

## 不同背景介质下金属 Cu 光子晶体带隙

杨波<sup>1,2</sup>, 梁静秋<sup>1</sup>, 梁中翥<sup>1</sup>, 王维彪<sup>1\*</sup>

(1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033;  
2. 中国科学院研究生院, 北京 100039)

**摘要:**提出了一种利用全反射抑制二维光子晶体表面电磁波泄漏的方法,并计算了不同背景介质下的二维金属 Cu 光子晶体的带隙结构,得到了带隙结构与填充率间的关系曲线.计算方法采用时域有限差分,金属型光子晶体由 Cu 柱构成.分别计算了以空气为背景介质和以 PMMA 为背景介质的正方晶格金属型光子晶体的带隙结构.研究结果表明:以 PMMA 为背景介质的正方晶格金属型光子晶体与以空气为背景介质相比,第一带隙更窄,第二带隙中心频率更低,且在填充率大于 0.70 时将会出现第三带隙.这对进一步扩展这种光子晶体的应用具有良好的参考意义.

**关键词:**金属型光子晶体;带隙;表面泄漏;全反射;第三带隙  
**中图分类号:** O431.1; O734 **文献标识码:** A

## The band structures of metallic photonic crystals filled with different mediums

YANG Bo<sup>1,2</sup>, LIANG Jing-Qiu<sup>1</sup>, LIANG Zhong-Zhu<sup>1</sup>, WANG Wei-Biao<sup>1\*</sup>

(1. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics,  
Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;  
2. Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

**Abstract:** A method is proposed to inhibit the leakage of electromagnetic waves on the surface of 2D photonic crystals using total internal reflection. The band structures of 2D metallic photonic crystals with different background mediums are analyzed. The band structures as a function of the filling factor are obtained via FDTD method. The metallic photonic crystals are composed of Cu columns. Two kinds of background media, air and PMMA, were selected in this study. The band structures of these two 2D square-lattice metallic photonic crystals were analyzed separately. The results indicate that the metallic photonic crystals filled with PMMA have a narrower first band gap and a lower second band gap than the metallic photonic crystals filled with air. A third band gap appears in the metallic photonic crystals with PMMA as the background medium when the filling factor reaches 0.70. This work provides a good reference for the application of photonic crystals.

**Key words:** metallic photonic crystal; band gap; surface leakage; total internal reflection; the third band gap  
**PACS:** 42.70.Qs, 42.79.Gn, 71.55.Ak

### 引言

光子晶体分为很多类型,从结构上分成一维<sup>[1,2]</sup>、二维<sup>[3]</sup>和三维;从材料上分普通介质型、金属型<sup>[4]</sup>和混合型.在普通介质材料的光子晶体中,

空气和介质棒集中了大部分的第一带隙上部与下底频率的电场.对于金属型光子晶体来说,金属棒中基本上不存在电场,波的能量被带边模集中在背景介质(一般为空气).金属型光子晶体相比普通介质型而言,拥有很多的优良特性.例如,对 TM 波来说,零

收稿日期:2011-04-12,修回日期:2011-06-28

Received date: 2011-04-12, revised date: 2011-06-28

基金项目:国家自然科学基金(60877031)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (60877031)

作者简介(Biography): 杨波(1987-),男,湖南湘潭人,硕士研究生,主要从事 WOEFS 与光通信方面的研究. E-mail: yangbo8123@163.com.

\* 通讯作者(Corresponding author); E-mail: wangwb@126.com.

频率与截止频率间存在一个非常宽阔的第一带隙,这在普通介质型中不存在;二维金属型光子晶体在微波波段可用来制作性能优良的反射器、偏振器和滤波器等;在某些波段金属材料对电磁波吸收比较小,接近于完全反射,对电磁波有着非常强的调控作用<sup>[5]</sup>,因此金属型光子晶体的器件尺寸通常要比普通介质材料小,这在体积方面有一定优势,有利于器件的集成;金属型光子晶体相对普通介质材料能承受的功率更高。

