

激光与光电子学进展

二维光子晶体负折射率的数值分析

朱璇笛, 袁健华*

北京邮电大学理学院, 北京 100876

摘要 为了研究光子晶体负折射率所在的频率范围, 基于有限元算法分析数值来求解二维光子晶体的带隙结构, 这一过程涉及如何设计数学和物理模型, 设计有限元算法的求解方程, 对数值结果进行物理分析。首先使用有限元算法将布里渊区域内所有相关频率上波矢空间中的点都计算出来以绘制等频率面, 然后绘制不同空气孔半径下的等频率面, 最后在等频率面的结构上找到群速度为负的方向就能得到负折射率所在的频率区间。同时, 比较不同空气孔半径对光子晶体负折射所在频率区间的影响, 可为光子晶体器件的制备提供支撑。

关键词 几何光学; 光子晶体; 负折射材料; 等频率面; 数值模拟

中图分类号 O242.21

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202158.2108002

Numerical Simulation for Negative Refractive Index of Two-dimensional Photonic Crystals

Zhu Xuandi, Yuan Jianhua*

School of Science, Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing 100876, China

Abstract In order to study the frequency range of the negative refractive index of the photonic crystal, the band gap structure of the two-dimensional photonic crystal is solved by analyzing the numerical value based on the finite element algorithm. This process involves how to design the mathematical and physical models, design the solving equation of the finite element algorithm, and the numerical results were physically analyzed. First, the finite element algorithm is used to calculate the points in the wave vector space of all relevant frequencies in the Brillouin region to plot the isofrequency surface. Then, the isofrequency surface under different air hole radii is drawn. Finally, the frequency interval between the negative refractive index can be obtained by finding the direction with negative group velocity on the structure of the isofrequency surface. At the same time, comparing the influence of different air hole radii on the frequency range of the negative refraction of photonic crystals can provide support for the preparation of photonic crystal devices.

Key words geometric optics; photonic crystals; negative refraction; isofrequency surface; numerical simulation

OCIS codes 080.1753; 160.3918; 160.5293

1 引言

介电常数和磁导率是两个基本的物理量, 可以用来描述材料的电磁性质, 并且能够确定介质中电

磁波的传播规律。1967年, Veselago^[1]提出了材料介电常数和磁导率同时为负的概念, 并对这种材料中电磁波的传播规律进行了理论上的探讨和研究。根据介电常数和磁导率的正负号, 材料可以分为不

收稿日期: 2021-03-02; 修回日期: 2021-03-10; 录用日期: 2021-03-15

基金项目: 国家自然科学基金(11671052, 11871115)

通信作者: *jianhua_yuan@126.com

同类别。一种类型的材料是介电常数和磁导率均为正,即材料的折射率为正,当电磁波在折射率为正的材料中传播时,其遵从右手螺旋运动法则,根据这一特性也可以将具有正折射率的材料称为右手材料,也就是自然界中常见的材料。另一种类型的材料是介电常数和磁导率均为负,即材料的折射率为负,电场矢量、磁场矢量和波矢量在材料中传播满足左手螺旋法则,因此这种材料也被称为负折射率材料或者左手材料。

自然界中存在具有负介电常数的材料,例如金属,其在光波频段中可以产生表面等离子体激元,当电磁波的频率小于等离子体振荡的频率时,材料的介电常数为负。但是在自然界中无法找到具有负磁导率的材料,因为磁场中不存在自由磁荷,所以若想获得具有负磁导率的材料,必须通过人工合成的方法来制作类似于电偶极子的“磁偶极子”,将“磁偶极子”周期性排列组合可以得到具有负磁导率的材料。

目前,对于主要根据等效介质理论制造的具有负折射率的材料,当入射电磁波的波长远大于单元结构和周期长度时^[2],其可看作具有等效介电常数或等效磁导率的均匀介质。Pendry等^[3]对细金属导线进行周期性排列,获得了在微波频率下具有负介电常数的材料。1999年,Pendry等^[4]设计一种金属环谐振器(SSR)结构来模拟“磁偶极子”,将金属环谐振器周期性排列构成的材料看作一种等效负磁导率介质。2000年,Smith等^[5-7]使用Pendry等^[4]提出的方法将具有负介电常数的材料和具有负磁导率的材料组合,得到了具有负折射率的材料,并通过实验观察到了该材料在空气界面上发生了负折射现象,之后进一步研究显示,某些介质材料和金属材料所构成的光子晶体也会存在类似于具有负折射率的材料折射现象。

光子晶体因具有周期性结构和能带结构,所以光在其中传播会对入射角度和光频率十分敏感^[8]。计算光子晶体的带隙结构可以帮助科研人员了解和预测光子晶体的某些特性,但由于受到计算量和时间的限制,很多情况下只能计算不可约布里渊区边界上的频率来得到光子带隙图。若想更深入地了解光子晶体,可以通过光子的等频线图来反映群速度的方向。对于具有负折射率的材料,超透镜等方面的研究十分重要^[9-10]。为晶体绘制等频线图也能方便科研人员制造具有负折

