

文章编号: 0253-2239(2006)12-1841-6

一种计算和分析二维光子晶体缺陷模式的方法*

全宇军 韩培德 陆晓东 叶志成 窦金锋 吴 黎

(中国科学院半导体研究所集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

摘要: 通过改进时域有限差分(FDTD)法,计算和分析了二维光子晶体的缺陷模式。运用一维时域有限差分算法和线性插值法在总场-散射场(TF-SF)连接边界引入入射平面波,采用完全匹配层(PML)技术对外行波进行了有效吸收。计算和分析结果表明,在光子晶体非对称方向入射的平面波能激发所有的缺陷模式,选取合适的探测点位置收集电场值,经快速傅里叶变换(FFT)能得到所有的共振峰值。另外,采用该方法研究了二维正方介质柱光子晶体缺陷模的共振频率与缺陷介质柱半径和介电常量之间的关系。结果表明通过改变缺陷的半径和介电常量大小可以在光子晶体禁带中一定的范围内调节缺陷模式的共振频率大小。

关键词: 光电子学; 光子晶体缺陷模式; 时域有限差分法; 总场-散射场

中图分类号: TN202; TN203 文献标识码: A

A Numerical Method to Calculate and Analyze of Defect Modes in Two-Dimensional Photonic Crystal

Quan Yujun Han Peide Lu Xiaodong Ye Zhicheng Dou Jinfeng Wu Li

(State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors,
the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

Abstract: A numerical method based on the modified finite-difference time-domain (FDTD) method for calculating and analyzing defect modes in a two-dimensional photonic crystal is presented. An ideal plane wave incident at different angles is realized by using the auxiliary one-dimensional FDTD method and linear interpolation at the total field-scattered field interface. Perfect matched layer technique is employed to absorb the out going wave efficiently. Numerical simulations show that all defect modes can be excited by an incident plane wave along a non-symmetric direction of the photonic crystal. The values of electric field are recorded by choosing a suitable detector position, and all resonant frequencies can be obtained by fast Fourier transform. The relationship between the resonant frequency in a two-dimensional square photonic crystal consisting of dielectric rods and the radius and dielectric constant of the rods is also investigated. The numerical results show that the value of the resonant modes of the photonic crystal can be modulated by changing the radius and dielectric constant.

Key words: optoelectronics; photonic crystal defect mode; finite-difference time-domain method; total field-scattered field

1 引 言

光子晶体及其器件是近年来发展很快的一个重要的研究课题,目前已成为光电子学科一个发展迅猛的研究领域。光子晶体是周期性排列的介质或金

属结构,光子晶体的特征是具有光子带隙(Photonic band gap, PBG),即频率落在光子带隙内的光在晶体中的传播方向受到限制^[1,2]。光子晶体一个重要性质就是在光子晶体的周期性结构中引入缺陷,破

* 国家自然科学基金(60477020)和国家自然科学基金重点基金(60537010)资助课题。

作者简介: 全宇军(1978~),男,湖北武汉人,博士研究生,主要从事光子晶体在密集波分复用器件中的应用研究。

E-mail: fatreny@red.semi.ac.cn

导师简介: 韩培德(1960~),男,天津人,中国科学院半导体研究所研究员,博士生导师,主要从事集成光电子学的研究。

E-mail: pdhan@red.semi.ac.cn

收稿日期: 2006-02-23; 收到修改稿日期: 2006-05-15

环其周期性,从而在光子晶体的能隙中出现局域化的缺陷模^[1,3,4]。有缺陷的光子晶体可以应用于滤波器^[3,5]、微腔^[3]以及波分复用器件^[6]等。

随着理论研究的深入,在缺陷模数值模拟计算中发展了不同的计算方法。例如平面波展开法^[7]和时域有限差分法^[3,8~12],平面波展开法虽然能够得到较精确的解,但对于较复杂的晶体结构计算量较大,效率较低。时域有限差分能够很直观的给出光在光子晶体中的传输行为,可以得出较精确的结果。时域有限差分法直接对麦克斯韦方程进行差分离散处理,能方便的处理复杂结构的光子晶体;通过一次时域的计算,变换到频域就可以得到所有的本征态,因此在设计光子晶体及其器件方面得到了广泛的应用。