计算光子晶体带隙结构的数值方法主要有时域有限差分法(FDTD)<sup>[6]</sup>、平面波展开法<sup>[7-8]</sup>、周期矩量法(PMM)<sup>[9-10]</sup>、时域矩阵法<sup>[11]</sup>等。FDTD方法概念简单,计算和存储量都比较小,只正比于网格的数目,能模拟复杂的半导体介质结构和金属,在电磁场计算和分析中应用非常广泛<sup>[12]</sup>。FDTD方法由Yee氏于1966年提出,C. T. Chan等人于1995年把它用在光子晶体带结构的计算中<sup>[13]</sup>,2001年,Sakoda等人把它推广到金属型光子晶体<sup>[14]</sup>。目前,对金属型光子晶体的研究相对较多的是一维结构,二维结构大都基于正方晶格,以空气为背景介质。波段主要集中在微波、毫米波和远红外<sup>[15-16]</sup>。国内在这方面的研究相对滞后,但也取得了一定的成就,近年来报道的成果主要有:杨光杰等人于2007年对比分析了两种金属型光子晶体间禁带的差异<sup>[17]</sup>;闫斌英等人于2009年针对THz波段金属型光子晶体的带隙及缺陷特性进行了分析<sup>[18]</sup>。

如果背景介质为空气,不采用相应的措施,在二维光子晶体中传播的电磁波将会不可避免的从表面泄漏,目前通常所用的抑制泄漏的方法为在两个表面覆盖高反射率的平板。本文提出了一种利用全反射原理抑制表面电磁波泄漏的方法,即将背景介质换成折射率相对空气更高的聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)。PMMA具有高度透明性,在可见光波段透光率可达90%~92%,大部分红外波段透过率在90%以上,并能透过73.5%的紫外光。如果将这种填充PMMA为背景介质的金属型光子晶体用于制作光子晶体波导等器件,可以减少表面电磁波泄漏引起的损耗。

本文采用FDTD数值计算方法,结合Cu具体的材料参数,考虑其色散特性<sup>[19]</sup>,给出了以空气为背景介质和填充PMMA为背景介质的正方晶格金属型光子晶体的带隙结构。研究结果对金属型光子晶体器件制备及实用等方面具有参考价值。

## 1 理论模型

讨论的结构全部基于正方晶格。图1为二维正方晶格金属型光子晶体,金属柱沿Y轴方向无限长,XZ平面为具有周期性的正方晶格阵列。金属柱的截面为圆形, $R$ 和 $\alpha$ 分别表示直径和晶格常数。

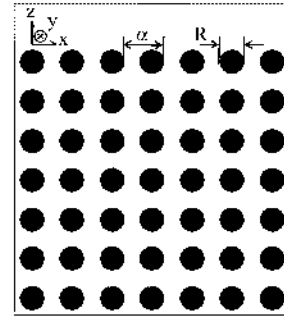


图1 二维正方晶格金属型光子晶体  
Fig. 1 2D square-lattice metallic photonic crystals

当其中的背景介质为空气时,光子晶体的内部和外部都是空气,折射率为 $n_0$ ,如图2(a)所示。当光线在其中传播时,与水平方向成一定角度的光线经过多次反射之后将会不可避免的从表面泄漏进入外界空气。通常的解决方法是在两个表面覆盖高反射率的平板<sup>[20]</sup>,如图3所示。

本文提出另外一种解决方案,即在金属型光子晶体中填充PMMA材料,如图2(b)所示,利用全反射抑制二维光子晶体表面电磁波泄漏。PMMA材料的折射率 $n_1 = 1.49$ ,大于空气折射率 $n_0 = 1$ 。由全反射定律,对于与水平方向成一定角度的光线,只要这个夹角小于临界角 $90^\circ - i_c = 90^\circ - \sin^{-1}(n_0/n_1) = 47.84^\circ$ ,这部份光线就能反射回光子晶体内部,从而抑制光线的表面泄漏。

参考前期工作<sup>[21]</sup>,采用FDTD方法计算金属型光子晶体的带隙结构,该理论从Maxwell方程出发<sup>[14]</sup>

$$\nabla \times E(r, t) = -\mu_0 \frac{\partial H(r, t)}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\nabla \times H(r, t) = \frac{\partial}{\partial t} \{ D_0(r, t) + P_d(r, t) \}, \quad (2)$$

