 为进一步进行光子晶体器件的设计提供了重要的理论依据。

2 计算缺陷模的方法

平面波展开法^[20]是光子晶体理论研究中应用最早和最广泛的计算方法, 且结合超胞理论可以用于复杂结构的模拟计算。从 Maxwell 方程出发, 考察介电常数 ε 在 z 方向均匀分布, 在 x - y 平面中周期排列的二维光子晶体中, 光子晶体中的电场和磁场满足方程

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

方程中的 $\varepsilon(\mathbf{r})$ 、 $\mu(\mathbf{r})$ 分别是介质的介电常数与磁导率, c 为真空中光速, ω 为传输光的频率。为了求解上面方程, 应用 Bloch 定理, 把介电常数、电场和磁场在倒格矢空间用平面波展开

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon^{-1}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{e}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (4)$$

通过对 Maxwell 方程简化, 在二维情况下, 得到 TM 模和 TE 模的两个本征方程分别为:

$$\text{TM: } \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}| |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| h_1(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_1(\mathbf{G}) \quad (5)$$

$$\text{TE: } \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G}) (\mathbf{k} + \mathbf{G}') h_2(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_2(\mathbf{G}) \quad (6)$$

式中 $\varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ 是矩阵 $\varepsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ 的逆, 所有晶格结构的信息包含在系数矩阵 $\varepsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ 中。解本征方程(5)和(6)时傅立叶系数 $\varepsilon^{-1}(\mathbf{G})$ 起着核心作用。设介质柱的介电常数为 ε_a , 背景介质介电常数为 ε_b 。对于正方晶格光子晶体 $\varepsilon(\mathbf{G})$ 为

$$\varepsilon(\mathbf{G}) = \begin{cases} \varepsilon_b \delta(\mathbf{G}) + 2(\varepsilon_a - \varepsilon_b) f \frac{J_1(GR)}{GR}, & G = 0 \\ \varepsilon_b + 2(\varepsilon_a - \varepsilon_b) & G \neq 0 \end{cases} \quad (7)$$

式中 J_1 为一阶贝塞尔函数, $G = \sqrt{h_1^2 b_1^2 + h_2^2 b_2^2}$, f 为填充因子, 表示圆介质柱面积占整个晶胞的百分比, 对周期介质排列情况 $f = \frac{\pi R^2}{a^2}$, 具有任意缺陷的超胞结构的填充因子为 $f = \frac{\sum V_{\text{atoms}}}{V_{\text{supercell}}}$ 。

3 计算结果与分析

以各向异性碲介质圆柱在空气中正方排列的光子晶体为研究对象, z 方向均匀分布, 在 x - y 平面中周期性排列, 如图 2(a) 所示。碲的正常光相对介电常数在 x - y 面内 $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_o = 23.04$, 沿 z 方向为非正常光相对介电常数 $\varepsilon_z = \varepsilon_e = 38.44$ 。在完整的光子晶体中引入点缺陷, 这里通过以下方法引入: 用不同于背景介质柱的各向同性介质来代替原来的碲介质柱, 同时改变缺陷介质柱半径。由于缺陷仅有一个介质柱, 选取 5×5 的超胞结构作为计算区域, 如图 2(b) 所示。

图 2 (a) 二维正方晶格光子晶体示意图; (b) 点缺陷及超胞选取示意图

Fig. 2 (a) Schematic of two-dimensional square photonic crystal; (b) Schematic of point defect and supercell.

首先,用平面波展开法计算了当填充率 $f=0.40$ 时,二维正方晶格各向异性碲介质柱光子晶体的禁带,计算结果如图3所示。计算结果显示,该光子晶体在归一化频率 $0.219 \sim 0.254$ 的范围内存在一个完全禁带,中心频率为 $0.2365\omega_c$ (其中 $\omega_c=2\pi c/a$, a 为晶格常数, c 为光速),计算结果与文献[17]一致。下面,在该完整禁带中计算缺陷模。

图3 二维正方各向异性碲圆柱光子晶体完全禁带图

Fig. 3 The absolute band-gap of two dimensional square photonic crystal consisting of anisotropic Te cylinders

