

文章编号:1001-9014(2006)01-0017-05

多重散射理论对光子晶体量子阱结构光子共振透射的研究

潘瑜^{1,2}, 李志锋², 陈效双²

(1. 江苏技术师范学院计算机科学与技术系, 江苏 常州 213001;

2. 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:用球面波展开的多重散射理论计算了光子量子阱的透射系数. 光子量子阱由两层光子势垒之间夹置一层均匀介质构成, 由于光子带隙的失配, 类似于电子量子阱, 形成所谓光子量子阱. 对透射峰位置的计算结果表明某些光子态以量子化的形式存在, 满足量子化频率关系. 同时证明有限高的光子势垒在不同光子能级中起到不同的限制作用. 共振峰的位置和数量可通过改变阱宽而实现人工调控, 通过适当选择阱和垒的参数能够实现高质量的多通道滤波. 对光子晶体耦合双量子阱的计算表明, 当阱间的垒宽度增加时, 两个模式的耦合减弱, 模式分裂的间距减小.

关键词:量子光学; 共振透射; 多重散射理论; 光子晶体; 量子阱

中图分类号: O431.2 **文献标识码:** A

RESONANT TRANSMISSION PROPERTIES OF PHOTONIC QUANTUM-WELL STRUCTURES STUDIED BY MULTIPLE-SCATTERING THEORY

PAN Yu^{1,2}, LI Zhi-Feng², CHEN Xiao-Shuang²

(1. Department of Computer Science and Technology, Jiangsu Teachers University of Technology, Changzhou 213001, China;

2. National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, China Academy of Sciences, Shanghai 20083, China)

Abstract: The resonant transmission properties of a photonic quantum-well were studied by a spherical-wave expansion method in combination with multiple-scattering techniques. Similar to the electronic quantum wells the photonic quantum-well is constructed by sandwiching a uniform medium between two photonic barriers. The calculated resonant transmission peaks show that some photonic states exist in a quantized way, satisfying a quantized frequency relation. The finite photonic potential barrier plays different confining roles on the different photonic levels. By appropriately choosing the parameters of the well and barrier, a high-quality multichannel filtering can be achieved. The calculation in the coupled double photonic quantum-wells shows that the coupling between the modes in the two wells weakens with the widening of the barrier thickness, and the mode splitting becomes smaller.

Key words: quantum optics; resonant transmission; multiple-scattering theory; photonic crystal; quantum wells

引言

由于介电周期性的引入所导致的新颖色散关系使光子晶体材料具有奇异的电磁波传播行为, 在材料中形成光传播被禁止的频率范围(禁带)和光传播为允许的频率范围(通带). 这与在具有禁带的半导体中的电子有很强的相似性, 使得人们有可能象在半导体中操纵电子的流动那样对光子的流动进行操纵和控制. 迄今为止已经发展了许多光电子领域

中的可能应用(见例如文献[1~2]).

众所周知, 电子量子阱结构是由于电子能带的失配而形成. 由于半导体中的量子限制效应, 电子的波函数被明显改变, 电子能量被量子化. 类似于电子量子阱结构的概念, 最近人们提出了光子量子阱结构^[3]. 在二维光子量子阱中, 光子晶体的势垒由无限长介电圆柱的列阵薄板构成. 共振峰出现在光子势垒的禁带区域并且表现出量子化的光子能级. 另一种构形是, 一维光子量子阱由两个不同的一维光

收稿日期: 2005-05-23, 修回日期: 2005-10-15

Received date: 2005-05-23, revised date: 2005-10-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(60476040, 10474108), 国家重点基础研究发展规划973项目(2001CB6104).

作者简介: 潘瑜(1963-), 男, 安徽黄山人, 江苏技术师范学院计算机科学与技术系教授, 硕士, 主要从事计算机应用技术研究.

子晶体构成. 已经发现通过调节光子量子阱结构的周期能够导致多通道滤波现象^[4], 人们自然能够想到用三维光子晶体做成的势垒薄板在非透射频率范围内实现高质量的透射. 因此, 需要对由三维薄板光子晶体势垒构成的实际光子晶体量子阱与电子量子阱进行对比研究. 本文考察了由两个三维光子晶体的薄势垒层中间夹置一均匀光学介质的光子晶体量子阱系统, 用球面波展开的多重散射方法计算了光子量子阱的透射系数. 结果表明有量子化形式的光子态存在, 透射系数满足量子化频率关系.