其中, $E(r, t)$ 表示电场, $H(r, t)$ 表示磁场, $\mu_0$ 表示自由空间的磁导率。 $P_d(r, t)$ 为振荡偶极矩。

FDTD方法分离Maxwell方程组有如下的差分形式:

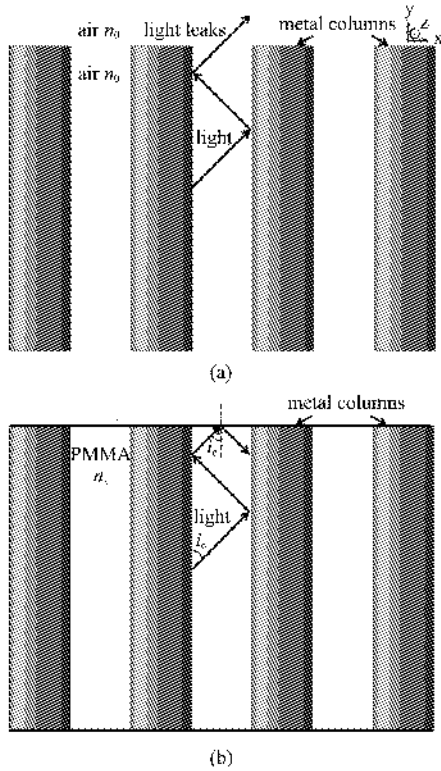


图 2 二维金属型光子晶体侧面视图 (a) 背景介质为空气, (b) 背景介质为 PMMA  
 Fig. 2 Side view of 2D metallic photonic crystals (a) the background medium is air, (b) the background medium is PMMA

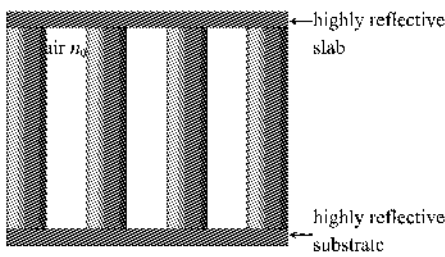


图 3 二维光子晶体覆盖高反射率平板  
 Fig. 3 2D photonic crystals covered with highly reflective slab

$$H_z |_{i,j}^{n+1/2} = H_z |_{i,j}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j}} \left( \frac{E_y |_{i,j+1}^n - E_y |_{i,j}^n}{\Delta x} \right), \quad (3)$$

$$H_x |_{i,j}^{n+1/2} = H_x |_{i,j}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j}} \left( \frac{E_y |_{i,j+1}^n - E_y |_{i,j}^n}{\Delta z} \right), \quad (4)$$

$$E_y |_{i,j}^{n+1} = \frac{\epsilon_{i,j} - \sigma_{i,j} \Delta t / 2}{M} E_y |_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{M} \left( \frac{H_x |_{i,j}^{n+1/2} - H_x |_{i,j-1}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{H_z |_{i,j}^{n+1/2} - H_z |_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta x} \right). \quad (5)$$

电磁场的边界条件采用 Bloch 理论中的周期边界条件<sup>[22]</sup>.

## 2 带隙结构计算及分析

所计算的带隙结构,全部基于 TM 模式. 晶格常数取 1 μm,通过增大金属柱的直径 R,可使填充率  $f = R/\alpha$  逐步从 0.01 增加到 0.78,分析由金属 Cu 构成的以空气为背景介质和以 PMMA 为背景介质的金属型光子晶体的带隙结构. Cu 的介电常量所符合的 Drude 模型参数<sup>[23]</sup>如下:

$$\text{Cu: } \omega_p = 2\pi \times 1914 \text{ THz}, \gamma = 2\pi \times 8.34 \text{ THz}$$

以空气为背景介质和填充 PMMA 为背景介质的二维金属 Cu 光子晶体的带隙结构随填充率的变化曲线分别如图 4 所示.

