

文章编号: 0253-2239(2009)08-2313-04

# 一维微波光子晶体带隙的仿真和实验研究

王 骥 林青勇\* 顾春晖 龚俊锋

(西安交通大学理学院, 陕西 西安 710049)

**摘要** 利用 MPB 软件和 MEEP 软件对一维光子晶体带隙结构及透射谱进行了仿真与实验研究。讨论了不同介质填充比和介质相对介电常数对光子晶体带隙结构的影响。仿真结果表明, 当高相对介电常数介质的填充比增大时, 或高相对介电常数增大时, 光子晶体带隙的中心频率缓慢减小, 带隙宽度呈先增大后减小的趋势, 存在一极大值点。采用高相对介电常数介质薄板[钛酸钡( $\text{BaTiO}_3$ )粉末混合聚二甲基硅氧烷(PDMS)胶体]和泡沫薄板周期性排列组成一维光子晶体。实验上制得了高低介质相对介电常数分别为 4.5 和 1, 填充比为 1:1, 晶格常数为 10 mm, 周期数为 5 的光子晶体, 并测量出该光子晶体的微波透射谱。测量结果表明, 在 8~12 GHz 的微波频段, 该光子晶体的带隙中心频率为 9.3 GHz, 带隙宽度为 500 MHz。

**关键词** 材料; 光子晶体; 平面波法; 时域有限差分法; 光子带隙

中图分类号 O43; TN202

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS20092908.2313

## Simulation of the Photonic Band Gap of One-Dimensional Photonic Crystal and Experimental Study in Microwave Region

Wang Ji Lin Qingyong Gu Chunhui Gong Junfeng

(School of Science, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Shaanxi 710049, China)

**Abstract** The photonic band gap (PBG) and transmission of one-dimensional photonic crystal are studied with two simulation software; MPB and MEEP in microwave region. The influence of the different ratio and the relative dielectric constant of the medium on PBG is studied. The simulation result shows that as the ratio of the high relative dielectric medium increases or the high relative dielectric constant itself increases, the center frequency of the PBG will decrease slowly and the width of the PBG will firstly increase and then decrease, which forms a maxima. A kind of material of photonic crystal is fabricated with dielectric sheets which consists of a  $\text{BaTiO}_3$  powder and PDMS and foam sheets arraying in cyclical order. A one-dimensional photonic crystal is made, of which the high relative dielectric constant is 4.5, the low relative dielectric constant is 1, the ratio of materials is 1:1, the lattice constant is 10 mm and the cycle is 5. The transmission of that one-dimensional photonic crystal is measured experimentally. Result shows that is the region from 8~12 GHz, the center frequency of the PBG is 9.3 GHz and the width of the PBG is 500 MHz.

**Key words** materials; photonic crystal; plane wave method; finite difference time domain; band gap

## 1 引 言

光子晶体<sup>[1,2]</sup>是一种介电常数周期性变化的材料,它分为一维、二维和三维光子晶体。光子晶体的一个重要特征就是具有光子带隙。频率处于光子带

隙内的光不能在光子晶体内传播。光子晶体的带隙结构由光子晶体的对称性、组成材料的介电常数和晶格常数决定。通过控制光子晶体的带隙以及带隙中的缺陷态可以方便地禁止或允许一定频率的电磁

收稿日期: 2008-09-03; 收到修改稿日期: 2008-12-01

基金项目: 国家大学生创新性实验(610766)资助项目。

作者简介: 王 骥(1986-),男,学士,主要从事光学方面的研究。E-mail: azure0932@stu.xjtu.edu.cn

导师简介: 肖国宏(1967-),男,博士,副教授,主要从事光学和光通信方面的研究。E-mail: xiaogh@mail.xjtu.edu.cn

\* 通信联系人。E-mail: linlqy@stu.xjtu.edu.cn

波通过光子晶体。光子晶体还具有光子局域、负折射率效应<sup>[3]</sup>等特性。这些特性决定了光子晶体有着广阔的应用领域。目前人们已经成功地把光子晶体应用到光子晶体激光器、光子晶体光纤、微波天线和微波谐振腔等方面<sup>[4~8]</sup>。同时,光子晶体在光子器件的制作和热光伏技术<sup>[9]</sup>以及波分复用系统光源、光谱分析仪、信道监测等方面也有着广泛的应用前景<sup>[10]</sup>。

