doi:10.3788/gzxb20124110.1200

精细积分法在一维光子晶体数值模拟中的应用

杨红卫,慕振峰,姜舒宁

(北京工业大学 应用数理学院,北京 100124)

摘 要:应用精细积分法对含各种介质材料的一维光子晶体进行了数值模拟,并对结果进行了分析.计算时将光子晶体分成不同的区段,引入区段势能和区段混合能,利用精细积分法求出各个区段的出口刚度矩阵,然后将各个区段的刚度矩阵合并,再结合边界条件便可求解问题.利用透射率和反射率之间的关系,判断了本算法的准确度,数值计算结果表明,对于一维光子晶体的数值模拟,此方法准确、有效、适用性强.

文章编号:1004-4213(2012)10-1200-5 光子晶体(One-dimensional Photonic Crystals)进行 了数值模拟,结果表明这种方法是准确而且有效的.

0 引言

光子晶体的概念在 1987 年分别由 S. John 和 E. Yablonovitch 提出^[1-2],其最主要的特性是具有光 子带隙,即频率处于禁带内的光波在光子晶体内部 是被禁止的,所以它在光通信、微波通信、光电子集 成等领域有着广泛的应用价值,因此,它很快成为光 学前沿领域中一个十分活跃的研究课题. 左手材 料^[3-4]是指等效介电常量 ϵ 和等效磁导率 μ 同时为 负值的介质材料,此时对电磁波的传播形成负的折 射率. 当折射率为负值时,电场强度 E、磁场强度 H和波矢量 k 之间形成左手规则. 2001 年,美国加州 大学圣迭哥分校的物理学家 Smith 教授等人制作了 微波波段 ϵ 和 μ 同时为负值的介质,在实验室实现 了左手材料(Left-Handed Material, LHM). 将左 手材料加入光子晶体后,出现了许多不同于右手材 料(Right-Handed Material, RHM)的性质^[5-7].

对光子晶体的研究采用的方法有:平面波展开 法^[8-9]、有限时域差分法^[10-11]、传输矩阵法等方 法^[12-13]等.精细积分方法是钟万勰院士发展的一种 新的计算方法,这种方法在进行数值计算时,将区段 分割的特别小,并且只考虑待求量的增量,而不是全 量,避免了舍入误差,对于时间历程的发展性方程和 两端边值问题及派生出来的黎卡提微分方程,都有 很精确的数值解,在计算力学^[14]及电磁学^[15-16]中已 经有了广泛的应用,并且取得了很大的成功.本文结 合精细积分及区段合并方法,对含各种介质的一维

1 模型和理论推导

光子晶体模型如图 1,它是由 A、B 两种不同的 介质周期性排列的介电结构,两种介质的厚度分别 为 d_A、d_B,介电常量分别为 ε_A、ε_B,磁导率分别为 μ_A、μ_B.本文考虑光沿 z 轴正入射到光子晶体上的 情况.



图1 一维光子晶体模型

Fig. 1 The model of one-dimensional photonic crystals

将光子晶体沿纵向分成不同的区段,一个介质 层就是一个区段.考虑其中的一个区段,其纵向长度 为区段长度,比如取介质层 A,则其纵向长度即区段 长度为 d_A.设该区段的两个端面的 z 坐标分别为 z_a、z_b,考虑齐次边界条件,与矢量波动方程相对应 的单变量变分原理为^[17]

$$\Pi(\mathbf{E}) = \frac{1}{2} \int_{\varepsilon_a \Omega}^{\varepsilon_b} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} \right] d\Omega dz$$

$$\delta \Pi(\mathbf{E}) = 0 \qquad (1)$$

在一维垂直入射情况下,变分原理可简化为

基金项目:国家自然科学基金(No. 11172008, No. 10972013)资助

第一作者:杨红卫(1967-),女,副教授,博士,主要研究方向为计算物理. Email: yanghongwei@bjut.edu.cn 收稿日期:2012-05-10;修回日期:2012-07-23

