

一种类分形结构光子晶体的能带*

李 岩^{1,2,3} 郑瑞生³ 田进寿^{1,2,3} 冯玉春³ 牛憨笨^{1,3}

(1 中国科学院西安光学精密机械研究所, 陕西西安 710068)

(2 中国科学院研究生院, 北京 100864)

(3 深圳大学光电子学研究所广东省光电子器件与系统重点实验室, 广东深圳 518060)

摘 要 用时域有限差分方法计算了一种类分形结构光子晶体的能带. 数值计算结果表明, 这种结构的光子晶体在介质柱、空气背景的情况下具有不完全带隙. 而且, 其能带结构随着级数的增大在整体地趋向于低频的同时, 能带结构也趋于稳定.

关键词 光子晶体; 带隙; 分形

中图分类号 O482.3; O471.5

文献标识码 A

0 引言

光子晶体作为一种周期结构的人造晶体, 自 1987 年被 E. Yablonovitch 和 S. John 提出后不久, 这一研究课题就引起了科学工作者的广泛兴趣. 由于二维光子晶体在光纤覆盖层^[1], 激光二极管反射镜^[2]等方面存在着广泛的应用, 因此, 二维光子晶体的理论及实验研究得到了科学工作者的高度重视. 一般地讲, 我们希望能制造出在光频范围内具有大绝对带隙的光子晶体. 对于二维光子晶体, 在长期的研究工作中, 这一领域的工作主要集中在传统的晶体结构及准晶结构方面, 并取得了丰硕的研究成果^[3-7]. 最近刘征等人^[8]讨论了一种 Sierpinski 垫片结构的光子晶体的能带. 其数值研究表明, 这种准分形结构的光子晶体存在绝对带隙. 李梁等人^[9]同样利用数值方法讨论了一种具有绝对带隙的分形结构光子晶体的能带. 而付云起等人^[10]则利用实验方法讨论了 Sierpinski 垫片结构微带线的频率特性. 他们的工作为二维光子晶体的研究开启了一条新的思路. 由于光子晶体的几何结构对光子晶体的能带有很大的影响, 而这种具有分形特征的光子晶体与传统的晶体和准晶相比有着不同的特点, 这使得具有分形特征的光子晶体的能带具有双频及多频带隙的特点, 这是传统光子晶体能带所不具备的特点; 而且, 其带隙的谐振频率可以随着分形结构单元的调整而得到改变^[10]. 这种能带的特点为具有分形特征的光子晶体在通信等领域的应用提供了可能. 同时, 随着近年来半导体制造技术的发展, 利用半导体的相关制备技术, 如等离子体刻蚀,

化学刻蚀等方法, 制造光频范围内具有分形特征的二维光子晶体也已具有可能性. 因此, 对于这种具有分形特征光子晶体的深入研究, 无论是在理论上还是在应用上都有着重要的意义. 由于理论研究表明, 对于二维光子晶体, 正方形点阵也是一种可能存在带隙的光子晶体结构^[11,12]. 因此, 我们利用数值方法讨论了一种具有类分形结构的光子晶体的能带.

1 模型

图 1 为这种类分形结构光子晶体的构造过程, 它是通过对 Sierpinski 地毯结构进行改造后得到的, 其中, 黑、白两种颜色代表两种不同的材料. 其构造过程为: 将由介质 1 组成的正方形区域 9 等分, 去掉中间一个小正方形的外接圆区域的介质, 并加入介质 2. 由此形成第一级类分形结构的光子晶体, 见图 1 中的 $n=1$ 的部分; 对剩余的 8 个小正方形再各 9 等分, 各自去掉中间一个正方形的外接圆区域的介质, 并加入介质 2. 由此形成第二级类分形结构的光子晶体, 如图 1 的 $n=2$ 所示. 重复上述过程, 直到无穷. 这里要注意, 当 $n \geq 3$ 时, 上述构造过程所形成的外接圆有重合的部分. 由于图 1 中的方形区域构成了光子晶体的一个单胞, 同时, 由图 1 单胞的构造过程知道, 这种结构不是一种严格的 Sierpinski 规则分形, 因此, 我们称这种光子晶体为一种类分形结构的光子晶体.