文中在时域有限差分格式的总场-散射场连接边界条件基础上,在总场区实现了任意角度平面波入射^[13]。为了减少散射场区入射波的泄漏,采用了一维时域有限差分随时间逐步推进地在总场区引入入射平面波,并用线性插值法逼近了波源在不同方向上入射时引起的距离误差。采用完全匹配层技术对外行波进行了吸收。接着运用时域有限差分法分

析了二维光子晶体点缺陷共振频率随缺陷介质柱不同半径和不同介电常量下的变化情况。

2 计算缺陷模的二维时域有限差分法分析

二维情况下的麦克斯韦方程可分解为两个偏振极化模,即 E 极化和 H 极化,由于无缺陷的二维正方晶格圆柱光子晶体 E 极化存在完全禁带,而 H 极化不存在完全禁带^[3],所以这里只考虑 E 极化。在无源无耗无磁性的介质中 E 极化的麦克斯韦方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial y} = -\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t}, \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} = \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t}, \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \end{cases} \quad (1)$$

其中 ϵ_0, μ_0 分别为真空的介电常量和磁导率, $\epsilon_0 = 8.8542 \times 10^{-12}$ F/m, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m, ϵ_r 为相对介电常量。应用 Yee^[14] 提出的方法对上述微分方程进行时空离散化,可以得到差分方程

$$H_x \Big|_{i+0.5,j}^{n+0.5} = H_x \Big|_{i+0.5,j}^{n-0.5} + \frac{\Delta t}{\mu_0} \frac{E_z \Big|_{i,j+1}^n - E_z \Big|_{i,j}^n}{\Delta y}, \quad (2)$$

$$H_y \Big|_{i+0.5,j}^{n+0.5} = H_y \Big|_{i+0.5,j}^{n-0.5} + \frac{\Delta t}{\mu_0} \frac{E_z \Big|_{i,j+1}^n - E_z \Big|_{i,j}^n}{\Delta x}, \quad (3)$$

$$E_z \Big|_{i,j}^{n+1} = E_z \Big|_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \epsilon_r \Big|_{i,j}} \left[\frac{H_y \Big|_{i+0.5,j}^{n+0.5} - H_y \Big|_{i-0.5,j}^{n+0.5}}{\Delta x} - \frac{H_x \Big|_{i,j+0.5}^{n+0.5} - H_x \Big|_{i,j-0.5}^{n+0.5}}{\Delta y} \right], \quad (4)$$

其中上标 n 表示离散的时间步长,下标 i, j 表示在 $x-y$ 平面上的离散格点的位置, Δt 为时间间隔, $\Delta x, \Delta y$ 分别为沿着 x, y 方向相邻离散点的间隔。

如果知道第 m 步 E_z 分量的空间分布以及第 $m-0.5$ 步 H_x, H_y 分量的空间分布,由(2)式可推出第 $m+0.5$ 步 H_x 分量的分布,由(3)式可推出第 $m+0.5$ 步 H_y 分量的分布,然后根据(4)式从第 m 步 E_z 分量的分布以及第 $m+0.5$ 步 H_x, H_y 分量的分布可推出第 $m+1.5$ 步 E_z 分量的空间分布,如此循环迭代下去便可得到 H_x, H_y, E_z 分量随时间的变化关系。

为保证解的稳定性,时间步长 Δt 要求满足^[13]

$$\Delta t \leq \left(\frac{c}{n_0} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} \right)^{-1}, \quad (5)$$

