

文章编号: 0253-2239(2004)03-313-6

具有复介电常量二维光子晶体的特性研究*

娄淑琴 王 智 任国斌 简水生

(北京交通大学电子信息学院, 全光网络与现代通信网教育部重点实验室, 北京 100044)

摘要: 采用平面波展开法, 通过数值模拟研究了具有复介电常量的二维光子晶体的能带结构和光传输特性, 重点讨论介电常量的虚部为负值情形时对传输特性的影响。研究表明由于光子带隙的存在有效地抑制了频率位于带隙内光的自发辐射。当在介质中掺入具有增益特性的杂质时, 即使两种介质的介电常量相差很小, 在靠近光子带隙边缘, 出现了较强的受激辐射放大。通常在带隙的边缘处, 光子晶体的群速度较小, 而激光阈值正比于群速度的平方, 当群速度很小时, 激光阈值将大大减小。这为实现零阈值激光器提供了基础, 也为制作光放大微器件提供了一个有益的理论参考。

关键词: 光子晶体; 光子带隙; 复介电常量; 增益
中图分类号: TN929.11 文献标识码: A

The Research on the Properties of Two-Dimensional Photonic Crystal with the Imaginary Part of Dielectric Constant

Lou Shuqin Wang Zhi Ren Guobin Jian Shuisheng

(Key Lab of All-Optical Network and Advanced Telecommunication Network of EMC, School of Electronic and Information Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044)

(Received 4 January 2003; revised 30 June 2003)

Abstract: The band structure and the optical transmission properties of the two-dimensional photonic crystal with complex dielectric constant, especially discussing on the case of negative imaginary part, are analyzed numerically with the plane-wave expansion method. The results show that the spontaneous emission of special light frequency that is in the range of photonic band gap is effectively restrained. A large enhancement of stimulated emission appears at the photonic band edges where the group velocity is small if the photonic crystal is with a little impurity atoms that have population inversion. This phenomenon will happen even if the dielectric constant difference between two dielectrics is very small. Generally, there is a small group velocity near the photonic band gap. Because the threshold of emitting laser is proportional to the square of group velocity, the lasing threshold decreases with a decrease in the group velocity. This might be used either to realize lasing operation near zero thresholds, or to supply a beneficial reference for fabricating optical amplification device.

Key words: photonic crystal; photonic band gap; complex dielectric constant; gain

1 引 言

近年来, 光子晶体的研究非常活跃^[1,2], 光子晶体的最根本特征是具有光子禁带, 频率落在禁带中

的光是被禁止传播的。光子禁带的存在可以有效地抑制自发辐射, 通常自发辐射的几率与光子所在频率的态密度成正比^[2], 如果处于光子晶体中原子的自发辐射的光频率落在光子禁带中时, 由于该频率处光子的态密度为零, 因此自发辐射几率为零, 自发辐射被抑制。但如果在光子晶体中掺入激活杂质, 增加了相应频率光子态密度, 对应频率处的受激辐

* 北京交通大学论文基金(PD212)资助课题。

E-mail: loushuqin@sina.com

收稿日期: 2003-01-04; 收到修改稿日期: 2003-06-30

射得到增强。因此,利用光子带隙对自发辐射的抑制作用,可设计出无阈值激光器、光子晶体激光二极管^[3]等。目前在光子晶体中掺入激活杂质形成激光振荡已经有了实验报道^[4~6]。

本文使用含有激活杂质(如掺 Er)的石英玻璃圆柱,在空气中构造了一个周期性排列的二维正方格子的光子晶体,利用平面波展开法对光子晶体的能带结构和传输特性进行了数值模拟研究。结果表明,当采用负的虚部介电常量模拟介质增益时,在靠近光子带隙的边缘,群速度较小或群速度异常处出现较强的受激辐射放大。利用经典极化理论,可以很好地解释该现象。研究证明在光子晶体掺入激活杂质,有望实现高效光放大、构造零阈值激光器、光子晶体激光器等方面得到广泛的应用。