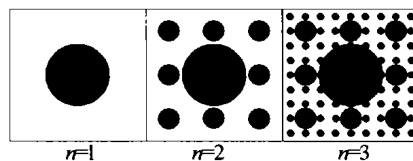


图 1 准分形结构光子晶体模型

Fig. 1 Quasi-fractal photonic crystal model

2 理论

我们采用了 A. J. Ward 和 J. B. Pendry^[13] 提出的

*深圳市科技计划“光子晶体在蓝绿光发光二极管中的应用”项目(批准号:2002-k1-65)资助

Tel:0755-26538556 Email:g_yjsh@szu.edu.cn

收稿日期:2003-09-16

一种一般坐标系下的时域有限差分方法来计算光子晶体的能带. 该方法利用差分思想将 Maxwell 方程组化为时域上的一组差分方程. 与 Yee 算法^[14]所采用的中心差商不同的是, 该方法采用的是向前及向后差分. 在网格划分方面, 与 Yee 算法所采用的将电场及磁场各分量在空间上分别相差半个网格步长的方法不同, 该方法的电场量及磁场量在空间上是重合的. 对于给定的波矢量, 当我们取定计算区域内的若干网格点后, 在计算过程中, 可以得到这些点处电、磁场量的时间序列, 由于这些点的电、磁场量的时间序列的功率谱的峰值频率即为计算区域的本征频率, 由此可求出计算空间内电磁场的频率随波矢的变化关系, 即, 光子晶体的能带. 在光子晶体的能带计算中, 并不需要计算所有空间网格点的电、磁场量的功率谱. 在本文的计算中, 我们在计算空间随机选取了 100 个点的电磁场量用于功率谱的计算.

在光子晶体能带结构的计算中, 为了使初始时刻的场分布能满足 Bloch 理论, 我们采用如下的伪周期平面波的初始场分布^[15]

对于横磁波为

$$H(r) = \sum_G h_0(k+G)e^{i(k+G)r}, h_0(k+G) = v_h \times (k+G), E(r) = 0 \quad (1)$$

对于横电波为

$$E(r) = \sum_G e_0(k+G)e^{i(k+G)r}, e_0(k+G) = v_e \times (k+G), H(r) = 0 \quad (2)$$

式中, $H(r), E(r)$ 分别为 r 处的磁场强度及电场强度矢量, h_0, e_0 分别为磁场及电场平面波的振幅矢量, k, G 分别为二维光子晶体周期面内的波矢量及倒格子矢量; v_h, v_e 为二维光子晶体周期面内的矢量. $H(r), E(r), h_0, e_0$ 矢量的方向均垂直于二维光子晶体的周期面.

由于光子晶体是一个周期结构, 且上述的伪周期平面波的初始场分布在任意时刻满足 Bloch 理论, 因此, 在光子晶体的能带计算中, 可以只选择光子晶体的一个单胞作为计算区域, 而在计算区域的边界上采用如下的周期边界条件^[16]

$$E(r+R) = e^{ik \cdot R} E(r) \quad H(r+R) = e^{ik \cdot R} H(r) \quad (3)$$

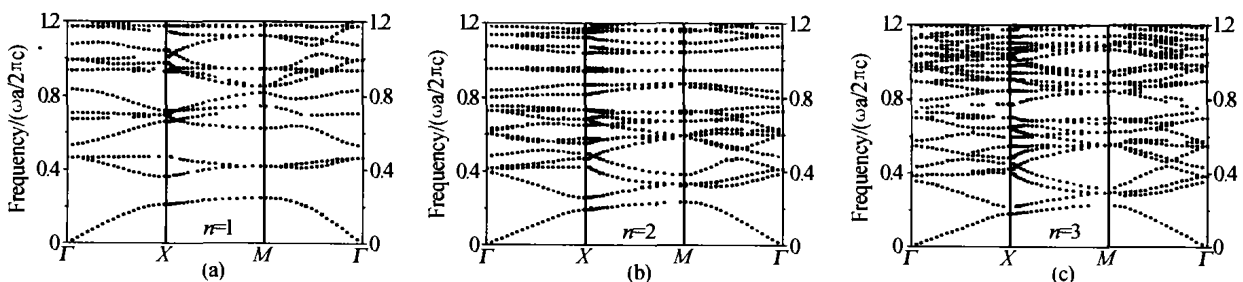


图2 介质柱空气背景下级数 $n=1, 2, 3$ 时, 横磁波的能带
Fig. 2 The photonic band of the TM wave as $n=1, 2, 3$, when dielectric pillar distribute in air

