

文章编号:1004-4213(2010)09-1562-5

改变光子晶体表面结构对负折射透射光强的影响*

毛宇,童元伟[†]

(上海理工大学 理学院,上海 200093)

摘要:以砷化镓圆形介质柱在空气中构成二维六边形排列结构的光子晶体为例,利用时域有限差分法模拟研究了光子晶体表面结构改变对负折射透射光强的影响.模拟结果表明:针对同一结构光子晶体,在可产生负折射现象的入射光频率范围,改变光子晶体表面两侧圆形介质柱的半径和顺向侧移两侧表面最外层圆形介质柱都会均对负折射透射光强产生影响.

关键词:负折射;光子晶体;表面结构;透射光强

中图分类号:O482.3

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20103909.1562

0 引言

前苏联物理学家 Veselago 于 1968 年率先提出了负折射率、左手材料等概念^[1],即磁导率 μ 和介电常量 ϵ 均为负值时,磁场、电场和波矢量之间构成与右手材料相反的左手关系.1996 年英国科学家 J. B. Pendy^[2] 等采用周期性排列的金属开口谐振环 (Split Ring Resonator, SRR) 制作出能够在微波频段实现负折射的人工材料,并提出了利用负折射材料实现完美成像的概念^[3].此后,以负折射介质为代表的新型材料引起了广泛关注^[4-7].研究发现由介质材料构成的光子晶体在一定条件下也能实现类似的负折射效应^[8].与左手介质不同,光子晶体负折射是基于布拉格散射效应,不需要负折射材料就能实现负折射效应.此外,光子晶体由周期性排列的电介质材料构成,相比由金属材料构成的左手材料具有更小的损耗.因此,研究光子晶体的负折射效应是一个崭新的方向.

本文利用平面波展开法 (Plane Wave Expansion Method, PWM) 和时域有限差分方法 (Finite Difference Time Domain, FDTD),模拟研究了以 GaAs 圆形介质柱在空气中周期性排列组成的二维六边形光子晶体,通过改变光子晶体两侧外表面结构分析透射光强变化.这一现象的研究为进一步研究光子晶体抗反射膜、光子晶体器件的优化提供了理论依据.

1 平面波展开法和时域有限差分法理论分析

1.1 平面波展开法

平面波展开法是将电磁场在倒格矢空间中以平面波叠加的形式展开,与薛定谔方程一样将麦克斯韦方程组化为一个本征方程.求解本征方程就可以得到光子能带.

如光子晶体处于无源空间中,并且组成光子晶体的介质为各项同性介质,根据麦克斯韦方程可以推出表征光子晶体的本征方程^[9-10]为

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

式中 $\epsilon(\mathbf{r})$ 为光子晶体介电常量, $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 为磁场强度矢量,在光子晶体中均是空间位移矢量 \mathbf{r} 的周期性函数, ω 为震荡频率, c 为真空中光速.

本文研究对象是由周期性排列 GaAs 介质柱构成的二维光子晶体,在电磁场为 TM 模式时,空气孔构成的光子晶体负折射现象较为明显,而在 TE 模式,介质柱构成的光子晶体负折射现象较明显^[11],本文采用 TE 模式的电磁波激励源.因此在 TE 模式下,式(1)可以简化为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) + \frac{\omega^2}{c^2} H_z = 0 \quad (2)$$

磁场强度 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 呈周期性分布,所以满足 Bloch 定理,因此光子晶体的 Bravais 点阵的平移矢量 \mathbf{r} 和点阵的倒格矢表示为

$$\mathbf{r}(l, m) = l\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (3)$$

$$\mathbf{G}(l, m) = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 \quad (4)$$

式中 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 和 \mathbf{b}_1 、 \mathbf{b}_2 分别表示点阵基矢和倒格子基矢, h_1 、 h_2 是任意整数.点阵基矢和倒格子基矢之间的关系如下式

