

文章编号: 0258-7025(2007)08-1077-04

结构无序对8重准晶光子晶体带隙特性的影响

殷建玲, 黄旭光*, 刘颂豪

(华南师范大学光子信息技术广东省高校重点实验室, 广东 广州 510006)

摘要 采用时域有限差分法(FDTD)对介质柱构成的8重准晶光子晶体(PQC)的光子带隙(PBG)特性进行了研究, 分别讨论了介质柱尺寸无序和位置无序对其带隙宽度、位置和各向同性的影响。数值模拟结果表明, 随着介质柱尺寸无序和位置无序的增大, 8重准晶光子晶体带隙的中心频率向低频方向移动, 带隙的相对宽度均变窄, 但介质柱尺寸无序对带隙的影响远大于位置无序的影响。当尺寸无序达到介质柱半径的一半时, 带隙完全消失, 而对于相同大小的位置无序, 相对带隙宽度只改变了1%; 同时, 在较大结构无序范围内, 带隙的各向同性也能很好地保持。

关键词 导波与光纤光学; 时域有限差分法; 准晶; 光子晶体; 光子带隙

中图分类号 O 439 文献标识码 A

Effect of Structure Disorder on Band Gap of Eight-Fold Photonic Quasicrystals

YIN Jian-ling, HUANG Xu-guang, LIU Song-hao

(Guangdong Provincial Key Laboratory of Photonic Information Technology,
South China Normal University, Guangzhou, Guangdong 510006, China)

Abstract The photonic band gap (PBG) of eight-fold photonic quasicrystal (PQC) with dielectric cylinder structure is studied using the finite difference time domain (FDTD) method, and the effect of disorder of cylinder size and displacement of cylinder sites on the width, site and anisotropy of photonic band gap is numerically investigated. When the disorder of cylinder size and displacement of cylinder sites increase, the central frequency of the photonic band gap has a redshift, and the relative band gap width decreases. The band gaps are much more sensitive to disorder of cylinder size than displacement of cylinder sites. When the disorder of cylinder size is half the cylinder radius, the band gap disappears completely, but the band gap only changes 1% for the same size of displacement of cylinder site. The isotropy of band gap is maintained in a large range of structure disorder.

Key words guided wave and fiber optics; finite difference time domain; quasicrystal; photonic crystal; photonic band gap

1 引言

传统意义上的光子晶体^[1,2]是指存在“光子带隙”(PBG)的周期性人工微结构, 故光子晶体也被称为光子带隙材料。一般情况下, 只有构成光子晶体的材料折射率 $n \geq 2$, 才能得到完全带隙(complete

PBG)。而准晶光子晶体(PQCs)则无需这么高的折射率就能产生完全带隙。准晶光子晶体是一种具有准晶特征的人工准周期性结构, 它具有旋转对称性和长程指向性, 但无平移周期性。大量研究表明, 大多数的准晶光子晶体, 如8重^[3~5], 10重^[3,6]和12

收稿日期: 2006-11-22; 收到修改稿日期: 2007-04-02

基金项目: 国家教育部留学回国人员科研启动基金、广东省自然科学基金(04010398)和广东省自然科学基金重点项目(05100534)资助课题。

作者简介: 殷建玲(1979—), 女, 河北人, 博士研究生, 主要从事光子晶体及其应用方面的研究。

E-mail: yinjianling2002@163.com

导师简介: 刘颂豪(1930—), 男, 广东人, 中国科学院院士, 目前研究方向为纳米材料、光纤通信新技术、激光加工以及光子在生物学、医学上的应用等。E-mail: liush@scnu.edu.cn

* 通信联系人。E-mail: huangxg@scnu.edu.cn

重^[7,8]等准周期性结构都具有较宽的完全带隙，而且产生完全带隙的折射率阈值都很低。例如，对于 8 重准晶光子晶体，对 TM 模出现完全带隙的相对介电常数甚至低至 $\epsilon = 1.6(n = 1.26)$ ^[4]，这意味着许多基于光子带隙的器件可以用普通光通信材料（如硅， $n = 1.45$ ）来实现，这对发展与当前光纤器件的直接耦合非常重要，因此，研究准晶光子晶体的带隙特性也就显得尤为重要，目前，准晶光子晶体的一些带隙特性都已得到讨论和证实^[3~5,9,10]。