1 结构与模型

图 1 示意地画出了所研究的光子晶体量子阱的几何构形(a)和光子频率带结构(b). 势垒层由均匀填充了球形颗粒的均匀介质所形成的多层结构组成, 而势阱层为真空. 均匀介质由实介电函数和实磁导率表征. 其结构在 XY 平面上具有二维周期性, 因此波矢 XY 平面上的分量 K_{\parallel} (一个二维倒格矢) 为一不变量.

采用球面波展开的多重散射方法可以求得量子阱结构中光子传播问题的数值解^[5]. 利用该方法得到过光子晶体的复频率带结构, 以及光子晶体异质结中入射光的反射系数、透射系数和吸收系数^[6]. 在均匀介质中传播的具有角频率 ω 和波矢 q 的平面电磁波的电场分量为:

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

其中定义了 $\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{q}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})$. 波矢的大

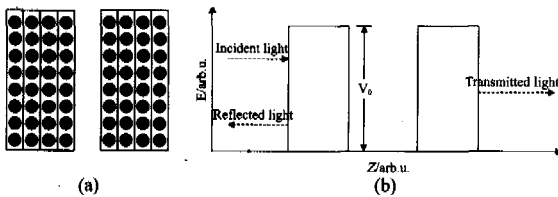


图 1 计算中采用的光子量子阱结构 (a) 光子量子阱构形的空间排列. 黑色圆点代表在 x - y 平面上周期排列的球 (b) 频率落在光子势垒禁带的入射光子所看到的量子阱的光子带结构, 其中 V_0 为光子禁带的高度.

Fig. 1 The schematic structure of the photonic quantum well structure in our calculation. (a) Geometrical arrangement of the photonic quantum well. The solid circles correspond to the spheres periodically arranged in x - y plane. (b) Photonic band structure of the quantum well as seen by the incident photons with the frequency within the band gap of photonic barrier, where V_0 is the height of photonic band gap.

小由 $q = \sqrt{\mu\epsilon\omega}/c$ 给出, c 为真空中的光速, ϵ 为介电函数, μ 为磁导率. $\vec{E}_0(\vec{q}) = E_0(\vec{q})\vec{p}$, 其中 E_0 和 \vec{p} 分别表示电场的幅度和偏振单位矢量. 类似地可以写出电磁波的磁场分量. 按照 Stefanous 等人的方法^[5], 由式(1)给出的平面波可以按球面波展开.

不论散射体的形貌和结构如何, 所需要的是确定这些散射体中的某一个. 假定某点处入射电场为 $E^i = E^i \hat{u}$, 这点的散射电场定义为该点的总场 E 和入射场 E^i 之差: $E^s = E - E^i$. 然后通过求解电场所满足的 Helmholtz 方程 $\nabla^2 E + k^2(M)E = 0$ 得到散射场的表达式. M 为空间中任一点.

只考虑电磁波的电场分量 $E(r, t) = \text{Re}[E(r) \exp(-i\omega t)]$, 其中 $E(r) = E_0(q) \exp(iq \cdot r)$, 磁场分量可由 $H(r) = -\left(\frac{i}{\omega\mu\mu_0}\right) \nabla \times E(r)$ 给出.

首先给出单个小球的散射, 入射波可用球面波展开为:

$$E(r) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{i}{q} a_{lm}^{0E} \nabla \times j_l(qr) X_{lm}(\hat{r}) + a_{lm}^{0H} \nabla \times j_l(qr) X_{lm}(\hat{r}) \right)$$

对应的散射波为:

$$E_{sc}(r) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{i}{q} a_{lm}^{+E} \nabla \times h_l^+(qr) X_{lm}(\hat{r}) + a_{lm}^{+H} \nabla \times h_l^+(qr) X_{lm}(\hat{r}) \right)$$

式中 $j_l(qr)$ 是球形 Bessel 函数, $h_l^+(qr)$ 是球形 Hankel 函数系数, 满足 $a_{lm}^{+p} = T_l^p a_{lm}^{0p}$ 的关系. 这里 p 代表 E, H . T_l^p 是 $j_l(qr), h_l^+(qr)$ 和小球和周围介质的介电函数和磁导率的函数.