(2)

$$\Pi(E_{y}) = \frac{1}{2} \int_{z_{a}}^{z_{b}} \left[\frac{1}{\mu_{r}} \left(\frac{\mathrm{d}E_{y}}{\mathrm{d}z} \right)^{2} - k_{0}^{2} \varepsilon_{r} E_{y}^{2} \right] \mathrm{d}z$$
$$\delta \Pi(E_{y}) = 0$$

积分式(2)称为区段的电磁势能.而电磁势能密度, 即拉格朗日函数可以表示为

$$L = \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_{\rm r}} (\dot{E}_{y})^{2} - \frac{1}{2} k_{0}^{2} \epsilon_{\rm r} E_{y}^{2}$$
(3)

其中, $E_y = dE_y/dz$. 区段电磁势能应该是两端切向 电场的二次型函数,即

 $P(E_a, E_b) = K_{aa} E_a^2 / 2 + K_{ab} E_a E_b + K_{bb} E_b^2 / 2 \quad (4)$ 其中, $E_a \searrow E_b$ 分别是区段两端的切向电场.

为了求出区段电磁势能的矩阵元素 K_{aa} 、 K_{ab} 、 K_{bb} ,将变分原理导向 Hamilton、辛体系,并引入区 段混合能,取对偶变量为

$$q=E_y, p=\partial L/\partial \dot{q}$$
 (5)
结合式(3)可以得到

$$\dot{q} = \mu_r p \tag{6}$$

引入 Hamilton 函数,即区段的混合能密度,它是 p 和 q 的二次型函数,可表示为

$$H(q,p) = Dp^2/2 + Apq - Bq^2/2$$
 (7)
其相应的亦公原理为

具相应的变分原理为

$$S = \int_{z_a}^{b} \left[p \, \dot{q} - H(q, p) \right] \mathrm{d}z, \ \delta S = 0 \tag{8}$$

又 $H = p\dot{q} - L$,结合式(6),可得

$$H = \frac{1}{2}\mu_{\rm r}p^2 + \frac{1}{2}k_0^2\varepsilon_{\rm r}q^2$$
(9)

与式(7)对比可知

$$D = \mu_{\rm r}, A = 0, B = -k_0^2 \varepsilon_{\rm r}$$
(10)

通过对区段电磁势能的 Legendre 变换引入区段混合能^[14]

$$\Gamma(q_a, p_b) = p_b q_b - \Pi(q_a, p_b)$$
(11)
区段混合能同样是两端变量二次型函数,可表示为

 $\Gamma(q_a, p_b) = Gp_b^2/2 + Fp_bq_a - Qq_a^2/2$ (12) 式中,Q,F,G可由区段混合能密度中的系数A、B、 D积分得到^[14],其关系满足联立的 Riccati 微分方 程

$$\begin{cases} dF/d\eta = (A - GB)F = F(A - DQ) \\ dG/d\eta = D + 2AG - BG^2 = DF^2 \\ dQ/d\eta = BF^2 = B + 2AQ - DQ^2 \end{cases}$$
(13)

式中,η为区段长度.应用基于 Riccati 微分方程的 精细积分算法可以对式(13)进行求解.

设定初始积分步长为 η ,将之继续细分 2^{N} 段, 取 N=20, $2^{N}=1$ 048 576,则有 $\tau=\eta/2^{N}$. η 本身是 一个有限长度的区段,如此 τ 将成为一个非常小的 量,在小区段内对 Q、F、G 做泰勒级数展开到四阶, 则略去的是 $O(\tau^{5})$.由于 $\tau \approx \eta \times 10^{-6}$,所以此时 $O(\tau^4) \approx \eta^4 \times 10^{-24}$,比计算机中双准确度实型变量的准确度还要高.

$$\begin{cases} F(\tau) = 1 + F'(\tau), F'(\tau) = \varphi_1 \tau + \varphi_2 \tau^2 + \\ \varphi_3 \tau^3 + \varphi_4 \tau^4 + O(\tau^5) \\ G(\tau) = \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 + \gamma_3 \tau^3 + \gamma_4 \tau^4 + O(\tau^5) \\ Q(\tau) = \theta_1 \tau + \theta_2 \tau^2 + \theta_3 \tau^3 + \theta_4 \tau^4 + O(\tau^5) \end{cases}$$
(14)