2 光子晶体理论研究

目前研究光子晶体能带结构和光传输特性方法^[7~17]主要有:平面波展开法、能量变分法、有限元法、有限时域差分法、转移(传输)矩阵法、多重散射法等。其中平面波展开法完全类似传统的能带理论,物理概念清晰,数学手段简单。所以,本文选用该方法,研究二维光子晶体能带结构和传输特性。

本文构造了一种含有激活杂质(如 Er)的石英玻璃圆柱,在空气中构成一个周期性排列的二维正方格子光子晶体,结构如图 1 所示。石英圆柱的介电常量取为 $2.10 - i0.01$,入射波为 TE 或 TM 波,沿垂直石英柱方向入射到光子晶体中。

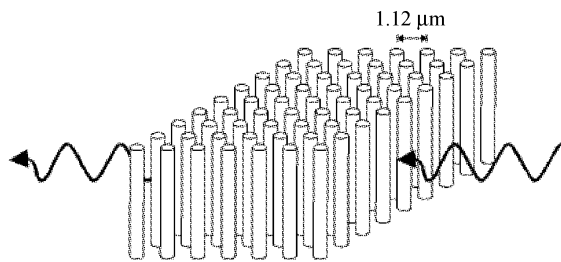


Fig. 1 The structure of photonic crystal made up

假定光子晶体是无源、无损、非磁性、线性时不变系统,麦克斯韦方程在频域内可用式(1)来表达:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = j\omega\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}), \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -j\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}), \\ \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0, \\ \nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $\epsilon(\mathbf{r})$ 是光子晶体相对介电常量的空间函数,(1)式中我们假设电磁场是时间谐变的,而且可以

看到,磁场强度 \mathbf{H} 和电位移矢量 \mathbf{D} 总是正交于波矢量 \mathbf{k} ,即它们都是横场。根据(1)式可以得到 \mathbf{E} 、 \mathbf{D} 、 \mathbf{H} 的本征值方程,这里只写出关于 \mathbf{H} 的本征值方程:

$$\Theta\mathbf{H}(\mathbf{r}) \equiv \nabla \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

根据布洛赫定理,电磁场矢量可以用第一布里渊区的波矢量 \mathbf{k} 和能级序号 n 来表示,即

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{r}) = \mathbf{U}_{kn}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (3)$$

其中 $\mathbf{u}_{kn}(\mathbf{r})$ 是周期性矢量函数,满足条件

$$\mathbf{u}_{kn}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = \mathbf{u}_{kn}(\mathbf{r}),$$

此处 $\mathbf{a}_i (i = 1, 2)$ 是两个方向上的晶格常量。

平面波展开法的核心是将介电常量的倒数和场矢量进行傅里叶展开^[18],即

$$\begin{cases} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} \epsilon^{-1}(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}], \end{cases} \quad (4)$$

其中 \mathbf{G} 表示倒格矢量。将(4)式代入(2)式中,可以得到关于傅里叶展开系数 $\mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G})$ 的方程:

$$\begin{aligned} & - \sum_{\mathbf{G}'} \epsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \\ & [(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G}')] = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G}), \end{aligned} \quad (5)$$

ω_{kn} 是与 $\mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G})$ 对应的本征角频率。

对于每一个 \mathbf{k} ,我们可以得到一系列本征频率 ω_{kn} 和本征矢量 \mathbf{H}_{kn} ,利用麦克斯韦方程可以得到相应的电场 E_{kn} , $\omega_{kn} \sim \mathbf{k}$ 的关系就构成了光子晶体的能带结构。

3 数值模拟与分析

3.1 实介电常量的传输特性

本文首先对介电常量为实数的二维正方格子光子晶体的能带结构和透射谱进行数值计算。选取参数如下:晶格常量 $a_1 = a_2 = a = 1.12 \mu\text{m}$, $\epsilon_a = 2.1$ (介质圆柱), $\epsilon_b = 1.0$ (空气),占空比 $f = 0.785$,由 16 层晶格组成。

