

结构和缺陷对二维光子晶体传输性质的影响*

周梅 陈效双 季亚林 王少伟 陆卫

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室, 上海, 200083)

摘要 用转移矩阵方法计算了二维光子晶体的传输性质, 讨论了不同极化光的透射行为, 比较了正方点阵、有心正方点阵、含缺陷有心正方点阵光子能带对透射特性的影响, 获得了第一禁带特性与光子晶体结构的一些基本关系。
关键词 二维光子晶体, 光子禁带, 转移矩阵法, 透射系数.

EFFECT OF STRUCTURE AND DEFECT ON TRANSMITTED CHARACTER OF 2D PHOTONIC CRYSTAL*

ZHOU Mei CHEN Xiao-Shuang JI Ya-Lin WANG Shao-Wei LU Wei

(National Laboratory of Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Abstract The transmitted character of 2D photonic crystal was calculated by transfer matrix method (TMM), and the transmission behavior of the different polarized light was discussed. The result provides the basic relation of the structure and the first band gap of the photonic crystal, comparing effect of square lattice, centered square lattice and centered square lattice with defect on the transmission characteristic.

Key words 2D photonic crystal, photonic band gap, TMM, transmission coefficient.

引言

自从 1987 年 Yablonovitch 和 John 分别提出光子晶体和光子能带结构的概念后^[1,2], 人们对光子晶体产生了极大的兴趣. 光子晶体中光子的特性与半导体材料中电子行为颇为相似. 将具有不同介电常数的介质材料在空间按一定的周期排列, 由于存在周期性, 在其中传播的光波的色散曲线成为带状结构, 带与带之间有可能出现类似于半导体禁带的“光子禁带”, 我们将具有光子禁带的周期性电介质结构称为光子晶体. 光子材料可以用来制作以前无法实现的光学器件, 比如高性能反射镜、损耗极低的天线、光纤、超棱镜、低阈值激光器、激光二极管、光过滤器、光波导、微腔、光开关、光放大器、光聚焦器等^[3-7]. 本文在研究正方点阵的基础上详细地研究了有心正方点阵及其引入缺陷后对光在二维光子晶体中传输的影响, 并与正方点阵结构进行了对比.

1 理论模型

光子晶体的能带计算可以套用电子能带的方法, 常用的有平面波法 (PW)、紧束缚法、转移矩阵法 (TMM) 等^[8-10], 不同的方法可以解出不同情况下的能带结构, 各有其优缺点. TMM 可用来计算近无限的周期性结构, 其主要优势是计算在有限厚的薄板状光子晶体材料中传播的不同频率电磁波的透射和反射光谱. 在 TMM 中, 整个体系被分割成单个的原胞, 而每一个原胞又被分割成许多单元. 转移矩阵是由入射区和透过区两部分来定义的. 本文采用转移矩阵法 (TMM) 计算了二维光子材料正方点阵、有心正方点阵和引入缺陷有心正方点阵的透射谱, 讨论了不同填充比、不同结构及缺陷对光子晶体通带和带隙的影响.

采用介电常数 $\varepsilon = 11.56$ 的介电材料作为光子晶体材料. 假如一束频率为 ω , 波矢为 \mathbf{q} 平面光波穿过一各向同性电极化率为 $\varepsilon(\omega)$ 、磁导率为 $\mu(\omega)$

* 国家重点基础研究发展规划 (批准号 2001CB61040 和 G1998061404) 和中科院百人计划 (批准号 200012) 资助项目
稿件收到日期 2002 - 01 - 09, 修改稿收到日期 2002 - 06 - 18

* The project supported by the State Key Program for Basic Research of China (No. 2001CB61040 and G1998061404) and one-hundred-person Project of Chinese Academy of Science (No. 200012)
Received 2002 - 01 - 09, revised 2002 - 06 - 18