这里 c 为光速, n_0 为介质的折射率。

为了引入入射平面波,并且保证在截断边界附

近只存在外向波,需要将时域有限差分区域划分为总场区和散射场区,其中总场区包含散射体,总场区边界和截断边界之间为散射场区。根据惠更斯原理,在总场边界上施加入射电场和磁场的切向分量就可以在总场区引入入射波,而在散射场区却没有入射波。但是在时域有限差分的差分离散实现时,会产生入射波泄漏到散射场区的现象。入射波为平面波时采用一维时域有限差分随时间逐步推进地在总场区引入入射平面波,可以减少散射场区入射波的泄漏^[13]。

以二维光子晶体 E 极化为例,如图 1(a)所示,设平面波入射方向为波矢 k 方向,并以入射方向为 y' 轴建立 $x'y'z'$ 坐标系。采用一维时域有限差分随时间逐步推进方式得到 y' 方向上一系列样点上入射波电场 $E_z^m(p)$, $p=0, 1, 2, \dots$, 二维总场区边界上的 $E_z^m(i, j)$ 节点位置 (x, y) 投影到平面波入射方

向 y' 轴上为

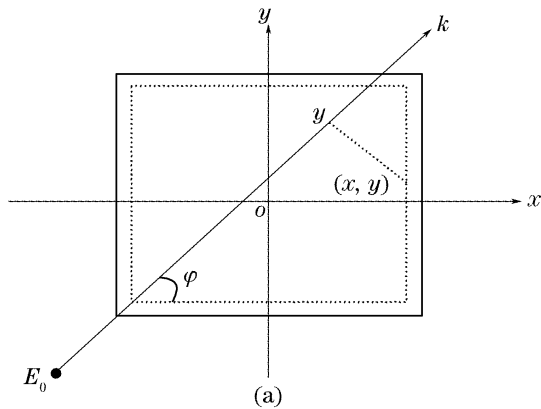
$$y' = x \cos \varphi_i + y \sin \varphi_i = i \Delta x \cos \varphi_i + j \Delta y \sin \varphi_i, \quad (6)$$

上述 y' 值可能并不对应于一维时域有限差分的样本点位置,即位于 p 和 $p+1$ 节点之间。可以采用线性插值公式得到二维总场边界上的电场值

$$E_{z,i}^m(i, j) = (1 - \omega) E_i^m(p) + \omega E_i^m(p+1), \quad (7)$$

其中 $0 < \omega < 1$, 且 $y' = (p + \omega) \Delta y$ 。以这种逐步推进的方式设置入射波,在总场区以外产生的泄漏较小。

为了模拟无穷空间,引入完全匹配层(PML)技术。在具体的时域有限差分计算过程中,设计计算区域为 5×5 的正方晶胞,晶格常量为 a ,介质柱半径为 $0.20a$,介电常量为 11.56,背景介质为空气,缺陷位于



计算区域的中心,缺陷半径为 R ,每一个晶胞包含 $1600(40 \times 40)$ 个离散格点,计算中取 2^{16} 个时间步长,每一个时间步长为 $\Delta t = 1/(c \sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2}})$ 。缺陷设计示意图如图 1(b) 所示,实线的外部为完全匹配层区域,实线与虚线之间为散射场区域,虚线内部为总场区域。采用一维时域有限差分随时间逐步推进地在总场区引入入射平面波,再根据离散的时域有限差分时间离散步长公式[(2)式~(4)式]获得电磁场的时间演化规律。为了获得谱信息,通过傅里叶变换将计算的场从时域变换到频域,而每一个傅里叶变换的谱峰位置对应于这个缺陷的共振频率。为此设置了三个探测点位置存储电场 E_z 的值,如图 1(b) 中 A, B, C 三点所示。

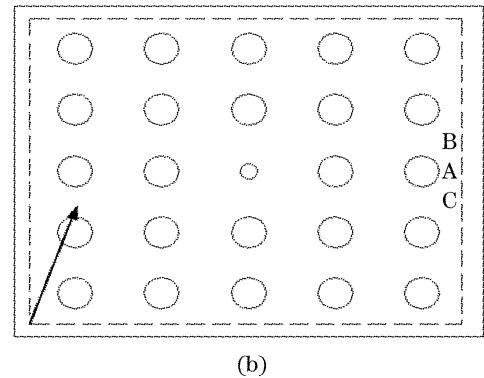


图 1 总场边界引入入射平面波示意图(a)和缺陷设计示意图(b),实线为完全匹配层边界,虚线为总场-散射场连接边界,箭头指向入射平面波方向,A、B、C为探测点位置