* 国家重点基础研究发展计划 (2005CB724304) 和国家自然科学基金 (60777045) 资助

[†] Tel: 021-65666454 Email: tyw0991@hotmail.com

收稿日期: 2010-01-25

修回日期: 2010-04-14

$$a_i + b_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (5)$$

用波矢为倒格矢 G 的平面波将 $\epsilon^{-1}(r)$ 、 $H_z(r, \omega)$ 展开成级数形式, 再进行适当的空间积分和代换, 可以得到式(6)的矩阵形式

$$\sum (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \hat{\mathbf{k}}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') A(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} A(\mathbf{k}, \mathbf{G}') \quad (6)$$

式中 $A(\mathbf{k}, \mathbf{G})$ 是磁场强度 z 方向分量 $H_z(r, \omega)$ 的傅里叶系数; $\hat{\mathbf{k}}(\mathbf{G})$ 是周期分布的 $\epsilon^{-1}(r)$ 傅里叶系数. 通过解这个波矢在不同波矢 k 情况下的本征值就可以得到 TE 模式下二维光子晶体的禁带结构图.

1.2 时域有限差分法

在各向同性线性介质中的麦克斯韦方程为

$$\nabla \times \mathbf{E}(r, t) = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}(r, t)}{\partial t} \quad (7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(r, t) = -\epsilon(r) \frac{\partial \mathbf{E}(r, t)}{\partial t} \quad (8)$$

式中, ∇ 为哈密顿算符, \mathbf{E} 、 \mathbf{H} 分别是光子晶体中电磁波的电场矢量和磁场矢量, $\epsilon(r)$ 是光子晶体中介质的介电常量, 是空间坐标的函数; μ 是介质磁导率.

假设光子晶体在 xz 平面内周期性排列, 本文中激励源为 TE 模式, 式(7)、(8)可简化为

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = -\epsilon(r) \frac{\partial E_x}{\partial t} \quad (9)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = -\epsilon(r) \frac{\partial E_z}{\partial t} \quad (10)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} = -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \quad (11)$$

采用 Yee 于 1966 年提出的中心差分法^[12], 将式(9)离散化得到时域有限差分法方程式: (其中 Δx 、 Δz 表示空间步长, Δt 表示时间步长)

$$H_y^{n+1/2} \left(i + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) = H_y^{n-1/2} \left(i + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} \left[E_z^n \left(i + 1, k + \frac{1}{2} \right) - E_z^n \left(i, k + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta z} \left[E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, k + 1 \right) - E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, k \right) \right] \quad (12)$$

$$E_x^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, k \right) = E_x^n \left(i + \frac{1}{2}, k \right) - \frac{\Delta t}{\epsilon(r)} \left\{ \frac{1}{\Delta z} \left[H_y^{n+1/2} \left(i + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+1/2} \left(i + \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \quad (13)$$

$$E_z^{n+1} \left(i, k + \frac{1}{2} \right) = E_z^n \left(i, k + \frac{1}{2} \right) + \frac{\Delta t}{\epsilon(r)} \left\{ \frac{1}{\Delta x} \left[H_y^{n+1/2} \left(i + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+1/2} \left(i - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \quad (14)$$

式中 i 、 k 分别代表网格中的 x 、 z 方向的节点序数, n 为时间步数. 重复求解式(12)~(14)可以得到光子晶体内部电磁波的传播规律. 为保证收敛得到稳定

解, Δx 、 Δz 、 Δt (c 为真空光速) 的选择满足稳定性条件为

$$\Delta t \leq \frac{1}{c} \left[\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2} \right]^{-1/2} \quad (15)$$

时域有限差分法是建立在一个有限的计算区域, 当计算趋向解析空间的边界时, 会导致计算数值的偏差, 数值模拟时采用了 D-abc 理论中的完美匹配层条件 (Perfect Matched Layer, PML) 边界理论来解决这一问题.