但是，在制备过程中，由于工艺水平和设备条件等各方面因素的限制，制备出的准晶结构光子晶体不可避免地在结构上存在一定的缺陷和无序，从而与理想结构之间有一定的偏差。这种结构无序会对准晶结构光子晶体的带隙特性造成一定影响，进而影响基于该结构的器件性能^[11]。因此，有必要讨论结构无序对带隙特性所产生的影响。最近，C. Rockstuhl 等^[12]分析了无序对 5 重、6 重和 7 重准晶光子晶体的局域态密度的影响，指出了准晶光子晶体低频光子带隙形成的主要原因是单个介质柱的米氏(Mie)共振。然而，对于不同结构的准晶光子晶体，其带隙对无序的敏感程度有很大的差别，而且目前所提出的器件大多基于对称程度更高的 8 重或 12 重准晶结构光子晶体^[4,13,14]，故具体探讨结构无序对高对称结构带隙特性的影响更为实用。本文采用时域有限差分(FDTD)法研究了由介质柱构成的二维 8 重准晶光子晶体对 TM 模的光子带隙，不仅分析了位置无序和介质柱尺寸无序对 8 重准晶光子晶体的带隙位置和宽度的影响，而且还讨论了这些结构无序对高对称结构所特有的带隙性质——带隙各向同性的影响。

2 数值模拟结果和分析

通常，计算光子晶体能带结构的方法主要是时域分析和频域分析。对于在传输方向具有周期性的晶体结构，采用平面波展开法可以在有限的时间内得到比较准确的能带结构。但是，本文所讨论的 8 重准晶光子晶体在传输方向上不是周期性结构，对于这种结构，如果再采用平面波展开法来计算，所需的计算时间和内存都非常大，很难在有限时间得到能带结构，而采用完美匹配层边界条件的时域有限差分法适用于各种计算^[15]。

图 1 给出了理想的二维 8 重准晶光子晶体。以正方形和菱形为基本原胞，相继转动 45°，重复排列

而成，其各参数取值为：晶格常数(原胞的边长)为 a ，深灰色部分为基底-空气，白色部分代表介质柱，介质柱的相对介电常数 $\epsilon = 5.0(n = 2.24)$ ，半径 r_0 取 $0.24a$ (该介电常数下的最佳填充因子^[10])。角 θ 为光的入射方向，由于 8 重准晶结构具有 8 重旋转对称性和镜面对称性，故入射角 θ 在 $0 \sim 22.5^\circ$ 之间变化就足以描述所有方向的入射和透射情况，当入射方向沿 x 轴时，入射角 $\theta = 0$ 。

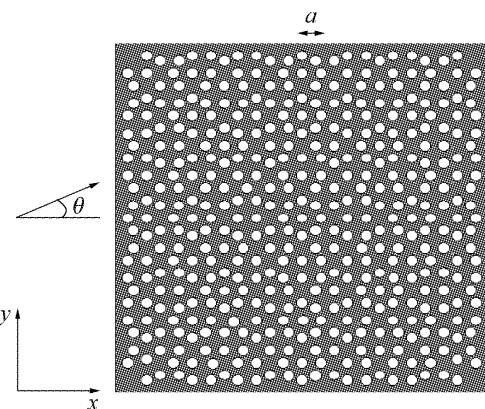


图 1 二维 8 重准晶光子晶体的结构示意图
角 θ 为光的入射角，箭头为人射光的方向

Fig. 1 Schematic of the two-dimensional eight-fold PQCs
the arrow indicates the direction of incident light,
and θ is the incident angle

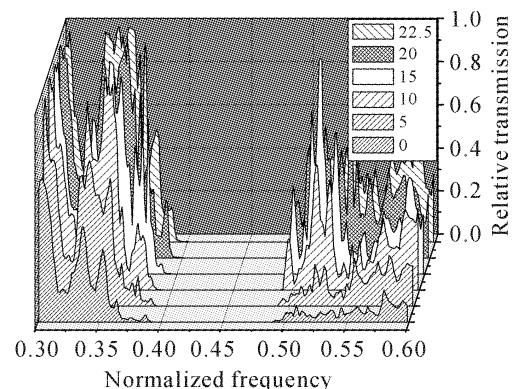


图 2 二维 8 重准晶结构光子晶体 TM 偏振光沿各个方向的透射谱线

介质柱相对介电常数 $\epsilon = 5.0(n = 2.24)$ ，半径为 $0.24a$

Fig. 2 Transmission spectra of eight-fold PQCs for different incident directions with $r/a = 0.24$ and $n = 2.24$ in TM polarization