假定入射波为 TE 波,沿垂直介质柱方向入射,入射波矢量平行于 Γ -X 方向。计算结果如图 2 所示。图 2(a)是光子晶体的能带结构,横坐标为波矢量,纵坐标为归一化频率。图 2(b)给出的是相应的透射谱,横坐标为归一化频率,纵坐标为透射率。

从图 2(a)中可看出,当采用 TE 波沿垂直方向入射时,光子晶体在归一化频率 $0.01 \sim 1.0$ 范围内有两个明显的带隙,第一个带隙位于归一化频率 $0.3530 \sim 0.3882$,第二个带隙位于归一化频率

0.7126~0.7225。为了看清第二个带隙的精细结构，图中给出了局部放大图。光子晶体的透射谱从另一方面显示出光子晶体的带结构，两个低透射区对应

的是两个光子带隙。带隙之间小的光谱峰的个数恰好等于光子晶体的层数，这与文献[14]给出的结论相吻合。

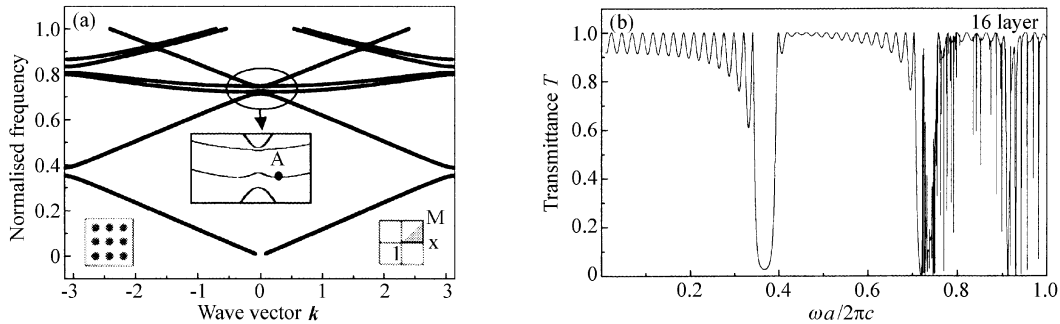


Fig. 2 The transmission properties of photonic crystal. (a) The band structure, (b) transmittance spectrum

3.2 掺入激活杂质的传输特性分析

前面分析了介电常量为实数情况下光子晶体的能带结构和透射谱。当在介质柱中掺入激活杂质时，如在石英柱中掺入 Er，此时介电常量的虚部不再为零，而是具有一个负值，同样可以用平面波展开理论来分析这种具有增益的光子晶体的传输特性。

假设掺杂的激活杂质均匀分布在介质柱中，介电常量为 $\epsilon_a = 2.1 - i0.01$ ，空气的介电常量 $\epsilon_b = 1.0$ ，占空比 $f = 0.785$ ，由 16 层晶格组成。同样对沿垂直方向入射的 TE 入射波，波矢量平行于 Γ -X 方向进行计算。计算得到透射谱和反射谱如图 3 所示，横坐标为归一化频率，取值范围与图 2(b) 相同。

为了更清楚的观察光子晶体的能带的变化情况，在图 3(a) 中给出第一和第二带隙的透射谱的局部放大图。将图 3 与图 2 做比较，可看出掺杂激活

杂质后，并没有改变光子晶体的能带结构，第一、二个带隙的归一化频率仍位于 0.3530~0.3882、0.7126~0.7225。但在靠近第二个带隙的边缘，归一化频率为 0.7228 处，反射率和透射率出现峰值，同时达到最大，数值远远大于 1，出现增强现象。为了后面表述方便我们将光放大最强点（透射和反射率的和达到最大的点）所对应的归一化频率定义为表征频率 ω_{smax} 。此时 $\omega_{smax} = 0.7228$ 靠近第二个带隙的上边缘。