射率的材料^[11],目前已制成基于柔性铝酸镍(NiAl_2O_4)且在微波频段的双负超材料,该材料可用于现代雷达和卫星^[12]。

本文重点采用数值模拟方法来计算二维光子晶体的光子带隙,通过等频率面来描述光子晶体的光传播问题,进一步分析光子晶体中因负折射率而产生的频率区域,并数值研究不同的光子晶体参数对负折射率的影响。有关光子晶体负折射的现象一直都在被不断研究,如使用FDTD(Finite-Difference Time-Domain)来模拟光子晶体的负折射共聚焦系统^[13],根据光子晶体的负折射现象可以制成超分辨成像系统^[14],该系统能够大幅度提高成像精度。

2 二维光子带隙结构的计算模型

光子晶体是由Yablonovitch^[15]和John^[16]提出的概念,指的是由不同折射率材料周期性排列组成的结构,其周期长度与光波在同一数量级。当光波通过光子晶体时,因色散关系使光波中处于某些频率区间的光无法传播,这些无法通过的频率区间被称作光子禁带。光子晶体可根据光子禁带在空间中所存在的维数分为一维、二维和三维光子晶体,光子晶体目前已经有一定的商业应用。如光子晶体光纤,其包层为光子晶体而非其折射率大于纤芯的材料,通过光子晶体的带隙效应可以约束光线在纤芯中传播;如高性能反射镜,利用光子晶体的光子带隙制成的高性能反射镜可以反射一定频率且来自任意方向的光线,处于光子禁带频率的光理论上可实现100%的反射率;此外还可以制作低阈值激光器、光子晶体滤波器、光子晶体微腔和多功能传感器等。随着现在技术的提升,科研人员更有使用飞秒激光来制造光子晶体,这使得光子晶体在光学器件中的应用得到进一步提升。

光子晶体中,光的传播规律可由麦克斯韦方程组来得到。对于二维光子晶体,利用其折射率是在两个方向上呈周期性变化的特性,并通过求解麦克斯韦方程组在一个元胞区域中的解即可得到二维光子晶体的能带图,由此得到带隙结构。麦克斯韦方程组的微分形式为

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) = -i\omega\mathbf{B}(\mathbf{x}), \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x}) + i\omega\mathbf{D}(\mathbf{x}), \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) = \rho, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) = 0, \quad (4)$$

式中： \mathbf{E} 表示电场强度，单位为 V/m ； \mathbf{D} 表示电通量密度，单位为 C/m^2 ； \mathbf{H} 表示磁场强度，单位为 A/m ； \mathbf{B} 表示磁通量密度，单位为 Wb/m^2 ； \mathbf{J} 表示电流密度，单位为 A/m^2 ； ρ 表示电荷密度，单位为 C/m^3 ； ω 表示电磁场频率； $\mathbf{x} = (x, y)$ ； ∇ 表示 Laplace 算子。当电磁场是无源场时， $\mathbf{D}(\mathbf{x}) = \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{x})$ ， $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mu \mathbf{H}(\mathbf{x})$ ，其中 ϵ 和 μ 分别表示材料的介电常数和磁导率，由此可得电场和磁场分别满足齐次波动方程，表达式为

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) \right] - \omega^2 \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{x}) = 0, \quad (5)$$

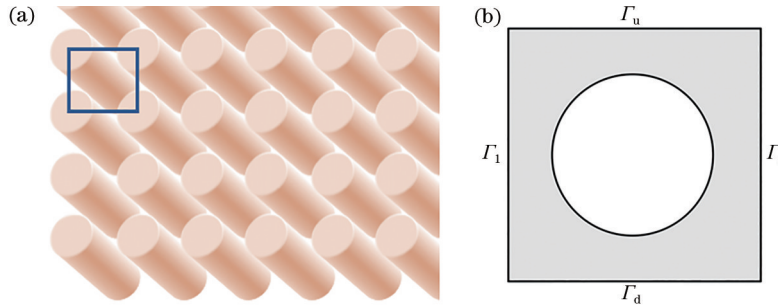


图 1 二维方形晶格的光子晶体。(a)结构示意图；(b)单元晶格

Fig. 1 Photonic crystals of two-dimensional square lattice. (a) Schematic structure; (b) cell lattice

在对光子晶体进行计算的过程中，通常只需计算波在不可约布里渊区中的解，就可以得到波在整个空间中的解。对空间波函数进行傅里叶变换可以得到倒易点阵，然后制作倒格子基矢的垂直平分面，垂直平分面所围成的最小区域就是第一布里渊区。由于晶体的周期性，很多坐标中的点是等价的，因此只需计算出不可约布里渊区域内的解即可得到整个晶体结构的解。

