

doi: 10.3788/gzxb20124104.0430

基于平面波展开法的二维光子晶体表面模式研究

蔡青, 黄昌清, 梁培, 董前民

(中国计量学院 光学与电子科技学院 光电工程研究所, 杭州 310018)

摘 要:采用平面波展开法研究了四种二维光子晶体结构(圆柱介质柱四方晶格、圆柱介质柱三角晶格、正方介质柱四方晶格、正方介质柱三角晶格)的带隙宽度随介质柱尺寸变化的关系. 使用平面波展开法计算常规晶格和表面缺陷晶格的模式并进行结果叠加, 研究了各结构的二维光子晶体在带隙宽度最大时的表面模式. 结果表明, 同种晶格的光子晶体带隙宽度随着介质柱的尺寸增大呈先增后减趋势, 存在最大值. 随着表面介质柱尺寸的增加, 四种晶格表面模式曲线均呈下降趋势. 四方晶格光子晶体与三角晶格相比, 表面介质柱尺寸的变化范围更大, 但能获取表面模式频率范围较小.

关键词:光子晶体; 平面波展开法; 带隙宽度; 表面模

中图分类号: O734

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2012)04-0430-6

0 引言

1987 年, E. Yablonovitch 和 S. John 提出光子晶体这一概念^[1-2]. 光子晶体具有许多独特的性质, 如光子带隙^[3]、局域模和表面模等^[4-5], 可以很好地应用在各种光学器件上^[6-8]. 随着理论和实验的发展, 光子晶体的表面模在 20 世纪 90 年代引起人们广泛关注^[4,9-13]. 光子晶体在存在禁带的条件下, 可以将光局域在晶体的缺陷中. 类似地, 由于表面缺陷的存在, 可以将光局域在晶体的表面. 在光子晶体被截断的情况下, 由于无限对称结构被破坏, 只在界面的一侧存在带隙. 而在满足折射率波导条件下, 在界面的另一侧可以通过类似于全内反射的作用来限制光沿着晶体表面传导. 在两个条件的共同作用下产生光子晶体的表面模^[14].

获得不同表面结构的方法有改变边缘介质柱的几何尺寸、切割边缘介质柱和偏移部分边缘介质柱等^[14]. 对表面介质柱进行周期性微小移动形成波动结构, 可以将不发射的表面模转变成可以发射的表面模^[15-18]. 表面模式可以很好地应用在微腔(如垂直腔面激光器)、晶体表面导光、将光耦合进出光子晶体波导等方面^[4,9,17,19-23]. 日本京都大学的 S. Noda 在理论及实验上研究了利用三维木堆结构的光子晶体的表面模对光子的控制^[22].

目前, 理论计算表面模式常用方法有将多个单晶胞作为基础计算单元的 R 矩阵传输法和超晶胞法等^[24-25]. 而常用来计算无限结构光子晶体带隙的平面波展开法在具体计算表面模方面还未见报导.

本文采用平面波展开法, 研究了四种不同晶格结构的二维光子晶体的表面模, 通过分别计算无限对称光子晶体单晶胞的常规模式和表面截断光子晶体单晶胞的缺陷模式分布, 将两者结合获得表面模的分布情况. 计算结果与文献^[18]结果一致, 并得到时域有限差分法的验证.

1 平面波展开法

平面波展开法^[26-27]是应用布洛赫定理, 将电磁场在倒易空间以平面波形式展开. 麦克斯韦方程组则将化成一本征方程, 求解该方程的本征值, 便得到光传播的本征频率和光在光子晶体中传播的色散关系, 即可得到光子晶体的能带分布情况.