从图 2 的能带结构图可以看出，在第二带隙的上边缘，随着波矢量的增加，群速度由负值向正值转换，而在带隙的边缘 A 点群速度为零，出现群速度为零的异常点，而产生受激辐射放大的频率恰好靠近该点。也就是说，受激辐射增强现象与光子带隙边缘群速度异常存在某种关联。

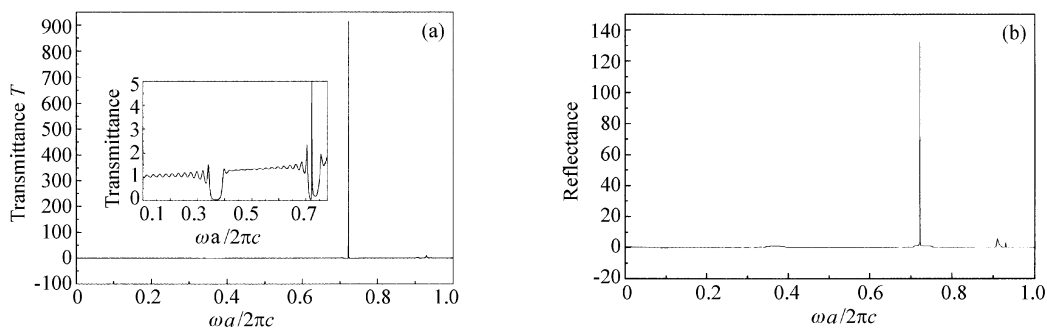


Fig. 3 The transmission properties of photonic crystal with a negative imaginary part dielectric constant.

(a) Transmittance spectrum, (b) reflectance spectrum

3.3 光子晶体长度对受激辐射的影响

这里主要讨论在第二带隙附近随光子晶体层数即光子晶体长度变化对受激辐射的影响。在归一化频率 0.70~0.74 范围内，选择 4、8、16 及 32 层光子晶体进行数值模拟。计算结果如图 4 所示，其中

纵坐标是反射率和透射率之和，反映受激辐射放大的强弱，横坐标为归一化频率。

分析图 4 给出的光谱的变化情况，在未掺入激活杂质时，光谱的反射率和透射率之和为 1，当掺入激活杂质时，在某些频率上，出现受激辐射增强现象，反

射和透射率的总和远大于 1。这说明在晶体中掺入

激活杂质后,受激辐射得到增强,使得光强显著增加。

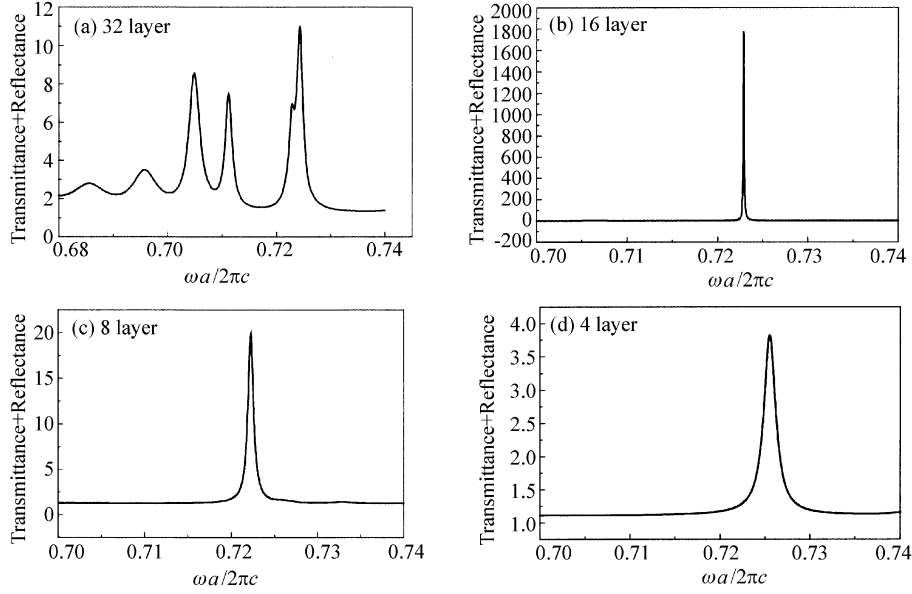


Fig. 4 The sum of reflectance and transmittance spectrum versus the layer of photonic crystal.