Fig. 1 (a) Schematic view of producing incident plane wave on the total-field border, and (b) the defect photonic crystal. Real line represents the border of perfect matched layer, and the dashed line represents the total field-scattered field interface. The plane wave is along with the direction of the arrow. A, B, and C are detectors

3 数值分析与讨论

传统的时域有限差分方法,即通过平面波传输谱方法计算缺陷模,计算区域较大。采用完全匹配层边界条件和在总场-散射场(TF-SF)连接边界引入入射平面波缩小了计算区域。图 2 是采用一维时域有限差分随时间逐步推进地在总场区引入入射平面波方法所模拟的平面波在真空中传播,入射方向为 45° ,采用的是高斯脉冲源,给出的分别是 $t = 4.17 \times 10^{-15}$ s, 5.42×10^{-15} s, 6.67×10^{-15} s, 7.51×10^{-15} s 时刻电场 E_z 分量在模拟空间的分布。从图中可以看出,总场-散射场连接边界清晰可见,入射平面波从总场区的左下角刚好以 45° 入射角进入总场区,最后平稳的通过总场区,在总场区的右上角处消失。入射场在总场区分布均匀,较少泄漏到散射场区。

如果平面波入射的方向在光子晶体对称的方向上,某些模式将不会被激发^[10],二维正方晶胞光子晶体在第一布里渊区的 $\Gamma-X$, $\Gamma-M$, $X-M$ 方向上具有对称性,分别对应入射方向的 0° , 45° , 90° 。平面波的入射方向沿着这些方向激发缺陷模,将会漏掉一些模式,如果沿着非对称的方向,例如入射角为 60° 时,将会激发所有的模式。当缺陷半径 $R = 0.20a$ 时表示无缺陷的二维光子晶体,频率从 $0.29 \times (2\pi c/a)$ 到 $0.42 \times (2\pi c/a)$ 的范围内存在一个完全禁带^[3]。当缺陷半径 $R = 0$ 时表示去掉光子晶体的中心介质柱,形成一个微腔结构,对此结构采用入射角为 60° 的平面波入射,由时域有限差分时间离散步长公式[(2)式~(4)式]获得图 1(b) 中 A, B, C 三点电场随时间的变化规律,再经快速傅里叶变换由时域变换到频域得到共振谱图,如图 3 所示,谱峰的横坐标对应相应缺陷半