2 光子晶体设计和色散关系分析

在 xz 平面上建立如图 1 所示排列为 60×14 的二维光子晶体平板层结构模型: 以空气 (折射率为 1) 为背景, 相对介电常量 $\epsilon = 12.96$ 的砷化镓 (GaAs) 为圆形介质柱材料, 圆形介质柱的直径 (波导宽度) 为 $2r = 0.7a$ (a 为晶格常量, 数值模拟时取 $1 \mu\text{m}$), 介质柱的排列结构为六边形.

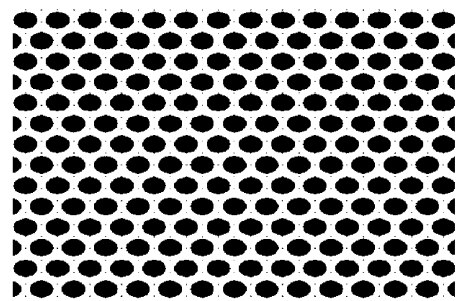


图 1 二维六边形排列结构的光子晶体
Fig. 1 The photonic crystals of 2D hexagonal structure

利用 PWM 计算在入射波为 TE 模式时, 该光子晶体的能带结构如图 2. 通过分析能带图结构, 在第二能带从 Γ 到 K 的方向上 ω 和 k 关系的曲线满足 $\frac{\partial \omega}{\partial k} < 0$. 且根据群速度定义 $v_g = -\nabla_k(\omega) = \frac{\partial \omega}{\partial k}$, 在此方向上传播的 TE 波的群速度 $v_g < 0$, 即负群速度^[13-14]. 有效折射率 $n_{\text{eff}} = \frac{c}{v_g} < 0$, 选取归一化频率

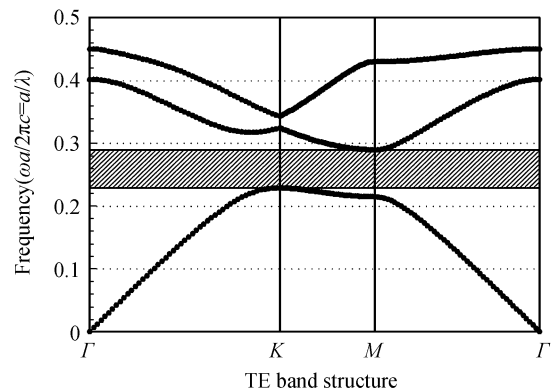


图 2 TE 波光子晶体能带图
Fig. 2 TE band structure

$f=a/\lambda=0.347$ 的 TE 波 (有效折射率最为接近于 -1) 作为入射波。

2.1 表面两侧介质柱的半径改变对透射光强影响

改变光子晶体表面两侧圆形介质柱的半径 r , 以 $0.01a$ 为间隔研究不同半径时透射光强的变化情况. 分别选取了 $r=0.30a, r=0.31a, \dots, 0.37a$ 等 8 个不同半径值进行比较。

对比半径 $r=0.33a$ 和 $r=0.35a$ (为原半径) 两种情况, 同一 TE 波均以 45 度入射, 结果如图 3(a) 和图 3(b), 可以清晰看出入射光线发生了明显的负折射效应, 且透射光在 x 方向上发生相同的侧向位移. 图 3(a) 中的透射波光明强于图 3(b), 而入射面一侧的反射波则明显少于图 3(b)。