式中 R 为二维光子晶体点阵的正格子矢量.

我们采用如下方法给出这种类分形结构二维光子晶体的网格划分, 由于计算区域的单胞是边长为 a 的正方形, 因此可将其每个边 N 等分. 由这种类分形结构的构造过程, 可按下述方法给出 N 值: $N = 3^n \cdot m$. 其中 n 为级数, m 为 $\frac{1}{3^n}$ 份边长上所取的网格数.

在本文的计算中, 令 $a = 999 \text{ nm}$. 各级类分形结构中网格的划分及网格间距等参数如表 1 所示.

表 1 网格划分及相关参数

级数	m 值	网格数 N	网格间距/nm	占空比	频率轴间隔
1	20	60	16.65	0.175	0.00183
2	10	90	11.10	0.330	0.00275
3	5	135	7.40	0.468	0.00742

光子晶体所用介质的相对介电常数分别为 $\epsilon_1 = 13$, $\epsilon_2 = 1$.

在本文的计算中, 频率以 $\frac{\omega a}{2\pi c}$ 为单位. 其中 ω 为电磁波的圆频率, c 为真空中的光速, 时间间隔以秒为单位. 在计算中我们使用了 2^{16} 个时间步, 因此光子晶体能带的频率轴上的间隔如表 1 所示. 同时, 对于简约布里渊区中沿 $\Gamma \rightarrow X, \Gamma \rightarrow M, X \rightarrow M$ 方向的波矢, 我们将其各分成 20 个等分点进行计算.

3 计算结果及讨论

当图 1 中的黑色部分的相对介电常数为 $\epsilon_1 = 13$, 而白色部分的相对介电常数为 $\epsilon_2 = 1$, 即为一种介质柱分布在空气背景中的情况时, 计算结果表明, 只有横电波的情况存在带隙, 而横磁波的情况不存在带隙, 因此这种类分形结构的光子晶体不存在绝对带隙.

横电波的计算结果如图 2 所示, 其中 (a)、(b)、(c) 分别为级数 $n = 1, 2, 3$ 的计算结果. 对于级数 $n = 1$ 的类分形结构的光子晶体, 由图 2(a) 可以看到, 它存在两个带隙, 其带隙的中心频率分别为 0.30670、0.50354, 带宽分别为 0.11536、0.06226. 对于级数 $n = 2$ 的类分形结构的光子晶体, 由图 2(b) 可以看到, 它存在有四个带隙, 其带隙的中心频

率分别为 0.24720、0.77866、0.90912、0.99839, 带宽分别为 0.02197、0.04669、0.06592、0.07965. 对于级数 $n=3$ 的类分形结构的光子晶体, 由图 2(c) 可以看到, 在所考虑的频率范围内, 图 2(a)、(b) 中所存在的带隙在 $n=3$ 的情况下均已关闭. 对于级数 $n=4$ 情况的计算表明, 当 $n=4$ 时, 横电波也不存在带隙.

当图 1 中黑色部分的相对介电常数为 $\epsilon_2 = 1$, 而白色部分的相对介电常数为 $\epsilon_1 = 13$, 即为一种空气孔分布在介质背景中的情况时, 计算结果表明, 无论是横电波的情况还是横磁波的情况均不存在带隙.