式中 φ 、 γ 和 θ 是泰勒展开的系数,将Q、F、G代入式(13),比较等式两边 τ 的各阶幂次有

$$\begin{cases} \gamma_{1} = D, \gamma_{2} = A\gamma_{1} \\ \gamma_{3} = (2A\gamma_{2} - B\gamma_{1}^{2})/3 \\ \gamma_{4} = (A\gamma_{3} - B\gamma_{2}\gamma_{1})/2 \\ \varphi_{1} = A, \varphi_{2} = (A\varphi_{1} - \gamma_{1}B)/2 \\ \varphi_{3} = (A\varphi_{2} - B\gamma_{2} - B\gamma_{1}\varphi_{1})/3 \\ \varphi_{4} = (A\varphi_{3} - \gamma_{3}B - B\gamma_{2}\varphi_{1} - B\gamma_{1}\varphi_{2})/4 \\ \theta_{1} = B, \theta_{2} = B\varphi_{1} \\ \theta_{3} = (2B_{g}\varphi_{2} + B\varphi_{1}^{2})/3 \\ \theta_{4} = (B\varphi_{3} + B\varphi_{1}\varphi_{2})/2 \end{cases}$$
(15)

这样,就可以得到 τ 段的Q、F、G,然后执行由 2 个 τ 段得到一个 2 τ 段的合并公式^[14]

$$F_{c} = \frac{F^{'2} + F^{'} - GQ/2}{1 + QG}, G_{c} = G + \frac{(1 + F^{'})^{2}}{1/G + Q}$$
$$Q_{c} = Q + \frac{(1 + F^{'})^{2}}{1/Q + G}$$
(16)

区段合并过程只需重复执行 N=20 次,就可以 将积分步长由 τ 合并为初始长度 η ,具有很高的效 率,计算中只求待求量的增量,又避免了舍入误差. 经过合并后,即可得到区段 η 的混合能系数 $Q(\eta)$ 、 $F(\eta)$ 、 $G(\eta)$.利用 Q、F、G 与 K_{aa} 、 K_{ab} 、 K_{bb} 的关 系^[14]

 $K_{aa} = Q + F^2/G, K_{ab} = -F/G, K_{bb} = 1/G$ (17) 可以求出区段的出口刚度矩阵.将求出的出口刚度 矩阵进行子结构的有限元的拼装后,再结合边界条 件,就可求解一维光子晶体的透射系数和反射系数.

在边界 z=0 处,总场可以表示为入射场和反射场的叠加,即

$$E_{y}(z) = E_{0} e^{-jk_{0}z} + RE_{0} e^{jk_{0}z}$$
(18)

式中,R代表反射系数.

在边界 z=L 处,只有透射场,即

$$E_{y}(z) = TE_{0} e^{-jk_{0}z}$$
 (19)

式中,T代表透射系数.

由式(18)和(19)可得出反射系数和透射系数的 表达式为

$$R = \frac{E_{y}(z=0) - E_{0} e^{-jk_{0} \cdot 0}}{E_{0} e^{jk_{0} \cdot 0}}$$
(20)

$$T = \frac{E_{y}(z=L)}{E_{0} e^{-jk_{0}L}}$$
(21)

即求出光子晶体两端的场后利用式(20)和(21)便可 求得反射和透射系数.