径的共振频率。从图中可以看出,三个样点得到的谱峰位置是一致的,所得缺陷的共振频率 $f=0.3766 \times$

$(2\pi c/a)$,处在禁带 $0.29 \times (2\pi c/a)$ 和 $0.42 \times (2\pi c/a)$ 之间。

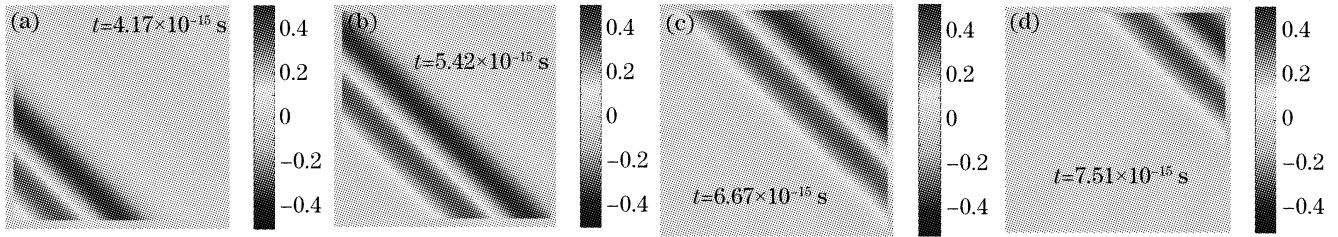


图 2 各时刻电场 E_z 分量在模拟空间的分布

Fig. 2 E_z component of the electric field in the simulation at different time

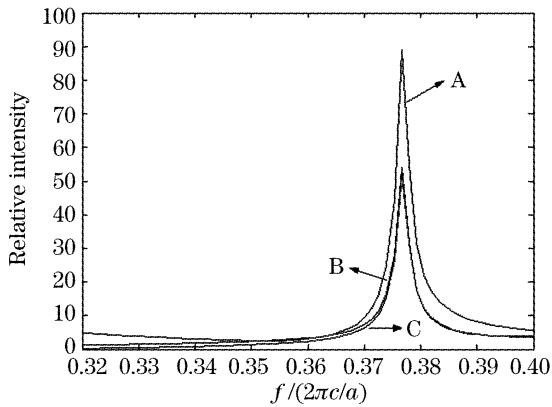


图 3 缺陷半径 $R=0$ 时的共振谱图

Fig. 3 Resonant spectra with the defect R as 0

图 4 是缺陷介质柱半径 $R=0.6a, 0.7a$ 时 A,B,C 三点收集的电场值分别经快速傅里叶变换后得到的

共振谱图,使用的平面波入射角为 60° 。从图中可以看出,当 $R=0.6a$ 时三个样点共得到四个共振峰值,分别为 $f_1 = 0.2973 \times (2\pi c/a)$, $f_2 = 0.3185 \times (2\pi c/a)$, $f_3 = 0.3343 \times (2\pi c/a)$, $f_4 = 0.3912 \times (2\pi c/a)$,和文献[3]结果吻合较好。B,C 两样点得到的共振峰值是一样的,且四个共振峰值都能探测到,而 A 样点得到的共振峰值为 f_2, f_3, f_4 ,漏掉了 f_1 。当 $R=0.7a$ 时,B,C 两样点得到的共振峰值还是一样的,分别为 $f_1 = 0.3026 \times (2\pi c/a)$, $f_2 = 0.3092 \times (2\pi c/a)$ 、 $f_3 = 0.3410 \times (2\pi c/a)$ 、 $f_4 = 0.3919 \times (2\pi c/a)$ 、 $f_5 = 0.4097 \times (2\pi c/a)$ 、 $f_6 = 0.4176 \times (2\pi c/a)$,而 A 样点得到的共振峰值却少了 f_5 。这里需要指出的是,当 $R=0.6a$ 时四个共振

