

文章编号: 0258-7025(2006)09-1195-05

二维光子晶体异质结 Order- N 数值研究

汤炳书^{1,2}, 李正华^{2,3}, 刘丽丽¹, 沈廷根¹

¹ 连云港师范高等专科学校物理系, 江苏 连云港 222006
² 江苏大学应用物理研究所, 江苏 镇江 212003; ³ 镇江船艇学院基础系, 江苏 镇江 212003

摘要 把多重散射(Order- N)方法用于二维光子晶体组成异质结的传输特性研究,分别数值研究了折射率异质结、柱体形状异质结、晶格结构异质结三种情况下的透射特性,数值结果指出在折射率异质结时出现类似于电子型半导体的单向导光性能,并作了简单理论类比分析。进一步对三种异质结进行研究,得出传导模的出现不只是晶格结构畸变一种情况可以产生,其他两种异质结也能产生传导模。

关键词 光电子学;二维光子晶体异质结;多重散射法;禁带;传导模

中图分类号 O 734 **文献标识码** A

Numerical Research of Two-Dimensional Photonic Crystal Heterostructures with Order- N Method

TANG Bing-shu^{1,2}, LI Zheng-hua^{2,3}, LIU Li-li¹, SHEN Ting-gen²

¹ Department of Physics, Lianyungang Teacher's College, Lianyungang, Jiangsu 222006, China
² Application Physics Graduate School of Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212003, China
³ Department of Base, Zhenjiang Institute of Boat, Zhenjiang, Jiangsu 212003, China

Abstract The order- N method is used to study the transmission properties of heterostructures of two-dimensional (2D) photonic crystal. Three different heterostructures, i. e., refractive index, pole's shape and lattice structure heterostructures are numerically calculated respectively. Numerical results show the property of single direction guidance of light, which is similar to that of the semiconductors of electronic type. Analogous analyzing between these two phenomena was made with a simple theory. It is further shown that guide modes appear not only in the case of lattice structure aberrance but also in the other two cases.

Key words optoelectronics; heterostructures of two-dimensional photonic crystal; order- N method; forbidden band; guide modes

1 引 言

光子晶体这一概念最先是在 1987 年由 E. Yablonovitch^[1] 提出来。光子晶体能够产生带隙,带隙之内的电磁波将无法在光子晶体中传播,二维光子晶体是由柱形散射子周期排列而成的。对于二维光子晶体,当电磁波垂直于晶体柱体轴向传播时,电磁场可分解为 E(TE mode)和 H(TM mode)两种本征偏振模式的线性叠加,它们的电场矢量分别垂直和平行于柱体的轴向,两种模式的光子能带都可

能有带隙,其重叠部分称为绝对带隙,在透射谱中表现为某些频率的传输系数为零。光子晶体的应用价值很大程度上在于局域态的存在,禁带的位置与宽度以及在光子晶体中局部破坏对称性形成缺陷而产生局域态^[2,3],这种禁带位置、宽度、局域态对应的传导模,对于未来的光电信息技术有重要的应用价值。目前研究光子晶体能带结构和光学传输特性的方法主要有:平面波展开法(PWE)^[4]、有限时域差分法(FDTD)^[5]、转移(传输)矩阵法(TMM)^[6]、多重散射法(Order- N)^[7]等。