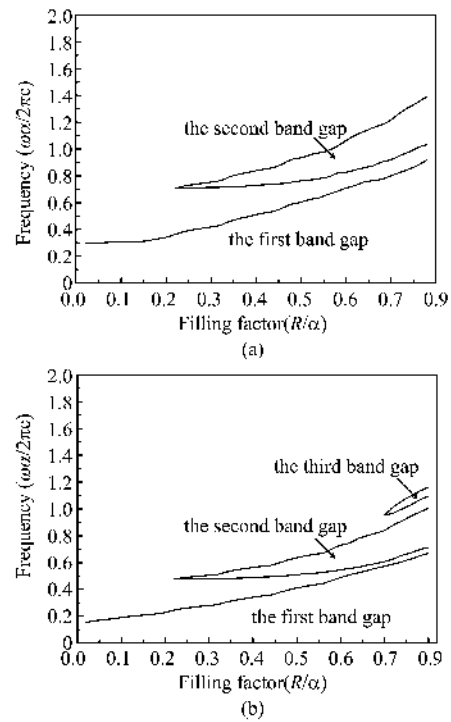


图 4 二维金属 Cu 光子晶体的带隙结构 (a) 背景介质为空气, (b) 背景介质为 PMMA  
 Fig. 4 The band structures of the 2D Cu photonic crystals (a) the background medium is air, (b) the background medium is PMMA

由图 4 可以看出,从零频到某个截止频率, TM 模式在金属型光子晶体中不能传播,以下称作第一带隙. 金属型光子晶体对于 H 极化波来说,不存在这种带隙特性,因为金属型光子晶体对 TE 模式来说是透明的,该模式不会有明显的光子禁带<sup>[18]</sup>. 继续增大金属柱直径 R,第一带隙将会随着展宽,当填充率达到某个值时,第二个光子带隙将会出现在第一带隙的上方,以下称作第二带隙.

不同背景介质的金属 Cu 光子晶体都存在第二

带隙,都在填充率  $f$  达到某个值时出现,如表 1 所示,以 PMMA 为背景介质的值和以空气为背景介质的值一样.

表 1 第二带隙出现时的填充率值(单位  $R/\alpha$ )

Table 1 The filling factor when the second band gap appears(unit:  $R/\alpha$ )

类型	背景介质为空气	背景介质为 PMMA
填充率	0.22	0.22

光子带隙随着填充率  $f$  的增加都会展宽,而且曲线的斜率同样也在变大,当填充率  $f$  接近 1 时,所有的光子带隙将会合并,且变成无限宽.这是因为随着  $R/\alpha$  的增大,相邻的金属柱将互相接触,形成一层金属壁,阻止其中所有的电磁波传播.从图 4(b)中,还发现第三带隙存在于以 PMMA 为背景介质的金属型光子晶体的带隙结构中,该带隙在填充率大于 0.70 时出现,并且三条光子带隙都有展宽合并的趋势.

表 2 带隙结构(填充率为 0.5,单位  $\alpha/\lambda$ )

Table 2 Band structures(filling factor: 0.5, unit:  $\alpha/\lambda$ )

	第一带隙 频率范围	第二带隙 频率范围	第一带隙宽度	第二带隙宽度
背景介质为空气	0~0.60	0.76~0.94	0.60	0.18
背景介质为 PMMA	0~0.41	0.51~0.64	0.41	0.13

通过比较图 4(a)和图 4(b),发现填充 PMMA 为背景介质的金属型光子晶体比填充空气为背景介质的金属型光子晶体第一带隙更窄,第二带隙中心频率更低.表 2 给出了当填充率为 0.5 时的带隙数据.分析其原因:在金属型光子晶体中填充 PMMA 代替空气为背景介质后,由于 PMMA 的折射率比空气大,导致光子晶体中周期排列的两种介质的相对折射率差降低,即金属相对 PMMA 的折射率差比金属相对空气的折射率差要小,光子晶体中周期排列的两种介质相对折射率差的降低导致带隙结构变窄.

组成光子晶体的周期性排列的两种介质的折射率差一般必须大于 2 才能出现光子带隙,由于半导体材料 Si 的折射率一般为 3.4,PMMA 的折射率为 1.49,两者的折射率差为 1.91,小于 2,因此这两种材料组合将很难出现光子带隙.Cu 的折射率(实际上是一个复数)比 Si 大,Cu 与 PMMA 组成的光子晶体的带隙就非常明显,此时,以金属代替常见的半导体介质制作光子晶体的优点也体现了出来.因此,填

充 PMMA 为背景介质的金属型光子晶体可以很好地实现文中提出的利用全反射抑制二维光子晶体表面电磁波泄漏的方法.