对于一个晶格常数为 L 的正方形晶体，晶体中不同方向的基矢分别为 $\boldsymbol{\alpha} = L\mathbf{k}_x$ 和 $\boldsymbol{\beta} = L\mathbf{k}_y$ ，计算出的倒格子基矢分别为 $\pm \boldsymbol{\xi} = \pm \frac{2\pi}{L} \mathbf{k}_x$ 和 $\pm \boldsymbol{\eta} = \pm \frac{2\pi}{L} \mathbf{k}_y$ ，对上述 4 个矢量分别作垂直平分可以构成正方形晶格结构的第一布里渊区。由此可知，第一布里渊区为 $\Omega = \left[-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L} \right]$ ，不可约布里渊区是由点 $T = \frac{2\pi}{L}(0, 0)$ 、 $X = \frac{2\pi}{L}\left(\frac{1}{2}, 0\right)$ 和 $M = \frac{2\pi}{L}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ 围成的三角形区域，如图 2 所示，其中正方形晶格为布里渊区，三角形 TXM 为不可约布里渊区。计算过程中将沿着 $T-X-M-T$ 的顺序进行计算，再由电磁波在光子晶体中的对称性可得到整个波失空间中的点。

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}) \right] - \omega^2 \mu \mathbf{H}(\mathbf{x}) = 0. \quad (6)$$

二维方形晶格的光子晶体如图 1(a) 所示，其介电常数满足 $\epsilon(\mathbf{x} + \mathbf{R}_n) = \epsilon(\mathbf{x})$ ，其中 $\mathbf{R}_n = n_1 \boldsymbol{\alpha} + n_2 \boldsymbol{\beta}$ ， $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 分别表示二维光子晶体在不同方向的基矢， n_1 和 n_2 均为整数。单元晶格如图 1(b) 所示，其中 Γ_u 、 Γ_d 、 Γ_l 和 Γ_r 分别表示原胞的上、下、左和右边界，空白区域和阴影区域中的介质不同。光子晶体是周期性结构，在计算带隙的过程中，方形单元边界上的对边满足拟周期性的边界条件。

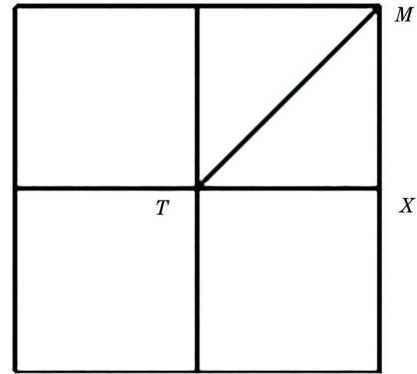


图 2 布里渊区和不可约布里渊区的示意图
Fig. 2 Schematic of Brillouin and irreducible Brillouin regions

3 基于有限元分析的带隙数值模拟方法

对具有二维方形晶格的光子晶体的带隙结构进行数值模拟，令 $\mu = \mu_r \mu_0$ 和 $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$ ，其中 μ_r 和 ϵ_r 分别表示相对介电常数和相对磁导率， ϵ_0 和 μ_0 分别表示真空中的介电常数和磁导率。因此，电场和磁场满足的方程为

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) - k_0^2 \epsilon_r(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}) = 0, \quad (7)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon_r} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}) \right] - k_0^2 \mathbf{H}(\mathbf{x}) = 0, \quad (8)$$

式中: k_0 表示空间中的波数, $k_0 = \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ 。电磁波在光子晶体中传播可分为 TE (Transverse Electric) 和 TM (Transverse Magnetic) 两种模式。

在 TM 模的情况下, 电场可以化简成 $\mathbf{E}(x, y) = (0, 0, u'(x, y))$ (其中 $u'(x, y)$ 为 z 方向的电场), 于是 (7) 式可写为

$$\nabla \cdot \nabla u' + k_0^2 u' = 0. \quad (9)$$

在 TE 模的情况下, $\mathbf{H}(x, y) = (0, 0, u'(x, y))$, 于是 (8) 式可写为

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\epsilon_r} \nabla u' \right) + k_0^2 u' = 0. \quad (10)$$

光子晶体为周期性结构, 因此波函数可写成一个平面波和一个与晶体结构相同周期的周期函数的相乘形式, 即 $u'(\mathbf{x}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) u_R(\mathbf{x})$, 其中 $u_R(\mathbf{x})$ 为周期函数, $\mathbf{k} = (\alpha, \beta)$ 。将 $u'(\mathbf{x})$ 代入 (7) 式和 (8) 式可以在单元晶格 Ω 上得到

$$(\nabla + i\mathbf{k}) \cdot (\nabla + i\mathbf{k}) u_R + k_0^2 \epsilon_r u_R = 0, \quad (11)$$

$$(\nabla + i\mathbf{k}) \cdot \left[\frac{1}{\epsilon_r} (\nabla + i\mathbf{k}) u_R \right] + k_0^2 u_R = 0. \quad (12)$$