理想情况下，每个介质柱都严格地排列在 8 重准晶光子晶体的格点上，且每个介质柱具有相同的尺寸，即半径相同。当 TM 偏振光沿不同方向入射到图 1 所示的理想结构上时，可以采用时域有限差分法分别计算其透射谱线，如图 2 所示。由图 2 可以看出，8 重准晶光子晶体的带隙具有各向同性，即

带隙的位置和宽度均与光的入射方向无关。带隙位于归一化频率在 $0.394 \sim 0.488 (\omega/(2\pi c))$, ω 为入射光频率) 之间, 相对带隙宽度 $\Delta\omega/\omega_g = 21.1\%$ 。其中, $\Delta\omega$ 为光子带隙的绝对宽度, 把它定义为该光子带隙右边沿和左边沿相对透过率为 -40 dB 处频率的差值; ω_g 为光子带隙的中心频率, 它等于该光子带隙右边沿和左边沿相对透过率为 -40 dB 处频率之和的二分之一。

但是, 在实际加工过程中, 由于受加工设备或工艺限制, 各介质柱所处的位置可能存在偏差, 而不是严格地排列在 8 重准晶光子晶体的格点上, 各介质柱的尺寸也可能不完全相等, 甚至与理想情况有较大的偏差。通常, 前一种情况被称为位置无序, 后一种情况被称为尺寸无序。为简化问题, 准晶光子晶体的这种无序可以被描述为一些特定的随机变量。对于位置无序, 可以认为每个介质柱都具有相同的半径 r_0 , 而第 i 个介质柱偏离理想位置的距离 γ_x 和 γ_y 是在区间 $[-d_t, d_t]$ 上均匀分布的随机变量, 其中, d_t 表示位置无序的大小。对于尺寸无序, 可以认为第 i 个介质柱排列在晶格的原始位置上, 其半径为 $r_i = r_0 + \gamma_t$, 其中 γ_t 是在区间 $[-d_r, d_r]$ 上均匀分布的随机变量, d_r 表示尺寸无序的大小。

当宽频 TM 偏振光沿 x 轴入射到存在结构无序的 8 重准晶光子晶体上时, 仍然可以采用时域有限差分法来计算其透射频率的分布曲线, 图 3(a) 和 (b) 分别给出了具有不同程度位置无序和尺寸无序的 8 重准晶光子晶体对 TM 模的透射谱线。从图中可以清楚地看到, 各谱线都明显偏离了理想结构的透射谱线, 随着无序程度的增大, 带隙的中心频率向低频方向移动, 带隙宽度逐渐变窄, 而且介质柱的尺寸无序远大于位置无序对带隙的影响。对于位置无序, 当无序程度分别为 $0.05a$, $0.10a$ 和 $0.12a$ ($0.5r_0$) 时, 带隙分别位于 $0.393 \sim 0.486 (\omega/(2\pi c))$, $0.394 \sim 0.484 (\omega/(2\pi c))$ 和 $0.394 \sim 0.482 (\omega/(2\pi c))$ 之间, 相应的相对带隙宽度 $\Delta\omega/\omega_g$ 分别为 21.1% , 20.5% 和 20.1% , 由此可见, 较小的位置误差 ($d_t = 0.05a$) 对带隙宽度的影响可以忽略, 即使在很大的位置无序 ($d_t = 0.12a = 0.5r_0$) 情况下, 带隙宽度也只改变了 1% 。而对于尺寸无序, 当无序程度分别为 $0.05a$, $0.10a$ 时, 带隙分别位于 $0.404 \sim 0.475 (\omega/(2\pi c))$ 和 $0.412 \sim 0.449 (\omega/(2\pi c))$ 之间, 当无序程度为 $0.12a$ ($0.5r_0$) 时, 带隙完全消失, 相应的相对带隙宽度 $\Delta\omega/\omega_g$ 分别为 16.8% , 8.6% 和 0 。通过简单的计算可知, 对于

较小的尺寸无序 ($d_r = 0.05a$), 带隙降为理想结构的 80% ; 对于较大的尺寸无序 $0.10a$, 带隙进一步降为理想结构的 41% ; 当尺寸无序达到介质柱半径的一半 ($0.12a$) 时, 带隙甚至完全消失。显然, 在相同大小的无序条件下, 尺寸无序比位置无序对 8 重准晶光子晶体的带隙影响更大, 这与 C. Rockstuhl 等^[12] 所讨论的 5 重, 6 重和 7 重准晶光子晶体带隙的变化规律一致。而尺寸无序的影响之所以大, 其原因是: 由介质柱构成的准晶光子晶体结构中产生带隙的主要因素是与单个介质柱半径有关的米氏共振, 尺寸无序会引起米氏共振频率偏离中心共振频率, 从而引起带隙的显著变化, 而位置无序则对米氏共振没有影响, 故不会引起带隙的明显改变^[13]。因此, 8 重准晶光子晶体带隙产生的主要原因是单个介质柱的米氏共振, 而非结构有序。