光子晶体的介电常量 $\epsilon(\mathbf{r})$ 、电矢量 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 和磁矢量 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ 为周期函数, 结合布洛赫定理将其展开为傅里叶级数, 再将倒格子空间的展开式代入特征方程

$$\sum_{\mathbf{G}'} \epsilon^{-1}(\mathbf{G}-\mathbf{G}') |K+\mathbf{G}| |K+\mathbf{G}'| e(\mathbf{G}) = \frac{\omega^2}{c^2} e(\mathbf{G}) \quad (1)$$

$$e(\mathbf{G}) = \begin{bmatrix} e_2 e_2' & -e_2 e_1' \\ -e_1 e_2' & e_1 e_1' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1' \\ h_2' \end{bmatrix} \quad (2)$$

基金项目:国家自然科学基金青年基金(No. 61006051)和浙江省科技厅重大科技攻关优先主题重点项目(No. 2010C11068)资助

第一作者:蔡青(1987—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为光子晶体的特性、应用与集成光路. Email: beyound021987@163.com

责任作者/导师(通讯作者):黄昌清(1980—), 男, 副教授, 主要研究方向为光子晶体制备及应用. Email: cqhuang@cjlu.edu.cn

收稿日期: 2011-11-23; **修回日期:** 2012-01-14

$$\epsilon^{-1}(G) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_b} + \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b}\right) \frac{\pi r^2}{a^2}, & G=0 \\ \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b}\right) \frac{\pi r^2}{a^2} \frac{2J_1(GR)}{GR}, & G \neq 0 \end{cases} \quad (3)$$

式(3)中 $J_1(GR)$ 是贝塞尔函数. 将式(2)、(3)代入式(1), 便可求得 TE 模式下的本征频率.

2 模型的建立

本文选取圆柱介质柱四方晶格、圆柱介质柱三

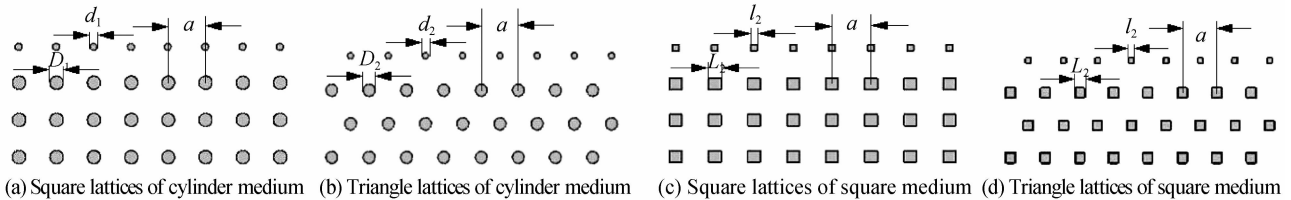


图1 二维光子晶体晶格模型
Fig. 1 Lattice models of 2D photonic crystal

3 表面模式的计算

3.1 带隙宽度

表面模存在于光子晶体的常规带隙中, 常规带隙越宽, 就可以获得越多落在带隙中的表面模. 本文分别研究了四种结构的光子晶体在改变各自介质柱尺寸 D_1 、 D_2 、 L_1 、 L_2 时的常规带隙分布, 采用各结构常规带隙最宽值对应的介质柱尺寸作为之后研究表面模式的参量, 所得结果如图 2.

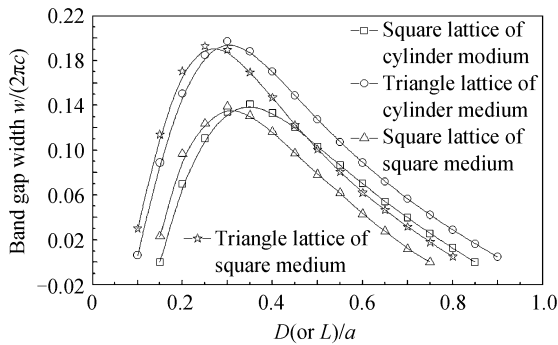


图2 带隙宽度与介质柱直径 D (或边长 L) 关系曲线
Fig. 2 Relational curves about the band gap width and the diameter D (or the length L) of the medium column

