

文章编号: 0253-2239(2006)12-1847-5

圆柱形散射子二维光子晶体的态密度与局域态密度*

车 明¹ 周云松¹ 王福合¹ 顾本源²

(¹ 首都师范大学物理系, 北京 100037)
(² 中国科学院物理研究所, 北京 100080)

摘要: 二维光子晶体只有赝带隙, 因此能否利用二维光子晶体有效控制原子自发辐射是令人感兴趣也是有实际意义的问题。其中最重要的因素是态密度和局域态密度的性质。采用平面波展开结合晶体群论的方法计算了二维正方格子光子晶体的态密度和局域态密度。其中散射子为空气圆柱, 放置在均匀的电介质背景上。结果显示两个特点: 第一, 总态密度和局域态密度在原来二维光子晶体赝带隙处虽然已经不为零, 但是取值明显低于赝带隙范围之外的值, 即存在一个准光子带隙。第二, 局域态密度在空气散射子界面处发生突变, 空气散射子区域的局域态密度相对较大, 这可由电位移矢量的连续性来理解。由于这两个特点在其他二维光子晶体中也被发现过, 它们可能是普遍存在的。

关键词: 光电子学; 光子晶体; 局域态密度; 态密度; 自发辐射

中图分类号: O488 文献标识码: A

Density of States and Local Density of States of Two-Dimensional Photonic Crystals with Cylinder Scatter in Square Lattice

Che Ming¹ Zhou Yunsong¹ Wang Fuhe¹ Gu Benyuan²

(¹ Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100037)
(² Institute of Physics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract: Two-dimensional photonic crystal possess only pseudo photonic band gaps, so it is interesting and meaningful that whether the spontaneous emission of the atoms in two-dimensional photonic crystals can be controlled effectively. The density of photonic states and local density of photonic states are most important to determine the properties of atomic spontaneous emission. the density of states and local density of states of the two-dimensional photonic crystal composed of air cylinders on square lattice are investigated by plane wave expansion method and group theory. The air cylinder as scatter is positioned on uniform dielectric background, the calculated results show that the density of states and local density of states exhibit nonzero values but evidently lower than those outside the pseudo-gap range in the frequency range of pseudo-gap, and it may be regarded as a quasi-photonic band gap. The local density of states takes much larger values in the air cylinders areas and drops down at the boundary between the air cylinders and dielectric medium background, and this phenomenon is due to the continuity of electric displacement vector. Considering that the above two characteristics are also found in other two-dimensional photonic crystal sample, it is believed they are universal in two-dimensional photonic crystal.

Key words: optoelectronics; photonic crystals; local density of states; density of states; spontaneous emission

1 引 言

光子晶体^[1] (PC) 最显著特征是具有光子带隙^[2,3] (PBG), 光子带隙除了可以禁止电磁波传播外, 还可以显著影响原子的自发辐射 (ASE)。近些