小球组成的平面的散射: 在平面上, 小球的排列是有一定的周期性的. 入射的电磁波为: $E_{in}^s(r) = \sum_{i=1}^3 [E_{in}^s]_{gi}^s \exp(iK_g^+ \cdot r) \hat{u}_i$, $S = +(-)$, 分别代表入射波的入射方向, (平面的左侧+和右侧-).

$$\text{散射波为: } E_{sc}^s(r) = \sum_{i=1}^3 \sum_g [E_{sc}^s]_{gi}^s \exp(iK_g^+ \cdot r) \hat{u}_i;$$

$$\text{透射波为: } E_{tr}^+(r) = \sum_{i=1}^3 \sum_g [E_{tr}^+]_{gi}^+ \exp(iK_g^+ \cdot r) \hat{u}_i,$$

其中: $[E_{tr}^+]_{gi}^+ = [E_{in}^+]_{gi}^+ \delta_{gg'} + [E_{sc}^+]_{gi}^+ = \sum_{g'} M_{gi;g'i}^{++} [E_{in}^+]_{g'i}^+$

$$\text{反射波为: } E_{rf}^-(r) = \sum_{i=1}^3 \sum_g [E_{rf}^-]_{gi}^- \exp(iK_g^- \cdot r) \hat{u}_i,$$

这里, $[E_{rf}^-]_{gi}^- = [E_{sc}^-]_{gi}^- = \sum_{g'} M_{gi;g'i}^{--} [E_{in}^+]_{g'i}^+$, M 是矩阵, M^{--} 和 M^{++} 代表透射矩阵, 而 M^{+-}, M^{-+} 代表反射矩阵, 求解这些矩阵, 就可以得到所要计算的物理量. 给出一个示意图如图 2 所示:

如果把小球组成的平面的厚度考虑之后, 则传输矩阵变为:

$$Q_{gi;g'i}^1 = M_{gi;g'i}^{++} \exp(i(K_g^+ \cdot d_r + K_g^+ \cdot d_i))$$

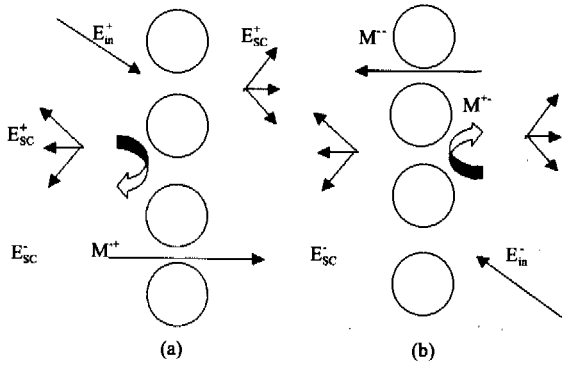


图2 平面球对平面波的散射 (a) 从左边入射 (b) 从右边入射

Fig. 2 Scattering of a plane of spheres on the plane EM waves: Incidence from left (a) and right (b)

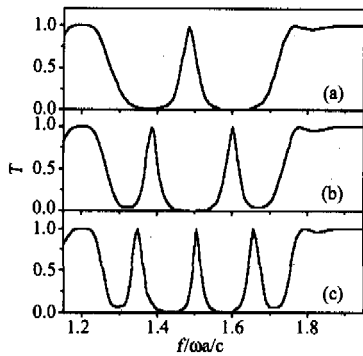


图3 不同阱宽情况下透射系数 T 随频率 f 的变化关系:(a) $5a$, (b) $10a$, (c) $15a$.

Fig. 3 Calculated transmission coefficient T as a function of the incident light frequency f with various well widths: (a) $5a$, (b) $10a$, (c) $15a$.

$$Q_{g^i, g^i}^2 = M_{g^i, g^i}^{+-} \exp(i(K_g^+ \cdot d_r - K_g^+ \cdot d_r))$$

$$Q_{g^i, g^i}^3 = M_{g^i, g^i}^{-+} \exp(-i(K_g^- \cdot d_r + K_g^+ \cdot d_l))$$

$$Q_{g^i, g^i}^4 = M_{g^i, g^i}^{--} \exp(-i(K_g^- \cdot d_l - K_g^+ \cdot d_r))$$