2 计算结果与讨论

2.1 光在双正介质中的传播

考虑由 A、B 两种右手材料交替组成的光子晶体,其中,A 材料的介电常量 $\epsilon_A = 5.5225$,磁导率 $\mu_A = 1$,厚度 $d_A = 740$ nm;B 材料的介电常量 $\epsilon_B =$ 1.9044,磁导率 $\mu_B = 1$,厚度 $d_B = 1260$ nm;周期长 度 $d = d_A + d_B = 2000$ nm,周期数 N = 10,其基频为 $\omega_0 = 271$ THz.图 2 给出了正入射情况下含右手材



图 2 含右手材料的一维光子晶体透射谱 Fig. 2 Transmittance spectrum of one-dimensional photonic crystals containing RHM

料一维光子晶体的透射谱图.从图中可以看出,含右 手材料的一维光子晶体,在基频的奇数倍处,出现禁 带,而在基频的偶数倍处,出现了震荡,与文献[18] 中的禁带宽度、禁带位置和禁带深度等是一致的.根 据能量守恒,在无损耗介质中,反射率和透射率的平 方和应该等于1,即

$$\Delta = 1 - (|R|^{2} + |T|^{2}) = 0$$
(22)

在实际计算中由于各种误差的存在,计算误差 Δ 总 是一个很小的非零数值.所以 Δ 可以作为判断算法 准确度的一个指标,即 Δ 越小,数值结果越精确.图 3 所示为一个周期内 Δ 的变化曲线,可以看出,误差 Δ 的量级始终保持在 10^{-15} ,说明结果具有很高的准 确度,证明了本文算法的准确性.



图 3 含右手材料的 Δ 随 ω/ω₀ 的变化

Fig. 3 The change of Δ in RHM versus ω/ω_0 in a period

2.2 光在双负介质中的传播

为了便于比较,与右手材料采用相同绝对值的 介电常量和磁导率,即:A材料的介电常量 $\epsilon_A =$ -5.522 5,磁导率 μ_A = -1,厚度 d_A = 740 nm; B 材 料的介电常量 ε_B = 1.904 4,磁导率 μ_B = 1,其厚度 d_B = 1 260 nm;周期长度 $d = d_A + d_B = 2$ 000 nm,周 期数 N=10,其基频为 ω_0 = 271 THz.其数值模拟结 果如图 4 所示.其传输特性与右手材料有了很大的 不同,在基频的奇数倍处,出现了较宽的禁带,而在 在基频偶数倍处出现了狭窄的透射带,与参考文献 [8]中的结果一致.图 5 也给出了一个周期中 Δ 的 变化曲线,其误差量级依然保持在 10⁻¹⁵.



图 4 含左手材料一维光子晶体的透射谱 Fig. 4 Transmittance spectrum of one-dimensional photonic crystals containing LHM





2.3 光在单负介质中的传播

单负材料在自然界中有两种,一种是介电常量 为负,即: $\epsilon < 0$ 且 $\mu > 0$,称为负 ϵ 材料,另外一种是 磁导率为负,即: $\epsilon > 0$ 且 $\mu < 0$,称为负 μ 材料,在单 负材料中,波矢为虚数,光无法在里面传播,但是将 两种单负材料交替排列,通过共振机制,则出现完全 隧穿共振和透明效应[18].考虑一种负介电常量材料 和负磁导率材料交替构成的一维光子晶体[19],其 中,A 材料的介电常量 $\epsilon_A = 3$,磁导率为 $\mu_A = 1 100/\omega^2$,厚度为 $d_A = 16 \text{ mm}; B$ 材料的介电常量 $\varepsilon_B =$ $1-144/\omega^2$,磁导率为 $\mu_B = 1.2$,厚度为 $d_B = 8$ mm; 周期长度 $d=d_A+d_B=24$ mm,周期数 N=20,其透 射图谱如图 6. 可以看出,含有单负材料的光子晶体 中,某些频段有较宽的禁带;虽然每层介质的折射率 为虚数,传播于其中的电磁波都应该呈不断衰减状 态,但是在某些频段电磁波还是能透射过去,与参考 文献[20]中的结果一致.图7显示了△的变化,其 误差在 10-15 以内. 由此可见, 此方法对于含各种材



图 6 含单负材料一维光子晶体的透射谱

Fig. 6 Transmittance spectrum of one-dimensional photonic crystals containing single negative materials



