doi:10.3788/gzxb20164503.0319002

三角晶格有耗色散光子晶体的能带结构分析

牛凯坤1,王丽华1,黄志祥1,吴博1,况晓静1,吴先良1,2

(1 安徽大学 计算智能与信号处理教育部重点实验室,合肥 230039)(2 合肥师范学院 电子信息工程学院,合肥 230061)

摘 要:为探讨有耗色散媒质光子晶体的特性,引入一种计算有耗色散光子晶体能带结构的方法,基于 有限元法将能带结构的计算简化为求解关于 Block 波矢的二次特征值问题,可以有效地得到色散材料 光子晶体的能带结构和特征模.分析了三角晶格介质光子晶体能带结构并与现有方法对比,结果表明两 种方法在 TM 模和 TE 模下得到的能带结构完全相同,验证了该方法的有效性.分析了无耗及有耗色散 光子晶体的能带结构,发现无耗光子晶体场强集中于色散媒质与空气的接触面,并呈现出明显的表面等 离激元特性,具有对称性,而有耗光子晶体场强减小,表面等离激元变弱,对称性被破坏. 相关结果可为 有耗色散光子晶体以及表面等离激元的研究提供参考.

关键词:光子晶体;能带结构;有限元法;光子带隙;表面等离激元 中图分类号:O734+.1 文献标识码:A 文章编号:1004-4213(2016)03-0319002-6

Band Structure of Triangular Lattices Photonic Crystals with Lossy and Dispersive Materials

NIU Kai-kun¹, WANG Li-hua¹, HUANG Zhi-xiang¹, WU Bo¹, KUANG Xiao-jing¹, WU Xian-liang^{1, 2}

(1 Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing, Anhui University, Hefei 230039, China)
(2 Electronic and Information Engineering School, Hefei Normal University, Hefei 230061, China)

Abstract: In order to explore the properties of photonic crystals, the finite element method was introduced to calculate the band structure of lossy and dispersive photonic crystals with triangular lattice. By using this method, the calculation of band structure is reduced to a quadratic eigenvalue problem which the eigenvalue is the Bloch wave vector, the band structure and eigenmode can be obtained more effectively. The band structure in the TE and TM mode of photonic crystals with dielectric material in triangular lattice was compared with the reference to demonstrate the accuracy of the method. Furthermore, the dispersion relation of the lossy and lossless photonic crystals was also given by the proposed method. The symmetry and surface plasmon polarizations properties are found in lossless photonic crystals and electric field distributions are concentrated on the interface of dispersive materials and air. It is demonstrated in the lossy photonic crystals that the symmetry is destroyed, the surface plasmon polarizations properties are weakened and electric field density is decreased. The results can be used as theoretical basis and reference for studying the lossy photonic crystals and surface plasmon polarizations.

Key words: Photonic crystals; Band structure; Finite element method; Photonic band gap; Surface plasmon

OCIS Codes: 190.4400; 050.5298; 200.0200; 160.5298; 240.6680

第一作者:牛凯坤(1992-),男,硕士研究生,主要研究方向为光学计算和新型电磁材料.Email:kkniuahu@gmail.com

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 61101064,51277001,61471001)、教育部博士学科点专项基金(No. 20123401110009)、安徽省自然基金(Nos. 2013SQRL065ZD,1508085JGD03, 1508085QF130)和教育部新世纪优秀人才支持计划(No. NCET-12-0596)资助

导师(通讯作者):黄志祥(1979-),男,教授,博士,主要研究方向为电磁高性能计算、新型电磁材料和新型天线设计.Email:zxhuang@ahu.edu.cn

0 引言

光子晶体(Photonic Crystals, PCs)是由不同介电 常量的材料,在空间中按一定周期排列组成的人工结 构.两种材料的介电常量相差足够大时,在这两种材料 界面上会出现布拉格散射,从而产生光子带隙 (Photonic Band Gap, PBG),当光的能量落在光子带隙 处时将不能传播.光波可以分解为TM模和TE模,如 果 PBG在两种模式中均存在,且互相有重叠的部分, 则形成完全光子带隙.PBG是光子晶体许多实际应用 的基础,如光波导、光子晶体滤波器和光子晶体激光 器^[1-3]等,通过改变 PBG 结构的对称性、占空比和材料 的介电常量可以控制光子晶体的能带结构,得到这些 实际应用所需要的特性.