对于方形光子晶体, $u_R(\mathbf{x})$ 满足边界条件, 可表示为

$$u_R|_{\Gamma_u} = u_R|_{\Gamma_d}, \quad (13)$$

$$u_R|_{\Gamma_l} = u_R|_{\Gamma_o}. \quad (14)$$

为了描述简单, 省略下标 R, 求频率 ω 和场 u , 表达式为

$$\begin{aligned} &(\nabla + i\mathbf{k}) \cdot [\varrho (\nabla + i\mathbf{k}) u] + \omega^2 \kappa u = 0, \\ &\text{in } \Omega, \text{ s.t. } u|_{\Gamma_l} = u|_{\Gamma_r}, u|_{\Gamma_u} = u|_{\Gamma_d}, \end{aligned} \quad (15)$$

其中

$$\varrho = \begin{cases} 1, & \text{TM} \\ \frac{1}{\epsilon_r}, & \text{TE} \end{cases}, \quad (16)$$

$$\kappa = \begin{cases} \tilde{\kappa}_0 \epsilon_r, & \text{TM} \\ \tilde{\kappa}_0^2, & \text{TE} \end{cases}, \quad (17)$$

$$\tilde{\kappa} = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}. \quad (18)$$

引入完备的 Sobolev 空间 $\mathbb{X} = \{v | v \in \mathbf{H}^1(\Omega), v|_{\Gamma_l} = v|_{\Gamma_r}, v|_{\Gamma_u} = v|_{\Gamma_d}\}$, 其中 $\mathbf{H}^1(\Omega)$ 为 Hilbert 空间, 定义 Ω 空间上的范数, 可表示为

$$\|v\|_1 = \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} + \|v\|_{L^2(\Omega)}, \quad \forall v \in \mathbb{X}, \quad (19)$$

式中: $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ 表示 $L^2(\Omega)$ 空间中的范数。根据 Galerkin 变分原理并结合连续边界条件, 对于 $\forall v \in \mathbb{X}$ 有

$$\langle \varrho (\nabla + i\mathbf{k}) u, (\nabla + i\mathbf{k}) v \rangle - \omega^2 \langle \kappa u, v \rangle = 0, \text{ in } \Omega, \quad (20)$$

式中: $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 表示 $L^2(\Omega)$ 空间的标准内积。定义 Sobolev 空间 \mathbb{X} 的双线性泛函, 表达式为

$$a(u, v) = \langle \varrho (\nabla + i\mathbf{k}) u, (\nabla + i\mathbf{k}) v \rangle, \quad (21)$$

$$b(u, v) = \langle \omega^2 \kappa u, v \rangle. \quad (22)$$

使用弱形式来求频率 ω 和场 u , 即

$$a(u, v) = \omega^2 b(u, v),$$

$$\text{in } \Omega, \text{ s.t. } u|_{\Gamma_l} = u|_{\Gamma_r}, u|_{\Gamma_u} = u|_{\Gamma_d}. \quad (23)$$

采用线性有限元离散的方法来求解 (23) 式, 先对求解区域 Ω 使用三角形网格来剖分。假设可以剖分出来 N 个单元, P 个结点, 而基函数选择一次函数, 那么未知函数 u 的近似函数可以表示为

$$u_h(x, y) = \sum_{q=1}^P u_{h,q} \Phi_q(x_q, y_q), \quad (24)$$

式中: $\Phi_q(x_q, y_q)$ 表示与第 q 个结点对应的线性基函数, 其中 (x_q, y_q) 表示第 q 个结点的坐标。正则三角形剖分后, 设求解空间 \mathbb{X} 所对应的离散解空间为 \mathbb{X}_h , $\mathbb{X}_h = \{v_h | v_h \in \mathbb{X}, v_h|_K = a_K + b_K x + c_K y, \{a_K, b_K, c_K\} \in \mathbf{R}, K \in M\}$, 其中 K 为三角形单元编码, 离散变分问题为求解 $u_h \in \mathbb{X}_h$ 和 $\omega \in \mathbf{R}$, 表达式为

$$a(u_h, v_h) = \omega^2 b(u_h, v_h), \quad v_h \in \mathbb{X}_h. \quad (25)$$

考虑每个子区域, 每一个三角形单元内的未知函数 u 可以近似表示为 $u_K = a_K + b_K x + c_K y$ 。三角形单元按照逆时针方向用 1、2 和 3 来表示顶点结点的编码, 使用 $u_{1,K}$ 、 $u_{2,K}$ 和 $u_{3,K}$ 来表示点 $(x_{1,K}, y_{1,K})$ 、 $(x_{2,K}, y_{2,K})$ 和 $(x_{3,K}, y_{3,K})$, 那么 $u_{1,K}$ 、 $u_{2,K}$ 和 $u_{3,K}$ 分别表示为

$$\begin{cases} u_{1,K} = a_K + b_K x_{1,K} + c_K y_{1,K} \\ u_{2,K} = a_K + b_K x_{2,K} + c_K y_{2,K} \\ u_{3,K} = a_K + b_K x_{3,K} + c_K y_{3,K} \end{cases} \quad (26)$$