图 7 含单负介质的 △ 随频率的变化 Fig. 7 The change of △ in single negative materials versus frequency

3 结论

本文将精细积分法用于含各种介质的一维光子 晶体传输特性的分析中,并对其透射特性进行了数 值模拟,做出了误差随频率的变化图.数值结果表 明,此方法对于含各种材料光子晶体的数值模拟都 具有很高的准确度,为一维光子晶体的研究提供了 一种有效的模拟方法,同时,此方法具有很强的适用 性,不但可以用于右手材料的分析,也可以用于左手 材料和单负材料的模拟,且参量修改简单.在实际应 用中,横截面都不是无限大的情况,它的横向会受到 一定外形的限制,这时只需对横截面进行有限元离 散,沿纵向仍然利用精细积分,从而进行半解析求 解,显示出该方法的优越性.通过对光子晶体的模 拟,可以发现,含左手材料的一维光子晶体对光的透 射具有很强选择特性,在基频的奇数倍处具有很宽 的带隙,在基频的偶数倍处有狭窄的透射带,可以用 它来选择特定频率的光波.

参考文献

- YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solidstate physics and electronics [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58(20): 2059-2062.
- [2] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58 (23): 2486-2489.
- [3] SHELBY R A, SMITH D R, SCHULTZ S. Experimental verification of a negative index of refraction [J]. Science, 2001, 292(10): 77-79.
- [4] SMITH D R, KROLL N. Negative refractive index in left-

handed materials [J]. Physical Review Letters, 2000, 85 (14): 2933-2936.

[5] YIN Cheng-ping, LIU Nian-hua. Transmission properties of one-dimensional photonic crystals containing negative refraction materials [J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2005, 26(2):173-177.
尹承平,刘念华. 含负折射率材料的一维光子晶体的光学传

尹承平, 刘念华. 含页折射率材料的一维光子晶体的光字传输特性[J]. 发光学报, 2005, **26**(2):173-177.

- QI Jun-xuan, WEN Shuang-chun. Research of optical properties of one-dimension photonic crystals constructed by positive-negative refractive materials[J]. Laser Technology, 2006, 30(5): 504-507.
 齐俊璇,文双春. 含正负材料的一维光子晶体的光学特性研究[J]. 激光技术, 2006, 30(5): 504-507.
- [7] DONG Hai-xia, YANG Cheng-quan, SHI Yun-long. The filtering properties of doped one-dimensional photonic crystal containing negative refractive index materials[J]. *Journal of Optoelectronics Laser*, 2007, 18(12): 1435-1437.
 董海霞,杨成全,石云龙. 含负折射率材料的一维光子晶体掺 杂后的滤波特性[J]. 光电子 激光, 2007, 18(12): 1435-1437.
- [8] JIANG Ai-min, WU Rui-xin, XU Jie. Band gap of twodimensional magnetized photonic crystals by plane-wave expansion method[J]. Journal of Nanjing University, 2008, 44(4): 401-407. 蒋爱敏, 伍瑞新, 徐杰. 应用平面波展开法计算色散和各向异

特发敏, 血病制, 标然. 应用于固放於方法计算已散和各向并 性二维磁性光子晶体的带隙[J]. 南京大学学报, 2008, **44**(4): 401-407.

[9] CAI Qing, HUANG Chang-Qing, LIANG Pei, et al. Surface modes of two-dimensional photonic crystal based on plane wave expansion method[J]. Acta Photonica Sinica, 2012, 41(4): 430-435.

蔡青,黄昌清,梁培,董前民.基于平面波展开法的二维光子 晶体表面模式研究[J].光子学报,2012,41(4):430-435.