年关于光子晶体中自发辐射性质的理论^[4~6] 和实验研究^[7] 引起人们的广泛兴趣。

均匀介质中的自发辐射是和系统的态密度 (DOS) 紧密相连的, 但由于光子晶体是非均匀系统,

* 国家重点基础研究发展计划 (001CB61040) 和北京市教育委员会科技发展计划面上项目 (KM200310028108) 资助课题。

作者简介: 车 明 (1980~), 男, 北京人, 首都师范大学硕士研究生, 主要从事光子晶体的理论研究。

E-mail: cheming@mail. edu. cn

导师简介: 周云松 (1957~), 男, 北京人, 首都师范大学物理系教授, 主要从事光子晶体的理论研究。

E-mail: 263zys@263. net

收稿日期: 2006-01-04; 收到修改稿日期: 2006-03-23

不同位置上原子的自发辐射性质不同,受局域态密度(LDOS)的影响。所以,计算局域态密度成为研究光子晶体中自发辐射的关键。

二维光子晶体(2D PC)中的局域态密度研究可分为两类,一类是有限二维光子晶体,即二维光子晶体的散射子数目有限,计算这种结构中的态密度或者局域态密度可以采用格林函数的方法^[8],另一类是无限二维光子晶体,即散射子的数目无限,这种结构具有完整的布拉非(Bravais)格子。计算无限二维光子晶体的局域态密度或者态密度问题通常采用平面波展开法。特别要注意的是,尽管系统是低维的,但是自发辐射的原子相当于一个内光源,可以向各个方向发光,计算的局域态密度必须是三维(3D)的,所以计算量非常大。考虑到无限光子晶体的局域态密度不受尺寸的影响,更能反映一般光子晶体中自发辐射的性质,这类工作是更有意义的。幸好计算中可以结合晶体点群对称性^[9],降低了数值计算量。无限二维光子晶体中只有赝带隙,即光线限制在二维光子晶体平面内的绝对光子带隙。当考虑三维态密度和三维局域态密度的时候,赝带隙将会闭合。但是最近有人用平面波展开的方法计算了无限宽二维正方格子正方形散射子的局域态密度^[10],研究发现:在赝带隙的频率范围内局域态密度虽然不为0,但是明显保持较小的值。这个结果说明二维光子晶体中自发辐射虽然不会被完全禁止,但却可以被有效抑制,这为利用二维光子晶体控制自发辐射提供了理论依据。另一个特点是:在空

气柱和电介质背景的交界处局域态密度发生突变。这两个特点有很高的利用价值^[11],可以为人工“随时”控制自发辐射提供新的途径^[12],这一途径是三维光子晶体无法实现的。因此本文将散射子的形状取为圆形,考察态密度和局域态密度的特性,这两个特点如果是二维光子晶体中的普遍规律,将为二维光子晶体的广泛应用提供理论基础。

2 计算公式及模型

由麦克斯韦方程组可以得到光子晶体中磁场 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 满足如下的本征方程^[13,14]:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

利用平面波展开的方法展开 $\epsilon^{-1}(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$, 得到

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} \epsilon^{-1}(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (2) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\lambda=1}^2 \mathbf{H}_{\lambda}(\mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}] = \\ &= \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\lambda=1}^2 \mathbf{H}_{\lambda}(\mathbf{G}) \mathbf{e}_{\lambda} \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}], \quad (3) \end{aligned}$$

其中 \mathbf{G} 为倒格矢, \mathbf{k} 为光波的波矢, ω 为频率, c 为真空中的光速, N 是平面波展开数。具体计算中采用的平面波个数为 $N = 613$, 计算结果的相对误差小于 1%。

对于实际二维光子晶体, G 是二维的, K 是三维的, 其第三维分量 k_z 平行于散射子的轴向。将(2)式, (3)式代入(1)式中, 可以得到^[7]:

$$\sum_{\mathbf{G}'} \epsilon^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}| |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \begin{bmatrix} \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}'_2 & -\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}'_1 \\ -\mathbf{e}'_2 \cdot \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}'_1 \cdot \mathbf{e}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_1(\mathbf{G}') \\ H_2(\mathbf{G}') \end{bmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{bmatrix} H_1(\mathbf{G}) \\ H_2(\mathbf{G}) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

其中单位矢量 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ 满足:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 &= \frac{\mathbf{k} + \mathbf{G}}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|}, \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{e}_1}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|}, \\ \mathbf{e}_1 &= \frac{\mathbf{e} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G})}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|}, \end{aligned}$$

光子晶体中的总态密度 $N(\omega)$ 和局域态密度 $N(\omega, \mathbf{r})$ 定义为^[4,7,15]

$$N(\omega) = \sum_n \int_{\text{FBZ}} d^3 \mathbf{k} \delta(\omega - \omega_{nk}), \quad (5)$$

$$N(\omega, \mathbf{r}) = \sum_n \int_{\text{FBZ}} d^3 \mathbf{k} |\mathbf{E}_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})|^2 \delta(\omega - \omega_{nk}), \quad (6)$$

FBZ 表示的是第一布里渊区。 $N(\omega)$ 和 $N(\omega, \mathbf{r})$ 满足如下的关系:

$$N(\omega) = \int_{\text{WSC}} d^3 \mathbf{r} \epsilon(\mathbf{r}) N(\omega, \mathbf{r}), \quad (7)$$

$\mathbf{E}_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 和 $\mathbf{H}_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 满足如下的关系:

$$\mathbf{E}_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{ic}{\omega_{nk} \epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (8)$$