由图 2 可知: 随着介质柱尺寸 D (或 L) 的增加, 四种晶格的带隙宽度呈先增后减趋势, 均存在最大值. 圆柱介质柱四方晶格、圆柱介质柱三角晶格、正方介质柱四方晶格、正方介质柱三角晶格四种结构对应的各自最佳带隙宽度和参量为: $\Delta f_1 = 0.1408$, $D_1 = 0.35a$; $\Delta f_2 = 0.1972$, $D_2 = 0.3a$; $\Delta f_3 = 0.1391$, $L_1 = 0.3a$; $\Delta f_4 = 0.1933$, $L_2 = 0.25a$. 介质柱形状相同时, 三角晶格结构产生的带隙最大宽度稍大于四方晶格结构, 且稍向介质柱尺寸小的方向偏移; 介质柱结构不同时, 正方介质柱产生的带隙最大宽度

角晶格、正方介质柱四方晶格、正方介质柱三角晶格四种结构的光子晶体来研究其表面模式. 模型如图 1, 四种结构共同的参量为: 晶格参量 $a = 1 \mu\text{m}$, 介质柱的介电常量 $\epsilon_1 = 11.56$, 背景介质的介电常量 $\epsilon_0 = 1$. 圆柱介质柱四方晶格和三角晶格的直径分别为 D_1 、 D_2 , 表面缺陷(圆柱介质柱)的直径分别为 d_1 、 d_2 ; 正方介质柱四方晶格和三角晶格的边长分别为 L_1 、 L_2 , 表面缺陷(正方介质柱)的边长分别为 l_1 、 l_2 .

值稍稍小于圆柱介质柱, 且稍向介质柱尺寸小的方向偏移.

3.2 表面模式的计算

采用平面波展开法获得表面模需要进行两次模式计算: 第一次为无限对称光子晶体的常规模式, 第二次为表面截断的光子晶体的缺陷模式.

图 3 是模型示意图. 当取圆柱介质柱四方晶格的参量 $D_1 = 0.35a$, $d_1 = 0.5D_1$ 时, 两次计算的结果分别如图 4(a) 和 (b). 图 4(a) 是常规模式的分布, 图中模式所标的级数从下往上递增, 即最底下的为常规模式 1, 最上面的为常规模式 10, 4(b) 同理. 带隙存在于常规模式 1 和常规模式 2 之间, 因此只需考虑常规模式 1、常规模式 2 之间的表面模分布. 将图 4(a) 和 (b) 结合, 表面晶胞的缺陷模式 2 至缺陷模式 10 均位于带隙上方, 故可不考虑, 结果如图 4(c). 表面模式的研究是沿着表面缺陷方向, 即 $K(x)$ 方向, 只需 K 矢量系数从 1 至 6 时的缺陷模式分布, 如图 4(d).

