

二维光子晶体禁带理论在浓度测量上的模拟研究

帕孜来提·阿卜杜热伊木 阿不都热苏力·阿卜杜热西提

(新疆大学物理科学与技术学院, 新疆 乌鲁木齐 830046)

摘要 对二维光子晶体的电磁波理论及周期性介质中的 Bloch 波解做了详细的推导,给出了光子晶体中的禁带存在的理论依据,同时以三角晶格的二维光子晶体为例,采用平面波展开方法对果糖水溶液的浓度进行测定。主要利用硅与果糖溶液介电常数较大的原理,通过数值模拟获得相应的光子禁带图并加以分析。结果表明,以果糖的水溶液作为空气圆孔中的介质材料,当溶液浓度不同时 TE 模式的光子禁带(PBG)明显变宽,而 TM 模式不出现光子禁带现象。研究结果及方法对高血糖临床应用有一定的指导作用。

关键词 光子晶体;平面波展开法;果糖溶液;光子禁带

中图分类号 O734; TN302 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP50.062302

Simulation of Two-Dimensional Photonic Crystal Band Gap in Concentration Measurement

Pazilaiti Abudureyimu Abuduresuli Abudurexiti

(School of Physics and Technology, Xinjiang University, Urumqi, Xinjiang 830046, China)

Abstract Detailed derivation is conducted to solve the Bloch wave solutions of the electromagnetic wave theory of two-dimensional photonic crystal and periodic media. The theoretical basis for the existence of the band gap in the photonic crystal is given. We measured the concentration of fructose solution in a two-dimensional triangular lattice photonic crystal using plane-wave expansion method. To get the numerical simulation of photonic band diagram for analysis, we take advantage of the large permittivity of silicon and fructose solution. The results show that the photonic band gap (PBG) of TE mode distinctly broadens with the difference of the concentration of the fructose solution but there is no PBG in TM mode, when fructose solution is used as the dielectric material in the air hole. The results of this study and the proposed method may play a guiding role in clinical applications for helping hyperglycemia patients.

Key words photonic crystal; plane-wave expansion method; fructose solution; photonic band gap

OCIS codes 230.5298; 140.3460; 160.5293; 230.4110

1 引言

光在光子晶体中的行为类似于电子在半导体中的传播,所以光子晶体又称为光半导体。像半导体中的电子一样,当光在两种不同介质所产生的周期性结构中传播时,不同介质形成的周期性结构导致介电常数的周期性变化,从而导致某些波段的光波无法穿过而产生反射,若此反射光与入射光产生干涉,则该波长的光会无法穿透材料而被反射,此即光子禁带或光子带隙(PBG)。由光子晶体所产生的禁带称为光子晶体禁带。

光子晶体的概念是 1987 年分别由 John 等^[1]和 Yabnllovitch^[2]提出的。由于它具有划时代的独特性能,在提出之后的短短十几年间,吸引了越来越多的研究者的关注,其重要性越来越被人们所认识。目前为各种电磁波段应用而进行的光子禁带结构的设计、数字模拟和制备工艺技术研究之成为材料科学研究的热点。反射器、滤波器、调制器^[3]、光纤^[4]、激光器^[5]和波导^[6]等功能器件的研究在光子晶体领域内很热门。同

收稿日期: 2012-12-31; **收到修改稿日期**: 2013-03-08; **网络出版日期**: 2013-05-22

基金项目: 国家自然科学基金(10965008,11164030)资助课题。

作者简介: 帕孜来提·阿卜杜热伊木(1987—),女,研究生,主要从事光子晶体方面的研究。E-mail: pazilat521@126.com

导师简介: 阿不都热苏力·阿卜杜热西提(1961—),男,博士,教授,主要从事超强激光与等离子体相互作用等方面的研究。E-mail: abdrusul@ sina. com