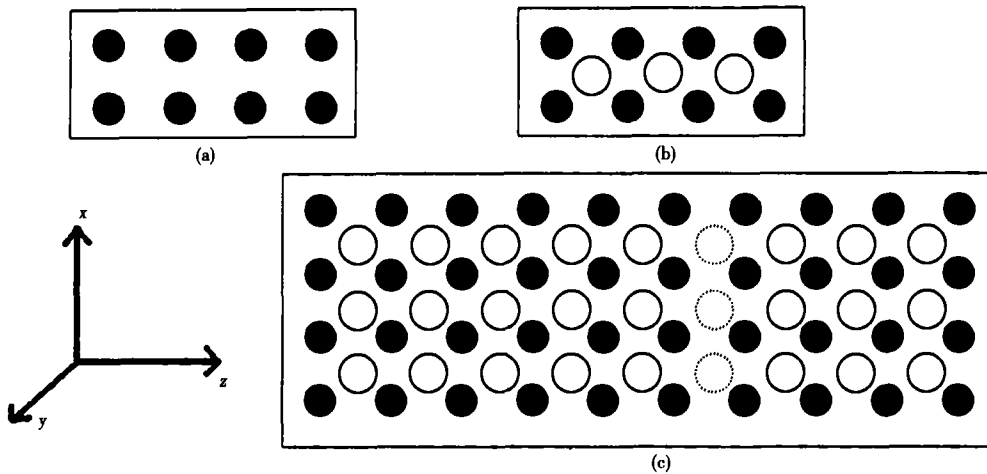


图1 (a)正方点阵的结构,(b)有心正方点阵结构(黑色圆为圆柱半径和晶格常数之比 $R/a=0.178$,白色圆表示半径不同于黑色圆),(c)引入缺陷的有心正方点阵结构(黑色圆为 $R/a=0.178$,白色圆同上,虚线圆表示引入的缺陷)
 Fig.1 (a)square lattice structure, (b)centered square lattice structure(the ratio of R of black cylinder to lattice constant a is $R/a=0.178$, difference R between black and white cylinder), (c) centered square lattice structure with defect(black cylinder; $R/a=0.178$, the same white cylinder as white cylinder in fig(b), broken line cylinders denote the defect)

μ_0 的电介质(其中 ϵ_0 和 μ_0 分别为真空中的电极化率和磁导率),光波的电矢量可表达为^[11]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)], \quad (1)$$

其中定义

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (2)$$

这里波矢 q 的标量值为 $q = (\mu\epsilon)^{1/2}/c, c = 1/(\mu_0\epsilon_0)^{1/2}$ 为真空中的光速. $\mathbf{E}_0(\mathbf{q}) = E_0(\mathbf{q})\mathbf{p}$, E_0 为标量, \mathbf{p} 为单位波矢. 首先我们将光子晶体沿光传播的方向分成若干层, c 为层在 z 方向的线度矢量, 因此电磁波在某一层光子晶体中的传播振幅分量可写成

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{c}) = \sum_{\vec{r}'} \hat{T}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}'). \quad (3)$$

其中

$$\mathbf{\Gamma}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} E_x(\mathbf{r}) \\ E_y(\mathbf{r}) \\ H'_x(\mathbf{r}) \\ H'_y(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \mathbf{r} \text{ 和 } \mathbf{r}' \text{ 为同一层中的两个端点.}$$

点, $H'_{x,y} = \frac{i}{c\omega\epsilon_0} \dot{H}_{x,y}$, $H_{x,y}$ 和 $E_{x,y}$ 分别为电场和磁场在

x 和 y 方向上的分量. $\hat{T}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 为转移矩阵, 详细形式可参考文献[12].