由图 2 可以观察到这样一种现象: 图 2 的能带结构中存在着某些相似的特点. 由图 2(a)、(b)、(c) 中第一能带与第二能带所构成的图形可以观察到这一特点. 在这三幅图中, 随着级数 n 的增大, 虽然能带的频率在降低, 但三幅图中由第一、第二能带所构成的图形仍具有一定的相似性. 同样, 由图 2(a)、(b)、(c) 中的第二、第三能带所构成的图形也可观察到这一特点. 能带结构的这种现象同样存在于横电波的情况以及图 1 中黑色部分为空气孔结构时的横磁波和横电波的情况. 这种能带结构具有某些相似性的特点应是这种光子晶体的几何结构所具有的分形特征的反映. 另外, 由图 2 也可以看到这样一种趋势, 随着级数 n 的增大, 这种光子晶体的能带结构整体地趋向于低频部分, 而且能带结构随着级数 n 的增大而趋于稳定. 这一点由图 2(a) 及图 2(b) 的第一条带隙的变化可以清楚地看到: 随着级数 n 的增大, $n=1$ 中的第一条带隙的中心频率被压低, 带宽也在变窄, 至 $n=3$ 时, 第一条带隙被完全关闭. 能带结构的这种现象同样存在于横电波的情况. 这一结果, 即, 随着级数的增大, 光子晶体的能带趋于低频部分, 且当级数 $n=3$ 时, 带隙被完全关闭, 与文献[8]所得到的结论是一致的; 而对于上述空气孔的情况, 则情况正相反, 当级数 n 增大时, 光子晶体的能带结构在整体地趋向于高频部分. 对于这种现象可以以图 2 的情况为例做如下的解释: 若令这种光子晶体的平均介电常数为 $\bar{\epsilon} = \eta\epsilon_1 + (1 - \eta)\epsilon_2$, 其中, η 为表 1 中的占空比, 则由均匀介质的色散关系 $\bar{\omega}^2 = \frac{k^2}{\mu\bar{\epsilon}}$ 可知, 随着级数 n 的增大, 导致了 $\bar{\epsilon}$ 的增大, 从而使得平均频率 $\bar{\omega}$ 逐渐降低. 但是随着级数 n 的增大, 由于 η 的增量在不断减小, 因此, 这种光子晶体的带结构又会随级数 n 的增大而逐渐趋于稳定. 对于上述空气孔的情况可做类似的解释.

由图 1 可以看到, 随着级数 n 的增大, 以介质柱空气背景为例, 介质柱的占空比在逐渐提高的同时,

介质 $\epsilon_1 = 13$ 的分布也趋于均匀. 反映在图 2 的能带中, 即表现为带隙随级数的增大而逐渐减小, 直到最后被关闭.

4 结论

通过对 Sierpinski 地毯的改造, 给出了一种类分形结构的光子晶体. 由数值计算我们发现, 这种具有分形特征的光子晶体的能带具有一定的相似性. 另外, 对于介质柱分布在空气背景中的情况, 这种类分形结构光子晶体的能带随级数的增大整体地趋向于低频部分, 同时, 能带结构也趋于稳定; 而对于空气孔分布在介质背景中的情况, 其能带结构的变化则正相反——当级数增大时, 这种类分形结构光子晶体的能带在整体地趋向于高频部分.

由于多数柱状正方形点阵光子晶体不存在绝对带隙, 因此, 若要在我们所讨论的这种具有正方形点阵特点的准分形结构光子晶体中获得绝对带隙, 需使用其他的一些办法, 比如应用不同的介质等.