其中 n 表示的是本征值指标, 也是能带指标, WSC 表示的是维格纳-赛茨(Wigner-Seitz) 元胞。 $d^3 \mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$, 其中 k_x, k_y 在第一布里渊区(FBZ)内取值, 而 k_z 在 $[-k_{z0}, k_{z0}]$ 取值。当讨论在 $[0, \omega_0]$ 范围内的 $N(\omega)$ 和 $N(\omega, \mathbf{r})$ 的时候, ω_0 应该满足

$$\omega_0 = \min\{\omega(k_x, k_y, k_{z0}), k_x, k_y \in \text{FBZ}\},$$

在计算电场强度 $E_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 时结合晶体群论的方法可以大大降低运算量^[15]。

计算模型如图 1 所示, 阴影部分为介电常量为 ϵ_b 的电介质背景, 空白部分是介电常量为 ϵ_a 的圆柱形散射子。 xy 平面平行于二维光子晶体的周期平面, z 方向沿散射子轴向。外围方框为维格纳-赛茨元胞的边界, a 是晶格常量。 O, M, N 分别代表

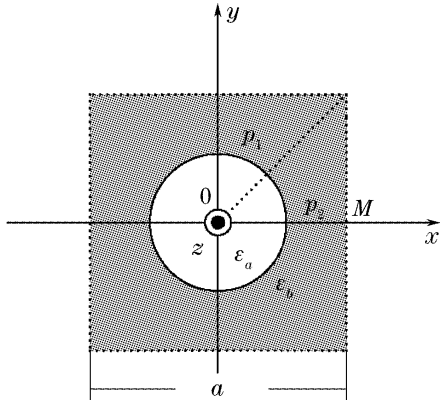


图 1 正方格子圆柱形散射二维光子晶体示意图
Fig. 1 Sketch of Wigner-Seitz cell of photonic crystal composed of cylinder scatterer in a square lattice

$(0, 0), (a/2, 0), (a/2, a/2)$ 三个点, p_1 和 p_2 分别为线段 ON, OM 与散射子边界的交点。考虑到此系统的对称性, 后面的讨论仅限制在 OMN 区域内。

3 计算结果及分析

文献[16]给出的正方格子圆柱形散射子二维光子晶体具有最大绝对光子带隙的参量为 $\epsilon_a = 1.00, \epsilon_b = 12.96$, 填充率 $f = 0.770$ 。这是在 $k_z = 0$ 的条件下得到的。本文计算也采用这组参量, 但是 k_z 逐渐增大。

图 2(a)、图 2(b)分别给出了随着 k_{z0} 的增加, 无限宽二维光子晶体 ω_0 和赝带隙上下沿的变化规律。从图 2(a)可以看出, 随着 k_{z0} 的增加, ω_0 单调增加。从图 2(b)可以看出, 随着 k_{z0} 的增加, 赝带隙的宽度逐渐减小, 当 $k_{z0} = 0.6(\pi \cdot a^{-1})$ 时候, 赝带隙完全闭合。从图 2(a)可以读出当 $k_{z0} = 4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 时, $\omega_0 = 1.24(2\pi c \cdot a^{-1})$, 以下的讨论 k_z 将在 $[-4.2, 4.2](\pi \cdot a^{-1})$ 内取值, $N(\omega)$ 和 $N(\omega, r)$ 则在 $[0, 1.24](2\pi c \cdot a^{-1})$ 范围内讨论。

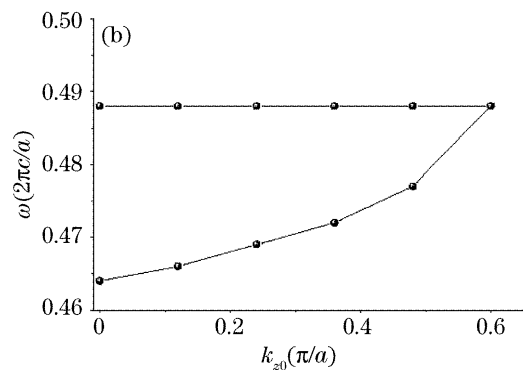
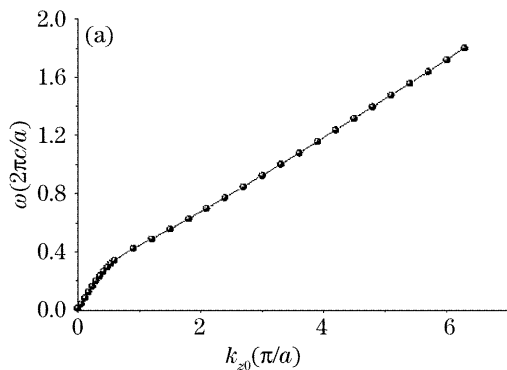