本文利用 MIT Photonic-Bands (MPB) 软件和 MIT Electromagnetic Equation Propagation (MEEP) 软件对光子晶体的带隙结构及透射谱与其结构参数之间的关系进行了仿真研究。该关系的深入探讨对于新型微波天线、滤波器、谐振器和分、合路器等微波组件的制备具有重要的实用价值<sup>[11]</sup>。

## 2 理论分析

### 2.1 一维光子晶体模型

选用钛酸钡( $\text{BaTiO}_3$ )粉末和聚二甲基硅氧烷胶体(PDMS)制备成光子晶体中的高介电常数材料。 $\text{BaTiO}_3$ 具有高介电常数和低介电损耗的特点<sup>[12]</sup>。PDMS作为有机硅材料中的一种,耐辐照、耐高温,并且具有良好的电器绝缘性、耐化学品腐蚀等性能<sup>[13,14]</sup>。通过溶胶-凝胶技术制备成有机-无机杂化材料,该材料集有机高聚物和无机材料两者的优点于一身<sup>[15]</sup>。

图1为一维光子晶体示意图。其中A为高相对介电常数介质,相对介电常数为 $\epsilon_a$ ,厚度为 $a$ 。B为低相对介电常数介质,相对介电常数为 $\epsilon_b$ ,厚度为 $b$ 。晶格常数 $\Lambda = a + b$ 。

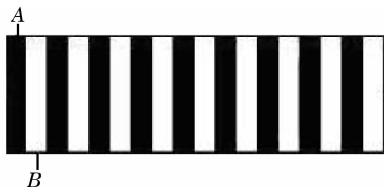


图1 一维光子晶体示意图

Fig. 1 Illustration of one-dimensional photonic crystal

### 2.2 理论计算方法

平面波展开法<sup>[16]</sup>是光子晶体计算中使用较早的一种方法。它是根据布洛赫定理把介电函数和电场或磁场用平面波展开,将麦克斯韦方程组组成一个本征方程,求解本征方程即可得到光子能带。这种方法的优点是思路清晰,易于编程。

时域有限差分法的主要思想是直接把含时间变量的麦克斯韦方程在 Yee 氏网格空间中转化为差

分方程。在这种差分格式中,每个网格点上的电场或磁场分量仅与它相邻的磁场或电场分量及上一时间步长时该点的场值有关。在每一时间步长计算网格空间各点的电场和磁场分量,随着时间步的推进,即能直接模拟电磁波的传播及其与物体的相互作用过程。这种方法的优点是简单直观,容易编程,且可减少计算量,节省计算机内存。

## 3 计算机仿真与分析

MPB 是利用平面波法计算周期性介电结构中麦克斯韦方程组的频率本征值的软件,主要用于光子晶体能带结构的研究。该程序可对任意的布洛赫波矢进行全矢量、三维计算;使用频域计算方法,可同时得到本征频率和本征态;本文应用 MPB 软件分析了一维光子晶体中两种材料对应不同厚度比和不同介电常数情况下,光子晶体带隙宽度和带隙中心频率的变化趋势。

MEEP 则是利用时域有限差分法计算光子晶体带隙结构特点的软件,能模拟仿真一维、二维和三维结构。采用完全匹配层(PML)边界条件,布洛赫周期边界条件。本文应用 MEEP 软件分析和输出光子晶体对电磁场的透射谱。

### 3.1 高低介电常数介质填充比对光子带隙的影响

取高相对介电常数 $\epsilon_a = 7$ ,低相对介电常数 $\epsilon_b = 1$ 。晶格常数 $\Lambda = 10 \text{ mm}$ 。图2给出了第一带隙中心频率和带宽随高相对介电常数介质厚度 $a$ 的变化曲线。从图2(a)中可以看出,随着高相对介电常数介质厚度的增加,第一带隙中心频率逐渐减小,且呈平稳减小的趋势。从图2(b)中可以看出,随着高相对介电常数介质厚度的增加,第一带隙宽度呈先增大后减小的趋势,带隙宽度存在极大值。