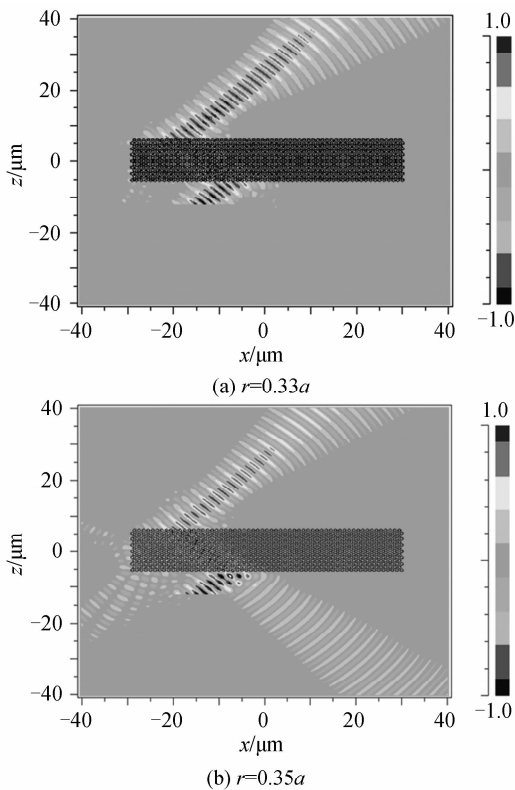


图 3 $r=0.35a$ 和 $r=0.35a$ 时负折射效果图
Fig. 3 The image of negative refraction ($r=0.33a$ and $r=0.35a$)

在入射光强 I_0 、入射波位置以及入射角相同的条件下, 顺序改变外侧介质柱半径, 比较透射光强 I_t 的变化, 结果如图 4。

从图 4 可以看出, 透射光强 I_t 与外侧介质的半径值有关. 在 $r=0.33a$ 时, 透射光最强, 其次为 $r=0.32a$, 而 $r=0.37a$ 时, 透射光最弱. 在改变外层介质柱半径时, 对于相同的入射光, 在相同入射光强 I_0 、入射位置以及入射角的条件下, 透射光在 x 方向上的侧向位移、负折射方向角均相同, 只是透射光光强 I_t 随外侧介质柱半径的变化而变化。

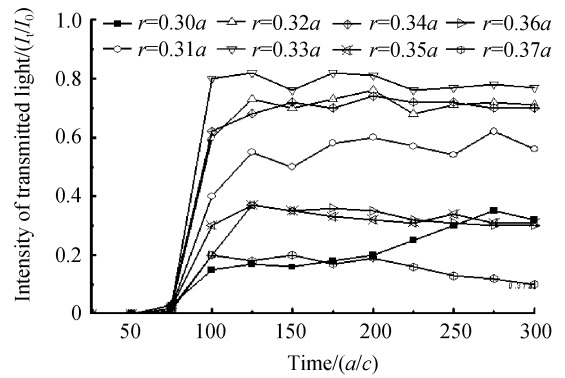


图 4 各不同外侧圆半径下, 透射光强分布图
Fig. 4 Intensity of transmitted light distribution for different radius of circle rods change in the outer surface

透射光强的变化取决于入射光模式与光子晶体结构内布洛赫波模式的耦合程度. 通过研究表明: 在第二能带低频区耦合效率较高, 即耦合度较高, 如图 5. 减小表面的圆形介质柱半径, 间接对光子晶体能带产生了影响, 使能带升高^[15], 同样频率的入射光就落在了低频区, 具有较高的耦合度, 如 $r=0.33a$ 、 $r=0.32a$ 时, 提高了透射率. 但半径差别过大也会降低透射率, 如 $r=0.3a$ 。

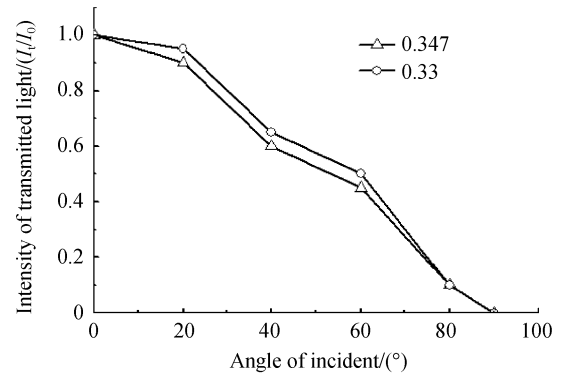


图 5 $f=0.347$ 和 $f=0.330$ 角度和透过率关系
Fig. 5 Relationship between angle and intensity of transmitted light ($f=0.347$ and $f=0.330$)

2.2 外侧介质柱顺向平移对透射光强的影响

将光子晶体两侧表面的圆形介质柱同向一侧做相同距离的位移, 通过时域有限差分法数值模拟研究透射光强的变化. 如图 6, 选取了侧向位移分别为 $\Delta=0.5a, \Delta=0.4a, \Delta=0.2a$ 和结构不变时的结果进行比较。