使用 $u_{j,K}$ 来解出系数 a_K 、 b_K 和 c_K , 代入 u_K 中可得

$$u_K(x, y) = \sum_{j=1}^3 N_{j,K}(x, y) u_{j,K}, \quad (27)$$

其中 $N_{j,k}(x, y)$ 可表示为

$$N_{j,k}(x, y) = \frac{1}{2\Delta_K} (a_{j,K} + b_{j,K}x + c_{j,K}y), \quad (28)$$

式中: Δ_K 为第 K 个三角形单元的面积。 Δ_K 和 $a_{j,K}$ 、 $b_{j,K}$ 和 $c_{j,K}$ 分别表示为

$$\begin{cases} a_{1,K} = x_{2,K}y_{3,K} - y_{2,K}x_{3,K}; & b_{1,K} = y_{2,K} - y_{3,K}; & c_{1,K} = x_{3,K} - x_{2,K} \\ a_{2,K} = x_{3,K}y_{1,K} - y_{3,K}x_{1,K}; & b_{2,K} = y_{3,K} - y_{1,K}; & c_{2,K} = x_{1,K} - x_{3,K}, \\ a_{3,K} = x_{1,K}y_{2,K} - y_{1,K}x_{2,K}; & b_{3,K} = y_{1,K} - y_{2,K}; & c_{3,K} = x_{2,K} - x_{1,K} \end{cases} \quad (29)$$

$$\Delta_K = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_{1,K} & y_{1,K} \\ 1 & x_{2,K} & y_{2,K} \\ 1 & x_{3,K} & y_{3,K} \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (b_{1,K}c_{2,K} - b_{2,K}c_{1,K}). \quad (30)$$

对于 (25) 式, 令 $\mathbf{A}_K = \{a[N_{j,k}(x, y), N_{i,k}(x, y)]\}$ 、 $\mathbf{B}_K = \{b[N_{j,k}(x, y), N_{i,k}(x, y)]\}$ 、 $\mathbf{k} = (\alpha, \beta)$ 、 K 为剖分三角形单元的编号以及 i 和 j 均为在剖分单元中的局部编码, 节点的方程可写成

$$\mathbf{A}_{ij,K} = \langle \varrho(\nabla + i\mathbf{k})N_{j,k}(x, y), (\nabla + i\mathbf{k})N_{i,k}(x, y) \rangle = \frac{\varrho(b_{j,k}b_{i,k} + c_{j,k}c_{i,k})}{4\Delta_K^2} \iint_K 1 \, dx dy + i\varrho(\alpha b_{i,k} + \beta c_{i,k}) \times \iint_K N_{j,k}(x, y) \, dx dy - i\varrho(\alpha b_{j,k} + \beta c_{j,k}) \iint_K N_{i,k}(x, y) \, dx dy + \varrho(\alpha^2 + \beta^2) \iint_K N_{j,k}(x, y)N_{i,k}(x, y) \, dx dy, \quad (31)$$

$$\mathbf{B}_{ij,K} = \langle \kappa N_{j,k}(x, y), N_{i,k}(x, y) \rangle = \iint_K N_{j,k}(x, y) \cdot N_{i,k}(x, y) \, dx dy = \kappa \iint_K N_{j,k}(x, y) \cdot N_{i,k}(x, y) \, dx dy. \quad (32)$$

记 $\lambda = \omega^2$, 最后得到的方程可写成矩阵形式, 即

$$\mathbf{A}\mathbf{U}_h = \lambda\mathbf{B}\mathbf{U}_h, \quad (33)$$

式中: $\mathbf{U}_h = \sum_{q=1}^P u_{h,q}$ 。 在求解广义特征值问题 $\mathbf{A}\mathbf{U}_h = \lambda\mathbf{B}\mathbf{U}_h$ 的过程中, 还需加上周期边界条件即可求得对应一个波矢的可传输频率, 表达式为