### 3 结论

为解决二维光子晶体表面电磁波泄漏引起的损耗,提出了一种利用全反射原理的抑制方法.运用 FDTD 计算了一种满足该方法的光子晶体的带隙结构,即填充 PMMA 为背景介质的金属 Cu 光子晶体.计算结果表明,其具有宽阔的光子带隙,可用于制作光子晶体器件,并将其与空气背景介质下金属 Cu 光子晶体的带隙结构进行了对比分析.通过计算结果发现了金属型光子晶体中第三带隙的存在.由于利用全反射抑制二维光子晶体表面电磁波泄漏的方法抛弃了传统方法中表面附加的高反射率平板,因此该理论的提出有助于进一步减小器件尺寸.

### REFERENCES

- [1] ZHANG Li-Wei, ZHANG Zhi-Wen, LI Hai-Yang, *et al.* One-dimensional photonic crystals consisting of metamaterials based on microstrip transmission lines [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (张利伟, 张治文, 李海洋, 等. 基于基带传输线的由特异材料构成的一维光子晶体. *红外与毫米波学报*), 2009, 28(1): 20-24.
- [2] LIANG Hua-Feng, LAI Jian-Jun, PENG Zhong-Liang, *et al.* Narrow band infrared emitter based on one-dimensional photonic crystals used for gas sensing [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (梁华锋, 赖建军, 彭中良, 等. 用于气体传感的一维光子晶体窄带红外发射光源. *红外与毫米波学报*), 2009, 28(6): 414-417.
- [3] SUN Jia-Zhao, XING Huai-Zhong. Effect of line defects on the band of two dimensional square photonic crystal [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (孙家兆, 邢怀中. 线缺陷对二维四方圆柱形介质光子晶体禁带的影响. *红外与毫米波学报*), 2010, 29(5): 389-391.
- [4] Poilasne G, Pouliguen P, Mahdjoubi K, *et al.* Experimental radiation pattern of dipole inside metallic photonic bandgap material [J]. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1999, 22(1): 10-16.
- [5] Aly A H, Ryus S W. Study of optical properties of metallic photonic crystal [C]. *Proc of SPIE*, 2007, 6722: 67221Z.
- [6] Thevenot M, Reineix A, Jecko B. A new FDTD surface impedance formalism to study PBG structures [J]. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1998, 18(3): 203-206.
- [7] Chan C T. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phy Rev Lett*, 1990, 65(25): 3152-3155.
- [8] Leung K M, Liu Y F. Photo band structures: the plane-wave method [J]. *Physical Review B*, 1990, 4(11): 10188-10190.
- [9] Zhang L J. Numerical characterization of electromagnetic band gap materials and applications in printed antennas and arrays [D]. University of California, 2000.
- [10] Yu H, Yang D. Characteristics of guided and leaky waves