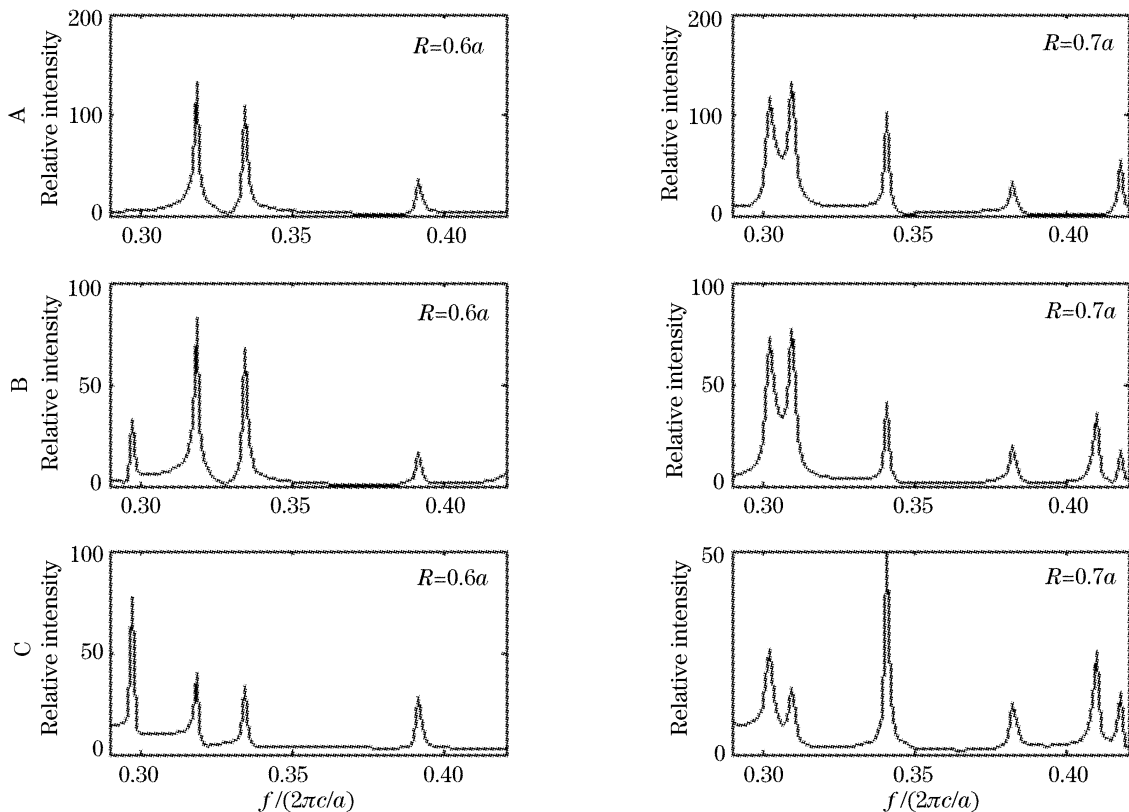


图 4 缺陷介质柱的共振谱图,入射角为 60° , $R=0.6a, 0.7a$

Fig. 4 Resonant spectra of the defect modes and the incident angle is 60° , $R=0.6a, 0.7a$

峰值对应的模式是不一样的, f_1 和 f_2 对应的是四极模(电场分布图在辐射方向上有四个节点),但是它们的节点位置方向不一样, f_3 和 f_4 分别对应单极模和六极模[3], A 样点正好处在 f_1 对应四极模的节点方向上,所以,漏掉了 f_1 。而当 $R=0.7a$ 时 A 样点也是正好处在 f_5 对应模式节点方向上,所以,仍然探测不到频率 f_5 对应的共振峰值。

图 5 是缺陷介质柱半径 $R=0, 0.05a, 0.1a, 0.15a$ 时经快速傅里叶变换后得到的共振谱图,使用的平面波入射角为 60° ,用 B 样点收集电场值。从图中明显看出,随着缺陷介质柱半径 R 从 0 慢慢增大到 $0.15a$ 时,谱峰位置逐渐向低频方向移动,缺陷的共振频率在慢慢减小。采用同样的方法,对于缺陷半径 R 在 $0.2a$ 和 $0.8a$ 之间变化时缺陷的共振频率变化情况也作了计算。

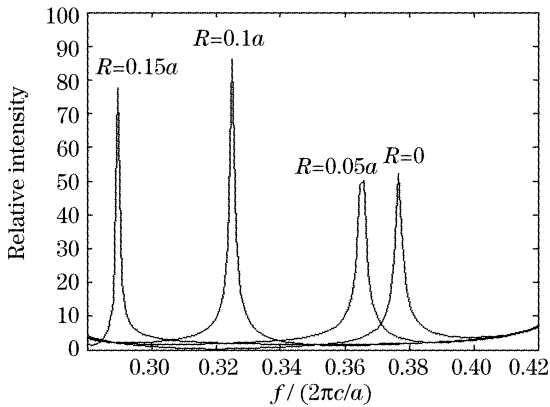


图 5 缺陷介质柱的共振谱图,入射角为 60° , $R=0, 0.05a, 0.1a, 0.15a$

Fig. 5 Resonant spectra of the defect modes and the incident angle is $60^\circ, R=0, 0.05a, 0.1a, 0.15a$