$$u(x, y)|_{\Gamma_r} = u(x, y)|_{\Gamma_l}, \quad (34)$$

$$u(x, y)|_{\Gamma_u} = u(x, y)|_{\Gamma_d}. \quad (35)$$

对于波矢 \mathbf{K} , 遍历不可约第一布里渊区域 TXM (边界为不可约布里渊区的边界) 就可以计算得到带隙结构。

4 数值模拟和负折射率范围的研究

使用在介质板上以正方形晶格排列的空气圆柱二维晶体作为模型来分析, 其晶格常数为 L , 圆柱孔的半径 $r=0.35L$, 介质的介电常数为 12.0, 在 TE 模式下可以计算出该光子晶体的带隙结构。图 3(a) 为归一化频率 $f = \omega L / 2\pi c$ 在 0.050~0.239 之间的等频率面图, 其中 c 为光速。等频率面是能带结构在第一布里渊区域内的投影, 就是利用第 3 节介绍的数值计算方法将布里渊区域内所有与固定频率相关的波矢 \mathbf{K} 空间中的点都计算出

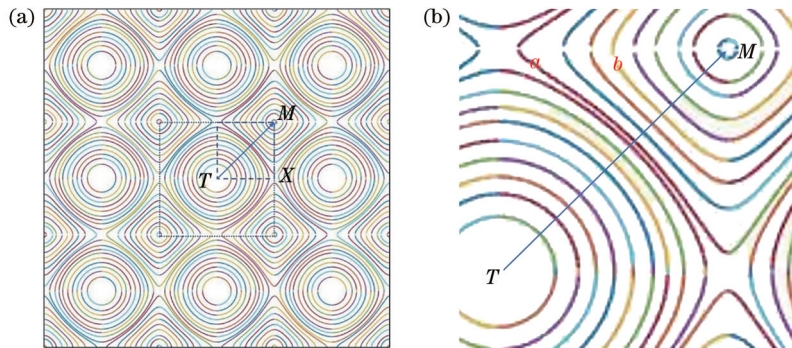


图 3 二维正方形晶格的等频面及其局部放大图。(a) 等频面; (b) TM 方向上的局部放大图

Fig. 3 Isofrequency surface of two-dimensional square lattice and its local magnification. (a) Isofrequency surface; (b) local enlargement in TM direction

来,然后绘制的等频率面。图 3(b)为图 3(a)的局部放大图,归一化频率 $f_a = 0.165$ 和 $f_b = 0.195$, M 点附近为高频部分。介质中的波矢 \mathbf{K} 是由界面上 \mathbf{K} 的连续分量决定的,当光的传播方向与波矢 \mathbf{K} 一致时,就形成了传统的折射现象。图 3 给出的计算结果与文献[17]一致,说明数值算法是正确

有效的。

当空气孔的半径分别为 $0.35L$ 、 $0.30L$ 、 $0.25L$ 和 $0.20L$ 时,光子晶体的等频面如图 4 所示。从 0.1 的归一化频率开始,以每次增加 0.005 的方式绘制等频率面的曲线,当频率比第一禁带小时,光的传播方向与波矢 \mathbf{K} 一致。

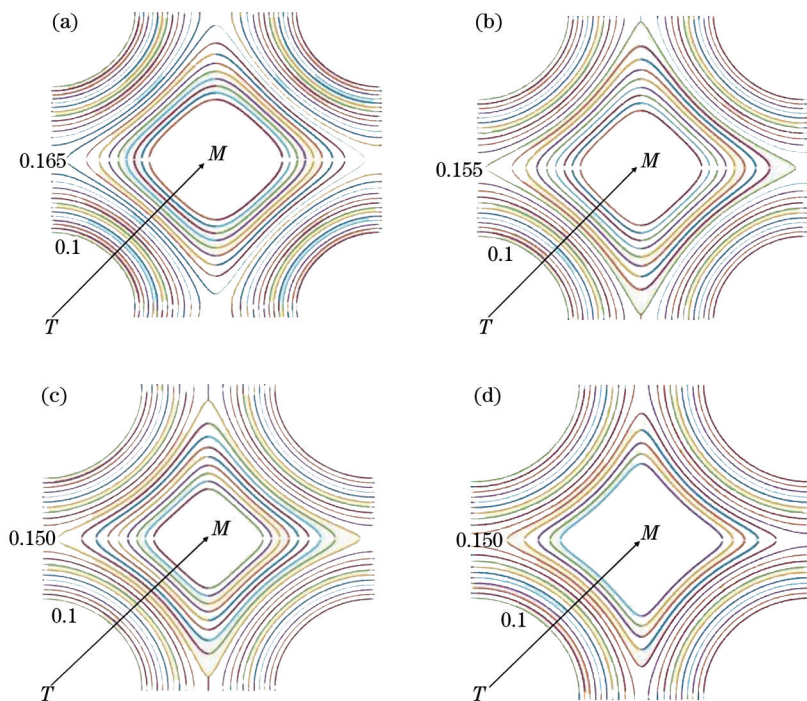


图 4 光子晶体在不同空气孔半径下的等频面。(a) $r=0.35L$; (b) $r=0.30L$; (c) $r=0.25L$; (d) $r=0.20L$

Fig. 4 Isofrequency surfaces of photonic crystals under different air hole radii. (a) $r=0.35L$; (b) $r=0.30L$; (c) $r=0.25L$; (d) $r=0.20L$