- [10] YAN Dun-bao, YUAN Nai-chang, FU Yun-qi. Research on dielectric layer PBG structures in waveguide based on FDTD [J]. Journal of Electronics and Information Technology, 2004, 26(1): 118-123.
 闫敦豹,袁乃昌,付云起.基于 FDTD 的波导介质层的 PBG 结构的研究[J]. 电子与信息学报, 2004, 26(1):118-123.
- [11] ZHANG Hai-feng, ZHANG Jian-ping, XIAO Zheng-quan. Filtering properties of one dimensional tunable magnetized plasma photonic crystals with single defective layer[J]. Acta Photonica Sinica, 2010, 39(9): 1572-1577. 章海锋,郑建平,肖正泉.含单缺陷层的一维可调谐磁化等 离子体光子晶体滤波特性研究[J].光子学报, 2010, 39(9): 1572-1577.
- [12] TONG Yuan-wei, ZHANG Ye-wen, HE Li. The band structure in microwave frequency for quasi-1-D coaxial photonic crystals[J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(2): 935-940.
 童元伟,张冶文,赫丽. 用传输矩阵法研究微波波段准一维 同轴光子晶体能隙结构[J]. 物理学报, 2006, 55(2): 935-940.
- [13] LIU Qi-neng. Polarization properties of total reflection tunnel effect of 1D anisotropic photonic crystal[J]. Acta Photonica Sinica, 2012, 41(1): 116-120.
 刘启能.各向异性光子晶体的全反射隧穿偏振特性[J].光子 学报, 2012, 41(1):116-120.
- [14] 钟万勰.应用力学对偶体系[M].北京:科学出版社,2002: 241-249.
- [15] CHEN Jie-fu, ZHENG Chang-liang, ZHONG Wan-xie. Symplectic analysis and dual edge element for electromagnetic

waveguide[J]. Acta Physica Sinica, 2006, **55**(5): 2340-2346.

陈杰夫,郑长良,钟万勰. 电磁波导的辛分析与对偶棱边元 [J]. 物理学报,2006,**55**(5):2340-2346.

- [16] ZHONG Wan-xie. Symplectic semi-analytical method for electro-magnetic wave guide[J]. Mechanica Sinica, 2003, 35 (4): 401-410.
 钟万勰. 电磁波导的半解析辛分析[J]. 力学学报, 2003, 35 (4): 401-410.
- [17] 金建铭. 电磁场有限元方法[M]. 西安:西安电子科技大学出版社, 2001:125-129.
- [18] GU Guo-chang, LI Hong-qiang. Properties of light propagation in 1-D periodic dielectric structure [J]. Acta Optica Sinica, 2000, 20(6): 728-734.
 顾国昌,李宏强.一维光子晶体材料中的光学传输特性[J].

光学学报,2000,20(6):728-734.

- [19] LIU Qi-hai, HU Dong-sheng, YIN Xiao-gang, et al. Defect mode in one-dimensional photonic crystal consisting of single-negative materials with an impurity layer[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(9): 094101.
 刘其海,胡冬生,尹小刚,等.由单负材料组成的含有缺陷 层的一维光子晶体结构中的缺陷模[J].物理学报, 2011, 60(9):094101.
- [20] DENG Xin-hua, LIU Nian-hua, LIU Gen-quan. Frequency response of photonic heterostructures consisting of single-negative materials[J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56(12): 7280-7285.
 邓新华,刘念华,刘根泉.单负材料异质结构光子晶体的频率响[J].物理学报, 2007, 56(12): 7280-7285.

Application of Precise Integration in Numerical Simulation of One-dimensional Photonic Crystal

YANG Hong-wei, MU Zhen-feng, JIANG Shu-ning

(College of Applied Sciences, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

Abstract: Transmission coefficient of the one-dimensional photonic crystal with various dielectric materials is simulated by using precise integration, and simulation results are analyzed. Photonic crystal is divided into different sections. Potential energy of the section and mixed energy of the section are introduced. The export stiffness matrix of each section can be obtained by using precise integration, and then each stiffness matrix is combined. The problem can be solved by imposing boundary conditions on the stiffness matrix. The curves of lose rate D are drawn to check the validity and accuracy of the numerical solution. The simulation results show that this method is accurate, efficient and applicable for the simulation of one-dimensional photonic crystal.

Key words: Photonic crystal; Precise integration method; Left-handed materials; Photonic band gap