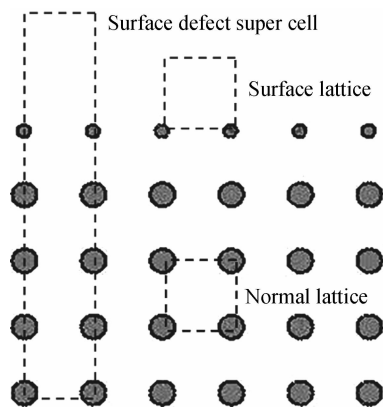


图3 光子晶体模型
Fig. 3 The photonic crystals model

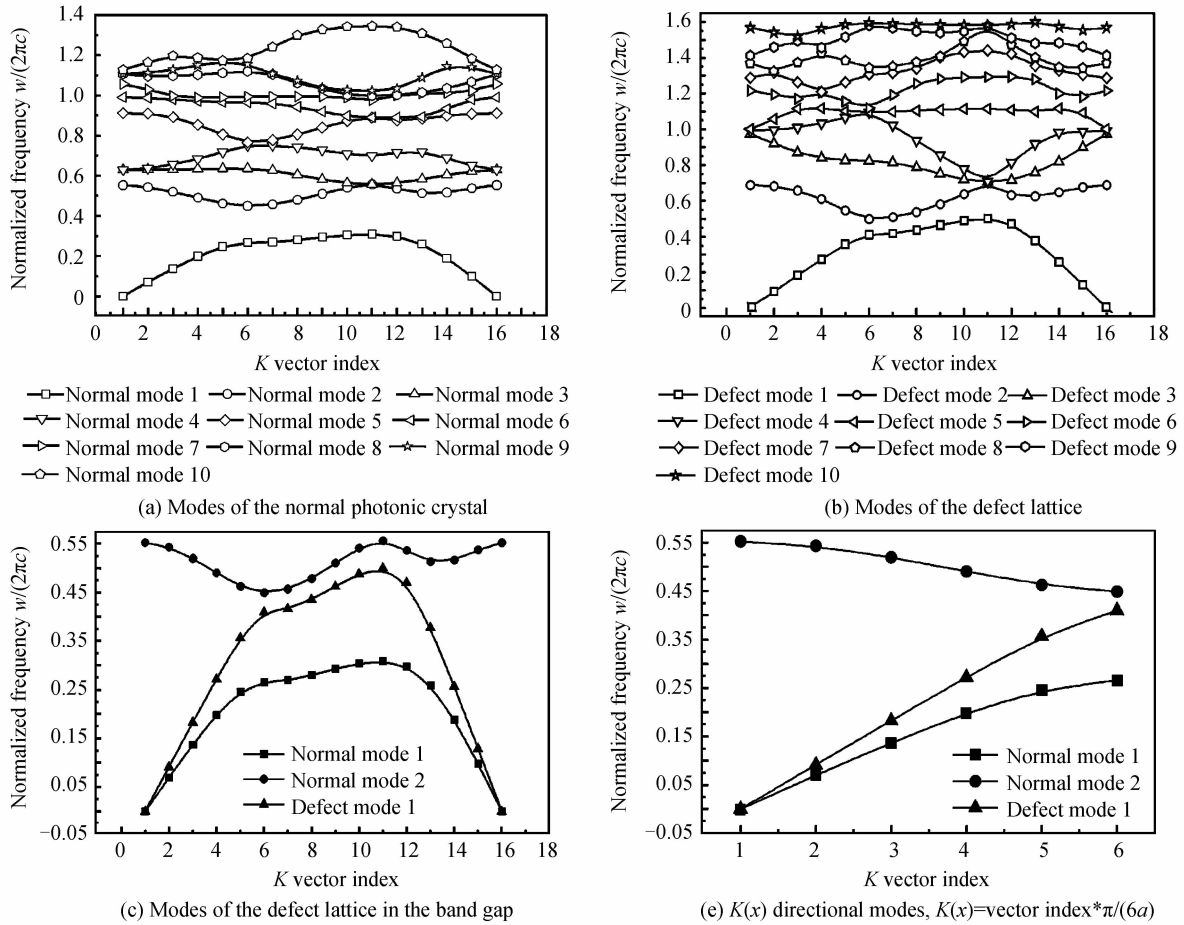


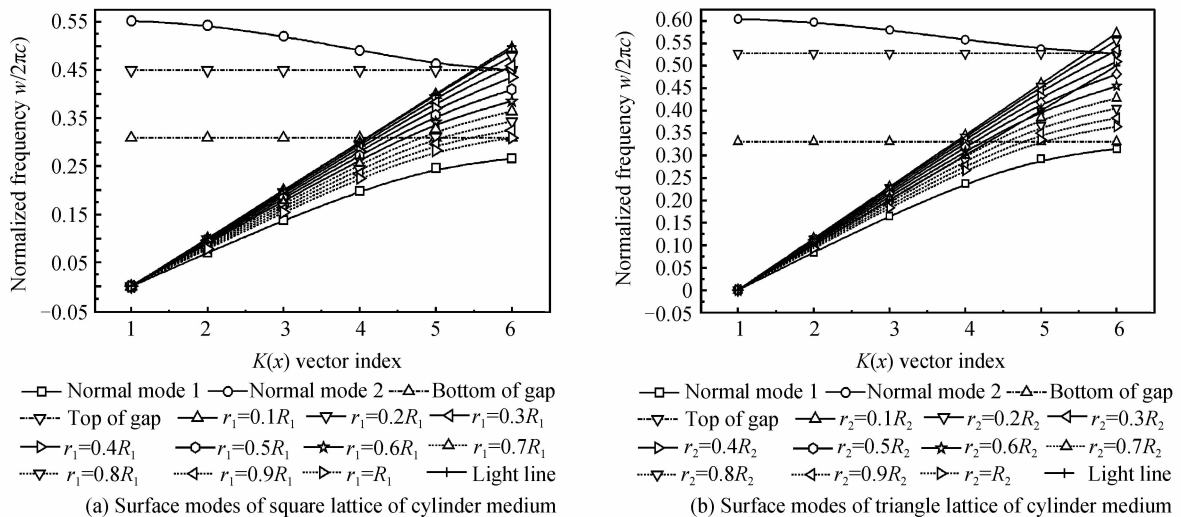
图 4 表面模计算方法

Fig. 4 Method of calculating the surface modes

根据这种方法,改变 d_1 值从 $0.1D_1$ 至 D_1 , 以获得不同表面介质柱尺寸时的表面模,如图 5(a)。类似的,计算得到圆柱介质柱三角晶格、正方介质柱四方晶格、正方介质柱三角晶格的表面模,如图 5(b)~(d)。

由图 5(a)和(c)可知,四方晶格结构中的圆柱介质柱和正方介质柱表面模式类似:其缺陷模式均位于光锥边缘线以下, d_1/D_1 (等于 r_1/R_1) 和 l_1/L_1

等于 1 时的缺陷模式在带隙下方; d_1/D_1 和 l_1/L_1 等于 0.1 至 0.3 时缺陷模式包含整个带隙区域; d_1/D_1 和 l_1/L_1 等于 0.4 至 0.9 时缺陷模式包含部分带隙区域,且包含的带隙区域随着比例的增加而减少。