从图 6 可看出: 透射光强 I_t 随外层介质柱的侧向位移而改变, 当侧向位移为 $0.2a$ 时, 透射光最强, 继续增加侧向位移, 则透射光光强减弱, 当侧向位移为 $0.5a$ 时, 透射波光强比其他结构要小很多, 如图 7. 当 $\Delta=0.5a$ 时, 外层柱子和第二层柱子的排列, 形成了正方形晶格, 而在正方形晶格下的光子晶体此时以相同角度入射, 透射光衰减较强。

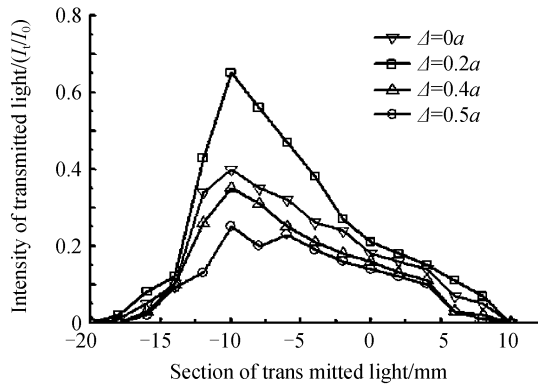


图6 位移不同时的透射光截面光强分布
Fig.6 Intensity of transmitted light distribution for different distance of shift change

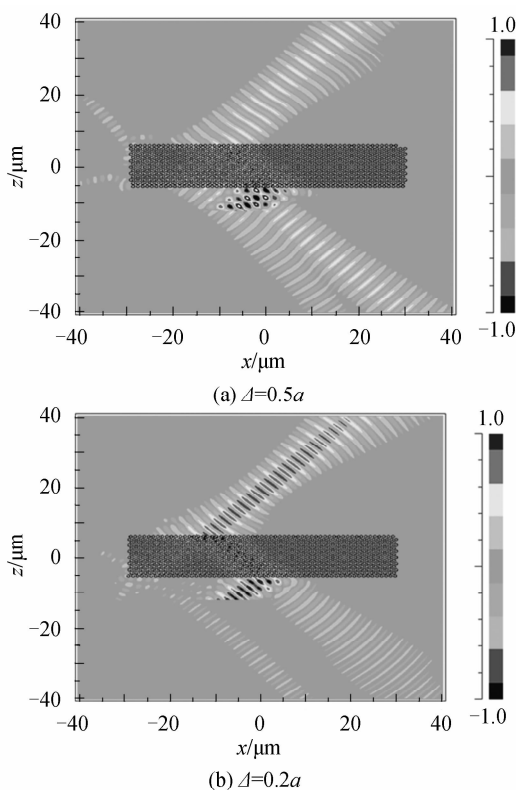


图7 $\Delta=0.5a$ 和 $\Delta=0.2a$ 时负折射效果图
Fig.7 The image of negative refraction ($\Delta=0.5a$ and $\Delta=0.2a$)

3 结论

本文以 GaAs 圆形介质柱构成二维六边形结构光子晶体,分别就改变光子晶体表面两侧介质柱的半径和顺向侧移外层介质柱等两种情况对透射光光强的变化进行了研究.研究表明:1)光子晶体表面介质柱半径的变化都不会影响透射光的负折射方向;2)通过适当的改变界面处介质柱半径以及顺向侧移介质柱,可以有效增强耦合效率(如外层 $r=0.33a$ 或者侧位移 $\Delta=0.2a$ 时),提高负折射透射光的强度.本文的研究结论可以对光子晶体抗反射膜、光器件的优化和改进提供依据.