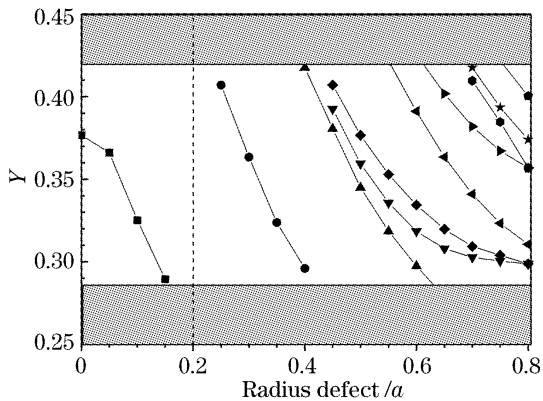


图 6 正方晶胞光子晶体的点缺陷模的共振频率随着缺陷半径变化图,阴影部分为带隙边缘

Fig. 6 Resonant frequency of the defect states of the photonic crystal consisted of square lattice as a function of R , and the shaded regions indicate the edges of the band gap

图 6 给出了缺陷的共振频率 $\Omega(\Omega=Y \times 2\pi c/a$, 其中 Y 为纵坐标值),随着缺陷介质柱半径 R 的变化情况,其中阴影部分为带隙边缘,虚线位置对应无缺陷光子晶体。计算结果和文献[3]完全一致,文献[3]中采用的是平面波展开法,进一步证明文中采用的非对称的方向引入平面波激发共振模方法完全正确。

光子晶体中缺陷的引入有多种方法,缺陷可以是任意的形状和尺寸。对于中心点缺陷的光子晶体,通过改变介质柱的半径或者介质柱的介电常量可以引入各种缺陷,当然,也可以同时改变几个介质柱的半径和介电常量来引入缺陷。下面将考察在固定缺陷中心介质柱半径 $R=0.20a$ 下,介电常量的变化对缺陷共振频率的影响。

图 7 给出了点缺陷模的共振频率随着中心缺陷介质柱介电常量变化图,阴影部分为带隙边缘,虚线位置对应无缺陷光子晶体,使用的平面波入射角为 60° ,用 B 样点收集电场值。从图中可以看出当中心介质柱的介电常量 ϵ_d 从 11.56(图中虚线位置)慢慢减小时,开始带隙中没有缺陷模式存在,当 ϵ_d 减小到 8 左右时,在带隙的下边缘开始出现缺陷模式。随着 ϵ_d 的进一步减小,缺陷模式的共振频率也逐渐增大,而且在第一禁带中没有其它的缺陷模式存在。由此可见,采用减小中心点缺陷介电常量的手段,可以达到在禁带中一定的范围内调节缺陷模式的共振频率大小的目的。当中心介质柱的介电常量 ϵ_d 从 11.56 开始慢慢增大到 16 左右时,在带隙的上边缘开始出现缺陷模式,随着 ϵ_d 的进一步增大,缺陷模式的本征频率开始逐渐减小。由此可见,采用增大中心点缺陷介电常量的手段,也可以达到在禁带中一定

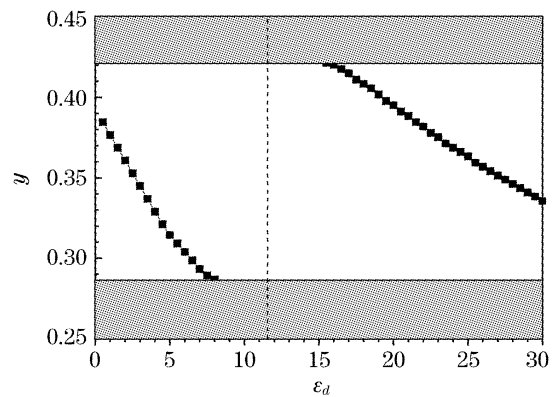


图 7 正方晶胞光子晶体的点缺陷模的共振频率随着中心缺陷介质柱介电常量 ϵ_d 变化图,阴影部分为带隙边缘

Fig. 7 Resonant frequency of the defect states of the photonic crystal consisted of square lattice as a function of ϵ_d , and the shaded regions indicate the edges of the band gap