参考文献

- 1 Knight J C, Birks T A, St J Russell P, et al. All-silica single-mode optical fiber with photonic crystal cladding. *Optics Letters*, 1996, **21**(19): 1547 ~ 1549
- 2 Bullock D L, Shih C C, Margulies R S. Photonic band structure investigation of two-dimensional Bragg reflector mirrors for semiconductor laser mode control. *J Opt Soc Am B*, 1993, **10**(2): 399 ~ 403
- 3 Tada T, Poborchii V V, Kanayama T. Fabrication of photonic crystals consisting of Si nanopillars by plasma etching using self-formed masks. *Jpn J Appl Phys*, 1999, **38**(12) B Pt. 1: 7253 ~ 7256
- 4 Kushwaha M S, Djafari R B. Band-gap engineering in two-dimensional periodic photonic crystals. *J Appl Phys*, 2000, **88**(5): 2877 ~ 2884
- 5 Zoorob M E, Charlton M D B, Parker G J, et al. Complete photonic bandgaps in 12-fold symmetric quasicrystals. *Nature*, 2000, **404**(6779): 740 ~ 743
- 6 冯尚申, 沈林放, 何赛灵. 一种具有大带隙的各向异性二维光子晶体结构. *光子学报*, 2003, **32**(2): 235 ~ 238
Feng S S, Shen L F, He S L. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(2): 235 ~ 238
- 7 陈慰宗, 申影, 宋应谦, 等. 一维光子晶体的带隙分析. *光子学报*, 2001, **30**(9): 1077 ~ 1080
Chen W Z, Shen Y, Song Y L, et al. *Acta Photonica Sinica*, 2001, **30**(9): 1077 ~ 1080
- 8 Liu Z, Xu J J, Lin Z F. Photonic band gaps in two-dimensional crystals with fractal structure. *Chin Phys Lett*, 2003, **20**(4): 516 ~ 518
- 9 Li L, Xie Y C, Wang Y Q, et al. Absolute gap of two-dimensional fractal photonic structure. *Chin Phys Lett*, 2003,

- 20(10):1767~1769
- 10 付云起,张国华,袁乃昌. 具有分形特征的 PBG 微带线. 电子学报,2002,30(6):913~915
Fu Y Q, Zhang G H, Yuan N C. A PBG microstrip line with fractal characteristics. *Acta Electronica Sinica*,2002,30(6):913~915
- 11 Padjen R, Gerard J M, Marzin J Y. Analysis of the filling pattern dependence of the photonic bandgap for two-dimensional systems. *Journal of Modern Optics*, 1994, 41(2):295~310
- 12 Meade R D, Rappe A M, Brommer K D, *et al.* Nature of the photonic band gap: some insights from a field analysis. *J Opt Soc Am B*, 1993,10(2):328~332
- 13 Ward A J, Pendry J B. A program for calculating photonic band structures, Green's functions and transmission/reflection coefficients using a non-orthogonal FDTD method. *Computer Physics Communications*, 2000,128(3):590~621
- 14 Yee K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans Antennas and Propagation*, 1966, 14: 302~307
- 15 Chan C T, Yu Q L, Ho K M. Order-N spectral method for electromagnetic waves. *Phys Rev B*, 1995, 51(23):16635~16642
- 16 Qiu M. A nonorthogonal finite-difference time-domain method for computing the band structure of a two-dimensional photonic crystal with dielectric and metallic inclusions. *J Appl Phys*, 2000,87(12):8268~8275

Photonic Band of Quasi-fractal Photonic Crystal Structure

Li Yan^{1,2,3}, Zheng Ruisheng³, Tian Jinshou^{1,2,3}, Feng Yuchun³, Niu Hanben^{1,3}

1 Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics of CAS, Xi'an, Shaanxi 710068

2 Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100864

3 Key Laboratory of Optoelectronic Device and System Institute of Optoelectronics, Shenzhen University, Guangdong 518060

Received date:2003-09-16

Abstract A kind of quasi-fractal photonic crystal is given in this paper. The structure of the photonic crystal is made from the Sierpinski carpet. The photonic band is calculated by a finite-difference time-domain method. The result shows that the photonic band declines to low frequency and trends toward stabilization as the fractal series increasing in the case of the medium pillar in the air, but it is opposite for the air pillar in medium. There are photonic band gaps for transverse magnetic wave in the photonic crystal, in which the pillar is medium.

Keywords Photonic crystal; Photonic band gap; Fractal



Li Yan was born in October 1967. He got his B. S. (Physics) and M. S. (Physics) degrees from Northwest University in 1989 and in 1996, respectively. Now he is a Ph. D. candidate in the Joint Laboratory of Xi'an Institute of Optics & Precision Mechanics of CAS and Institute of Optoelectronics, Shenzhen University. His current research interest is the photonic crystal.