一般来说,通过简单改变单个介质柱半径的方法引入缺陷时,很难得到对TM模和TE模具有相同缺陷模的缺陷微腔。为了得到对TM模和TE模具有相同共振频率的缺陷模,引入各向同性的介质柱作为缺陷微腔,通过改变介质介电常数和介质柱半径的方法,来同时调节缺陷模的位置。介质介电常数 ϵ_i 从5.44变化到38.44;半径 R_i 从 $0.05a$ 变化到 $0.50a$ (a 为晶格常数),用超胞平面波展开法系统计算了两种偏振状态下的缺陷模随介质介电常数和介质柱半径变化规律,计算结果对TM模如图4(a)所示,TE模如图4(b)所示。

图4 缺陷模随着缺陷介质介电常数和半径变化的关系图 (a) TM; (b) TE

Fig. 4 Schematic of defect mode with the variation of defect dielectric constant and radius for (a) TM and (b) TE

结果表明,随着介质介电常数的增大,两种偏振的缺陷模均随缺陷半径的变化越敏感,特别对TM模,在介电常数取38.44时,仅当缺陷半径在 $0.082a \sim 0.113a$ 变化时才出现缺陷模。由于TM模和TE模的变化规律不同,它们的缺陷模分布将出现相交区域,如图5(a)所示。交线上对应的频率即为对TM模和TE模具有相同缺陷模取值。交线在介电常数和半径平面上的投影,如图5(b)所示,图中交线处所对应的参数决定了形成TM模和

图5 (a)缺陷模随缺陷介质介电常数和半径变化的关系图;(b)(a)图交线在介电常数和半径平面上的投影图;(c)(a)图交线在频率轴上的投影图

Fig. 5 (a) Schematic of defect mode with the variation of defect dielectric constant and radius; (b) Projection of intersect line of Fig. (a) in the bottom plane; (c) Projection of intersect line of Fig. (a) in the frequency axis.

TE 模具有相同共振频率的缺陷微腔的参数取值,结果显示,整个变化区域它们均出现相同的共振频率,且在得到对于 TM 模和 TE 模具有相同共振频率的缺陷模的情况下,随着介电常数的减小,缺陷柱半径增大。将交线向频率方向投影,如图 5(c)所示,结果显示共振频率随着介质介电常数和介质柱半径变化,归一化共振频率在 0.241 8 ~ 0.243 2 之间可调。

以上分析表明,在实际的应用中,可以采用低介电常数的各向同性介质作为缺陷处的介质柱,这样可以选择较大的缺陷半径,且两种偏振的缺陷模均随缺陷半径的变化趋于缓慢,对光子晶体缺陷的制作工艺要求可以降低,有利于光子晶体器件的加工制作。

进一步分析 TM 模、TE 模随缺陷半径、介电常数的变化规律,可以得出,当缺陷柱采用 $\epsilon_e > \epsilon_o$ 的各向异性材料时,不易出现对 TM 模和 TE 模具有相同共振频率的缺陷模;当缺陷柱采用 $\epsilon_e < \epsilon_o$ 的各向异性材料时,同样可以得到对 TM 模和 TE

模具有相同共振频率的缺陷模,且缺陷模的共振频率与所取的各向异性的介电常数有关,与各向同性介质作为缺陷柱相比,共振频率的可调范围增大。图 6 为理论上取 $\epsilon_e = 7.44$ 、 $\epsilon_o = 16.44$ 时,缺陷模随缺陷柱半径的变化关系图。结果表明,由于 TM 模、TE 模随缺陷柱半径的变化规律不同,当缺陷半径为 $0.282a$ 时, TM 和 TE 缺陷模归一化共振频率趋向于同一值 $\omega = 0.239 3$ 。

4 结 论

为了设计出对于 TM 模和 TE 模具有相同共振频率的缺陷模,采用二维正方晶胞各向异性碲介质柱光子晶体为研究对象,通过在完整的各向异性光子晶体中,采用不同于背景介质柱的各向同性介质圆柱作为点缺陷,研究了在同时改变点缺陷处介质介电常数和半径时缺陷模的变化规律,研究表明,缺陷介质柱介电常数从 5.44 变化到 38.44、半径从 $0.05a$ 变化到 $0.50a$ 的整个区域,均会出现对 TM 和 TE 模具有相同缺陷模,缺陷模频率在 0.241 8 ~ 0.243 2 之间可调。且随着介电常数的减小,缺陷模随着缺陷半径的变化趋于缓慢,在得到对于 TM 模和 TE 模具有相同共振频率的缺陷模的情况下,采用低介电常数介质比高介电常数介质时的缺陷柱半径大,实际制作中用低介电常数介质作为缺陷时,有利于光子晶体缺陷的制作,进一步讨论了各向异性的介质柱作为缺陷的缺陷模特性。当缺陷柱采用 $\epsilon_e < \epsilon_o$ 的各向异性材料时,同样可以得到对 TM 模和 TE 模具有相同共振频率的缺陷模,且共振频率的可调范围增大。该研究对光子晶体在波分复用技术中的应用具有重要的理论参考价值。