范围内调节缺陷模式的共振频率大小的目的。

4 结 论

改进了一种计算二维光子晶体缺陷模式的方法。并且运用一维时域有限差分算法和线性插值法在总场-散射场的连接边界引入入射波,缩小了计算区域。在非对称方向入射的平面波能激发所有的缺陷模式,选取合适的探测点位置收集电场值,经快速傅里叶变换能得到所有的共振峰值。对二维正方晶胞光子晶体的点缺陷模的共振频率随着缺陷半径变化进行了分析,当半径 R 从 0 慢慢增大到 $0.15a$ 时,缺陷的共振频率在慢慢减小。对缺陷半径 R 在 $0.2a$ 和 $0.8a$ 之间变化时缺陷的共振频率变化情况也作了计算,结果与采用平面波展开法所得结果一致。采用所提出的方法,对点缺陷模的共振频率随着缺陷介质柱半径和介电常量变化的情况进行了分析,结果表明采用改变中心点缺陷介电常量的手段,可以达到在禁带中的一定范围内调节缺陷模式的共振频率大小的目的。

参 考 文 献

- 1 E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, R. D. Meade *et al.*. Donor and acceptor modes in photonic band structure [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, **67**(24): 3380~3383
- 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 (in Chinese)
安鹤男,欧阳征标,许桂雯等. 二维光子晶体结构参量对光子禁带特性的影响[J]. *光学学报*, 2004, **24**(6): 842~846
- 3 Pierre R. Villeneuve, Shanhui Fan, J. D. Joannopoulos. Microcavities in photonic crystals: Mode symmetry, tenability, and coupling efficiency[J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **54**(11): 7837

~7842

- 4 Sun Zhihong. The study of the defect modes and coupling characteristic of photonic crystals[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(7): 984~989 (in Chinese)
孙志红. 光子晶体局域缺陷模及耦合特性研究[J]. *光学学报*, 2005, **25**(7): 984~989
- 5 Shanhui Fan, Pierre R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos *et al.*. Channel drop tunneling through localized states[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**(5): 960~963
- 6 Ahmed Sharkawy, Shouyuan Shi, Dennis W. Prather. Multichannel wavelength division multiplexing with photonic crystal[J]. *Appl. Opt.*, 2001, **40**(14): 2247~2252
- 7 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
- 8 Miu Qiu, Sailing He. Numerical method for computing defect modes in two-dimensional photonic crystals with dielectric or metallic inclusions[J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **61**(19): 12871~12876
- 9 Kazuaki Sakoda, Hitomi Shiroma. Numerical method for localized defect modes in photonic lattices[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(8): 4830~4835
- 10 Shangping Guo, Sacharia Albin. Numerical techniques for excitation and analysis of defect modes in photonic crystals[J]. *Opt. Express*, 2003, **11**(9): 1080~1089
- 11 Zhu Zhihong, Ye Weimin, Yuan Xiaodong *et al.*. Study of transmission characteristics of 2-D photonic crystals by the finite-difference time-domain method[J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(5): 522~525 (in Chinese)
朱志宏,叶卫民,袁晓东等. 用时域有限差分法研究二维光子晶体传输特性[J]. *光学学报*, 2003, **23**(5): 522~525
- 12 Lin Xubin, Liu Yukui, Li Baojun. Theoretical study of silicon-based two-dimensional photonic crystal coupler[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(9): 1157~1160 (in Chinese)
林旭彬,刘玉奎,李宝军. 硅基二维光子晶体耦合器理论研究[J]. *光学学报*, 2005, **25**(9): 1157~1160
- 13 Taflove, S. C. Hagness. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* [M]. Second Edition. Boston-London: Artech House, 2000. 70~72, 133~140
- 14 Kane S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media[J]. *IEEE, Trans. Antennas Propagat.*, 1966, **14**(3): 302~307