如图 5(b)和(d)所示,三角晶格结构中的圆柱介质柱和正方介质柱三角晶格的表面模式类似:当 d_2/D_2 (等于 r_2/R_2) 和 l_2/L_2 等于 0.1 至 0.4 时,其缺陷模式位于光锥边缘线以上,即在光锥区域内;当



(a) Surface modes of square lattice of cylinder medium

(b) Surface modes of triangle lattice of cylinder medium

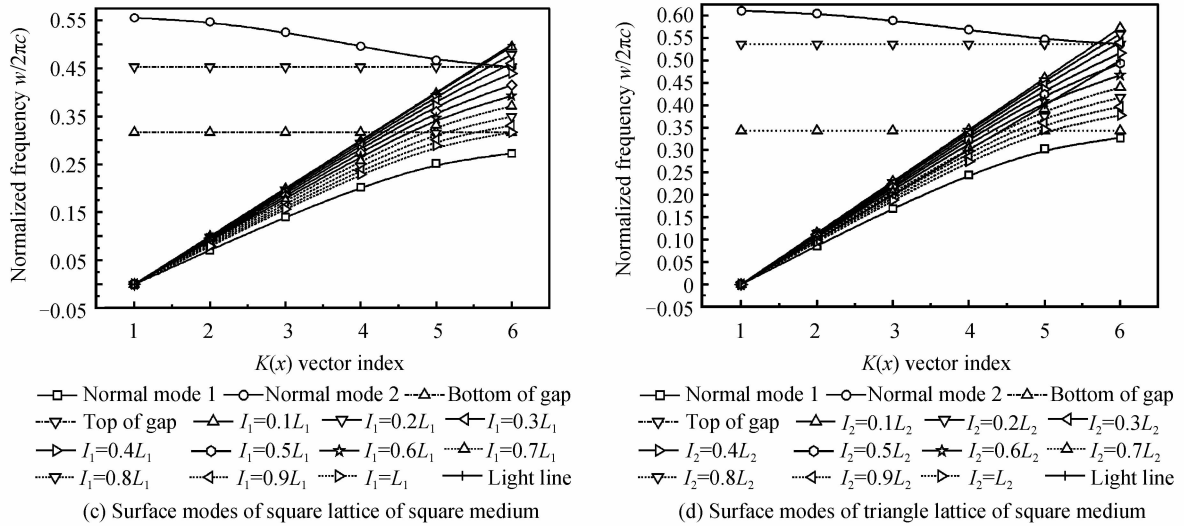


图 5 四种晶格的表面模式
Fig. 5 Surface modes of four lattices

d_2/D_2 和 l_2/L_2 等于 0.5 至 0.6 时,缺陷模式部分落在光锥边缘线以下,且包含部分带隙区域;当 d_2/D_2 和 l_2/L_2 等于 0.7 至 1 时,缺陷模式包含部分带隙区域,且包含的带隙区域随着比例的增加而减少. 上述结果中的位于光锥边缘线以下同时包含带隙区域的模式可作为表面模传播^[14]. 与三角晶格相比,四方晶格光子晶体表面介质柱尺寸的变化范围可以更大,但能获取表面模式频率范围较小.