图 6 缺陷模随缺陷半径的变化关系图

Fig. 6 Scheme of the variation of defect mode with defect radius

参 考 文 献:

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58** (20):2059-2062.
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2486-2489.
- [3] Li Yiyu, Gu Peifu, Wang Baoqing, *et al.* Filling-factor graded wavelike two-dimensional photonic crystals [J]. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2008, **28**(1):169-173 (in Chinese).
- [4] Quan Yujun, Han Peide, Lu Xiaodong, *et al.* A numerical method to calculate and analyze of defect modes in two-dimensional photonic crystal [J]. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2007, **26**(12):1841-1846 (in Chinese).
- [5] Chen Song, Wang Weibiao, Liang Jingqiu, *et al.* Two-dimensional photonic crystal microcavities [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2007, **28**(1):7-12 (in Chinese).

- [6] Chen Haibo, Gao Yingjun, Hu Sunei. Properties of mirror symmetrical photonic crystals of dielectric constant defect layer with imaginary part [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2008, **29**(2):233-237 (in Chinese).
- [7] Wang Daobin, Hou Shanglin, Ren Guodong, *et al.* Band structure of Suguki-phase photonic crystal [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2008, **29**(5):885-890 (in Chinese).
- [8] Yablonovitch E, Gmitter T J, Meade R D, *et al.* Donor and acceptor modes in photonic band structure [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, **67**(24):3380-3383.
- [9] Gadot F, de Lustrac A, Lourtioz J, *et al.* High-transmission defect modes in two-dimensional metallic photonic crystals [J]. *J. Appl. Phys.*, 1999, **85**(12):8499-8501.
- [10] Painter O, Lee R K, Scherer A, *et al.* Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser [J]. *Science*, 1999, **284**(5421):1819-1821.
- [11] Berggren M, Dodabalapur A, Slusher R E, *et al.* Organic lasers based on lithographically defined photonic band gap resonators [J]. *Electronics Lett.*, 1998, **34**(1):90-91.
- [12] Fan S, Villeneuve P R, Joannopoulos J D, *et al.* Channel drop tunneling through localized states [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**(5):960-963.
- [13] Kuo Chihwen, Chang Chihfu, Chen Maohsiung, *et al.* A new approach of planar multi-channel wavelength division multiplexing system using asymmetric super-cell photonic crystal structures [J]. *Opt. Express*, 2007, **15**(1):198-206.
- [14] Ren Honglian, Jiang Chun, Hu Weisheng, *et al.* Photonic crystal channel drop filter with a wavelength-selective reflection micro-cavity [J]. *Opt. Express*, 2006, **14**(6):2446-2458.
- [15] Yu Jianli, Ruan Xiaokui, Shen Hongjun, *et al.* Design of highly efficient photonic crystal 6-channel drop filter [J]. *Opt. Commun. Tech.* (光通信技术), 2008, **32**(4):40-43 (in Chinese).
- [16] Gao Sujuan, Peng Wei, Chen Heming. The effect of structure parameter on complete bandgap of two-dimensional photonic crystal [J]. *Optoelectronic Technology & Information* (光电子技术与信息), 2005, **18**(5):16-19 (in Chinese).
- [17] Li Zhiyuan. Large absolute band gap in 2D anisotropic photonic crystals [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**(12):2574-2577.
- [18] Zhuang Fei, He Sailing, He Jiangping, *et al.* Large complete band gap of a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic elliptic cylinders [J]. *Acta Physica Sinica* (物理学报), 2002, **51**(2):355-360 (in Chinese).
- [19] Zhuang Fei, Xiao Sanshui, He Jiangping, *et al.* A FDTD method for calculating defect modes in a two-dimensional photonic crystal consisting of anisotropic cylinders [J]. *Acta Physica Sinica* (物理学报), 2002, **51**(9):2167-2171 (in Chinese).
- [20] Sun Zhihong. The study of the defect modes and coupling characteristics of photonic crystals [J]. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2005, **25**(7):984-989 (in Chinese).