不管散射体是什么元素, 只要求解了这个传输矩阵, 就可以计算出所需要的物理量. 以薄板为例: 假定一从薄板左边入射的电磁波为

$$\sum_i [E_{in}]_{g^i}^+ \exp(iK_g^+ \cdot (r - A_L)) \hat{u}_i$$

反射波为:

$$\sum_{g^i} [E_{rf}]_{g^i}^- \exp(iK_g^- \cdot (r - A_L)) \hat{u}_i$$

透射波为:

$$\sum_{g^i} [E_{tr}]_{g^i}^+ \exp(iK_g^+ \cdot (r - A_R)) \hat{u}_i$$

这里

$$[E_{tr}]_{g^i}^+ = \sum_r Q_{g^i, g^i}^1 [E_{in}]_{g^i}^+$$

$$[E_{rf}]_{g^i}^- = \sum_r Q_{g^i, g^i}^4 [E_{in}]_{g^i}^+$$

通过计算透射波和反射波可以得到透射系数和反射系数

$$T = \frac{\sum_{g^i} [E_{tr}]_{g^i}^+ ([E_{tr}]_{g^i}^+)^* K_{g^i}^+}{\sum_i [E_{in}]_{g^i}^+ ([E_{in}]_{g^i}^+)^* K_{g^i}^+}$$

$$R = \frac{\sum_{g^i} [E_{rf}]_{g^i}^- ([E_{rf}]_{g^i}^-)^* K_{g^i}^-}{\sum_i [E_{in}]_{g^i}^+ ([E_{in}]_{g^i}^+)^* K_{g^i}^+}$$

这里 * 代表复共轭. 如果所计算的材料有吸收, 则吸收系数为

$$u = 1 - T - R.$$

因此当入射平面波被球体散射时, 球体外的波场由入射波和相应的散射波组成. 通过考察球体表面的 \vec{E} 和 \vec{H} 的正交分量的连续性可同时确定散射波和球体内的波场. 当平面波从左边入射到含有球体的介质平面时, 在球体平面右边的透射波由下式给出:

$$\vec{E}_{tr}^+(\vec{r}) = \sum_{j=1}^2 \sum_{\vec{g}} [E_{tr}]_{\vec{g}j}^+ \exp(i\vec{K}_{\vec{g}}^+ \cdot \vec{r}) \vec{e}_j, \quad z > 0, \quad (3)$$

而反射波为

$$\vec{E}_{rf}^-(\vec{r}) = \sum_{j=1}^2 \sum_{\vec{g}} [E_{rf}]_{\vec{g}j}^- \exp(i\vec{K}_{\vec{g}}^- \cdot \vec{r}) \vec{e}_j, \quad z < 0, \quad (4)$$

其中 \vec{g} 为一特定的倒矢量, \vec{e}_1 和 \vec{e}_2 分别为极向和角向的单位波矢. 展开系数 $[E_{tr}]_{\vec{g}j}^+$ 和 $[E_{rf}]_{\vec{g}j}^-$ 与透射和反射矩阵元相关联. 具体的展开系数以及透射和反射矩阵元可参考文献[5]. 对于平行于 XY 平面并且具有相同二维周期性的球体组成的平面的多个多层结构(如图1(a)所示), 其透射矩阵可以从单个平面的透射矩阵得到. 最后, 由单个散射元的相关矩阵能够得到由一定数量散射元组成的薄板的透射矩阵.

2 结果与讨论

在本文的数值计算中假设势垒光子晶体具有简立方结构. 球体半径为 $0.35a$, a 为三维势垒光子晶体晶格常数. 匀质薄板介质和介电球体的介电常数分别取为 $\epsilon_0 = 2$ 和 $\epsilon = 11$. 假设电磁波垂直入射到 XY 平面. 计算得到的势垒光子晶体的光子禁带位于 $1.2c/a$ 与 $1.8c/a$ 之间. 为简化起见考虑阱中的均匀介质为真空. 图3给出了量子阱层中不同阱宽条件下透射谱随入射频率的变化关系. 最上端是阱宽为 $5a$ 的谱, 中间为 $10a$, 最底部的阱宽为 $15a$. 如前所述, 透过光子模式落在势垒光子禁带之中, 如果不形成量子阱结构, 对应的光子模式不能在其光子禁带中传播. 我们发现实际上如果频率在势垒禁带之中的入射光入射到这样的三维势垒光子晶体薄板时, 透射率随着穿透深度的增加迅速下降到接近为零. 因此, 一般地该薄板禁止了该入射光的传播. 然