根据本文所提计算表面模式的方法可以得出任意一种想要获取的表面模式,只要满足该模式位于常规晶格的带隙内且处在光锥边缘线以下的表面缺陷晶胞模式内两个条件. 如想获得常用通信波长为 $1.55 \mu\text{m}$ 的表面模,首先需要找到带隙包含 $1.55 \mu\text{m}$ 的晶体结构(将上述研究中的圆柱介质柱四方晶格

的晶格参量 a 设定为 0.61 即可),然后计算找到包含 $1.55 \mu\text{m}$ 同时处在光锥边缘线以下的表面模式,且该模式距离光锥边缘线越远,越强地限制在晶体表面传播.

4 表面模式的仿真验证

采用时域有限差分法模拟光沿着二维光子晶体表面传导的情况,对上述用平面波展开法计算的表面模式结果进行验证.

当取圆介质柱四方晶格的 $d=0.5D$ 时,其可作为表面模传导的归一化频率位于 0.308 5 至 0.410 1 之间,即波长位于 $2.438 \mu\text{m}$ 至 $3.241 \mu\text{m}$ 之间. 当波长为 $2.2 \mu\text{m}$ 、 $2.5 \mu\text{m}$ 和 $3.2 \mu\text{m}$ 的光沿着其表面传播时,波印廷矢量分布如图 6.

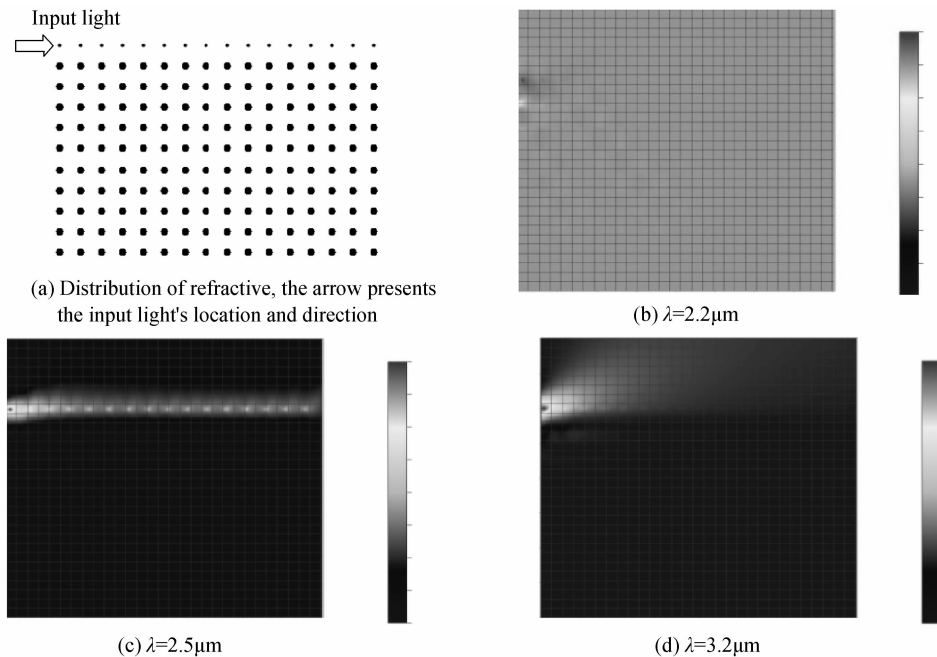


图 6 表面模导光的波印廷矢量分布
Fig. 6 Poynting vector distribution about guiding light by the surface modes

从图 6 中可以看出,当入射波长位于表面模式外时,其沿着表面介质柱的传播很快消逝,如 6(b);当入射波长位于表面模式内时,入射波的大部分都沿着表面介质柱传播,理想地将光波控制在晶体表面,如 6(c);当入射波长处在表面模式内但靠近光锥边缘线时,虽然也可以沿着表面传播,但大部分的光强传播到空气中,损耗非常大,如 6(d).