当光波沿 z 方向通过 k 层材料后(每层厚度为 d)总的透射波振幅分量可用单层转移矩阵 \hat{T}_i 的乘积表示为

$$\mathbf{\Gamma}(z + kd) = \prod_{i=1, k} \hat{T}_i \mathbf{\Gamma}(z) = \hat{T}(z). \quad (4)$$

其中 \hat{T} 为转移矩阵, 形式为

$$\hat{T} = \prod_{i=1, k} T_i = \begin{pmatrix} \hat{T}^{++} & \hat{T}^{+-} \\ \hat{T}^{-+} & \hat{T}^{--} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

从透射矩阵 $\hat{T}^{++} \hat{T}^{--}$ 中我们能获得最终的透射系数. 这一行为过程就是入射光经过光子晶体层材料时经历着不断的反射、折射、干涉和衍射过程.

2 晶体结构和计算结果

如图1(a)所示,在均匀的空气介质中沿 x, z 轴方向周期性地嵌入介电常数 $\epsilon = 11.56$ 圆柱, a 为晶格常数,其值为 $12.7 \mu\text{m}$. 正方点阵结构中的 $R/a = 0.178$, 其中 R 为圆柱的半径, 这种结构的填充比 f 约为 0.1 . 入射波矢 q 与材料界面的夹角为 0 , 也就

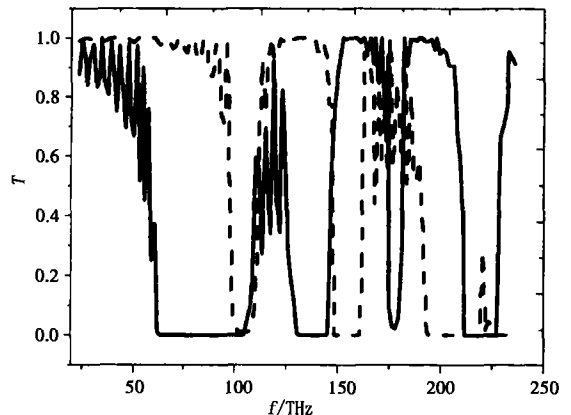


图2 正方点阵结构的 s (实线)和 p (虚线)极化波的透射图

Fig.2 transmissions of s (solid line) and p (dashed line) polarized waves in square lattice structure

是 q 沿着 z 轴的方向入射, E 矢量平行或者垂直于 y 轴, 平行于 s 极化波, 垂直于 p 极化波。

图 2 是正方点阵结构的 s 与 p 极化波的透射光谱图比较. 从图中可看出正方点阵的 s 极化波和 p 极化波的第一个禁带顶几乎是相同的, 但两者的禁带宽度却相差一个数量级, 即 s 极化波的禁带宽度远比 p 极化波的大, 由此看出全光波波段的带隙仅仅是 p 极化带隙的量级. s 极化波的第二个禁带宽度与 p 极化波禁带宽度相同, 但前者禁带顶几乎与后者禁带底重合, 从而导致整个光波段带隙消失。

正方点阵结构 R/a 值变化时对谱带位置和禁带宽度的影响如图 3 所示. 我们选择的 R/a 值的变化范围为 $0.028 \sim 0.278$. 第一禁带的位置随着 R/a 值由大变小逐渐地从低频移向高频, 而禁带宽度在 0.128 时出现了极大值 (见插图). 从物理的直观上存在这样的极值是可以理解的, 因为光子禁带是由入射光受光子晶体中周期性介质分布的散射后相互干涉而成. 当 R/a 为 0 时, 不存在散射便没有禁带, 而当 $R/a = 0.5$ 时, 充满空间的介质圆柱会将全部入射光散射回去, 透射波为 0 , 也不存在透射波的干涉. 因此, 存在较大禁带条件之一是入射波和透射波发生最强烈的干涉效应, 就象典型的双缝干涉实验中一样, 当两束相互干涉光的强度相同, 干涉导致的相消最大. 为此我们认为当 $R/a = 0.128$ 时, 通过简立方结构的透射光干涉会处于较强状态, 从而构成了禁带宽度的极大值。