时糖类化合物在生物、药物、催化及环境等相关领域具有重要作用,有关糖类的研究也是一个重要课题^[7]。在研究电解质溶液行为的理论中,作为媒介的介电常数具有重要意义。光子晶体将在糖类的研究中有重要应用价值。

本文采用平面波展开方法,以果糖等材料的水溶液作为空气圆孔中的介质材料,模拟了三角格子式二维(2D)光子晶体的带隙结构,对果糖溶液的浓度进行了测定。

2 二维光子晶体的电磁波理论

对于二维光子晶体,类似于波导的情况,可以定义磁场平行于介质柱的 TE 模式和电场平行于介质柱的 TM 模式。

假设电磁波在两种不同相对介电常数的三角格子二维光子晶体中传播,此时电磁波的传播分解为两个相互独立的方程来描述。

只含电场或磁场的主方程式写作^[8~11]

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\boldsymbol{\rho})] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\boldsymbol{\rho}), \quad (1)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{\rho})} \nabla \times \mathbf{H}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\boldsymbol{\rho}), \quad (2)$$

式中 c 为光速。这两个基本方程都类似于量子力学的 Schödinger 方程,利用其中的任一个方程就可以确定电磁场在光子晶体中的传播。

对于如图 1 所示的三角形排列的二维光子晶体,(1)、(2)式中的 $\varepsilon^{-1}(\boldsymbol{\rho})$, $E(\boldsymbol{\rho})$ 和 $H(\boldsymbol{\rho})$ 都是位置 $\boldsymbol{\rho}$ 的周期函数。为了以平面波展开法计算光子能带结构,对 $\varepsilon^{-1}(\boldsymbol{\rho})$, $E(\boldsymbol{\rho})$ 和 $H(\boldsymbol{\rho})$ 进行傅里叶展开:

$$\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{\rho})} = \sum_{\mathbf{G}} K(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\rho}), \quad (3)$$

$$E(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mathbf{G}} B(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\rho}), \quad (4)$$

$$H(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\rho}), \quad (5)$$

式中 $\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2$ 称为倒晶格矢量, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ 为基本倒格矢, h_1, h_2 为整数; \mathbf{k} 是被限制于第一布里渊区的波矢,即 $\mathbf{k} = k_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + k_2 \hat{\mathbf{x}}_2$,如图 2 所示。三角格子的基本倒格矢为 $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}}_1 \sqrt{3} + \hat{\mathbf{x}}_2)$ 和 $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}}_1 \sqrt{3} - \hat{\mathbf{x}}_2)/2$ 。

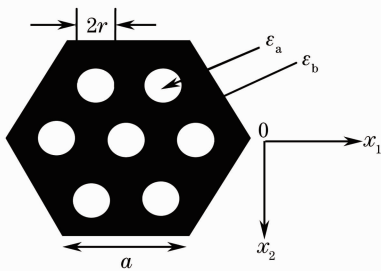


图 1 三角格子排列

Fig. 1 Triangular lattice arrangement

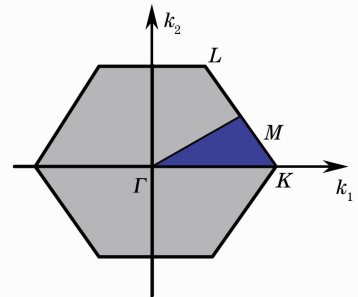


图 2 三角晶格光子晶体的第一布里渊区

Fig. 2 First Brillouin zone of the triangular lattice photonic crystal

根据上述推导,可得

$$\sum_{\mathbf{G}} K(\mathbf{G} - \mathbf{G}') B(\mathbf{k} + \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}'|^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 B(\mathbf{k} + \mathbf{G}), \quad (6)$$