可见,时域有限差分法的模拟结果非常符合平面波展开法计算得到的表面模式结果.

5 结论

利用平面波展开法计算了不同晶格结构单元光子晶体的能带结构和表面缺陷模. 得到如下结论:

1)随着介质柱尺寸的增加,四种晶格的带隙宽度均先增大后减小,并有最大值. 介质柱的几何形状相同的条件下,三角晶格结构比正方晶格结构产生较大的带隙.

2)随着表面介质柱尺寸的增加,相同晶格结构的表面模曲线逐渐下降. 与三角晶格相比,四方晶格光子晶体的表面介质柱尺寸的变化范围更大,能获得表面模式频率范围较小. 只有当入射光的波长位于可作为表面模式传导的频率范围内,才能比较好的限制在晶体表面传播. 否则光将向空气或晶体中传播,使得沿表面方向的光强迅速减弱消逝.

研究表明,本文提出的光子晶体表面模计算方法可以获得任何波段的表面模,只要满足该波段位于常规晶格的带隙内和该模式处在光锥边缘线以下的表面缺陷模式内这两个条件.

参考文献

- [1] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Physical Review Letters*, 1987, **58**(23): 2486-9.
- [2] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Physical Review Letters*, 1987, **58**(20): 2059-62.
- [3] FENG Gang, GAO Li-na, HAO Dong-shan. Influence of photonic band gap in non-uniform plasma photonic crystals induced by Compton scattering[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(7): 1071-5.
冯刚, 高丽娜, 郝东山. Compton 散射对非均匀等离子体光子晶体光子带隙的影响[J]. *光子学报*, 2011, **40**(7): 1071-5.
- [4] MEADE R D, BROMMER K D, RAPPE A M, *et al.* Electromagnetic Bloch waves at the surface of a photonic crystal[J]. *Physical Review B*, 1991, **44**(19): 10961-C4.
- [5] TARHAN, WATSON G H. Analytical expression for the optimized stop bands of fcc photonic crystals in the scalar-wave approximation[J]. *Physical Review B*, 1996, **54**(11): 7593.
- [6] SUN Lu-lu, SHEN Yi-feng, WANG Juan, *et al.* Efficient polarization beam splitter based on two-dimensional photonic crystal[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2010, **39**(10): 1795-9.
孙露露, 沈义峰, 王娟, 等. 二维高效光子晶体偏振分束器[J]. *光子学报*, 2010, **39**(10): 1795-9.

