

## 二维光子晶体绝对带隙影响因素的分析

熊刚强 王加贤 张峻诚 苏培林

(华侨大学信息科学与工程学院, 福建 泉州 362021)

**摘要** 对二维三角形空气孔结构的光子晶体 TE 模、TM 模的禁带重叠区,即绝对带隙的影响因素进行了系统的分析计算,得到其禁带随介电常数的差别还有填充比的变化规律:绝对带隙在  $r/d$  (空气孔半径/晶格周期)  $>0.4$  时出现,带隙宽度随  $r/d$  的增加而增加,到  $r/d=0.483$  时达到最大,往后开始减小。其中带隙中心频率值随  $r/d$  的增加而增加;把填充比  $r/d$  固定在 0.483,计算绝对带隙宽度随背景材料的介电常数  $\epsilon$  的变化规律发现:绝对带隙在背景材料的介电常数  $\epsilon > 8$  的时候出现,宽度随  $\epsilon$  的增加而增加。

**关键词** 光子晶体;电磁波;介电常数差;绝对带隙

**中图分类号** TN252 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20092912.3523

## The Analysis of the Influence Factors of Photonic Absolute Band Gap

Xiong Gangqiang Wang Jiaxian Zhang Juncheng Su Peilin

(College of Information Science and Engineering, Huaqiao University, Quanzhou, Fujian 362021, China)

**Abstract** Through systematic analysis and calculation of the influence factors of the absolute band gap for 2D triangle lattice photonic crystal with air pore, we found the relation between complete band gap and the two main influence factors, fill ratio, background dielectric constant. The results of calculation show that the complete band gap shows up when the fill ratio  $f > 0.4$ , increasing fill ratio leads to an increase of band gap width, the largest band gap can be obtained where  $f = 0.483$ . Further, the larger fill ratio is, the higher the central frequency of the gap is. When  $f = 0.483$ , the complete band gap shows up when the background dielectric constant  $\epsilon > 8$ . The width of band gap increases with the increase of  $\epsilon$ .

**Key words** photonic crystal; electromagnetic waves; D-value of dielectric constant; complete band gap

### 1 引言

光子晶体<sup>[1,2]</sup>是在光学尺度上具有周期性介电常数的人工设计和制造的功能材料。与半导体晶格对电子波函数的调制相似,周期性的介电材料能够调制具有相应波长的电磁波;当电磁波在周期性的介电材料中传播时,由于周期性带来的布拉格散射而受到调制,它能够在一定的范围内产生光子禁带<sup>[3]</sup>。如果光子的能量落入光子禁带频率范围内,则不能在介质中传播。这使得人们可以通过设计和制造光子晶体及其器件,以达到控制光子运动的目的。

在光子晶体的设计过程中,人们一般希望得到大的 TE 模与 TM 模带隙重叠的绝对光子带隙,影响光子晶体带隙的因素主要有 3 个:1)两种材料的介电常数的差别;2)介质填充比;3)晶格结构。本文通过对二维三角形光子晶体进行系统的模拟计算,分析了光子晶体的绝对带隙宽度以及带隙中心频率与构成光子晶体的两种材料的介电常数,还有介质填充比之间的关系。

### 2 计算方法

采用时域有限差分(FDTD)<sup>[4,5]</sup>法,此方法从最

收稿日期: 2008-06-17; 收到修改稿日期: 2008-10-20

基金项目: 福建省自然科学基金(A0610023)资助项目

作者简介: 熊刚强(1979—),男,硕士,主要从事固体激光技术与器件以及光子晶体等方面的研究。

E-mail: xlxgq@hqu.edu.cn

导师简介: 王加贤(1955—),男,教授,博士,主要从事固体激光技术与器件等方面的研究。E-mail: wangjx@hqu.edu.cn

基本的麦克斯韦方程出发,通过对电场  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  分量在空间和时间上采取交替抽样的离散方式,每一个  $\mathbf{E}$  (或  $\mathbf{H}$ ) 场分量周围有四个  $\mathbf{H}$  (或  $\mathbf{E}$ ) 场分量环绕 (图 1),应用这种离散方式将含时间变量的麦克斯韦旋度方程转化为一组差分方程,并在时间轴上逐步推进的求解空间电磁场。过程如下:

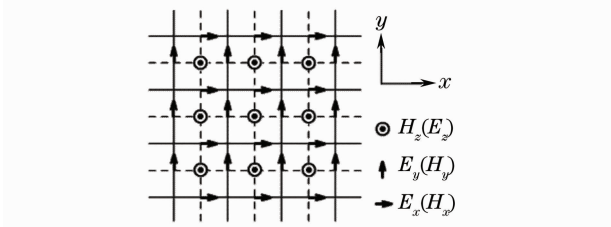


图 1 用于二维 TE(TM)模的差分网格

Fig. 1 2D-FDTD cells

麦克斯韦方程为

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{J}_m, \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $\mathbf{E}$  为电场强度,  $\mathbf{D}$  为电通量密度,  $\mathbf{H}$  为磁场强度,  $\mathbf{B}$  为磁通量密度,  $\mathbf{J}$  为电流密度,  $\mathbf{J}_m$  为磁流密度。对于各向同性线性介质