收稿日期:2006-01-10;收到修改稿日期:2006-04-03

基金项目:江苏省自然科学基金(BK2004059)资助项目。

作者简介:汤炳书(1963—),男,江苏丹阳县人,连云港师范高等专科学校副教授,主要从事计算凝聚态物理方面的研究。

E-mail: tbs6363@163.com

近年来对各种形状散射子的光子晶体异质结构界面态性质的研究多了起来,这种结构由空气圆柱、矩形、六角形等散射体组成,在均匀背景上形成正方格子、三角格子,沿格子选定一个界面,界面两边不同的可以是柱体折射率、柱体形状或填充率、晶格结构等。研究表明有些界面结构并没有界面态的存在,但是当两边的晶格横向拉开或者纵向错开,则分别在 TE 模和 TM 模的带隙中发现了界面态^[2]。最近刘江涛、周云松等用平面波展开加超级原胞方法,计算了不同晶格及不同形状介质散射体组成的二维光子晶体镜面对称异质结的界面态^[8~10],经过研究发现,这种异质结界面态可以通过相对于界面横向拉开或者纵向错开而产生,可以调节到绝对带隙中成为传导模,界面态的个数和变化规律在很大程度上依赖于光子晶体异质结构的几何和物理参量。

Order- N 方法^[7]是引自电子能带理论的紧束缚近似中的一种方法,是在 Yee 于 1966 年提出的时域有限差分方法(TDTD)基础上发展起来的^[11]。基本思想是:通过傅里叶变换先将麦克斯韦方程组变换到倒空间,用差分形式的约简方程组再作傅里叶变换,又将其变换回实空间,得到一组被简化了的时域有限差分方程,这样,原方程可以通过一系列在空间和时间上都离散的格点间的关系来描述,计算量大大降低。本文把文献[12]提供的 Order- N 计算程序用于二维光子晶体组成异质结的传输特性研究,就各种异质结构情形进行数值研究,得到了一些有意义的结果,为实验制作和应用提供很好的理论依据。另外对文献[8~10]的研究内容作进一步的扩展。二维光子晶体较三维容易制备,且计算工作小,因此仅以二维光子晶体为例进行计算,该方法及相应计算程序经调整后可推至三维情况。

2 基本理论与数值模型

2.1 基本理论

由电子的能带理论知道,当把电子的运动近似地看成单个电子在一个等效的周期性势场中运动时,电子的波函数 φ 满足薛定谔方程,即

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\varphi = E_e\varphi, \quad (1)$$

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n), \quad (2)$$

其中 \hbar 为普朗克常数, m 为电子的质量, E_e 为电子能量,式(2)表示位能 $V(\mathbf{r})$ 具有周期性,其周期为晶

格矢量 \mathbf{R}_n 。

一束频率为 ω 的光在周期性介质中传播时,它的电矢量 \mathbf{E} 所满足的麦克斯韦方程可写成

$$-\nabla^2\mathbf{E} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_0\mathbf{E}, \quad (3)$$

其中 ϵ_0 为介质的平均介电常数, $\epsilon(\mathbf{r})$ 为扰动介电常数, c 为真空中的光速。当光子在一个介电常数作周期性变化的介质中传播时, $\epsilon(\mathbf{r})$ 为周期函数。令 \mathbf{R}'_n 为变化的周期,则

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}'_n), \quad (4)$$

比较式(1)和式(3),可以看出它们的形式有某种相似之处,从而建立如下的类比关系

$$\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\mathbf{r}) \rightarrow V(\mathbf{r}), \quad \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_0 \rightarrow E_e, \quad (5)$$

即介电常数的变化相当于位能的变化, $\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_0$ 相当于电子的能量本征值。

从光子及电子运动方程的可类比性得出,在一个折射率周期变化的结构中,光子的运动将类似于在周期性势能变化下电子的运动。因此,折射率周期变化的结构应具有光子的能带结构及相应的光子能隙。对于存在光子能隙的介质来说,不是所有频率的光都能在其中传播的,相应于光子能隙区域的那些频率的光将不能通过介质,而是被全部反射出去,透射谱中表现为透过系数为零的禁带。在周期性被破坏后,光子禁带中会出现态密度很高的窄透过带,即所谓的传导模。

