

文章编号: 1007- 2985(2005) 03- 0083- 03

二维正方圆柱光子晶体带隙的 FDTD 模拟

汤炳书, 周艳玮, 徐健良

(连云港师范高等专科学校物理系, 江苏 连云港 222006)

摘要: 利用时域有限差分方法研究二维光子晶体传输函数理论, 计算了各种情况下二维正方圆柱光子晶体的透射率即光传输函数随频率的变化. 计算结果表明, 对于一定的入射方向, 某些频率的光不能在光子晶体中传播即出现所谓的带隙, 带隙的宽度与入射光的偏振、圆柱的折射率、有无缺陷等因素有关.

关键词: 二维光子晶体; 时域有限差分法; 传输系数; 带隙

中图分类号: O431. 2

文献标识码: A

光子晶体是一种由不同介电常数的材料间隔周期性排列而成的人工材料^[1]. 当电磁波入射其上时, 某一频率范围内的电磁波不能透射过去, 很像固体物理学中晶体的能带, 所以引进禁带与带隙的基本概念, 它的理论及应用研究是目前物理学材料科学与光电子领域最热门的课题之一^[2]. 二维正方圆柱光子晶体是一系列介质圆柱在空间二维周期排列, 第三维上均匀无限. 当电磁波垂直于圆柱入射时, 在透射光中将出现带隙, 带隙的位置宽度与入射电磁波的偏振模式、本身的结构有关.

光子晶体传输特性常用的研究方法有平面波展开法^[3-4]、转移矩阵法^[5-6]和时域有限差分法(Finite Difference Time Domain, 简称 FDTD)^[7-8]等. 笔者用 FDTD 法对常见的二维正方圆柱光子晶体传输函数进行了研究, 并分析其禁带情况. FDTD 法能够很直观地给出光在光子晶体中的传输行为, 通过比较发现, 用 FDTD 法计算出的结果比用平面波展开法和转移矩阵法计算出的结果更精确. 因为 FDTD 法是直接对麦克斯韦方程进行离散化处理, 没有过多地引入可能导致计算误差的假设, 理论上它能处理任意几何形状的光子晶体; 此外, 它可以通过傅里叶变换, 一次计算出包含很大频率范围的结果.

1 基本理论

1.1 时域有限差分法

光子晶体中的麦克斯韦方程组为

$$\begin{cases} H = -\frac{E}{t} + E; \\ E = -\frac{H}{t} - H. \end{cases} \quad (1)$$

其中: ϵ 是光子晶体介质柱的介电常数, 它是空间坐标的函数; σ 是介质柱的电导率; μ 是磁导率; γ 是计算磁损耗的磁阻率. 在组成光子晶体的材料中一般不用磁性材料, 所以 $\mu = \mu_0$; 因为不考虑磁性, 所以 $\gamma = 0$; 考虑的圆柱以空气或聚乙烯材料为例, 故 $\sigma = 0$.

用 FDTD 法求解麦克斯韦方程组(1)的具体方法是, 将其在直角坐标系中展开成标量场分量的方程组, 然后用二阶精度的数值差商代替微商, 将连续的空间和时间问题离散化, 得到标量场分量的差分方程组. 对方程组(1)进行时空离散化, 可以得到如下差分方程^[9-10]:

y 收稿日期: 2004- 12- 08

基金项目: 江苏省自然科学基金资助项目(BK2004059)

作者简介: 汤炳书(1963-), 男, 江苏省丹阳人, 连云港师范高等专科学校物理系副教授, 主要从事计算凝聚态物理研究.

$$E_x \Big|_{i,j+2^{-1}}^{n+2^{-1}} = E_x \Big|_{i,j+2^{-1}}^{n-2^{-1}} + \frac{t}{i,j+2^{-1}} \left[\frac{H_z \Big|_{i,j+1}^n - H_z \Big|_{i,j}^n}{y} \right]; \tag{2}$$

$$E_y \Big|_{i+2^{-1},j}^{n+2^{-1}} = E_y \Big|_{i+2^{-1},j}^{n-2^{-1}} - \frac{t}{i+2^{-1},j} \left[\frac{H_z \Big|_{i+1,j}^n - H_z \Big|_{i,j}^n}{x} \right]; \tag{3}$$

$$H_z \Big|_{i,j}^{n+2^{-1}} = H_z \Big|_{i,j}^n - \frac{t}{0} \left[\frac{E_y \Big|_{i+2^{-1},j}^{n+2^{-1}} - E_y \Big|_{i-2^{-1},j}^{n+2^{-1}}}{x} - \frac{E_x \Big|_{i,j+2^{-1}}^{n+2^{-1}} - E_x \Big|_{i,j-2^{-1}}^{n+2^{-1}}}{y} \right]. \tag{4}$$

(2) 至(4) 式是对 TE(对应 H 偏振) 模式入射而言的. 对 TM 模式同样可以得到关于 H_x, H_y, E_z 的计算式.