(a) 32 layers, (b) 16 layers, (c) 8 layers, (d) 4 layers

当光子晶体层数为 4、8 和 16 时,在第二光子带隙附近只有一个受激辐射增强峰,表征频率 $\bar{\omega}_{\text{max}}$ 分别为 0.7255、0.7229 和 0.7228;当光子晶体层数增加到 32 层时,出现多个受激辐射增强峰,各峰位于归一化频率为 0.7049、0.7111 和 0.7244 处。由此可以看出,当光子晶体层数较少即光子晶体较薄时,表征频率靠近第二光子带隙的上边缘,光子晶体的群速度异常,出现零值。当光子晶体的层数增加到 32 层时,受激辐射增强点虽然有所增加,但其归一化频率靠近光子带隙的上下边缘处,对应的群速度很小或为零。

显然,受激辐射增强与本征模式群速度很小或群速度异常(出现群速度为零)相关,最容易出现在带隙的边缘处。

这一结论可由经典极化理论予以解释。假设掺杂激活均匀分布在光子晶体中。用 $\rho(\mathbf{r})$ 表示粒子数密度,用 α 表示极化率。当一个本征模场 $\mathbf{E}_{kn}^{(T)}$ 在晶体里传播时,将产生一个极化场 $\mathbf{P}_{st}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$;由极化场 $\mathbf{P}_{st}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ 将产生出的一次场 $\mathbf{E}_{st}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$,一次场在光子晶体中传播又将产生二阶极化场 $\mathbf{P}_{st}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$;二阶极化场又将产生出二阶场 $\mathbf{E}_{st}^{(2)}(\mathbf{r}, t)$,依此下去,最后总场包含无限阶感应场和原场,可表示为

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \beta_{kn}^j l^j \mathbf{E}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r}) \exp[-i\omega_{kn}^{(T)} t] = \mathbf{E}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r}) \exp[\beta_{kn} l - i\omega_{kn}^{(T)} t],$$

其中 $\beta_{kn} = \frac{i\alpha\omega_{kn}^{(T)} F_1(\mathbf{kn})}{2\varepsilon_0\nu_g(\mathbf{kn})}$ 为传输常量, $F_1(\mathbf{kn}) = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) |\mathbf{E}_{kn}^{(T)}|^2$ 为本征场 $\mathbf{E}_{kn}^{(T)}$ 的掺杂原子的有效粒子数密度。

β_{kn} 的实部:

$$\text{Re}[\beta_{kn}] = -\frac{\text{Im}[\alpha]\omega_{kn}^{(T)} F_1(\mathbf{kn})}{2\varepsilon_0\nu_g(\mathbf{kn})}, \quad (6)$$

表示单位长度的放大因子,与介电常量的虚部、本征频率及掺杂原子的有效粒子数密度成正比,与群速度成反比。

由此可知,当本征模群速度较小或趋近于零时,增益值很高,放大效应显著增强。通常在简约布里渊区的边缘附近,群速度较小或出现零值,那么辐射场和介质体系相互作用时间比较长,从而大大增强受激辐射,提高光子晶体的增益。对于二维光子晶体,由于光子带隙的存在一定程度的抑制了带隙内频率对应的自发辐射,但当在光子晶体的介质中掺入激活杂质后由于在带隙的边缘群速度很小或群速度出现异常,将使受激辐射大大增强。

3.4 介电常量负虚部的大小对增益的影响

与实的介电常量情况相比,在光子晶体中掺入激活杂质后,介电常量的虚部不再为零,而具有一个负值,数值研究结果表明负虚部的存在将出现较强的受激辐射放大。下面对固定光子晶体长度(16 层)情形,讨论负虚部的数值大小对光子晶体的增益