下面采用数值方法来研究负折射频率范围。受到光子禁带的影响,光子晶体会出现负折射的现象。在光子晶体中,群速度等于频率的梯度,即 $\mathbf{v}_g = \left(\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{K}_x}, \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{K}_y} \right)$ 。由此可知,群速度方向是等频面的法线方向,折射方向由群速度方向决定,为此可以通过等频面来确定 $\mathbf{v}_g \cdot \mathbf{K}$ 的符号。对于空气孔半径为 $r=0.35L$ 的二维方形光子晶体,当归一化频率在 $0.2485 \sim 0.3387$ 之间时,数值计算后得到的等频面如图 5 所示。二维方形光子晶体在 TE 模式下的等频面图中,1~8 依次对应的归一化频率分别为 0.2485 、 0.2685 、 0.2793 、 0.2985 、 0.3093 、 0.3187 、 0.3293 和 0.3359 ,且 Γ 点附近的等频面线对应的归一化频率为 0.3385 。

从图 5 可以看到,第一布里渊区域中心 T 点附近为高频部分,高频区域内等频面的曲线形状非常接近圆形,曲线向内,而且随着频率的增大曲线半

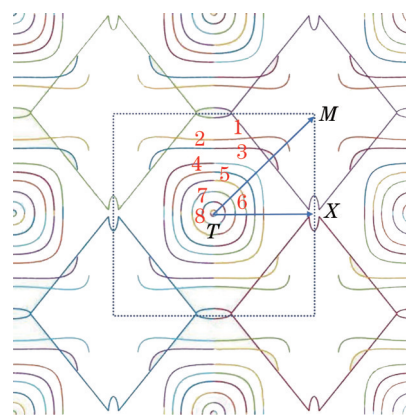


图 5 二维方形光子晶体在 TE 模式下第一负折射频带范围的等频面

Fig. 5 Isofrequency surface of 1st negative refraction band under TE mode of two-dimensional square photonic crystal

径逐渐减小,这说明群速度为负也就是在 TM 方向上有 $\mathbf{v}_g \cdot \mathbf{K} < 0$,即负折射现象所出现的区间。在实际应用的过程中,为了避免负折射现象受到禁带频

率的影响,在此频率带中心值附近可以观察到较好的负折射现象,当空气孔半径 $r=0.35L$ 时,可以选取 0.29 的归一化频率来研究负折射现象。

若光子晶体的禁带结构不同,则出现负折射率的频带区域也不同。由于光子晶体的带隙结构受到光子晶体的周期晶格结构、介质材料、介质圆柱或介质中空气孔半径等参量的影响,故通过改变不同的参量可以找到不同负折射率频率范围。以方形晶格排列的圆柱空气孔为例,数值研究不同的空气孔半径对负折射率频率范围的影响,其中晶格常数为 L ,圆柱孔的半径分别为 $0.45L$ 、 $0.40L$ 和 $0.35L$,介质的介电常数为 12.0。表 1 为不同的空气孔半径与第一负折射频带之间的对应关系。从表 1 可以看到,随着空气孔半径的减小,起始负折射频点之间的距离逐渐减小,但是产生负折射的频带带宽逐渐

表 1 不同空气孔半径对负折射率频率范围的影响

Table 1 Influence of different air hole radius on frequency range of negative refractive index

r	1 st negative refraction band range	Negative refraction bandwidth
$0.45L$	0.3500-0.4160	0.0660
$0.40L$	0.2965-0.3668	0.0721
$0.35L$	0.2485-0.3387	0.0902

增大。

当圆柱孔的半径分别为 $0.45L$ 和 $0.40L$ 时,第一负折射频带的等频面如图 6 所示。从图 6 可以看到,第一布里渊区域中心 T 点附近为高频部分,在高频区域内等频面的曲线形状非常接近圆形,曲线向内,随着频率的增大曲线半径逐渐减小,此时可以产生负折射现象。