2.2 数值模型

结构完整的二维圆柱光子晶体异质结模型如图 1 所示,它是在介电常数为 $\epsilon_1 = 10.5$ (InP/GaInAsP 折射率为 $n_1 = 3.24$) 中挖取空气圆柱(ϵ_2 介电常数取 1.0, 折射率为 $n_2 = 1.0$) 形成,圆柱心间距为 a , 空气柱半径为 $0.36a$ 。在 x - y 平面二维周期相同成正方形排列, z 方向认为无限长, y 方向为无限多层空气柱, x 方向取有限层,计算时考虑到计算时间, x 方向共取 16 层,中间分界面(图 1 及图 2 所示平面坐标 x 轴原点)处两边各 8 层。TE 模平面电磁波沿 x 方向垂直 y 轴入射,为了不失一般性,在程序设计与数据处理作图时横轴采用归一化频率,纵轴采用归一化透射系数,程序设计时长度以晶格常数 a 为基准。分界面两侧柱体形状相同,晶格结构相同,折射率不同时形成折射率异质结,如图 1(a) 所示;分界面两侧晶格结构相同,散射柱体折射率相同而形状不同,形成柱体形状异质结,见图 2 所示;分界面两侧散射体形状相同、折射率相同,两侧晶格结构不同,形成

晶格结构异质结, 见图 1(b) 所示。

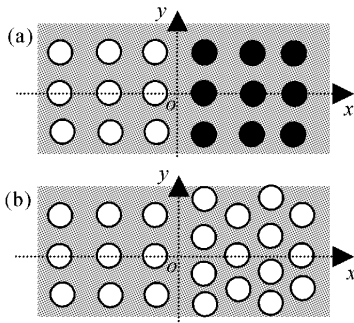


图 1 圆柱二维光子晶体截面

Fig. 1 Section of a 2D photonic crystal circle cylinder

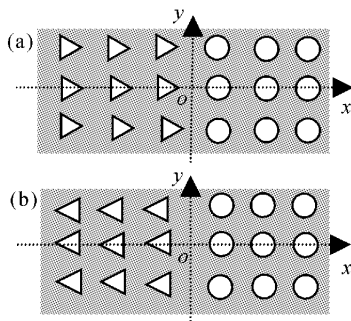


图 2 不同截面柱体二维光子晶体

Fig. 2 2D photonic crystal of various section

3 数值结果及分析

3.1 折射率异质结

图 1(a) 是折射率异质结模型, 此时不同折射率介质柱体交界处晶格没有畸变。计算时右边柱体保持与左边空气柱相同半径, 折射率分别取 2.56 和 7.86。计算结果表明禁带宽度与位置都与两边全是空气柱体时一样。交换左右柱体折射率重新计算, 发现同样没有变化, 两种情况下都没有界面传导模式产生。当左右两边晶格位置不变, 折射率相同, 散射柱体半径不同时, 禁带宽度、位置与前面的计算都有变化, 并且有界面传导模式出现, 改变入射方向 (从右边垂直 y 轴沿 x 轴负方向) 进一步计算表明, 禁带宽度、位置界面传导模的位置与从哪边入射无关, 只是传导模的透过率稍有变化, 从小半径边入射, 其中有一传导模透过率稍大一些, 见图 3。图 3 中细实线表示无异质时的透射谱曲线, 虚线与粗虚线分别表示同晶格同介质不同半径的散射柱体组成的异质结透射谱曲线, R_1, n_1 表示图 1 中左边的柱体半径与折射率, R_2, n_2 表示右边区的柱体半径与折射率。从图 3 中看出有两处界面传导模式出现, 分别