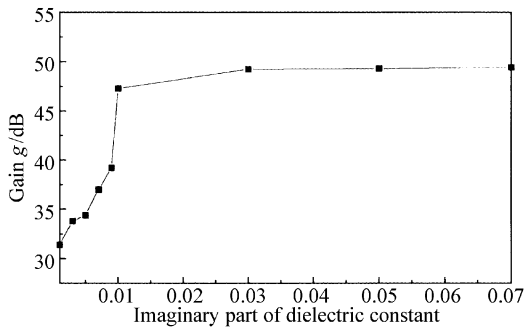


Fig. 5 Gain versus the negative imaginary part of dielectric constant

的影响,图 5 为光子晶体增益与负虚部数值大小的变化关系,此处的增益 g 定义为有源与无源时反射率与透射率之比,即

$$g = 10 \lg \frac{(R+T)_{\text{active}}}{(R+T)_{\text{passive}}} \text{ (dB)}$$

图 5 表明,当介电常量虚部数值比较小时,随着介电常量的增加,增益曲线迅速上升,增益增加速度较快;但当介电常量虚部数值增加到 0.01 时,此时增益曲线变得比较平坦,上升速度较慢。增益曲线上升较慢,原因之一是随着介电常量负虚部的增加,表征频率值也随之发生变化,表征频率处所对应的光子的群速度出现较大的变化,从而使增益的增长速度变缓。这里不容忽视的一个因素是由于计算机表示数据的精度的限制所带来的截断误差的影响。在光子晶体中存在多层界面,光在其中传播时既有透射光又有反射光,通常反射光较弱时,由于数据精度的限制而被舍去。当介质增益较低时,弱反射光对输出光的贡献很小。但当介质的增益很大时,将把很弱的光放大为很强的光,而且由于光子晶体中多层界面的作用,一点微光的光程可能很长,从而将得到极大的放大。因此,计算机的截断误差对介质有较大增益时影响很大。

结论 本文采用平面波展开法通过数值模拟研究二维有源光子晶体的能带结构和光传输特性,研究表明,当在介质中掺入激活杂质即介电常量具有负的虚部时,将出现较强的受激辐射放大,而且受激辐射放大最容易出现在靠近光子带隙边缘。主要原因是在带隙的边缘处,光子晶体的群速度较小或群速度异常。借助经典极化理论很好地解释了该现象。研究表明,在光子晶体的长度为 16 层 ($17.92 \mu\text{m}$) 时,即使两种介质的介电常量相差很小,掺入少量的激活原子,可以获得较强的受激辐射增强。随着光物

理理论的发展,当代微加工技术的不断提高,使制作该结构的光子晶体成为可能。实际上,辐射场和物质之间的相互作用是普遍存在的,但这种相互作用是可以控制的。通过控制制作光子晶体的参量,可以有效地控制辐射场与物质的相互作用,使希望的受激辐射大大增强。由于激光阈值是正比于群速度的平方,当群速度很小时,激光阈值将大大减小。同时,激光阈值的减小既可以导致受激辐射增强又可以使反射系数增加,实现零阈值运转激光器成为可能。同时,本研究为制作光放大微器件提供了一个有益的理论参考。