### 3.2 介质相对介电常数对光子带隙的影响

取 $a = 5 \text{ mm}$ , $b = 5 \text{ mm}$ 。保持 $\epsilon_b = 1$ 不变。图3给出第一带隙中心频率和带宽随高相对介电常数 $\epsilon_a$ 的变化曲线。从图3(a)可以看出,随着高相对介电常数的增加,第一带隙中心频率逐渐减小,且减小幅度越来越小。从图3(b)可以看出,随着高相对介电常数的增加,第一带隙宽度呈先迅速增大再逐渐减小的趋势,带隙宽度存在极大值。

### 3.3 模拟结果分析

实验用微波源的输出频率范围为 $8 \sim 12 \text{ GHz}$ 。因此,所制一维光子晶体的带隙中心频率需在此输出频率范围之内,并且带隙宽度不宜过大。从图2(a)、(b)可以看出,当高介电常数介质的厚度为

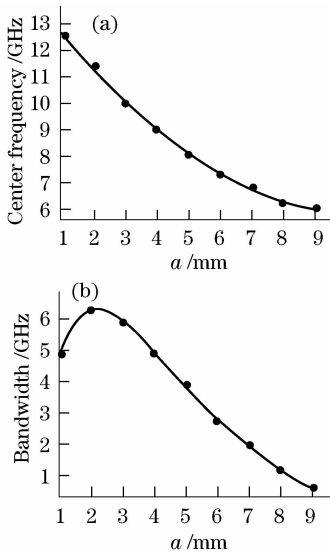


图 2 第一带隙中心频率(a)和带隙宽度(b)与高相对介电常数介质厚度  $a$  关系曲线

Fig. 2 Relation of center frequency (a), bandwidth (b) with thickness  $a$

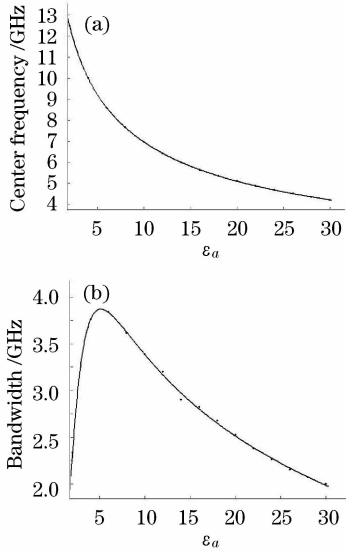


图 3 中心频率(a)和带隙宽度(b)与高相对介电常数关系曲线

Fig. 3 Relation of center frequency (a) bandwidth (b) with high relative dielectric constant

5 mm左右时,带隙中心频率约为 8.7 GHz,带隙宽度约为 3 GHz,符合实验室微波源的条件要求。因此,采用厚度均为 5 mm 的高相对介电常数介质和低相对介电常数介质组成一维光子晶体。从图 3(a)、(b)可以看出,当高相对介电常数为 5 左右时,光子带隙的中心频率在 10 GHz 附近,带隙宽度约为 3.5 GHz。因此,可选用相对介电常数为 5 左右的电介质作为组成一维光子晶体的高相对介电常数介质。

### 4 实验测量及结果分析

实验制备材料时,将 BaTiO<sub>3</sub> 粉末与 PDMS 按不同质量比混合,经脱气、固化后制成高介电常数介质。室温下测得所制电介质材料的相对介电常数与 BaTiO<sub>3</sub> 粉末与 PDMS 的质量比之间的关系如图 4 所示。

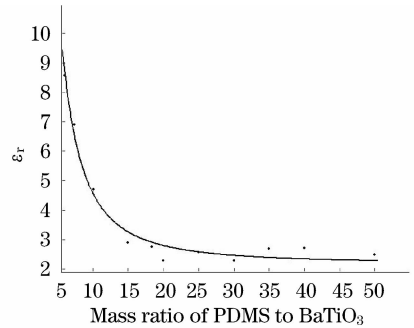


图 4 相对介电常数  $\epsilon_r$  与 PDMS/BaTiO<sub>3</sub> 质量比关系曲线

Fig. 4 Relation of relative dielectric constant with mass ratio of PDMS to BaTiO<sub>3</sub>