式中 \mathbf{G}' 与 \mathbf{G} 近似,但 h_1, h_2 取值不同。

(6)式使得 TM 偏振的电磁波在光子晶体中的传播问题变成了求解一个对称矩阵的本征值和本征函数的问题。

对于电磁场的磁场分量平行于介质圆柱棒的 TE 偏振,同理可得如下方程:

$$\sum_{\mathbf{G}'} K(\mathbf{G}-\mathbf{G}')A(\mathbf{k}+\mathbf{G}')(\mathbf{k}+\mathbf{G}')(\mathbf{k}+\mathbf{G}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 A(\mathbf{k}+\mathbf{G}), \quad (7)$$

(7)式也是一个对称矩阵的本征值问题。

3 数值结果和讨论

对于三角格子式光子晶体,有

$$K(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_a}f + \frac{1}{\epsilon_b}(1-f), & \mathbf{G} = 0 \\ 2f\left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b}\right)\frac{J_1(|\mathbf{G}|r)}{|\mathbf{G}|r}, & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases}, \quad (8)$$

式中 $f = \frac{2\pi r^2}{\sqrt{3}a^2}$ 是三角格子的填充因子, r 为半径, a 为晶格常数, J_1 为一阶贝塞尔函数,即可求出 TE 和 TM 偏振的本征频率 ω_{kn} 。

4 数值计算结果

表 1 给出了果糖水溶液的介电常数,可见其随着溶液浓度的变化而变化。

表 1 果糖水溶液的介电常数(293.15 K)

Table 1 Dielectric constants of the fructose solutions (293.15 K)

| Molarity / (mol/kg) | 0.2 | 0.4 | 0.6 | 0.8 | 1.0 | 1.2 |
|---------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Dielectric constant | 1.9009 | 1.8965 | 1.8921 | 1.8882 | 1.8848 | 1.8814 |

根据表 1 中的数据,利用平面波展开法,对果糖水溶液作为空气圆孔介质材料的光子晶体的禁带结构进行模拟。以介电常数较大的半导体材料 Si($\epsilon_b = 11.7$)为背景,使空气圆柱在 Si 介质在光子晶体中呈三角格子的形式。对于给定浓度,相应的介电常数值 ϵ_a 可从表 1 中获取。图 3 和图 4 分别为以果糖水溶液(质量摩尔浓度为 0.2 mol/kg,介电常数为 1.9009)作为空气圆孔介质材料的光子晶体 TE 模式和 TM 模式的带结构;纵坐标为采用标量的无量纲频率,横坐标为 Bloch 波矢。光子晶体中空气孔的直径为 $d = 0.8 \mu\text{m}$,晶格常数为 $a = 1 \mu\text{m}$ 。为了便于比较,分别展示了 TE 模式和 TM 模式。从图可知 TE 模式具有一个带隙,为光子带隙宽度或禁带宽度,即 $0.2419 \sim 0.3335$ (以 $\omega a / 2\pi c$ 归一化, ω 为光波角频率),而 TM 模式没有带隙。

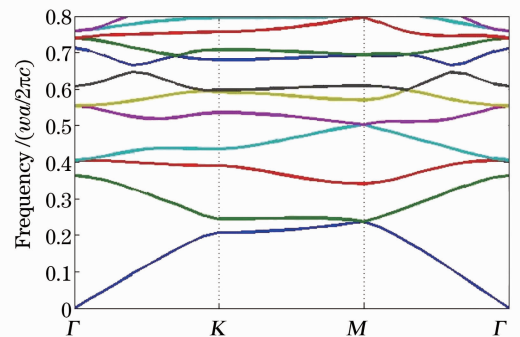
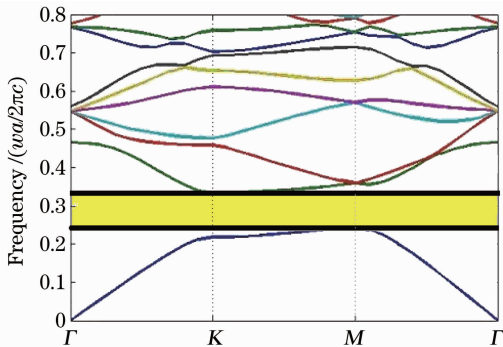