参 考 文 献

- 1 Yablonovitch Eli. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58** (20):2059~2062
- 2 Sajeev John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23):2486~2489
- 3 Hirayama H, Hamano T, Aoyagi Y. Novel surface emitting laser diode using photonic band-gap crystal cavity. *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **69**(5):791~793
- 4 Imada M, Noda S, Chutinan A *et al.*. Coherent two-dimensional lasing action in surface-emitting laser with triangular-lattice photonic crystal structure. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(2):316~318
- 5 Meier M, Mekis A, Dodabalapur A *et al.*. Laser action from two-dimensional distributed feedback in photonic crystals. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **74**(1):7~9
- 6 Notomi M, Suzuki H, Tamamura T. Directional lasing oscillation of two-dimensional organic photonic crystal laser at several photonic band gap. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **78**(10):1325~1327
- 7 Kafesaki M, Sigalas M M, Garcia N. The finite difference time domain method for the study of two dimensional acoustic and elastic band gap material. 2001, *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century*, Costas M. Soukoulis Ed. Boston: Kluwer Academic Publishers, 69~82
- 8 Masanori Koshiba, Yasuhide Tsuji, Masafumi Hikari. Time-domain beam propagation method and its application to photonic crystal circuits. *J. Lightwave Technol.*, 2000, **18**(1):102~110
- 9 Jun Yonekura, Mitsutaka Ikeda, Toshihiko Baba. Analysis of finite 2D photonic crystals of columns and lightwave devices using the scattering matrix method. *J. Lightwave Technol.*, 1999, **17**(8):1500~1508
- 10 Silvestre E, Russell P S J, Birks T A *et al.*. Analysis and design of an endlessly single-mode finned dielectric waveguide. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1998, **15**(12):3067~3075
- 11 Kerbage C E, Eggleton B J, Westbrook P S *et al.*. Experimental and scalar beam propagation analysis of an

- air-silica microstructure fiber. *Optics Express*, 2000, **7** (3):113~122
- 12 Chigrin D N, Lavrinenko A V, Yarotsky D A *et al.*. All-dielectric one-dimensional periodic structures for total omnidirectional reflection and partial spontaneous emission control. *J. Lightwave Technol.*, 1999, **17** (11):2018~2024
- 13 Pendry J B, Mackinnon A. Calculation of photon dispersion relation. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, **69** (13): 2772~2775
- 14 Joannopoulos J D, Meade R D, Winn J N. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. New York: Princeton University Press, 1995
- 15 Song Junfeng, Wan Haihong *et al.*. Analysis Fundamental mode in photonic crystal fiber. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2002, **22**(9):1032~1034 (in Chinese)
- 16 Gu Guochang, Li Hongqiang *et al.*. Properties of light propagation in 1-D periodic dielectric structure. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2000, **20**(6):728~734 (in Chinese)
- 17 Wang Zhi, Ren Guobin, Pei Li *et al.*. Investigating the fiber Bragg grating in the scope of photonic crystal. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2003, **23** (11): 1~4 (in Chinese)
- 18 Ho K M, Chen C T, Kurland I. Existence of a photonic gap in periodic structure. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65** (25):3152~3155

《光学手册》简介

顾问 龚祖同

主编 李景镇

陕西科学技术出版社, 16开, 1541页, 定价 100元

本手册是我国编写的第一本基础性大型光学手册。全书有 2700 多个公式, 1400 余幅插图和 400 多个数据表格, 230 万字。手册包括 25 个光学分科, 如量子光学、非线性光学、信息光学、纤维光学和变折射率光学、集成光学、统计光学、成像光学、薄膜光学、光谱学、大气光学、海洋光学、色度学、视觉光学、高速摄影和光子学、光学材料、光学元器件、光学仪器仪表、光电探测器、光学测量仪器等; 5 个附录, 2 个索引。资料丰富, 表达方式详略得当, 是“一本兼顾光学工作者和非光学科技工作者的参考书”(引自王大珩院士为本书的题词)。能使读者在较短时间内全面了解某门光学分科的主要内容, 查阅公式、数据省时省力。

手册由 20 多位光学专家编撰完成, 在编写过程中得到了龚祖同、王大珩、侯 洵、薛鸣球等著名光学专家的指导和帮助, 保证了该手册的编写质量和权威性。

如需购买, 请与光学期刊联合编辑部葛晓红联系。电话: 021-69918428, 021-69918011, 请从邮局汇款, 地址: 上海市 800-211 信箱, 光学期刊联合编辑部, 邮编: 201800

光学期刊联合编辑部

2004 年 2 月