因此,实验选取将钛酸钡粉末与 PDMS 按质量比 1 : 12 混合,合成相对介电常数为 4.5、厚度为 5 mm 的高介电常数介质薄膜。将该介质薄膜与厚度为 5 mm 的泡沫薄板交替排列,组成周期数为 10 的光子晶体模型。图 5 为利用微波分光仪测得所制光子晶体的透射谱<sup>[20,21]</sup>。结果表明,透射谱出现了明显的带隙,且带隙的中心频率为 9.3 GHz,带宽为 500 MHz。这样,就从实验上成功制备了带隙中心波长位于微波段的光子晶体。

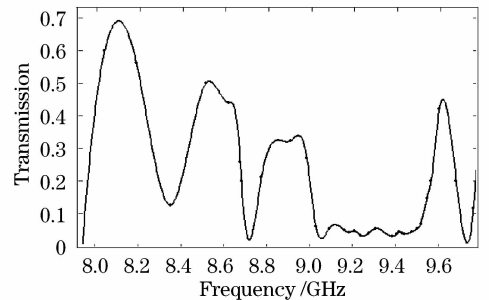


图 5 光子晶体透射谱

Fig. 5 Transmission spectrum of photonic crystals

利用计算机模拟得出所制光子晶体的理想带隙结构为:带隙中心频率为 9.48 GHz,带隙宽度为 3.87 GHz。比较可知,实验组成的光子晶体的带隙中心频率与理论值基本符合。但带隙宽度与理论计算存在较大差别。原因可能是制备的光子晶体在平行于界面的二维尺度上不是严格的无穷大,这就使得光子晶体中传播的电磁场需满足这二维上的边界

条件,因而导致了这种差异。另外,实验上合成的 BaTiO<sub>3</sub> 混合 PDMS 材料不够均匀,与泡沫板拼接时界面不够紧贴,透射谱的测量装置存在一定的误差等也可能是导致这一差别的原因,这都有待于实验的进一步改进。

## 5 结 论

本文通过 MEEP 和 MPB 软件对一维光子晶体的带隙进行了研究。模拟结果表明,随着高相对介电常数介质厚度和相对介电常数的增加,第一带隙中心频率逐渐减小,带宽呈先增大再减小的趋势,且存在极大值。

实验选取 BaTiO<sub>3</sub> 和 PDMS 制备光子晶体,并测量了其在微波频段的透射谱,发现在 9.0~9.5 GHz 之间存在带隙,带隙中心频率为 9.3 GHz。从而实现了带隙中心波长位于微波段的光子晶体的构造,为光子晶体材料的选择提供了新的途径。实验测得的光子晶体带隙中心频率与计算机仿真结果一致,但是带宽尚存在较大差异。这可能是由于材料制备工艺尚不成熟,使制备的光子晶体与理想模型存在差异造成的,这也为以后的实验提出了新的问题。

## 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 S. John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2486~2489
  - 3 M. Notomi. Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystal; refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap [J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(16): 10696~10698
  - 4 Szymanska M. H., Hughes A. F., Pike E. R.. Effect of a photonic band gap on the threshold and output power of solid-state lasers and light-emitting diodes [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **83**(1): 69~72
  - 5 T. M. Monro, D. J. Richardson. Holey optical fibres: fundamental properties and device applications [J]. *C. R. Physique*, 2003, **4**(1): 175~186
  - 6 C. Serier, C. Cheype, R. Chantalat *et al.*. 1-D photonic bandgap resonator antenna [J]. *Microwave Opt. Technol. Lett.*, 2001, **29**(5): 312~314
  - 7 Meng Qingsheng, Ouyang Zhengbiao, Wang Zhongchun *et al.*. Mode types and their related properties of one-dimensional photonic crystal resonant cavity[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(7): 1290~1294
- 孟庆生,欧阳征标,王仲淳等. 一维光子晶体谐振腔的模式类型及其性质[J]. *光学学报*, 2007, **27**(7): 1290~1294
- 8 Wang Hong, Ouyang Zhengbiao, Han Yanling *et al.*. Optical properties and mode tuning of defect modes in one-dimensional