- [7] LI Peng, FENG Li-shuang, CHEN Shu-ying, *et al.* Design of photonic crystal micro-mirrors in ring resonant cavity[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(3): 358-62.
李鹏, 冯丽爽, 陈淑英, 等. 构成环形谐振腔的光子晶体微镜设计[J]. *光子学报*, 2011, **40**(3): 358-62.
- [8] ZHANG Xiao-juan, ZHAO Jian-lin, FANG Liang. Analysis of pulse trapping characteristic in highly birefringent photonic crystal fiber[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2011, **40**(8): 1154-60.
张晓娟, 赵建林, 方亮. 一种高双折射光子晶体光纤中的脉冲俘获分析[J]. *光子学报*, 2011, **40**(8): 1154-60.
- [9] MEADE R D, RAPPE A, BROMMER K, *et al.* Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials [J]. *Physical Review B*, 1993, **48**(11): 8434-7.
- [10] HU X, SHEN Y, LIU X, *et al.* Superlensing effect in liquid surface waves [J]. *Physical Review E*, 2004, **69**(3): 030201.
- [11] ARTIGAS D, TORNER L. Dyakonov surface waves in photonic metamaterials[J]. *Physical Review Letters*, 2005, **94**(1):
- [12] FOTEINOPOULOU S, KAFESAKI M, ECONOMOU E, *et al.* Backward surface waves at photonic crystals [J]. *Physical Review B*, 2007, **75**(24): 245116.
- [13] CAGLAYAN H, BULU I, OZBAY E. Off-axis directional beaming via photonic crystal surface modes [J]. *Applied Physics Letters*, 2008, **92**(9): 092114.
- [14] JOANNOUPOULOS J, MEADE R, WINN J. Photonic crystals: molding the flow of light[M]. Princeton: Princeton University Press, 1995.
- [15] MORENO E, GARC A-VIDAL F, MART N-MORENO L. Enhanced transmission and beaming of light via photonic crystal surface modes [J]. *Physical Review B*, 2004, **69**(12): 121402.
- [16] MORENO E, MARTINMORENO L, GARCIAVIDAL F. Efficient coupling of light into and out of a photonic crystal waveguide via surface modes [J]. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 2004, **2**(2): 97-102.
- [17] BULU I, CAGLAYAN H, OZBAY E. Beaming of light and enhanced transmission via surface modes of photonic crystals [J]. *Optics Letters*, 2005, **30**(22): 3078-80.
- [18] ZHAO D, ZHOU C, ZHANG Y, *et al.* Vertical cavity-surface emitting photonic crystal surface-mode lasers [J]. *Applied Physics B*, 2008, **91**(3-4): 475-8.
- [19] SONG D S, KIM S H, PARK H G, *et al.* Single-fundamental-mode photonic-crystal vertical-cavity surface-emitting lasers[J]. *Applied Physics Letters*, 2002, **80**(21): 3901.
- [20] XIAO S, QIU M. Surface-mode microcavity [J]. *Applied Physics Letters*, 2005, **87**(111102).
- [21] LEHMAN A C, RAFTERY J J, CARNEY P S, *et al.* Coherence of photonic crystal vertical-cavity surface-emitting laser arrays [J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2007, **43**(1): 25-30.
- [22] ISHIZAKI K, NODA S. Manipulation of photons at the surface of three-dimensional photonic crystals [J]. *Nature*, 2009, **460**(7253): 367-70.
- [23] LU T W, HSIAO Y H, HO W D, *et al.* High-index sensitivity of surface mode in photonic crystal hetero-slab-edge microcavity [J]. *Optics Letters*, 2010, **35**(9): 1452-4.
- [24] ELSON J M, TRAN P. Coupled-mode calculation with the R-matrix propagator for the dispersion of surface waves on a truncated photonic crystal [J]. *Physical Review B*, 1996, **54**

- (3): 1711.
- [25] RAMOS-MENDIETA F, HALEVI P. Surface electromagnetic waves in two-dimensional photonic crystals; effect of the position of the surface plane [J]. *Physical Review B*, 1999, **59**(23): 15112.
- [26] HO K, CHAN C, SOUKOULIS C. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Physical Review Letters*, 1990, **65**(25): 3152-5.
- [27] LEUNG K, LIU Y. Photon band structures: The plane-wave method [J]. *Physical Review B*, 1990, **41**(14): 10188.

Surface Modes of Two-dimensional Photonic Crystal Based on Plane Wave Expansion Method

CAI Qing, HUANG Chang-qing, LIANG Pei, DONG Qian-min

(*Institute of Optical and Electrical Engineering of China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*)

Abstract: The relations of band gap widths of four photonic crystal structures (square lattices of cylinder medium, triangle lattices of square medium, square lattices of square medium and triangle lattices of square medium) and the size of medium are studied by the plane wave expansion method. Then the plane wave expansion method is used to calculate the modes of normal lattices and surface defect lattices, and composite the results. The results show that the band gap width of the same photonic crystal lattice increases at first and then decreases. The maximum of band gap width is obtained. The surface mode curves of the four lattices are all declining as the size of surface medium column increase. The square lattices, comparing with the triangle lattices, could have a larger range to change the size of the surface medium column, but get a smaller surface mode range.

Key words: Photonic crystal; Plane wave expansion method; Band gap width; Surface mode