在 $R/a = 0.178$ 正方点阵中每两列之间插入一列与正方点阵中圆柱材料相同但半径不同的圆柱, 形成了 $x-z$ 平面上有心正方点阵, 见图 1(b). 图 4 为有心正方点阵的 s 极化波和 p 极化波的透射系数随着面心上填充的圆柱填充比变化而变化的谱图. 取面心立方结构中面心上的圆柱的 R/a 分别为 $0.228, 0.128, 0.078$ 和 0.028 , 它们所对应的实际圆柱直径为 $5.79, 3.25, 1.98$ 和 $0.71 \mu\text{m}$. 由于目前的光刻技术已达到 $0.18 \mu\text{m}$, 因此这类光子晶体是可制备的. 从图 4(a) ~ (d) 中可看到 s 极化波与 p 极化波的异同点: 随着面心上的圆柱的 R/a 由大变小, s 和 p 极化波的第一个禁带的位置的变化相同, 都是由低频移向高频. 而两者的禁带宽度的变化却相反, s 极化波的禁带宽度随着中心上圆柱的 R/a 由小变大而逐渐变窄, p 极化波的禁带宽度随着 R/a 由小变大逐渐变宽. 在 R/a 为 $0.228, 0.128$ 的两个谱图中, p 极化波的第一个通带的频率范围几乎包括了 s 极化波的第一个禁带频率宽度, 也就是说在

此频率范围内 p 极化波可以传播但是 s 极化波被禁止传播, s 和 p 波在这一频率范围内不同的传播特性表示了此种光子晶体的偏振行为. 而 R/a 为 $0.078, 0.028$ 的两个谱图中 s 和 p 极化波的第一个禁带有相同的频率范围即导致了全光波段带隙的消失. 图 3 中虚线表示: 随着中心上圆柱半径的变小其谱带的位置移向高频区, 在我们所选择的 R/a 变化范围内有心正方点阵的第一禁带宽度没有出现极大值 (见图 3 插图).

从前文可以看出不同极化光子禁带和通带的差别, 下面我们分析不同结构对材料的谱带影响. 图 5 给出了 $R/a = 0.178$ 正方点阵和该点阵分别填充了 $R/a = 0.028, 0.228$ 的有心正方点阵 s 极化波透射图, 可以看出: (1) 前者与后者的禁带的位置相对发生了移动, 随着 R/a 值由 0.028 变到 0.228 有心正方点阵谱带从高频移向低频, 当 R/a 的值大于正方点阵的 $R/a = 0.178$ 时, 第一禁带位置低于正方点阵的禁带位置, 反之则高于正方点阵的禁带位置. (2) 有心正方点阵的谱带的形状随 R/a 变化, 在 R/a 的值较大时其谱带的形状与正方点阵结构的谱带差别较大, 但是当 R/a 减小到 0.028 时其谱带的形状已接近正方点阵的谱带形状, 只是从第二个禁带开始谱带的宽度有所展宽, 而且有心正方点阵的第一禁带宽度和正方点阵的第一禁带宽度相当, 这说明随着圆柱的 R/a 变小有心正方点阵结构禁带宽度趋向于正方点阵结构的禁带宽度. 如果中心位置上的圆柱 $R/a = 0$, 则演变成 $R/a = 0.178$ 的正方点阵, 所以中心位置上的 R/a 愈接近于 0 , 则该有心正方点阵愈趋近 $R/a = 0.178$ 的正方点阵, 导致禁带宽度愈逼近 $R/a = 0.178$ 的正方点阵结构的禁带宽度。

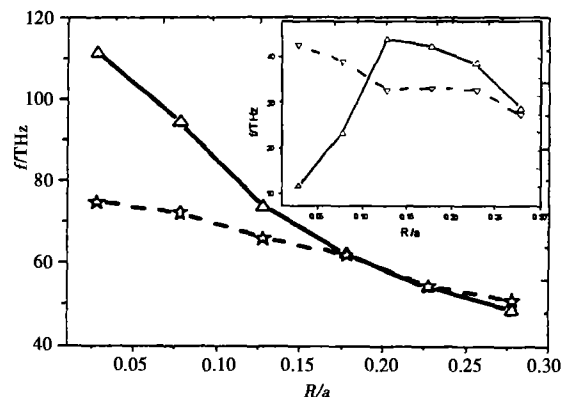


图 3 正方点阵 (实线) 和有心正方点阵结构 (虚线) 第一禁带的位置和禁带宽度 (右插图)