$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ ,  $\mathbf{J}_m = \sigma_m \mathbf{H}$  式中  $\epsilon$  为介电系数,  $\mu$  为磁导系数,  $\sigma$  为电导率,  $\sigma_m$  为导磁率,真空中  $\sigma = 0, \sigma_m = 0$ 。在二维直角坐标系中(1)式可写为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial H_z}{\partial y} &= \epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x \\ \frac{\partial H_z}{\partial x} &= -\epsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} - \sigma E_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} - \sigma_m H_z \end{aligned} \right\} \text{TE 波, (2)}$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial y} &= -\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} - \sigma_m H_x \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} &= \mu \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma_m H_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} &= \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} - \sigma E_z \end{aligned} \right\} \text{TM 波. (3)}$$

下面对(2)式,(3)式进行 FDTD 差分离散,令  $f(x, y, z, t)$  代表  $\mathbf{E}$  或  $\mathbf{H}$  在直角坐标系中的某一分量,在时间和空间域中的离散取下符号表示

$$\begin{aligned} f(x, y, z, t) &= \\ f(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) &= f^n(i, j, k), \end{aligned} \quad (4)$$

对  $f(x, y, z, t)$  关于时间和空间的一阶偏导数取中心差分近似,即

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=i\Delta x} &\approx \frac{f^n(i + \frac{1}{2}, j, k) - f^n(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \\ \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y=j\Delta y} &\approx \frac{f^n(i, j + \frac{1}{2}, k) - f^n(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \\ \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=k\Delta z} &\approx \frac{f^n(i, j, k + \frac{1}{2}) - f^n(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \\ \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial t} \Big|_{t=n\Delta t} &\approx \frac{f^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - f^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k)}{\Delta t} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

将(2)式,(3)式中的偏导数用(5)式表示就可得到二维情况下的 FDTD 电磁场的时间推进计算公式。计算中为了保证离散后的差分方程组的解是收敛和稳定的,时间和空间离散间隔还要满足 Courant 稳定条件<sup>[6]</sup>,对二维情况下 Courant 稳定条件为

$$c\Delta t \leq \frac{1}{\sqrt{1/(\Delta x)^2 + 1/(\Delta y)^2}}. \quad (6)$$

计算过程中边界采用 Berenger 完全匹配层 (PML),空气孔阵列为  $11 \times 11$ ,通过对电磁场的 TE 模和 TM 模分别求解并计算出其各自的带隙,然后

再进一步算出 TE 模和 TM 模带隙的重叠区(绝对带隙)的宽度。本文主要从以下两个方面对二维三

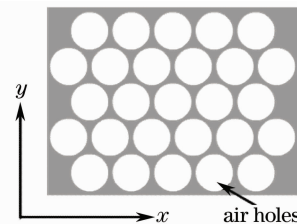


图 2 二维三角形空气孔结构的光子晶体模型  
Fig. 2 Model of 2D triangle lattice photonic crystal with air holes

角形空气孔结构的光子晶体进行了系统的研究: 1) 固定背景材料的介电常数, 改变空气填充率, 分析绝对带隙宽度及绝对带隙的中心频率随空气填充率变化的规律。2) 固定空气填充率, 改变背景材料的介电常数, 分析绝对带隙宽度及绝对带隙的中心频率随背景材料的介电常数变化的规律。

### 3 数值分析

#### 3.1 空气填充率对绝对带隙的影响

首先固定背景材料的介电常数为  $\epsilon_b = 13$ , 改变空气孔的半径与晶格常数的比值  $f = r/d$ , 计算结果如图 3 所示。

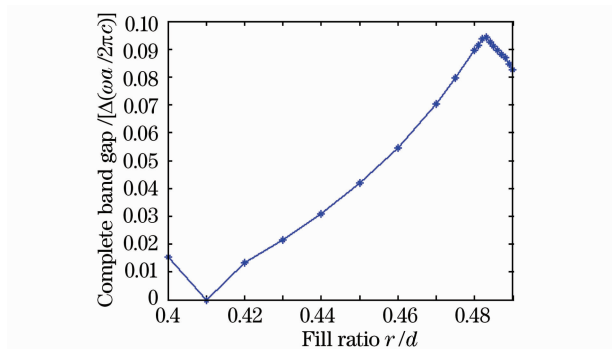


图 3 绝对带隙宽度与空气填充率的关系

Fig. 3 The relation between the width of complete band gap and air fill ratio

图 3 中在  $f = 0.41$  是有一凹陷, 其形成原因是: 在  $f = 0.40$  时, TE 模的第二带隙与 TM 模的第二带隙重合形成绝对禁带, 在  $f = 0.41$  时 TE 模和 TM 模的第二带隙又错开, 从而绝对禁带消失。在  $f > 0.42$  之后都是 TE 模的第一带隙和 TM 模的第一带隙重合而形成的绝对禁带。由图 3 可以看出绝对带隙在  $f > 0.4$  时开始出现, 并随  $f$  的增加而增加, 在  $f \approx 0.483$  时获得最宽的绝对带隙。其带隙的