而,当电磁波进入到前面所述的量子阱结构时情况就变得完全不同.其差别为在势垒禁带的频率范围内可以清楚看到非常尖锐的透射峰.随着量子阱宽度的增加,透射峰的数量也在增加,但其增加方式是非连续的.例如,图3中峰的数量分别为一、二和三,而阱宽为 $5a, 10a$ 和 $15a$.可以认为这些峰是对应于阱层中光子能带的量子化之后的态或模式.类似于半导体量子阱中量子化的电子态,光子的限制也将导致光子模式的量子化.一旦入射电磁波的频率与量子化模式的频率相同,将形成共振,透射达到其峰值,正如在图3中看到的透射系数的计算结果所示.

类比于有限高势垒半导体量子阱中的量子化电子态,无限势垒的情形电子态量子化展示不同的行为,光子晶体的量子化态的能级也应该揭示其与势垒的阱宽的关系.如果一个光子晶体量子阱具有无限势垒,其量子化态就由频率 $f_n = nc/\omega$ 表示,其中 n 为整数,因此对于固定阱宽而言峰位之间的间距是相同的.与之相反的是,在有限势垒的情形,我们发现量子化能级与阱宽的关系并不服从上述解析关系.图4画出了模式频率随阱宽的变化关系,图中实线为有限势垒的数值结果,虚线是选取适当能级数 n 后的解析关系式 $f_n = nc/\omega$ 的结果.很明显,在有限势垒的情形量子化能态的模式频率偏了解析关系.随着阱宽的增加,有限势垒的模式频率的下降比 $f_n = nc/\omega$ 要慢.该结果表明随着势垒高度的下降对量子化光子能级的限制效应变弱了.同时可以看到,量子化能级的间距并不是相同的.当光子能级接近量子阱底部时,势垒对较低能级的限制作用变得比

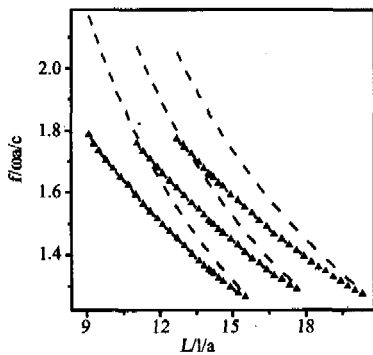


图4 量子化频率 f 随阱宽 L 的变化关系,带黑三角的实线为有限势垒的结果,虚线对应于解析关系式 $f_n = nc/\omega$.
 Fig. 4 The quantized frequency f as a function of the well width L , the solid lines with solid triangles corresponding to the result of finite potential barrier and the dashed lines to the analytic relation $f_n = nc/\omega$.

较高光子能级的限制要强得多.较低光子能级之间的间距要比较高光子能级之间的间距来得宽.从图4中任取一个特定阱宽条件就能看到上述结果.该结果更进一步地表明了由有限势垒诱导的光子能级的量子化行为不同于关系式 $f_n = nc/\omega$.

进一步可以讨论量子化光子能态的数量对量子阱结构的依赖关系.从图3中可以清楚地看到量子化能态的数量是随着阱宽的增加而增加的.相应地出现了更多的透射峰,而共振态之间的间距就自然变窄了.此外,势垒宽度变化时可以看到,非常宽的势垒将导致在禁带区域的频率出现零透射系数,因为在这种情况下光子是不允许穿过光子晶体的势垒薄板进行传播的.入射电磁波不能与量子阱中的量子化能态发生耦合,共振隧穿消失.但是,如果考虑适当的势垒厚度,入射的电磁波就将与量子阱中的受限态发生耦合并且穿过下一个势垒层.因此在这样的量子阱结构中能够实现高质量的共振隧穿.

上面仅仅讨论了单个孤立光子晶体量子阱的光子共振隧穿现象.再类比到半导体双量子阱结构,当两个孤立的量子阱之间的垒足够地薄,在两个量子阱之间将存在着明显的电子隧穿渗透,必须采用量子力学来考虑两个阱作为一个耦合系统.当两个光子晶体量子阱相互靠近时,若阱间的光子垒足够地薄,也将导致不同阱中光子模式的耦合.考虑光子晶体双量子阱结构,垒和阱的材料与上述的材料构造一致,势垒层由均匀填充了球形颗粒的均匀介质所