Fig. 3 position and width (inserted right) of the first band gap in square lattice (solid line) and centered square lattice (dashed line) structures

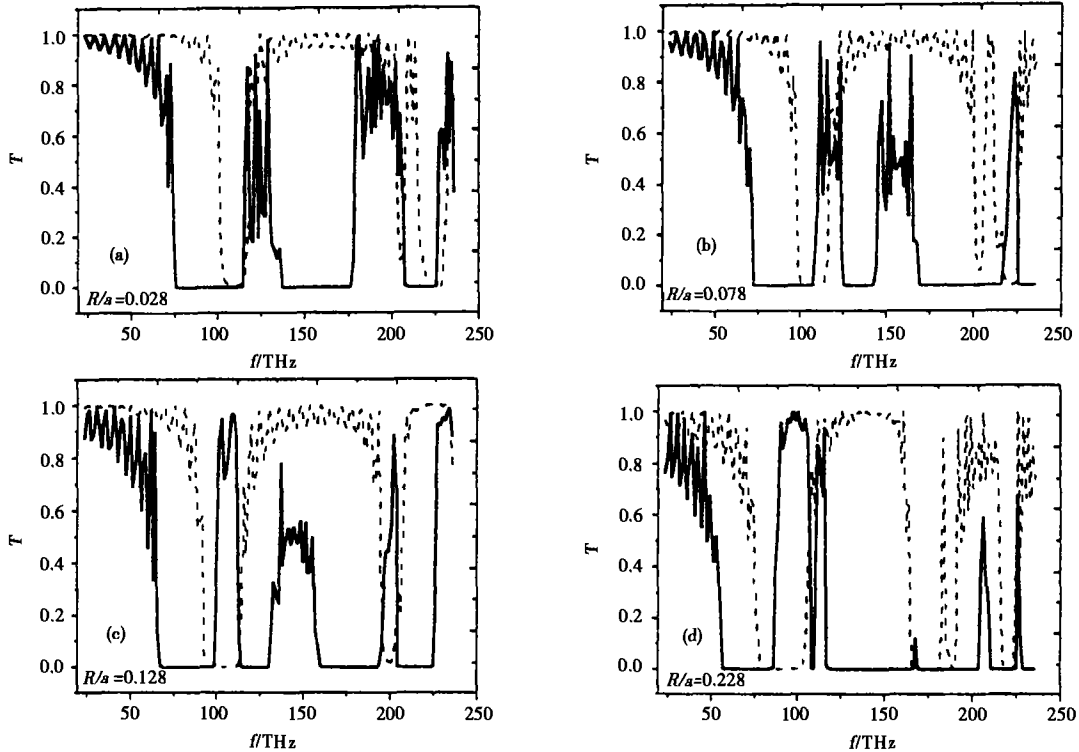


图4 有心正方点阵结构的 s (实线)和 p (虚线)极化波的透射图 (a) $R/a = 0.028$, (b) $R/a = 0.078$, (c) $R/a = 0.128$, (d) $R/a = 0.228$

Fig. 4 transmission of s (solid line) and p (dashed line) polarized waves in centered square lattice structure

正如半导体中的缺陷常会影响到整个半导体的许多性质一样,光子晶体中的缺陷也会影响光子晶体的许多性质.为了研究光子晶体中的缺陷如何对光子能带产生影响,我们设计了如图1(c)的结构,把 $z-x$ 平面六列圆柱的最后一列拿掉,然后重复这样一个块排列.图6是没有缺陷的有心正方点阵和引入缺陷的有心正方点阵结构的 s 极化波的透射