介质构成的不同结构光子晶体的研究已取得一定 的进展,而在实际应用中,并非所有光子晶体都是由介 质构成,多数材料是有耗色散媒质,如贵金属可以激发 表面等离激元^[4],这一特性在光探测方面有广泛的应 用,大多数贵金属在光波段都具有色散性.一些新型 人工材料^[5]的电磁参量通常情况下也是频率的函数, 所以对有耗色散光子晶体进行研究有重要的意义.当 材料介电常量与频率无关时,光子带隙的求解是一个 标准的线性本征值问题.如果材料为色散材料而且有 损耗,光子带隙的计算就是一个复杂的非线性本征值 方程求解问题, 计算耗时目计算所需内存量较大. 传 统光子带隙计算方法[6-7] 在计算色散关系时, 给定布 洛赫波矢 k, 频率 ω 作为本征值($\omega = \omega(k)$). 如果光子 晶体材料是色散的,则布洛赫波矢 k 为复数,传统方 法求解难度增大,此时需要将布洛赫波矢 k 作为本征 值 $(k = k(\omega))$.

学者们先后提出了很多求解光子晶体能带结构的 数值方法,如平面波展开法^[8]、传输矩阵法^[9-11]、时域有 限差分法[12]等.在传统平面波展开法中,给定沿不可 约布里渊区边界的 Bloch 波矢 k,以频率作为特征值计 算光子晶体的能带结构.当构成光子晶体的材料为色 散媒质时,平面波展开法遇到困难.而在改进平面波展 开法[13-15] 中,由于色散媒质的表面等离激元极化 (Surface Plasmon Polarizations, SPP) 特性,计算遇到 特征模的收敛问题.传输矩阵法一般用于计算复杂晶 体结构的透射、反射系数,对光子晶体物理概念的理解 帮助不大.时域有限差分法[16]虽然可以计算色散光子 晶体的能带结构,但计算耗时且不能直接得出特征模的 分布.另外,当光子晶体由有耗色散媒质构成时,能带结 构将更加复杂,现有方法很难求解,具体到三角晶格光 子晶体,时域有限差分与频域有限差分^[17]等方法在网 格剖分的时候都是矩形网格,剖分比较复杂,会引入阶 梯误差,使得准确度下降,因此,需要提出一种有效的方

法对有耗色散光子晶体能带结构和特征模进行研究.

本文基于有限元法,以 Bloch 波矢 k 作为特征值, 计算了由介质构成的三角晶格光子晶体的能带结构, 并验证了该算法的正确性和有效性.在计算色散光子 晶体时,利用后处理程序选出合适的特征模,分别得到 了无耗及有耗色散光子晶体的能带结构,并分析了损 耗对场分布的影响.

1 基本理论

电磁波在光子晶体中的传播通常用波动方程来描述,即

$$\nabla \left(p \nabla \phi \right) + \frac{\omega^2}{c^2} q \phi = 0 \tag{1}$$

对于 TM 模: $\phi = E_{\varepsilon}, p = \mu^{-1}, q = \varepsilon$; 对于 TE 模: $\phi = H_{\varepsilon}, p = \varepsilon^{-1}, q = \mu$. 其中, μ 和 $\varepsilon = 分别是材料的相对磁 导率和相对介电常量.$

二维光子晶体是由不同介电常量的材料在二维平 面(设为 *x*-*y* 平面)上周期性排列形成的人工结构.该 结构的介电常量在 *z* 方向上分布均匀,在 *x*-*y* 平面上 呈周期性变化.由于这里的介电常量具有周期性,根据 Bloch 理论,此时场也具有周期性,即

 $\varphi = u(r)e^{(-ik \cdot r)}$ (2)
式中, k 是 Bloch 波矢. 将式(2)代人式(1),得 $\nabla (p \nabla u) - i\nabla (pku) - ik \cdot p\nabla u - k^2 pu = -\frac{\omega^2}{c^2} qu$ (3)
为了利用有限元方法,首先对式(3)两边同乘以检验函

数
$$f_{\text{test}}$$
,得

$$\nabla \left[p\left(\nabla u\right) f_{\text{test}} \right] - p \nabla u \nabla f_{\text{test}} - i \nabla \left(p \mathbf{k} u f_{\text{test}} \right) + i \mathbf{k} \left\{ p u \nabla f_{\text{test}} - \left[p\left(\nabla u\right) \right] f_{\text{test}} \right\} - k^2 p u f_{\text{test}} = -\frac{\omega^2}{c^2} q u f_{\text{test}}$$
(4)

式(4)对原胞所围的闭合区域Ω进行积分,得

$$ik \left\{ \iint_{\Omega} (puk \nabla f_{\text{test}}) \,\mathrm{d}\Omega - \iint_{\Omega} pk (\nabla u) f_{\text{test}} \,\mathrm{d}\Omega \right\} + k^{2} \iint_{\Omega} pu f_{\text{test}} \,\mathrm{d}\Omega - \oint_{l} pf_{\text{test}} (\nabla u - iku) n \,\mathrm{d}l = 0 \quad (6)$$

式中,*n* 是边界 l 上的单位外法向量, $k = k_0 + \lambda k_n$ 是第 一布里渊区内的 Bloch 波矢, k_0 是偏移向量, k_n 是单位 方向向量.