参考文献

- [1] VESELAGO V G. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ [J]. *Soviet Phys Uspekhi*, 1968, **10**(4): 509-514.
- [2] PENDRY J B, HOLDEN A J, STEWART W J. *et al.* Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures [J]. *Phys Rev Lett*, 1996, **76**(25): 4773-4775.
- [3] PENDRY J B. Negative refraction makes a perfect lens[J]. *Phys Rev Lett*, 2000, **85**(18): 3966-3969.
- [4] LUO D, ALAGAPPAN G, SUN X W, *et al.* Superbending effect in two-dimensional graded photonic crystals[J]. *Opt Commun*, 2009, **283**(1): 329-332.
- [5] ABDELMALEK F, BELHADJ W, BOUCHRIHA H. FDTD study of subwavelength imaging by a photonic crystal slab[J]. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 2005, **3**(8): 19-24.
- [6] CHEN Pei, KONG Fan-min, LI Kang, *et al.* Condition and property of negative refraction phenomenon in two-dimension photonic crystal[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(4): 721-724.
陈沛,孔凡敏,李康,等.二维光子晶体负折射现象条件及特性研究[J]. *光子学报*, 2008, **37**(4): 721-724.
- [7] YI Yan, FANG Ji-xiang, DING Bing-jun. Analysis of structural parameter and electromagnetic parameter in Two-Dimensional photonic crystals with all angle negative refraction property[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(2): 287-290.
易燕,方吉祥,丁秉钧.对全入射角负折射二维光子晶体结构和电磁参量的研究[J]. *光子学报*, 2008, **37**(2): 287-290.
- [8] GRALAK B, ENOCH S, TAYEB G, *et al.* Anomalous refractive properties of photonic crystals[J]. *JOSA A*, 2000, **17**(6): 1012-1020.
- [9] GUO S P, ALBIN S. Simple plane wave implementation for photonic crystal calculations [J]. *Opt Express*, 2003, **11**(2): 167.
- [10] WEN Xi-sen. Theory and technology of photonic/sonic crystals[M]. Beijing: Science Press, 2006.
温熙森. 光子/声子晶体理论和技术[M]. 北京: 科学出版社, 2006.
- [11] NOTOMI M. Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals: Refraction like behavior in the vicinity of the photonic band gap[J]. *Phys Rev B*, 2000, **62**(16): 10696-10705.
- [12] YEE K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. *IEEE Trans Antennas Propag*, 1966, **14**: 302-307.
- [13] KOSAKA H, KAWASHIMA T, TOMITA A, *et al.* Superprism phenomena in photonic crystals[J]. *Phys Rev B* 1998, **58**(16): 10096-10099.
- [14] LUO C, JOHNSON S G, JOANNOPOULOS J D, *et al.* All-angle negative refraction without negative effective index[J]. *Phys Rev B*, 2002, **65**(20): 201104.
- [15] FENG Li, LIANG Bin-ming, LI Zhuo, *et al.* Dependence of negative refraction phenomenon on incident light frequency [J]. *Laser and Opto-electronics Process*, 2008, **45**(3): 61-65.
冯莉,梁斌明,李卓,等.入射光频率变化对负折射现象的影响[J]. *激光与光电子学进展*, 2008, **45**(3): 61-65.

Effect of the Change of Surface Structure of Photonic Crystals on Intensity of Transmitted Light

MAO Yu, TONG Yuan-wei

(College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: The photonic crystals of hexagonal structure with GaAs circle rods are taken as examples to illuminate dependence of intensity of transmitted light on the change of surface structure of the PC. Simulation with finite difference time domain method shows that the change of radius of outside rods and the displacement of the outermost layer circle rods will have effect on intensity of negative transmitted light, in frequency range where negative refraction exist for the same photo crystal.

Key words: Negative refraction; Photonic crystal; Surface structure; Intensity of transmitted light



MAO Yu was born in 1984. Now he is a M. S. degree candidate, and his research interests focus on photonic crystal and negative refraction phenomenon.



TONG Yuan-wei was born in 1971. He received his Ph. D. degree from Tongji University in 2006. From 2008 to now, he is engaged in post-doctoral research at University of Shanghai for Science and Technology. His mainly research interests focus on photonic crystal and negative refraction phenomenon.