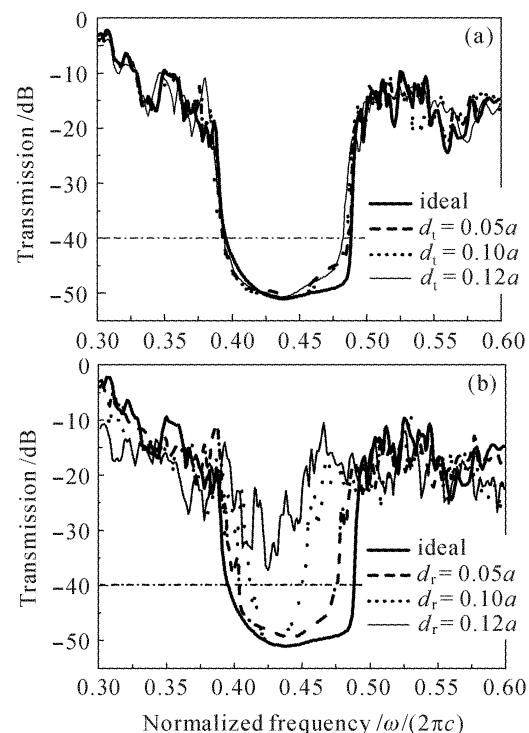


图 3 具有不同程度的位置无序(a)和尺寸无序(b)的准晶光子晶体的透射谱线

Fig. 3 Transmission spectra of disordered PQC with (a) site disorder and (b) size disorder

图 4(a) 和 (b) 分别给出了位置无序和尺寸无序均为 $0.10a$ 时, 在 $0 \sim 22.5^\circ$ 的入射范围内 8 重准晶结构光子晶体的透射谱线。由图 4 可以看出, 较大的尺寸无序和位置无序均未对该入射范围内带隙的位置和宽度产生明显影响, 即带隙在 $0 \sim 22.5^\circ$ 的入射范围内各向同性都保持得很好。为了进一步严格验证其各向同性, 计算了其他方向的透射谱线, 结果

也都表明 8 重准晶光子晶体的各向同性在所有方向上都能很好地保持。产生这种现象的原因主要是：尺寸无序和位置无序都是随机函数，虽然单个介质柱在位置和尺寸上偏离理想情况，但对包含大量介质柱的结构(图 1)，这种无序在整个结构上几乎是均匀的、沿各个方向出现的概率几乎是相同的，因此不会影响带隙的各向同性。

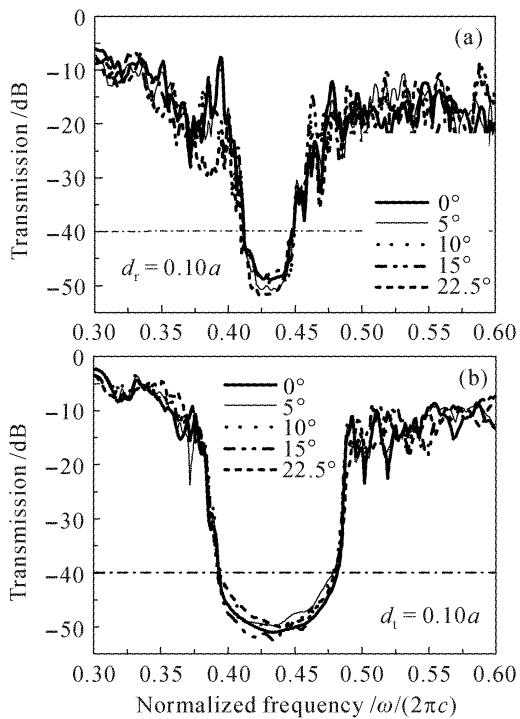


图 4 位置无序(a)和尺寸无序(b)均为 $0.10a$ 的准晶光子晶体沿各个方向的透射谱线

Fig. 4 Transmission spectra of disordered PQC for different incident directions with the same (a) site disorder and (b) size disorder of $0.10a$