根据连续边界条件,式(6)中的线积分项为零.则



2 数值计算与结果

对称性引起的能级简并会影响光子晶体的能带结

构. 三角晶格空气柱光子晶体较低的对称性有助于消除能级简并,从而易产生较大带隙. 本文所计算的结构为相对介电常量 ε_a=1的无限长空气圆柱在相对介电常量为ε_b的背景材料中周期性排列形成的二维三角晶格光子晶体.圆柱半径 r=0.48α,α 是光子晶体的晶格常量.圆柱轴线与z轴平行,二维周期结构分布在 x y 平面内,如图 1(a).其中,六边形阴影部分表示三角晶格的原胞.



图1 三角晶格光子晶体

Fig. 1 Triangular lattices photonic crystal

三角晶格在正空间的基矢为 $a_1 = \alpha(1/2, \sqrt{3}/2)$, $a_2 = \alpha(1/2, -\sqrt{3}/2)$;在倒易空间中的倒格矢为 $b_1 = (1, 1/\sqrt{3})2\pi/\alpha$, $b_2 = (1, -1/\sqrt{3})2\pi/\alpha$.图1(b)是三角晶格的第一布里渊区.其中,黑色阴影部分是三角晶格的不可约布里渊区,其边界上高对称点的坐标分别是 $\Gamma = (0,0), M = (0, 1/\sqrt{3})2\pi/\alpha$, $K = (1/3, 1/\sqrt{3})2\pi/\alpha$.基于有限元法,将三角晶格的原胞进行离散,形成如图1(c)所示的离散空间,沿不可约布里渊区边界计算式(7)中的特征值,得到能带结构.

2.1 介质构成的光子晶体

计算由空气柱在 ε_b=13 的背景介质中周期排列构 成的三角晶格光子晶体,得到的能带结构如图 2,与文 献[7]中的结果一致,证明了本文算法的有效性.同时 可以注意到,在 TM 模和 TE 模下,三角晶格光子晶体





分别出现较大带隙.当归一化频率 $\Omega = \omega/\omega_p$ 在0.431 ω_p 至 0.522 ω_p 之间时,PBG 出现重叠,形成完全光子带 隙.其中, $\omega_p = 2\pi c/\alpha$.此时,沿 *xy* 平面内所有方向的 电磁波都将不能传播.

2.2 无耗色散光子晶体

现考虑空气柱在色散媒质中的周期排列,构成色 散光子晶体.利用 Drude 模型表示色散媒质的介电常 量^[19],即

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_{\rm p}^2}{\omega^2 + i\omega\omega_{\rm c}} \tag{8}$$

式中, $\omega_p = 2\pi c/\alpha$ 是材料的等离子体频率, ω_e 是衰减系数.当 $\omega_e = 0$ 时,表示材料为无耗色散媒质.考虑 r=0.48 α 的空气柱在 $\varepsilon_b = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ 的无耗色散媒质中 周期排列构成的三角晶格光子晶体,在TE模下的能 带结构如图 3.在归一化频率小于 0.236 ω_p 时,没有特 征模,称频点0.236 ω_p 为光子晶体的截止频率.由于









图 4 三角晶格无耗色散光子晶体在 TE 模下的磁场分布 H_z Fig. 4 The distributions of field H_z in the triangular lattice photonic crystal with lossless dispersive material for TE modes

SPP 特性, 归一化频率在 0.5 至 0.6ω, 之间的能带较 为平坦.图 3(b)是 0.5 至 0.6ω, 频段的放大图.可以看 到, 三角晶格无耗色散光子晶体在 TE 模下出现两条 较窄的 PBG.为了研究这部分平坦能带的物理特性, 分 析了无耗色散光子晶体在不同频率处的磁场分布.如 图 4(a),由于 SPP 是沿两种介质界面传播的表面波, 当归一化频率为 0.03ω_p 时,磁场集中在空气柱以及两 种介质的界面上,并且在以色散媒质为背景的材料中 迅速衰减.当归一化频率为 0.571ω_p 时的磁场分布如 图 4(b).可以发现,此时场强集中在色散媒质与空气 的接触面,具有对称性,并呈现出明显的 SPP 特性.