于归一化频率 0.37 与 0.45 处出现, 在 0.37 处从较细圆柱侧入射透过系数较大。

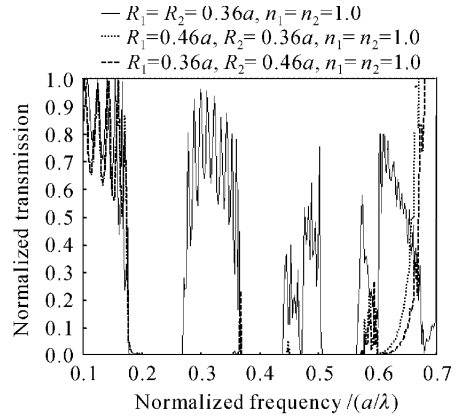


图 3 柱体粗细异质时的透射谱

Fig. 3 Transmission spectra of various radius of heterostructures

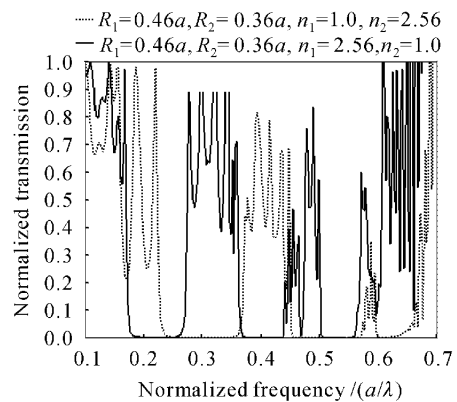


图 4 柱体粗细、折射率相同时异质时的透射率

Fig. 4 Transmission spectra of various radius and refraction index of heterostructures

在同晶格不同半径的散射柱体组成的异质结中再使柱体折射率异质, 计算结果见图 4。图中粗虚线表示 $R_1 = 0.46a, n_1 = 1.0, R_2 = 0.36a, n_2 = 2.56, x$ 轴正方向入射时的透射谱。实线表示 $R_1 = 0.46a, n_1 = 2.56, R_2 = 0.36a, n_2 = 1.0, x$ 轴正方向入射时的透射谱, 相当于交换折射率计算。从图 4 中看出, 与图 1 比较界面传导模消失, 禁带出现分裂现象, 前一种情况分裂成相对比较宽的两禁带, 后一情况分裂成三个稍窄些的禁带, 特别有意思的是在有些频率处出现了半导体二极管单向导电性类似的单向导光性能, 对此可以用电子型半导体的 PN 结单向导电理论加以理解。因为电子型半导体的单向导电性就是基于 PN 结两侧的两种不同掺杂半导体位能差的存在, 由 (5) 式可知介电常数的变化相当

于位能的变化,这里折射率异质结在分界面同样出现了对于光子而言的“位能差”,因此出现单向导光就不难理解了。

3.2 柱体形状异质结

保持晶格结构不变,把图 1(a)左右两侧任意一侧的圆柱体换成截面是其他形状的柱体,这里用正三角形柱进行计算得到图 5 结果,柱体在 xy 平面内的排布截面如图 2 所示。图 5 中虚线是对应图 2(a)从左边入射(正对三角形的底边)时的透射谱,可看出在比较宽的禁带中有较明显的处于归一化频率 0.45 与 0.63 附近的界面传导模。图 5 中实线是对应图 2(b)同样从左边入射(正对三角形的一个角)时的透射谱,从图中看出在禁带中几乎不出现传导模,归一化频率 0.64 附近有微弱透过率。交换左右两边柱体重新计算发现总体曲线情况一样,禁带宽度、位置传导模的位置不变,只是传导模的透过率增加,与图 3 左右交换计算结果一样。柱体形状异质与图 3 中细实线无异质结构相比禁带宽度和位置都有明显变化,禁带数目变少,并且在有的情况下出现明显界面传导模。

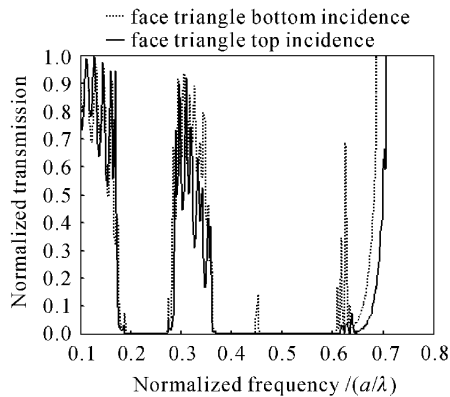


图 5 三角柱与圆柱异质时的透射谱

Fig. 5 Transmission spectra of various section with triangular and circle cylinder