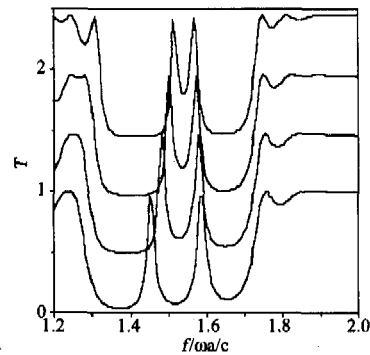


图5 光子晶体双量子阱结构的透射系数 T 随频率 f 的变化,从上到下量子阱间的光子垒宽度分别为4个、3个、2个和1个单层结构,每个单层含有球形颗粒的均匀介质.为清楚起见对上面的3条曲线作了垂直平移
 Fig. 5 The variation of the transmission coefficient T with the incident light frequency f . From top to bottom: the barrier width between the two quantum wells is of 4, 3, 2, and 1 time of the single plate. Each single plate consists of uniform medium filled with spheres. The upper 3 curves are vertically shifted for clearness.

形成的多层结构组成,而势阱层为真空. 球体半径仍然为 $0.35a$, a 为三维势垒光子晶体晶格常数. 匀质薄板介质和介电球体的介电常数分别取为 $\epsilon_0 = 2$ 和 $\epsilon = 11$. 仅仅是阱间的垒厚可以改变,两个量子阱的宽度分别固定为 $5a$. 每个量子阱只有一个束缚态,并且所有的束缚光子态落在光子垒中. 我们知道当考虑每个阱作为单个的阱时,相同的两个阱具有相同的波函数分布. 如果让两个光子晶体形成耦合的量子阱结构,则能够获得类似于半导体双量子阱的光子势分布. 通过用上述的方法计算耦合量子阱系统的麦克斯韦方程,获得的耦合光子模式分布如图 5 所示. 这时最低的光子模式为单个量子阱的本征函数的对称线性联合相关(在两个量子阱中波函数有同样的符号),较高的光子能态模式为单个量子阱的本征函数的反对称线性联合相关(在两个量子阱中波函数的符号相反),这两个模式是从单个量子阱的孤立模式的耦合分裂出来的. 当阱间的垒宽度增加时,两个模式的耦合减弱,模式分裂的间距减小. 这样的结构设计多光子晶体量子阱结构时,容易形成窄色散的共振模式的光波导器件.

3 结论

用球面波展开的多重散射方法研究了光子晶体量子阱中的量子化能态. 类似于电子隧穿通过半导体量子阱结构的过程,由于光子势垒禁带的限制,当入射频率满足量子化光子态时,将发生共振隧穿. 发

现有有限的光子势垒对不同光子能级起着不同的限制作用. 计算结果表明受限态的数量随着量子阱宽度的增加而增加. 同时考察了光子晶体耦合双量子阱的模式变化,当阱间的垒宽度增加时,两个模式的耦合减弱,模式分裂的间距减小.

REFERENCES

- [1] LIU Hai-Wen, SUN Xiao-Wei, LI Zheng-Fan. Low-pass filters of wide stop-band based on photonic band-gap structures [J]. *J. Infrared and Millim. Waves* (刘海文, 孙晓玮, 李征帆. 一种基于光子带隙结构的宽阻带低通滤波器. *红外与毫米波学报*), 2004, **23**(2): 135—138.
- [2] XU Jing, CHEN Xiao-Shuang, ZHOU Mei, et al. Numerical study of photonic properties in two-dimensional complex photonic crystals of square lattice [J]. *Infrared Millim. Waves* (徐靖, 陈效双, 周梅, 等. 二维正方形复式晶胞光子晶体的光子特性研究. *红外与毫米波学报*), 2005, **24**(4): 241—244.
- [3] Jiang Y, Niu C, Lin D. Resonance tunneling through photonic quantum wells [J]. *Phys. Rev. B.*, 1999, **59**: 9981—9986.
- [4] Qiao F, Zhang C, Wan J, et al. Photonic quantum-well structures: Multiple channeled filtering phenomena [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **77**: 3698—3700.
- [5] Stefanou N, Yannopapas V, Modinos A. MULTEM 2: A new version of the program for transmission and band-structure calculations of photonic crystals [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2000, **132**: 189—196.
- [6] Zhang W Y, Lei X Y, Wang Z L, et al. Robust photonic band gap from tunable scatterers [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**: 2853—2856.