图 2 (a) ω_0 随 k_{z0} 变化图, (b) 赝带隙上下沿随 k_{z0} 变化图

Fig. 2 (a) Frequency ω_0 as the function of k_{z0} , (b) up band and down band of pseudogap as the function of k_{z0}

图 3 分别给出 $k_{z0} = 0$ 和 $k_{z0} = 4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 时总态密度 $N(\omega)$ 图, 从图 3(a) 可以看出, $k_{z0} = 0$ 的时候, 在 $[0.464, 0.488](2\pi c \cdot a^{-1})$ 内, $N(\omega) = 0$ 。当

$k_{z0} = 4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 时, 从图 3(b) 可以看出, 态密度在赝带隙处不再为零, 但取值相对很低。在低频范围, $N(\omega)$ 虽然有所增加, 但是变化并不是很明显; 高频

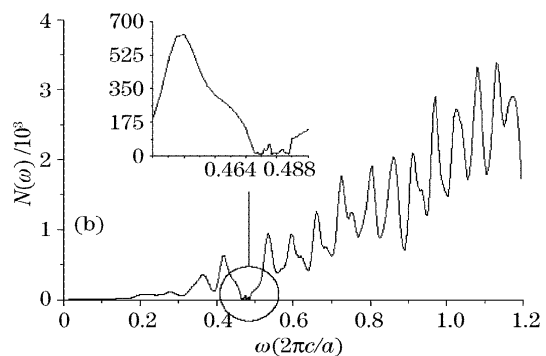
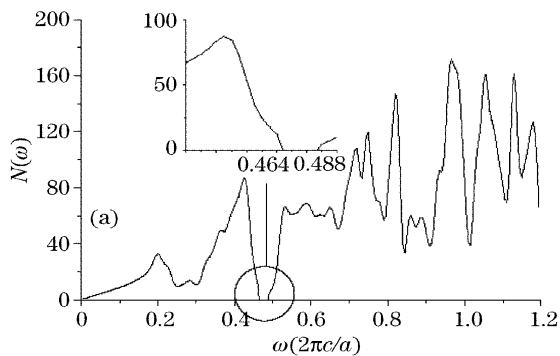


图 3 二维光子晶体总态密度变化图。(a) $k_{z0} = 0$, (b) $k_{z0} = 4.2(\pi \cdot a^{-1})$

Fig. 3 Density of states as the function of frequency ω (a) $k_{z0} = 0$, (b) $k_{z0} = 4.2(\pi \cdot a^{-1})$

范围 $N(\omega)$ 增加很多,而且较 $k_{z0}=0$ 时二维光子晶体 $N(\omega)$ 变化明显。

图 4 为 $k_{z0}=4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 二维光子晶体沿线段 ON 方向的局域态密度 $N(\omega, r)$ 三维立体图,

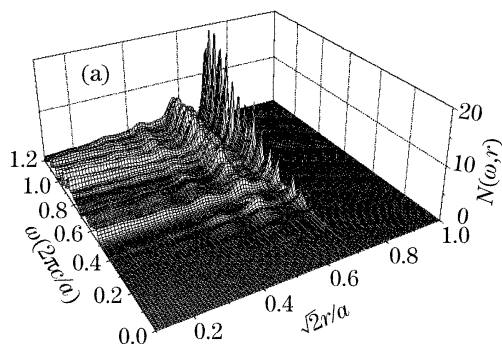


图 4(a)、图 4(b) 只是沿不同的视角,其中图 4(b) 只截取 ω 从 $(0.3 \sim 0.6)(2\pi c \cdot a^{-1})$,目的是为了观察带隙附近的局域态密度的变化规律。

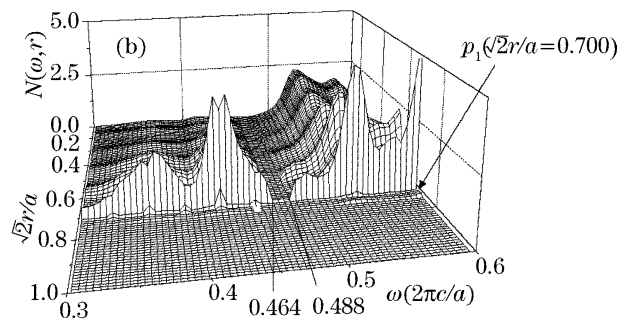


图 4 $k_{z0}=4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 时沿线段 ON 方向的局域态密度的三维立体图, (a), (b) 两图只是沿不同的视角