Study of Defect Modes in Two-dimensional Square Photonic Crystal Consisting of Anisotropic Cylinders

YU Jian-li^{1,2}, SHEN Hong-jun²

(1. Department of Physics, Chaohu College, Chaohu 238000, China;

2. Department of Physics, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

Abstract: Photonic crystals are new manual microstructure materials with periodic refractive indices distribution. They have photonic band-gaps analogous to the electronic band-gaps in semiconductors. If the frequencies of electromagnetic waves are within the photonic band-gaps, they cannot propagate in the photonic crystals. In recent years, a lot of theories and experiments on the application of photonic crystals have been studied. The electromagnetic wave in two dimensions can be separated into two polarized modes, namely TM and TE. In this paper, a resonant micro-cavity is designed by introducing isotropic cylinder in a two-dimensional square photonic

crystal consisting of anisotropic tellurium cylinder. The micro-cavity can drop TM and TE two polarized modes synchronously. The defect mode is calculated using supercell plane-wave expansion method. The characteristics of defect modes have been calculated systematically when the defect cylinder varies with the defect dielectric constant and radius. The result shows that the same defect modes of TM and TE appear in the absolute band-gap with the variation of defect dielectric constant from 5.44 to 38.44 and the rate of radius and lattices constant from 0.05 to 0.5. When the dielectric constant decreases, the defect modes change slowly with the variation of the radius. The normalized resonating frequency of defect modes can be adjusted between 0.241 8 and 0.243 2. The same defect modes of TM and TE also appear in the absolute band-gap when the anisotropic cylinder with the dielectric constant ϵ_e greater than ϵ_o ($\epsilon_e < \epsilon_o$) is introduced. The resonating frequency can be adjusted on a larger scale. This research provides theoretical support for the design of photonic crystal components.

Key words: photonic crystal; anisotropic; defect mode; plane-wave expansion method

Received date: 2008-08-25

欢迎订阅 欢迎投稿 《光学 精密工程》(月刊)

《光学 精密工程》是中国仪器仪表学会一级学术期刊,中国科学院长春光学精密机械与物理研究所主办,科学出版社出版。由国内外著名科学家任顾问,陈星旦院士任编委会主任,国家科技部副部长曹健林博士担任主编。

《光学 精密工程》坚持学术品位,集中报道国内外现代应用光学、光学工程技术、光电工程和精密机械、光学材料、微纳科学与技术、医用光学、先进加工制造技术、信息与控制、计算机应用以及有关交叉学科等方面的最新理论研究、科研成果和创新技术。本刊自 2007 年起只刊发国家重大科技项目和国家自然科学基金项目及各省、部委基金项目资助的论文。《光学 精密工程》竭诚欢迎广大作者踊跃投稿。

本刊获奖:

中国精品科技期刊
中国科学技术协会择优支持期刊
中国百种杰出学术期刊
第一届北方优秀期刊
吉林省双十佳期刊

国际检索源:

《美国工程索引》(EI Compindex)
《美国化学文摘》(CA)
《英国 INSPEC》(SA)
《俄罗斯文摘杂志》(PJK)
《美国剑桥科学文摘》(CSA)

国内检索源:

中国科技论文统计源期刊
中国学术期刊(光盘版)
万方数据系统数字化期刊
台湾华艺中文电子期刊网
中国科学引文数据库
中国物理文献数据库
中国期刊网
中文核心期刊要目总览(北大)
中国学术期刊综合评价数据库
中国光学与应用光学文摘
中国科学期刊全文数据库
中国光学文献数据库
中国学术期刊文摘
中国物理文摘

地 址:长春市东南湖大路 3888 号

《光学 精密工程》编辑部

邮 编:130033

电 话:(0431)86176855

传 真:(0431)84613409

E-mail: gxjmgc@ciomp.ac.cn

gxjmgc@sina.com

http://www.ojpe.net

国内邮发代号: 12-166

国外发行代号: 4803BM

定 价: 50.00 元/期

帐 户: 中国科学院长春光学
精密机械与物理研究所

银 行: 中行吉林省分行营业部

帐 号: 220801471908091001