3 结 论

采用时域有限差分法研究了 8 重准晶光子晶体的带隙特性，讨论了制备过程中出现的加工误差对该结构带隙特性的影响。数值模拟研究表明，随着介质柱的尺寸无序和位置无序的增大，带隙的中心频率均向低频方向移动，带隙宽度均逐渐变窄，但介质柱的尺寸无序对带隙的影响远大于位置无序对带隙的影响。在较大的结构无序条件下，8 重准晶光子晶体的各向同性仍能很好地保持。这些研究结果对进一步设计和开发基于光子带隙的准晶光子晶体器件提供了一定参考。

参 考 文 献

- 1 Lu Xiadong, Han Peide, Quan Yujun et al.. Influences of wave vector direction on energy bands and applications of two-dimensional photonic crystals [J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(6):770~774
陆晓东, 韩培德, 全宇军等. 波矢方向对二维光子晶体能带及应用的影响[J]. 中国激光, 2006, 33(6):770~774
- 2 An He'nan, Ouyang Zhengbiao, Xu Guiwen et al.. The influences of the structure parameters of a two-dimensional square photonic crystal on its photonic bandgap properties [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(6):842~846
安鹤男, 欧阳征标, 许桂雯等. 二维光子晶体结构参数对光子禁带特性的影响[J]. 光学学报, 2004, 24(6):842~846
- 3 Masashi Hase, Hiroshi Miyazaki, Mitsuru Egashira et al.. Isotropic photonic band gap and anisotropic structures in transmission spectra of two-dimensional fivefold and eightfold symmetric quasiperiodic photonic crystals [J]. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**(21):214205-1~214205-8
- 4 J. Romero-Vivas, D. N. Chigrin, A. V. Lavrinenko et al.. Resonant add-drop filter based on a photonic quasicrystal [J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(3):826~835
- 5 D. T. Roper, D. M. Beggs, M. A. Kaliteevski et al.. Properties of two-dimensional photonic crystals with octagonal quasicrystalline unit cells [J]. *J. Mod. Opt.*, 2006, **53**(3):407~416
- 6 M. A. Kaliteevski, S. Brand, R. A. Abram et al.. Two-dimensional penrose-tiled photonic quasicrystals; diffraction of light and fractal density of modes [J]. *J. Mod. Opt.*, 2000, **47**(11):1771~1778
- 7 M. E. Zoorob, M. D. B. Charlton, G. J. Parker et al.. Complete photonic bandgaps in 12-fold symmetric quasicrystals [J]. *Nature*, 2000, **404**(6779):740~743
- 8 Xiangdong Zhang, Zhaoqing Zhang, C. T. Chan. Absolute photonic band gaps in 12-fold symmetric photonic quasicrystals [J]. *Phys. Rev. B*, 2001, **63**(8):081105-1~081105-4
- 9 Robert C. Gauthier, Khaled Mnaymneh. Photonic band gap properties of 12-fold quasicrystal determined through FDTD analysis [J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(6):1985~1998
- 10 Jianling Yin, Xuguang Huang, Songhao Liu et al.. Photonic bandgap properties of 8-fold symmetric photonic quasicrystals [J]. *Opt. Commun.*, 2006, **269**(2):385~388
- 11 Zhu Zhihong, Ye Wimin, Ji Jiarong et al.. The transmission properties of photonic crystals without strict periodicity [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(6):847~850
朱志宏, 叶卫民, 季家榕等. 光子晶体的非严格周期性对其传输特性的影响[J]. 光学学报, 2004, 24(6):847~850
- 12 C. Rockstuhl, F. Lederer. The effect of disorder on the local density of states in two-dimensional quasi-periodic photonic crystals [J]. *New J. Phys.*, 2006, **8**:1~11
- 13 Zhifang Feng, Xiangdong Zhang, Yiquan Wang et al.. Negative refraction and imaging using 12-fold-symmetry quasicrystals [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **94**(24):247402-1~247402-4
- 14 Robert C. Gauthier, Khaled Mnaymneh. Towards physical implementation of an optical add-drop multiplexer (OADM) based upon properties of 12-fold photonic quasicrystals [C]. *SPIE*, 2005, **5970**:59700Q-1~59700Q-10
- 15 A. Lavrinenko, P. I. Borel, L. H. Frandsen et al.. Comprehensive FDTD modelling of photonic crystal waveguide components [J]. *Opt. Express*, 2004, **12**(2):234~248