3.3 晶格结构异质结

在散射柱体都是同半径圆柱,折射率相同都取 1.0 时,无损耗空气,左右两边晶格结构不同(图 1(b)所示左边为正方结构晶格,右边为三角结构晶格),首先计算 TE 平面电磁波沿 x 轴正方向入射(正方晶格边)情况,然后左右交换(即三角晶格边入射)计算,结果如图 6 所示。图 6 中虚线对应图 1(b)所示结构下的透射谱,两禁带中较宽的部分(左边)归一化频率 0.36 处有及其微弱的透过率,归一化透过系数为 0.018。图 6 中实线对应其他不变只是交

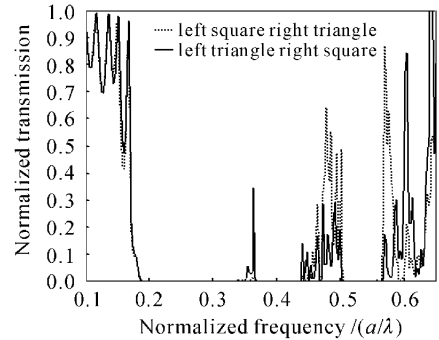


图 6 晶格结构异质时的透射谱

Fig. 6 Transmission spectra of various unit cell

换左右晶格结构情形,即相当于从三角晶格边入射时的透射谱,与前面结果相比可知在归一化频率 0.36 处有一明显的传导模,归一化透过系数为 0.35,这说明并不是只要晶格畸变就能产生界面传导模。文献[8]只研究了类似第一种情况(晶格结构异质同时柱体形状异质,没有考虑从哪一边入射)。

4 结 论

用 Order- N 方法数值研究不同柱体形状、不同折射率、不同晶格结构组成二维光子晶体异质结的传输特性,数值研究结果表明在改变形成异质结诸多因素如半径大小、折射率大小、晶格结构成以及它们的放置次序等都可调节光子晶体禁带的宽度与中心频率的位置,传导模的出现、位置、透过率。

参 考 文 献

- 1 E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 Lanlan Lin, Zhiyuan Li. Interface states in photonic crystal heterostructures [J]. *Phys. Rev. B*, 2001, **63**: 033310-1~033310-4
- 3 E. Istrate, M. Charbonneau-Lefort, E. H. Sargent. Theory of photonic crystal heterostructures [J]. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**: 075121-1~075121-6
- 4 K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(25): 3152~3155
- 5 Li Yanfeng, Liu Bowen, Wang Zihan *et al.*. Finite difference analysis of dispersion properties of photonic crystal fibers [J]. *Chinese J. Lasers*, 2004, **31**(10): 1257~1260
栗岩峰,刘博文,王子涵 等. 光子晶体光纤色散的有限差分法研究[J]. *中国激光*, 2004, **31**(10): 1257~1260
- 6 P. M. Bell, J. B. Pendry, L. M. Moreno *et al.*. A program for calculating photonic band structures and transmission coefficients of complex structures [J]. *Com. Phys. Commun.*, 1995, **85**: 306~322
- 7 C. T. Chan, Q. L. Yu, K. M. Ho. Order- N spectral method for electromagnetic waves [J]. *Phys. Rev. B*, 1995, **51**(23):

16635~16642

8 Liu Jiangtao, Zhou Yunsong, Wang Fuhe *et al.*. Guide modes at interface of photonic crystal heterostructures composed of different lattices [J]. *Acta Physics Sinica*, 2004, **53**(6):1845~1848
刘江涛,周云松,王福合 等. 不同晶格光子晶体异质结的界面传导模[J]. *物理学报*, 2004, **53**(6):1845~1848

9 Che Ming, Zhou Yunsong, Wang Fuhe *et al.*. Guid modes in magnetic photonic crystal heterostructures in two-dimensional square lattices [J]. *Acta Physics Sinica*, 2005, **54**(5):2096~2101
车 明,周云松,王福合 等. 二维正方形格子磁性光子晶体的界面传导模[J]. *物理学报*, 2005, **54**(5):2096~2101