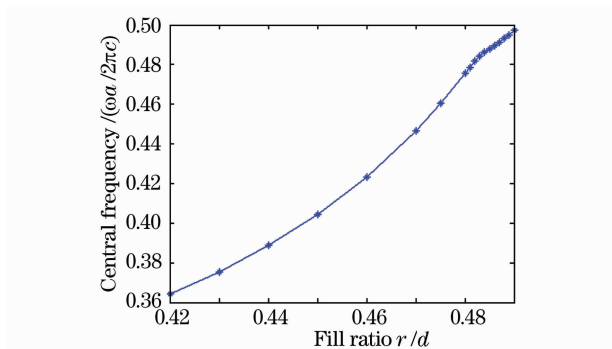


图 4 绝对带隙中心频率与空气填充率的关系

Fig. 4 The relation between the central frequency of complete band gap and air fill ratio

中心频率随  $f$  的增加而增大, 如图 4 所示。

#### 3.2 背景介电常数对绝对带隙的影响

固定空气孔的半径与晶格常数的比值  $f = 0.483$ , 改变背景材料的介电常数, 计算绝对带隙宽度、绝对带隙的中心频率与背景材料介电常数的关系如图 5, 图 6 所示。

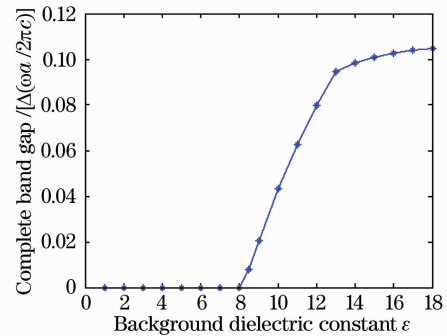


图 5 绝对带隙宽度与背景材料的介电常数的关系

Fig. 5 The relation between the width of complete band gap and the background dielectric constant

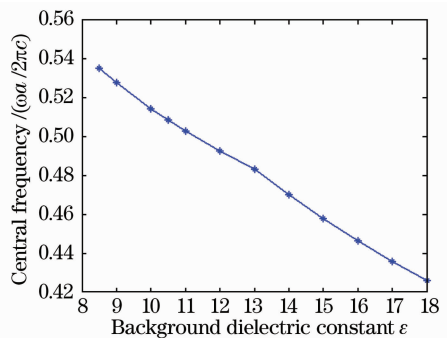


图 6 绝对带隙的中心频率与背景材料介电常数的关系

Fig. 6 The relation between the central frequency of complete band gap and the background dielectric constant

从图 5 中可以看出, 当背景材料的介电常数  $\epsilon_b > 8$  时绝对带隙开始出现, 在  $8 < \epsilon_b < 13$  内绝对带隙的宽度与  $\epsilon_b$  近似成正比, 且增加很快, 当  $\epsilon_b > 13$  后增加变缓。其带隙的中心频率随  $\epsilon_b$  的增加而减小(图 6)。

### 4 结 论

对二维三角形空气孔结构的光子晶体绝对带隙的影响因素进行了系统的分析计算, 从以上的计算结果我们可以得到以下结论: 1) 绝对带隙宽度在一定的范围内随  $f$  的增加而增加。其中带隙中心频率值也随  $f$  的增加而增加; 2) 绝对带隙宽度随背景材料的介电常数的增加而增加, 在  $8 < \epsilon < 13$  之间绝对带隙增加的很快。  $\epsilon > 13$  后增加变缓。其中带隙的中心频率值

随  $\epsilon$  的增加而减小。因此可以通过调整空气孔的半径与晶格常数的比值以及背景材料的介电常数来针对某一特定的频率设计最佳的光子晶体材料。

### 参 考 文 献

- 1 E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, K. M. Leung. Photonic band structure: the face-centered cubic case employing nonspherical atoms [J]. *Phy. Rev. Lett.*, 1991, **61**: 2295~2298
- 3 Wen Xisen. *Photonic/Phonon Crystal Theory and Technology* [M]. Beijing: Science Press, 2006  
温熙森. 光子/声子晶体理论与技术[M]. 北京: 科学出版社, 2006
- 4 K. Bierwirth, N. Schulz, F. Amdt. Finite-difference analysis of rectangular dielectric waveguide structures [J]. *IEEE Trans. Microwave Theory Technol.*, 1986, **34**(11): 1104~1114
- 5 K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. *IEEE Trans. Antennas Propagation*, 1966, **17**(5): 302~307
- 6 Ge Debiao, Yan Yubo. *Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetic Waves*, second edition [M]. Xi'an: Xidian University Press, 2006  
葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法, 第二版[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2006
- 7 Hong Wei, Sun Lianyan, Yin Lei *et al.*. *Domain Decomposition Method for Electromagnetic Field Boundary Value Problem* [M]. Beijing: Science Press, 2005  
洪伟, 孙连友, 尹雷等. 电磁场边值问题的区域分解算法 [M]. 北京: 科学出版社, 2005