- on multilayer thin-film structures with planar material gratings [J]. *IEEE Trans On MTT*, 1997, **45**(3): 428 - 435.
- [11] Pendry J B, Bell P M. Transfer matrix techniques for electromagnetic waves; Photonic band gap materials [C], 1996, 315; 203 - 228.
- [12] GAO Ben-Qing. *Finite difference time domain method* [M]. Beijing: National Defence Industry Press (高木庆. 时域有限差分法. 北京:国防工业出版社), 1995.
- [13] Chan C T, Yu Q I, Ho K M. Order-N spectral method for electromagnetic waves [J]. *Phys Rev B*, 1995, **51**(23): 16635 - 16642.
- [14] Sakodak K, Kawai N, Ito T, et al. Photonic bands of metallic systems. I. Principle of calculation and accuracy [J]. *Physical review B*, 2001, **64**(4): 045116.
- [15] Gadot F, De L A, Lourtioz J M, et al. High-transmission defect modes in two-dimensional metallic photonic crystals [J]. *Journal of applied physics*, 1999, **85**(12): 8499 - 8501.
- [16] Temcikuran B, Bayindir M, Ozbay E, et al. Quasimetallic silicon micromachined photonic crystals [J]. *Applied Physics Letters*, 2001, **78**(3): 264 - 266.
- [17] YANG Guang-Jie, KONG Fan-Min, MEI Liang-Mo. Band gaps of photonic crystal composed of metallic cylinders [J]. *Acta Photonica Sinica*(杨光杰, 孔凡敏, 梅良模. 金属光子晶体禁带研究. 光子学报), 2007, **36**(010): 1821 - 1823.
- [18] YAN Bin-Ying, CHEN He-Ming. Band gap properties and defect characteristic of metallic photonic crystal in the Terahertz region [J]. *Optics & Optoelectronic Technology* (闫斌英, 陈鹤鸣. THz 波段金属光子晶体的带隙及缺陷特性分析. 光学与光电技术), 2009, **7**(3): 37 - 40.
- [19] Born M, Wolf E. *Principles of optics* [M]. Pergamon Press, 1975.
- [20] Tada T, Pohorčič V V, Kanayama T. Channel waveguides fabricated in 2D photonic crystals of Si nanopillars [J]. *Microelectronic Engineering*, 2002, **63**(1-3): 259 - 265.
- [21] YANG Bo, LIANG Jing-Qiu, LIANG Zhong-Zhu, et al. Study on the band gaps of 2-D metallic photonic crystals [J]. *Laser & Infrared*(杨波, 梁静秋, 梁中翥, 等. 二维金属型光子晶体带隙研究. 激光与红外), 2011, **41**(3): 314 - 318.
- [22] GE De-Biao, YAN Yu-Bo. *Finite difference time domain method for electromagnetic waves* [M]. 2nd ed. Xi'an: Xidian University Press (葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法.) 第二版. 西安电子科技大学出版社, 2005; 45 - 113.
- [23] Kady I E, Sigalas M M, Biswas R, et al. Metallic photonic crystals at optical wavelengths [J]. *Phys Rev B*, 2000, **62**(23): 15299 - 15302.

\*\*\*\*\*

(上接第 313 页)

可以大大改善其表面平整度而不改变其光学性能, 所以这种阵列化的多孔硅光子晶体结构应用于高性能红外热释电传感器件的制备中是可行的.

## REFERENCES

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059 - 2062.
- [2] John S. Following the initial disclosure of the photonic band gap concept [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**: 2486 - 2489.
- [3] Iysenko V, Perichon S, Remaki B, et al. Thermal isolation in microsystems with porous silicon [J]. *Sensors Actuators A; Physical*, 2002, **99**(1-2): 13 - 24.
- [4] Kochergin V, Foell H. Novel optical elements made from porous Si [J]. *Mater. Sci. Engin. B* 2006, **52**(4-6): 93 - 140.
- [5] Huanca D R, Ramirez-Fernandez F J, Salcedo W J. Porous silicon optical cavity structure applied to high sensitivity organic solvent sensor [J]. *Microelectron. Journal*, 2008, **39**(3-4): 499 - 506.
- [6] Chang C C, Tang C S. An integrated pyroelectric infrared sensor with a PZT thin film [J]. *Sensors Actuators A*, 1998, **65**(2): 171 - 174.
- [7] Zhang J, Xu S H, Yang S Q, et al. A stable porous silicon dielectric reflector with a photonic band gap centred at 10  $\mu\text{m}$  [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2008, **25**(4): 1317 - 1320.
- [8] Chan S, Fauchet P M. Tunable, narrow, and directional luminescence from porous silicon light emitting devices [J]. *Appl. Phys., Lett.*, 1999, **75**(2): 274 - 276.
- [9] Lugo J E, López H A, Chan S, et al. Porous silicon multilayer structures; a photonic band gap analysis [J]. *J. Appl. Phys.*, 2002, **91**(8): 4966 - 4972.
- [10] Wang Z J, Zhang J, Xu S H, et al. 1D partially oxidized porous silicon photonic crystal reflector for mid-infrared application [J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2007, **40**(15): 4482 - 4484.
- [11] Qian M, Bao X Q, Wang L W, et al. Structural tailoring of multilayer porous silicon for photonic crystal application [J]. *J. Cryst. Growth*, 2006, **292**(2): 347 - 350.