10 Liu Jiangtao, Zhou Yunsong, Wang Fuhe *et al.*. Guid modes in magnetic photonic crystal heterostructures composed of different lattices [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(5):665~669
刘江涛,周云松,王福合 等. 不同晶格磁性光子晶体异质结的界面传导模[J]. *光学学报*, 2005, **25**(5):665~669

11 Wang Binzhong. Calculation Electromagnetic [M]. Beijing: Science Press, 2002. 52~56
王秉中. 计算电磁学[M]. 北京:科学出版社, 2002. 52~56

12 <http://www.cs.wisc.edu/~ghost/>



第八届全国激光加工学术会议第二轮通知

“第八届全国激光加工学术会议”将于 2006 年 11 月 25~27 日在广州举办,由中国光学学会激光加工专业委员会主办,华南师范大学信息光电子科技学院和广州市光机电工程研究开发中心承办,得到广州瑞通千里激光设备有限公司、浙江博业激光应用技术有限公司、广州优力激光工程中心和广州安特激光技术有限公司支持。

本次会议邀请到 7 位国际知名专家参加会议并作大会邀请报告,包括:1) 英国利物浦大学 William Steen 教授: The Growth of Laser Material Processing as a Science and an Industrial Process; 2) 德国斯图加特大学 Friedrich Dausinger 教授: Welding with Strongly Focusable Lasers up to 6 kW; 3) 德国汉诺威激光中心主任 Andreas Ostandorf 博士: Laser Micro- and Nanoprocessing Using Short Laser Pulses; 4) 法国 CEA/GERAILP Pascal Aubry 博士: Progress in Laser Direct Manufacturing by Laser Metal Deposition and Selective Laser Melting; 5) 美国 Nebraska-Lincoln 大学 Lu Yongfeng 教授: Laser Material Processing and Characterization at Micro/Nano-scales; 6) 德国 EdgeWave GmbH Du Keming 博士: Micro Material Processing with Diode Pumped Lasers; 7) 德国 BIAS Harald Kohn 博士: Laser Cladding-Applications in Germany.

国外代表以英语报告论文,有现场中文翻译。

本次会议已收到国内论文摘要 131 篇,会议交流论文全文在大会报告之后将由《中国激光》杂志以增刊形式发表(2007 年第 34 卷,《中国激光》增刊论文由 EI 收录),论文作者需支付相应版面费,由《中国激光》编辑部在会后将论文集寄送给论文作者。所有参会论文将由组委会组织专家评审并送交《中国激光》主编终审。如果稿件不能通过评审与终审,该稿件可以参加大会报告交流但将无法在《中国激光》刊出。本次会议不再出光盘论文集。在论文集出版后,正式登记注册的代表(非论文作者)将由组委会寄送一本论文集。

请于 2006 年 9 月 30 日前将论文全文(论文格式要求详见“中国光学期刊网”《中国激光》投稿模板 www.opticsjournal.net)和详细英文摘要电子版(Word 文件格式)发 e-mail 或软盘寄到会议秘书处,过期论文将无法在《中国激光》上统一出版论文集并不予安排会议报告。

组委会将于 2006 年 10 月中旬通告会议节目单和会议报告 Power Point 要求。

会议秘书组通讯处(摘要邮寄地址)

地 址:北京清华大学机械工程系激光加工研究中心 邮 编:100084

电 话:(010)62772993,62796466 传 真:(010)62773862,(010)62796466

联 系 人:钟敏霖 教授,e-mail:zhml@tsinghua.edu.cn

会议秘书:张红军 工程师,e-mail:zhjhjme@tsinghua.edu.cn,(010)62773858

有关会议详细信息请上中国光学期刊网查询:www.opticsjournal.net

中国光学学会激光加工专业委员会
2006 年 6 月 26 日