图 3 果糖溶液(0.2 mol/kg)光子禁带(TE 模式)

Fig. 3 Photonic band gap (TE mode) of the 0.2 mol/kg fructose solution

图 4 果糖溶液(0.2 mol/kg)光子禁带(TM 模式)

Fig. 4 Photonic band gap (TM mode) of the 0.2 mol/kg fructose solution

图 5 和图 6 是介电常数分别为 1.8921 和 1.8814 的果糖水溶液作为空气圆孔介质材料的光子晶体 TE 模式的带结构。其 TE 模式禁带宽度分别为 $0.2419 \sim 0.334$ 和 $0.242 \sim 0.3347$ 。从图可知,当糖溶液质量摩尔浓度从 0.2 mol/kg 增加到 1.2 mol/kg(介电常数也减小)时,禁带宽度从 0.0916 增加到 0.0927。

图 7 给出光子带隙与空气孔中糖溶液介电常数之间的关系,从中可以看出,光子带隙随着空气孔中的

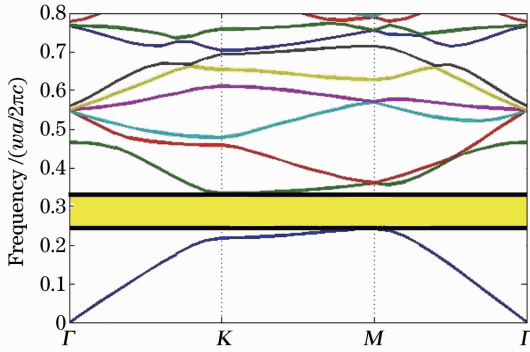


图5 果糖溶液(1.2 mol/kg)光子禁带(TE模式)

Fig. 5 Photonic band gap (TE mode) of the 1.2 mol/kg fructose solution

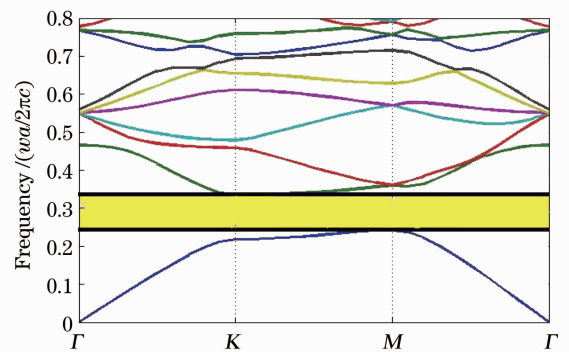


图6 果糖溶液(0.6 mol/kg)光子禁带(TE模式)

Fig. 6 Photonic band gap (TE mode) of the 0.6 mol/kg fructose solution

糖溶液浓度的增加而增加,且基本上呈线性增加。

5 结 论

根据平面波展开法,研究和计算了不同浓度的果糖溶液在三角格子光子晶体中的光子带隙变化关系。研究的主要依据是介质介电常数之差和晶格的排列决定光子晶体的主要性质。本文中利用了硅和果糖溶液之间较大的介电常数之差,从数值模拟中分别得出了TE模式和TM模式下的光子带隙图。结果表明TM模式不出现任何光子带隙的现象,而TE模式下的光子带隙随溶液浓度的不同而发生变化,也就是光子带隙随着溶液浓度的增加而变宽。相对于别的浓度测量方法而言,这种方法的准确性很高。该方法展示了利用二维光子晶体来测量溶液浓度的新思想,据我们所知是国内尚无报道的新概念。