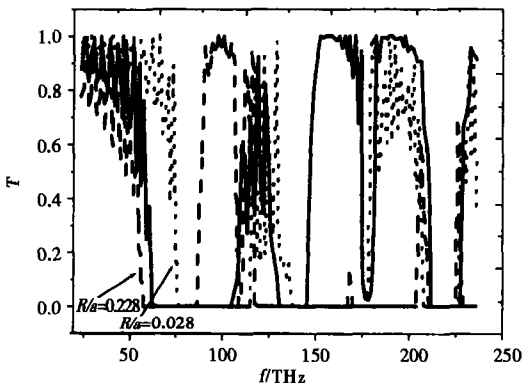


图5 正方点阵(实线)和有心正方点阵结构(短线为 $R/a = 0.228$,点线为 $R/a = 0.028$)的 s 极化波透射图

Fig. 5 transmissions of s polarized waves in square lattice (solid line) and centered lattice (dashed line: $R/a = 0.228$; dotted line: $R/a = 0.028$) structures

谱,具体计算了中心上的圆柱 R/a 从 0.028 变化到 0.278 的有心正方点阵结构缺陷的谱图.从图中可看出对于 s 极化波的透射图,有缺陷结构的第一禁带位置与无缺陷结构的禁带位置相比都向低频移动,同时,有缺陷时第二个通带的宽度明显变窄,第一个光子带隙宽度增加.当 R/a 非常小时,带隙的移动比较小,宽度的增大也下降.缺陷影响减小表现为高频区的通带宽度变化不大,仅仅向高频移动,在一些结构中高频区出现一新的透射通带区.这与定性上的估计是相符的.因为我们可以将引入缺陷后的光子晶体看作是两段完整光子晶体相互间的拼接.光入射到第一段光子晶体并出射到第二段光子晶体交界处,即缺陷所在的位置时,光的透射系数会如图6中实线所示,但此时各频段的光波波前位相已有一个复杂的相对分布,与入射到第一段光子晶体时所有频段波前的位相均相一致状态的完全不同了.所以光继续入射到第二段光子晶体时在其中的光相互干涉效应会不同于在第一段光子晶体中的特性.从而形成不同的透射光谱特征.从一级近似上讲透射谱应是经过两段光子晶体的透射谱之积,所以禁带宽度加大.而从二级近似上来讲,第二段光子晶体会将光波部分反射回第一段光子晶体中,从而扰动第