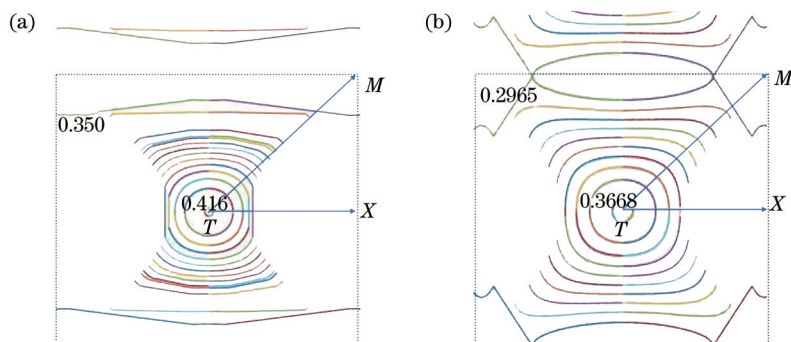


图 6 不同空气孔半径下第一负折射频带的等频面。(a) $r=0.45L$; (b) $r=0.40L$

Fig. 6 Isofrequency surface of 1st negative refraction band under different air hole radii. (a) $r=0.45L$; (b) $r=0.40L$

5 结 论

本文基于有限元方法数值求解光子晶体的等频率面,由此来描述光子晶体的光传播问题,数值计算结果与已有实验和其他数值模拟的结果一致,说明所提的数值模拟方法是正确有效的。基于数值模拟方法分析了光子晶体中负折射率产生的频率区域,并研究不同的光子晶体参数对负折射率产生的影响。研究结果表明,对于方形晶格的空气柱光子晶体,随着空气孔半径的减小,产生负折射的频带带宽逐渐增大,本文的研究结果可为光子晶体器件的制备提供指导和数值算法支撑。

参 考 文 献

- [1] Veselago V G. Electrodynamics of substances with simultaneously negative ϵ and μ [J]. Usp Fiz Nauk, 1967, 92: 517-526.
- [2] Koschny T, Kafesaki M, Economou E N, et al.

Effective medium theory of left-handed materials[J]. Physical Review Letters, 2004, 93(10): 107402.

- [3] Pendry J B, Holden A J, Stewart W J, et al. Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures[J]. Physical Review Letters, 1996, 76(25): 4773-4776.
- [4] Pendry J B, Holden A J, Robbins D J, et al. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1999, 47(11): 2075-2084.
- [5] Smith D R, Padilla W J, Vier D C, et al. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity[J]. Physical Review Letters, 2000, 84(18): 4184-4187.
- [6] Shelby R A, Smith D R, Nemat-Nasser S C, et al. Microwave transmission through a two-dimensional, isotropic, left-handed metamaterial[J]. Applied Physics Letters, 2001, 78(4): 489-491.
- [7] Shelby R A, Smith D R, Schultz S. Experimental

- verification of a negative index of refraction[J]. *Science*, 2001, 292(5514): 77-79.
- [8] Huang B Q, Gu P F. Numerical study about the abnormal refraction in one-dimensional photonic crystals[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2004, 33(10): 1222-1225.
黄弼勤, 顾培夫. 一维光子晶体反常折射的数值分析[J]. *光子学报*, 2004, 33(10): 1222-1225.
- [9] Chen P, Kong F M, Li K, et al. Condition and property of negative refraction phenomenon in two-dimension photonic crystal[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, 37(4): 721-724.
陈沛, 孔凡敏, 李康, 等. 二维光子晶体负折射现象条件及特性研究[J]. *光子学报*, 2008, 37(4): 721-724.
- [10] Regan E C, Igarashi Y, Zhen B, et al. Direct imaging of isofrequency contours in photonic structures[J]. *Science Advances*, 2016, 2(11): e1601591.
- [11] Jiang Q, Chen J B, Liang B M, et al. Measurement of effective negative refractive index of two-dimensional photonic crystal slabs[J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(6): 0616001.
蒋强, 陈家璧, 梁斌明, 等. 二维平板光子晶体的等效负折射率测量[J]. *光学学报*, 2017, 37(6): 0616001.
- [12] Faruque M R I, Ahamed E, Rahman M A, et al. Flexible nickel aluminate (NiAl_2O_4) based dual-band double negative metamaterial for microwave applications [J]. *Results in Physics*, 2019, 14: 102524.
- [13] Niu J K, Liang B M, Zhuang S L, et al. Confocal system based on the negative refraction of two-dimensional photonic crystals[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(2): 020501.
牛金科, 梁斌明, 庄松林, 等. 基于二维光子晶体负折射的共聚焦系统[J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(2): 020501.
- [14] Zhang B, Li Z Q, Wang L, et al. Research advances in laser crystal optical waveguides fabricated by femtosecond laser direct writing[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(11): 111415.
张彬, 李子琦, 王磊, 等. 飞秒激光直写激光晶体光波导的研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(11): 111415.
- [15] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[M]//Burstein E, Weisbuch C. *Confined electrons and photons*. NATO ASI series. Boston: Springer, 1995, 340: 841-844.
- [16] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58(23): 2486.
- [17] Luo C Y, Johnson S G, Joannopoulos J D, et al. All-angle negative refraction without negative effective index[J]. *Physical Review B*, 2002, 65(20): 201104.