三角晶格无耗色散光子晶体在 TM 模下的能带结构如图 5. 截止频率为 0. $368\omega_p$, 在 0. $681 \ge 0.733\omega_p$ 频段内出现 PBG.



图 5 三角晶格无耗色散光子晶体在 TM 模下的能带结构 Fig. 5 TM dispersion relation of the triangular lattice photonic

crystal with lossless dispersive material

2.3 有耗色散光子晶体

当衰減系数 $\omega_c = 0.01 \omega_p$ 时, $r = 0.48 \alpha$ 的空气柱在 $\varepsilon_b = 1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + 0.01 i \omega \omega_p)$ 的媒质中周期排列构成三角 晶格有耗色散光子晶体.在 TE 模下,沿 ΓM 方向的能 带结构如图 6.在图 6(a)中,归一化频率 0 至 0.239 ω_p 之间出现类似 PBG 的区域;归一化频率 0.43 至 0.45 ω_p 之间,能带较为平坦,在这些曲线上的群速为 零,此时为表面等离激元模.对比图 6(b)中相应的频 段可以发现,此时Block 波矢 k的虚部较大,表现为损



图 6 当 ω_c=0.01ω_p 时的三角晶格有耗色散光子晶体 在 TE 模下的能带结构

Fig. 6 TE dispersion relation of the triangular lattice photonic crystal with lossy dispersive material when $\omega_c = 0.01 \omega_p$ 耗较高.

为了更深入地分析有耗光子晶体的特性,在归一 化频率为 0.571 ω_p 处,分别给出了 $\omega_e = 0$ 以及 $\omega_e =$ 0.01 ω_p 处电场的 x 分量分布,如图 7.可以观察到,此时 电场都呈 SPP 模,集中在空气与媒质接触面上,并向 周围迅速衰减.无耗色散光子晶体的电场强度最大值 为 140 V/m,场分布较集中,且具有对称性,相比于有 耗光子晶体,其场值更集中于接触面上.而有耗光子晶 体的电场强度最大值 40 V/m,明显减小,即此时的表 面等离激元变弱,而随着损耗的增大,场分布的对称 性被破坏且趋于集中在一个方向上.





- 图 7 归一化频率为 0.571 wp 时,三角晶格光子晶体在 TE 模下的电场分布 E_x
- Fig. 7 The E_x field distributions when the normalized frequency is $\omega = 0.571 \omega_p$

在 TM 模下, $\omega_c = 0.01\omega_p$ 的有耗色散光子晶体的 能带结构如图 8. 与 TE 模下类似,在 0 至 0.368 ω_p 频 段和 0.651 至 0.734 ω_p 频段内分别出现类似 PBG 的区 域,区域内的群速为无穷大.



图 8 当 ω_c = 0.01ω_p 时的三角晶格有耗色散光子晶体在 TM 模下的能带结构

Fig. 8 TM dispersion relation of the triangular lattice photonic crystal with lossy dispersive material when $\omega_{\rm c} = 0.01 \omega_{\rm p}$

3 结论

本文基于有限元法计算了由介质构成的三角晶格 光子晶体的能带结构.在此基础上,分别计算了无耗色 散光子晶体和有耗色散光子晶体的能带结构,并分析 了损耗对能带结构以及场分布的影响.结果表明,ε,= 13 的介质三角晶格光子晶体出现带宽为 0.091ω, 的完 全带隙.结构不变,当材料的介电常量为无耗色散媒质 时,三角晶格光子晶体出现截止频率且能带向高频移 动,在TE模下出现带宽较小的双禁带,并在归一化频 率为 0.571ω。时,呈现较明显的 SPP 特性,场强分布较 为集中,对称性较好;在TM模下出现带宽为0.052ω。 的 PBG. 当衰减系数 $\omega_c = 0.01 \omega_n$ 时,三角晶格有耗色 散光子晶体在 TM 模下、0.63 至 0.72ω。频段内能带出 现类似 PBG 的结构,此时群速度为无穷大;材料为有 耗媒质时场强相对于无耗时明显减小且场分布没有无 耗时集中.该方法能有效计算有耗色散媒质光子晶体 的非线性光学问题,对理解有耗光子晶体的光学现象 和物理特性有重要意义.相关结果可以为有耗色散光 子晶体以及表面等离激元的研究提供理论基础.