- photonic crystal micro-cavity containing dispersive medium[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(5): 940~944
- 王宏,欧阳征标,韩艳玲等. 含色散介质的一维光子晶体微腔的光学特性和模式调节[J]. *光学学报*, 2007, **27**(5): 940~944
- 9 Liu Guangping, Xuan Yimin, Han Yuge. Applications of one-dimensional photonic crystal in thermophotovoltaic [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(1): 115~119
  - 刘广平,宣益民,韩玉阁. 一维光子晶体在热光伏技术中的应用[J]. *光子学报*, 2008, **37**(1): 115~119
  - 10 Zhang Wenfu, Fang Qiang, Cheng Yihua *et al.*. Narrow band interleaver based on one-dimensional photonic crystal with positive-negative index alternant multilayer [J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(9): 1696~1699
  - 张文富,方强,程益华等. 正负折射率交替一维光子晶体窄带梳状滤波器[J]. *光学学报*, 2007, **27**(9): 1696~1699
  - 11 Wen Xisen. *Theory and Technology of Photonic/phononic Crystals*[M]. Beijing: Science Press, 2006, 160~161
  - 温熙森. *光子/声子晶体理论与技术*[M]. 北京: 科学出版社, 2006, 160~161
  - 12 Xiao Changjiang, Jin Changqing, Wang Xiaohui. Crystal structure and ferroelectricity of nanocrystalline barium titanate ceramics fabricated by the high pressure sintering[J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2008, **36**(6): 748~750
  - 肖长江,靳常青,王晓慧. 高压烧结纳米钛酸钡陶瓷的结构和铁电性[J]. *硅酸盐学报*, 2008, **36**(6): 748~750
  - 13 Coons J. E., McKay M. D., Hamada M. S.. A bayesian analysis of the compression set and stress-strain behavior in a thermally aged silicone foam [J]. *Polym Degrad Stab*, 2006, **91**(8): 1824~1836
  - 14 Xiong Liangping, Xu Yunshu. Structural analysis of polydimethylsilane irradiated by electron beam [J]. *Atomic Energy Science and Technology*, 2008, **42**(5): 404~407
  - 熊亮萍,许云书. 电子束辐照聚二甲基硅烷的结构分析[J]. *原子能科学技术*, 2008, **42**(5): 404~407
  - 15 Zhou Weixin, Zeng Liming. Research progress in application of poly(dimethylsiloxane) [J]. *New Chemical Materials*, 2007, **35**(1): 16~20
  - 周卫新,曾黎明. 聚二甲基硅氧烷的应用研究进展[J]. *化工新型材料*, 2007, **35**(1): 16~20
  - 16 Zeng Hui, Yang Yapei. Analysis of difference between the FDTD method and the plane wave expansion method [J]. *Journal of UEST of China*, 2005, **34**(6): 901~904
  - 曾辉,杨亚培. FDTD法与平面波展开法在光子禁带计算中的差异分析[J]. *电子科技大学学报*, 2005, **34**(6): 901~904
  - 17 K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. *IEEE Tans. Antenn. Propag.*, 1996, **14**(3): 302~307
  - 18 Allen Taflove, Susan C. Hagness. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* [M]. Norwood: Artech House, 2000
  - 19 Ge Debiao, Yan Yubo. *Finite Difference Time Domain in Electromagnetic Field*[M]. Xi'an: Xidian University Press, 2005
  - 葛德彪,闫玉波. *电磁场时域有限差分法*[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005
  - 20 Zhang Baofeng, Liao Tisheng. A study of determining the microwave absorptivity of a medium[J]. *College Physics*, 2000, **19**(8): 33~35
  - 张宝峰,廖惕生. 测量介质微波吸收的实验研究[J]. *大学物理*, 2000, **19**(8): 33~35
  - 21 Zhang Baofeng, Liao Tisheng, Sun Fenglan. A study of determining the microwave reflectivity [J]. *Physics Experimentation*, 2000, **20**(7): 3~4
  - 张宝峰,廖惕生,孙凤兰. 微波反射特性测量实验的研究[J]. *物理实验*, 2000, **20**(7): 3~4