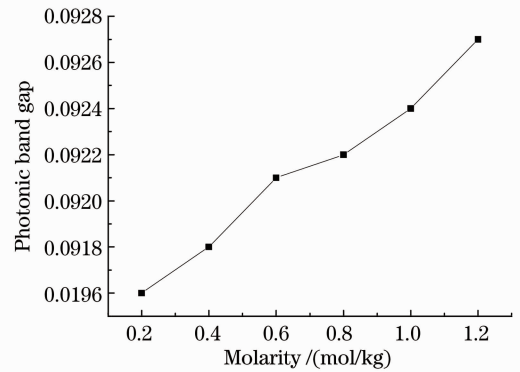


图7 禁带宽度随果糖浓度的变化

Fig. 7 Band gap changes with fructose concentration

参 考 文 献

- 1 S. John. Strong localization of photon in certain disordered dielectric superlattice [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2486~2489
- 2 E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 3 Tan Yi, Yuan Zongheng. Transmission characteristic of 2-D regular triangular lattice metallic crystal in THz range [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, **49**(7): 071601
谭毅,袁纵横.太赫兹波在二维正三角晶格金属光子晶体中的传输特性[J].*激光与光电子学进展*, 2012, **49**(7): 071601
- 4 Yi Changshen, Zhang Peiqing, Dai Shixun *et al.*. Research progress of large-mode area photonic crystal fibers [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, **49**(10): 100001
易昌申,张培晴,戴世勋等.大模场光子晶体光纤研究进展[J].*激光与光电子学进展*, 2012, **49**(10): 100001
- 5 Wang Huayong, Xu Xingsheng. Research progress of photonic crystal vertical cavity surface emitting laser [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, **49**(9): 090003
王华勇,许兴胜.光子晶体垂直腔面发射激光器的研究进展[J].*激光与光电子学进展*, 2012, **49**(9): 090003
- 6 Li Xin, Yang Ming, Guo Shiliang *et al.*. Characteristics of photonic-crystal waveguides with random media [J]. *Chinese J. Lasers*, 2012, **39**(10): 1006001
李欣,杨明,郭士亮等.含随机介质的光子晶体波导特性[J].*中国激光*, 2012, **39**(10): 1006001

- 7 Chen Yajuan, Zhuo Kelei, Kang Lei *et al.*. Dielectric constants for binary saccharide-water solutions at 278.15~313.15 K [J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2008, **24**(1): 91~96
陈玉娟, 卓克垒, 康磊等. 278.15~313.15 K下糖-水二元体系的介电常数[J]. *物理化学学报*, 2008, **24**(1): 91~96
- 8 Yuan Guifang, Han Lihong, Yu Chongyuan *et al.*. Two-dimensional photonic crystal band gap characteristics [J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, **60**(10): 104214
袁桂芳, 韩利红, 俞重远等. 二维光子晶体禁带特性研究[J]. *物理学报*, 2011, **60**(10): 104214
- 9 Xie Donghua, Yang Hui, Lü Shunuan *et al.*. Band gap characteristics of 2-D photonic crystals constructed with a triangular lattice of dielectric rods [J]. *J. Xi'an University of Posts and Telecommunications*, 2012, **17**(2): 53~56
谢东华, 杨祎, 吕淑暖等. 二维三角介质柱光子晶体能带特性分析[J]. *西安邮电学院学报*, 2012, **17**(2): 53~56
- 10 Abuduresuli Abudurexiti, Paerhati Mijiti. Two dimensional photonic band structure: the square lattice [J]. *J. Xinjiang University*, 2003, **20**(1): 32~35
阿不都热苏力·阿卜杜热西提, 帕尔哈提·米吉提. 二维光子晶体及其光子带结构研究[J]. *新疆大学学报*, 2003, **20**(1): 32~35
- 11 Jin Chongjun, Qin Bai, Yang Sen *et al.*. Two dimensional photonic band structure: triangular non bravais lattice [J]. *Acta Optica Sinica*, 1997, **17**(4): 409~413
金崇君, 秦柏, 杨森等. 三角形复式晶格的光子带结构研究[J]. *光学学报*, 1997, **17**(4): 409~413