Fig. 4 $k_{z0}=4.2(\pi \cdot a^{-1})$ three-dimensional plot of local density of states as the function of frequency ω and reduced radial position r along the ON line, with different view angle for (a), (b)

对于图 4(a),如果固定某一频率 ω ,观察不同位置的局域态密度变化规律,可以看出,整个图像可以分成两个区域, I 区域: $0 \leq \sqrt{2}r/a \leq p_1$, II 区域: $p_1 \leq \sqrt{2}r/a \leq 1.000$,其中 $p_1=0.700$, I 区域局域态密度相对较大, II 区域局域态密度相对较小, p_1 正好为线段 ON 与散射子边界的交点,即空气散射子和均匀电介质背景的交界处。当 $\sqrt{2}r/a=p_1$,局域态密度在此处发生了突变。这是因为,电场强度 $E_n(k, r)$ 在 xy 平面界面处的分量应该保持连续,即 $\epsilon_a E_a = \epsilon_b E_b$,当观察点在 I 区域, $\epsilon = \epsilon_a = 1.00$;在 II 区域, $\epsilon = \epsilon_b = 12.96, \epsilon_a < \epsilon_b$,所以 $E_a > E_b$,由(2)式可以看出, I 区域局域态密度相对较大。而介电常量 ϵ 在两个区域的分界处 $\sqrt{2}r/a=0.700$ 发生突变,造成了电场强度的突变,进而使局域态密度在此处也会有突变。对于图 4(b),如果固定某一位置,观察

不同频率 ω 的局域态密度变化规律,可以看出,类似于态密度,在带隙范围局域态密度取值相对较低,在低频范围局域态密度较小,高频范围局域态密度较大。

图 5 为 $k_{z0}=4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 时沿线段 OM 方向的局域态密度 $N(\omega, r)$ 三维立体图,图 5(a)、图 5(b) 两图只是沿不同的视角,其中图 5(b) 只截取 ω 从 $(0.3 \sim 0.6)(2\pi c \cdot a^{-1})$ 。目的是为了观察带隙附近局域态密度的变化规律。

和沿线段 ON 方向局域态密度的结果类似,可以看出,同样是在带隙范围局域态密度取值相对较低,在低频范围局域态密度较小,高频范围局域态密度较大。

对比文献[10]中正方形散射子的计算结果,分别计算了沿 OX, OM, YM 三个方向的局域态密度, O, X, M, Y 分别代表 $(0, 0), (a/2, 0), (a/2, a/2)$,

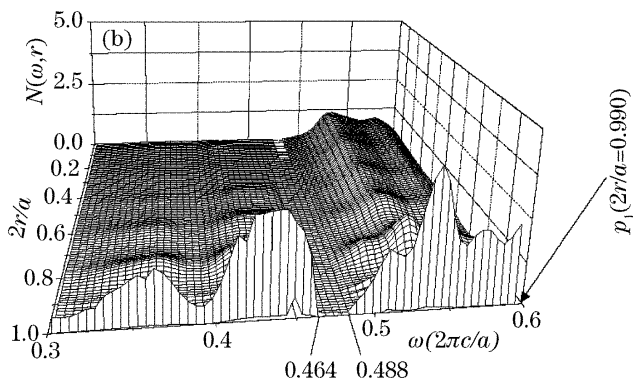
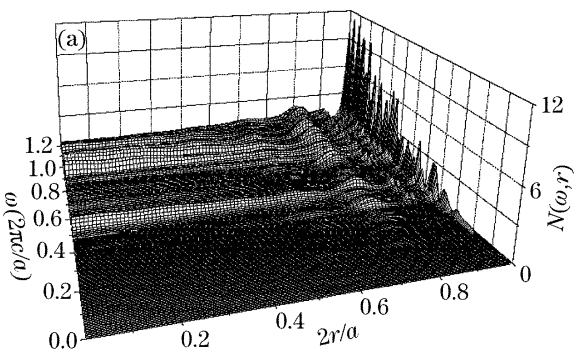