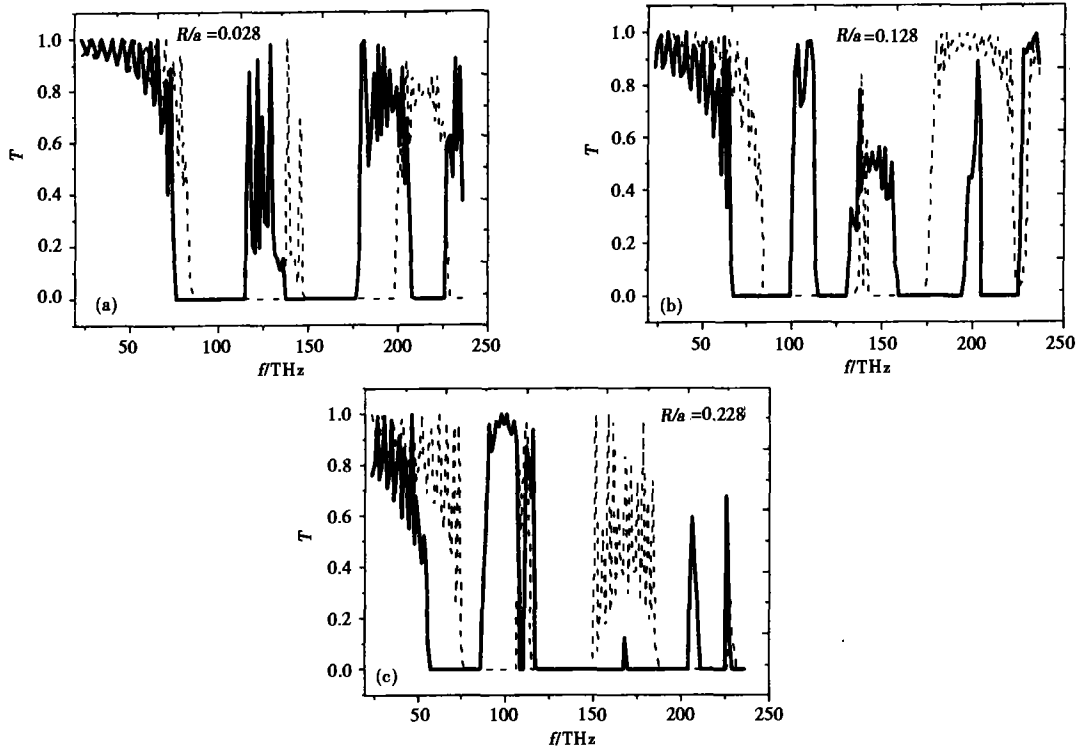


图 6 无缺陷(实线)和引入缺陷(虚线)的有心正方点阵结构的 s 极化波透射波 (a) $R/a = 0.028$, (b) $R/a = 0.128$, (c) $R/a = 0.228$

Fig.6 transmission of s polarized waves in centered square lattice (solid line) and centered square lattice with defect (dashed line)

一段光子晶体的光传输行为,修饰了第一段光子晶体的透射谱行为,导致了最终经过有缺陷的光子晶体透射谱禁带加宽,透射性能下降.缺陷对展宽光子禁带的贡献提供了光子晶体结构设计的一种思路.

3 结论

我们详细地研究了结构和缺陷对二维光子晶体光子能带的影响.发现不同结构和缺陷对光子晶体的光子能带位置、带隙宽度和分布形式有着重要的影响.展示了有心正方点阵结构的第一个禁带的位置和宽度可以由调节其中心上的圆柱半径来控制,也可以通过引入缺陷来改变.我们希望这些理论研究可以得到实验上的佐证,从而对光子晶体的设计有所启迪.

REFERENCES

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**: 2059
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**: 2486
- [3] Mekis A, Chen J C, Kurland I, et al. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**: 3787
- [4] Kosaka H, Kawashima T, Tomita A, et al. Superprism phenomena in photonic crystals. *Phys. Rev. B*, 1998, **58**: R10096
- [5] Brown E R, Parker C D, Yablonovitch E. Radiation properties of a planar antenna on a photonic-crystal substrate. *J. Opt. Soc. Am.*, 1993, **10**: 404
- [6] Bullock D L, Shin C C, Margulies R S. Photonic band structure investigation of two-dimensional bragg reflector mirrors for semiconductor laser mode control. *J. Opt. Soc. Am.*, 1993, **10**: 399
- [7] Lin S Y, Hietala V M, Lyo S K, et al. Photonic band gap quantum well and quantum box structures: a high-Q resonant cavity. *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **68**: 3233
- [8] Pendrym J B, Mackinnon A. Calculation of photonic dispersion relations. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, **69**: 2772
- [9] Sailor W C, Mueller F M, Villeneuve P R. Augmented-plane-wave method for photonic band-gap materials. *Phys. Rev. B*, 1998, **57**: 8819
- [10] Lidorikis E, Sigalas M M, Economou E N, et al. Tight-binding parametrization for photonic band gap materials. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**: 1405
- [11] Stefanou N, Yannopoulos V, Modinos A. A new version of the program for transmission and band-structure calculation of photonic crystals. *Computer Physics Communications*, 2000, **132**: 189
- [12] Ward A J. Transfer matrices, photonic bands and related quantities. PhD. thesis, University of London, 1996