参考文献

[1] NODA S, CHUTINAN A, IMADA M. Trapping and emission of photons by a single defect in a photonic bandgap structure[J]. Nature, 2000, 407(6804): 608-610.

- [2] PAINTER O, LEER K, SCHERER A, et al. Twodimensional photonic band-gap defect mode laser[J]. Science, 1999, 284(11): 1819-1821.
- [3] FANS H, JOHNSONS G, JOANNOPOULOSJ D, et al. Waveguide branches in photonic crystals[J]. Optical Society of America B, 2001, 18(2): 162-165.
- [4] NIU Kai-kun, LI Xue-wei, ZHANG Jun-long, et al. Restoring Casimir force between doped silicon slab and metamaterials[J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43 (11): 1116003.

牛凯坤,李学伟,张俊龙,等. 掺杂硅片与电磁超材料间的 Casimir 平衡恢复力[J]. 光子学报, 2014, **43**(11): 1116003.

- [5] DAVANCOM, URZHUMOV Y, SHVETS G. The complex bloch bands of a 2D plasmonic crystal displaying istropic negative refraction[J]. Optics Express, 2007, 15(15): 9681-9691.
- [6] GUO S P, WU F, SACHARIA A, et al. Photonica band gap analysis using finite-difference-frequency-domain method [J]. Optics Express, 2004, 12(8): 1741-1746.
- QIU M, HES L. Large complete band gap in two-dimensional photonic with elliptic air holes[J]. *Physical Review B*, 1999, 60(15): 10610-10612.
- [8] BOTTENL C, ASATRYANA A, LANGTRYT N, et al. Semianalytic treatment for propagation in finite photonic crystal waveguides[J]. Optics Letters, 2003, 28(10): 854-856.
- [9] LIZ Y, LINL L. Photonic band structures solved by a planewave-based transfer-matrix method[J]. *Phycical Review E*, 2003, 67(4): 046607.
- [10] HUANGK C, BIENSTMANP, JOANNOPOULOSJ D, et al. Field expulsion and reconfiguration in polaritonic photonic crystals[J]. Physical Review Letters, 2003, 90(19): 196402-196405.
- [11] ZHU Z, BROWNT G. Full-vectorial finite-difference analysis of microstructured optical fibers[J]. *Optics Express*, 2002, **10**

(17): 853-864.

- [12] SHIS Y, CHENC H, PRATHERD W. Revised plane wave method for dispersive material and its application to band structure calculations of photonic crystal slabs[J]. Applied Physics Letters, 2005, 86(4): 043104.
- [13] JIANG B, ZHOU W J, CHEN W, et al. Improved planewave expansion method for band structure calculation of metal photonic crystal[J]. Chinese Physics Letters, 2011, 28 (3): 034209.
- [14] JIANG B, ZHOU W J, LIU A J, et al. Improved combined wave number eigenvalue equations method for band structure calculations of metal photonic crystal [J]. Optics Communications, 2012, 285(7): 1859-1863.
- [15] HUANG Z X, KOSCHNY T, SOUKOULIS C M, Theory of pump-probe experiments of metallic metamaterials coupled to a gain medium[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108(18): 187402.
- [16] WEI Yuan, XIAO Feng, HUANG Zhi-xiang, et al. Thinfilm solar cell's characteristic with periodic structure based on FDFD method[J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43(1): 0131001.
 魏源,肖峰,黄志祥,等. 基于 FDFD 方法周期结构的薄膜太 阳能电磁特性[J]. 光子学报, 2014,43(1): 0131001.
- [17] CHRIS F, YAROSLAV U, GENNADY S. Complex k band diagrams of 3D metamaterical/photonic crystal [J]. Optics Express, 2011, 19(20):19027-19041.
- [18] JOANNOPOULOSJ D, JOHNSONS G, WINN J N, et al. Photonic crystals molding the flow of light[M]. Princeton: Princeton University Press, 2008, 76-77.
- [19] WANG Hui, SHA Wei, HUANG Zhi-xiang, et al. A novel eigenvalue method for calculating the band structure of lossy and dispersive photonic crystals[J]. Acta Physica Sinica, 2014, 63(18): 184210.
 王辉,沙威,黄志祥,等. 有耗色散光子晶体带隙结构的本征值 分析新方法[J]. 物理学报,2014,63(18):184210.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (Nos. 61101064, 51277001, 61471001), the Doctoral Fund Ministry of Education of China (No. 20123401110009), the Natural Science Foundation of Anhui Province (Nos. KJ2012A013, 1508085JGD03, 1508085QF130), and the New Century Excellent Talents Ministry of Education(NCET-12-0596) of China