图 5 $k_{z0}=4.2(\pi \cdot a^{-1})$ 时二维光子晶体沿线段 OM 方向的局域态密度三维立体图, (a), (b) 只是沿不同的视角

Fig. 5 $k_{z0}=4.2(\pi \cdot a^{-1})$, three-dimensional plot of local density of states as the function of frequency ω and reduced radial position r along the OM line with different view angle for (a), (b)

(0, $a/2$) 四个点。结果发现: OX, OM, YM 三个方向的局域态密度分别在空气散射子和均匀电介质背景交界处会发生突变, 空气散射子区域局域态密度较大; 而且正方形散射子同样是在赭带隙处有一个明显的低值带, 考虑到上面圆柱形散射子局域态密度的计算结果, 这两个特点可能是二维光子晶体所共有的。

4 结 论

采用平面波展开的方法计算了圆柱形散射子构成的正方形格子二维光子晶体的态密度和局域态密度。研究发现: 随着 k_{z0} 的增加, 赭带隙逐渐闭合, ω_0 单调增加; 空气散射子区域局域态密度较大, 局域态密度会在电介质和空气散射子的交界处会发生突变。态密度和局域态密度在赭带隙范围处虽然闭合, 但是有一个明显的低值带, 这两个特点可能是二维光子晶体所共有的。

参 考 文 献

- 1 Eli Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 Gaoxin Qiu, Fanglei Lin, Hua Wang *et al.*. Absolute band gaps in two-dimensional graphite photonic crystal[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2003, **1**(5): 302~304
- 3 K. Busch, S. John. Liquid-crystal photonic-band-gap materials; the tunable electromagnetic vacuum[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **83**(5): 967~970
- 4 X. H. Wang, R. Z. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Decay distribution of spontaneous emission from an assembly of atoms in photonic crystals with pseudo gaps[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **88**(9): 093902~093904
- 5 Liu Jiangtao, Zhou Yunsong, Wang Fuhe *et al.*. Guide modes in magnetic photonic crystal heterostructures composed of different lattices[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(5): 665~669 (in Chinese)
- 6 Liu Zhengdong, Lin Yu. Quantum interference between virtual and real photons of the spontaneous emission in an atom embedded in photonic band gap structure[J]. *Chin. J. Lasers*, 2001, **28**(11): 991~993 (in Chinese)
- 7 Kurt Busch, S. John. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems[J]. *Phys. Rev. E*, 1998, **58**(3): 3896~3908
- 8 A. A. Asatryan, K. Busch, R. C. McPhedran *et al.*. Two-dimensional Green's function and local density of states in photonic crystals consisting of a finite number of cylinders of infinite length[J]. *Phys. Rev. E*, 2001, **63**(4): 046612~046614
- 9 X. H. Wang, B. Y. Gu, R. Z. Wang. Numerical method of Brillouin zone integrals of vectorial fields in photonic crystals[J]. *Phys. Lett. A*, 2003, **308**(2): 116~119
- 10 Y. S. Zhou, X. H. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Characteristics of local photonic state density in an infinite two-dimensional photonic crystal[J]. *Chin. Phys.*, 2005, **14**(11): 2241~2245
- 11 Y. S. Zhou, X. H. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Photonic band gap effects on spontaneous emission lifetimes of an assembly of atoms in two-dimensional photonic crystals[J]. *Phys. Rev. E*, 2005, **72**(1): 0176011~0176014
- 12 Y. S. Zhou, X. H. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Switching control of spontaneous emission by polarized atoms in two-dimensional photonic crystals[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, **96**(10): 1036011~1036014
- 13 Y. S. Zhou, B. Y. Gu, F. H. Wang. Guide modes in photonic crystal heterostructures composed of rotating non-circular air cylinders in two-dimensional lattices[J]. *J. Physics: Condensed Matter*, 2003, **14**(10): 4109~4118
- 14 Z. Y. Li, L. L. Lin, Z. Q. Zhang. Spontaneous emission from photonic crystals; full vectorial calculations[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**(19): 4341~4344
- 15 R. Z. Wang, X. H. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Local density of states in three-dimensional photonic crystals; Calculation and enhancement effects[J]. *Phys. Rev. B*, 2003, **67**(15): 1551141~1551147
- 16 R. Z. Wang, X. H. Wang, B. Y. Gu *et al.*. Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals[J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **90**(9): 4307~4313