为了保证解的稳定性, 时间步长应满足 $t < \frac{1}{c \sqrt{(x)^{-2} + (y)^{-2}}}$, 计算时取对单个原胞进行 301 301 个分割离散.

与传输系数有关的平均能流的计算公式为^[11] $S_w(\omega) = \frac{1}{2} \text{Re}[E(\omega) \cdot H^*(\omega)]$.

1.2 边界条件

在计算程序中, 在 y 方向采用完全匹配层(Perfectly Matched Layer) 边界条件^[9], x 方向采用周期边界条件(Periodic Boundary Condition)^[10]. 在计算中, x 方向看成无限, 采用线光源.

2 结果与讨论

2.1 计算模型

建立如图 1 所示模型, 线光源向 y 方向入射, y 方向 16 层, 圆柱在 z 方向无限长, x 方向无限列. 计算时, 背景材料的介电常数取 3.4(InP GaInAsP).

2.2 TE 模式与 TM 模式入射时的带隙

光源分别采用不同的模式入射时, 计算结果如图 2 所示. 其中: a 表示正方圆柱的边长; 实线表示以 TE 模式入射; 虚线表示以 TM 模式入射. 从图 2 可看出, 带隙的宽度在 TE 模式入射下较宽. 这里, 传输函数与频率都是归一化的.

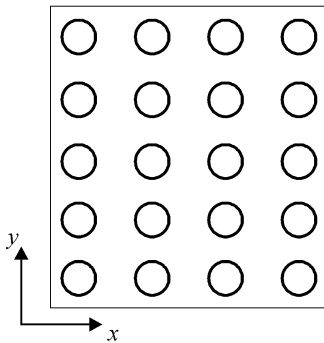


图 1 二维正方圆柱光子晶体

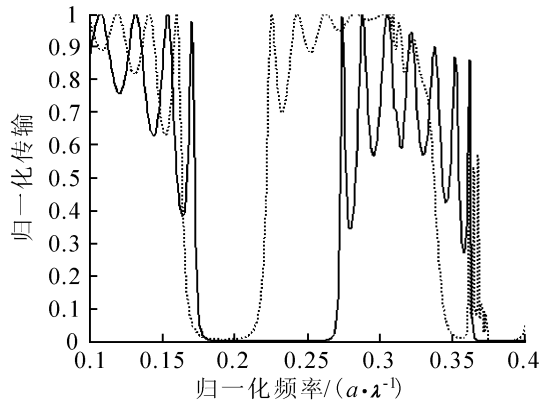


图 2 不同入射模式下的带隙

2.3 圆柱采用不同介电常数时的带隙

改变介质圆柱的介电常数时禁带的宽度发生了改变, 如图 3 所示. 其中: 实线表示介质是空气, 其介电常数值为 1.0, 折射率为 1.0; 虚线表示介质是聚乙烯材料, 其介电常数值为 2.3, 折射率为 1.516. 从图 3 可看出, 圆柱材料的介电常数与背景材料的介电常数相比, 差别越大则禁带越宽.

2.4 带有缺陷时的带隙

完整的光子晶体中间抽去若干层时, 称此时的光子晶体为有缺陷的光子晶体, 计算结果如图 4 所示. 其中, 实线和虚线分别表示抽去 3 层和抽去 1 层时的情况. 此时, 禁带中出现了缺陷模即在原来不透光的地方有一部分能量传输到另一边, 禁带中出现 3 个透光处. 从图 4 可看出, 抽去层数越多, 透过率即传输函

数越大,透过的能量越多.

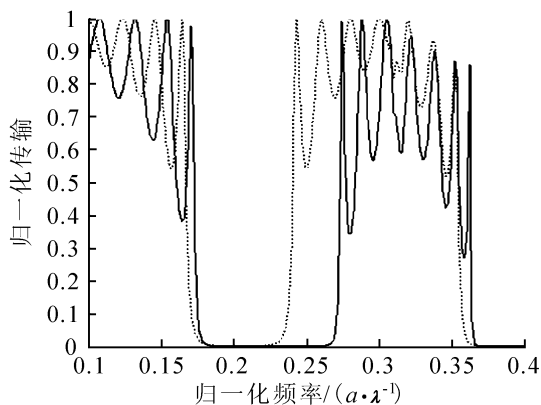


图3 介质柱在不同介电常数下的带隙

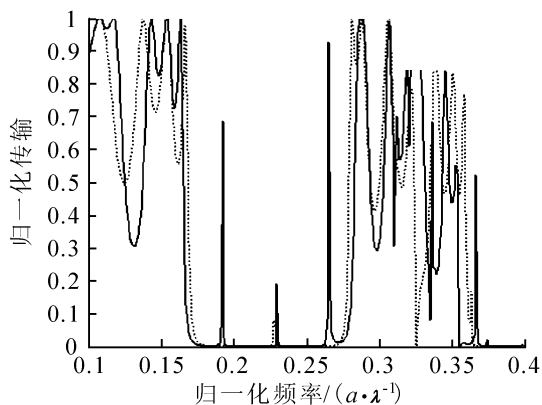


图4 存在缺陷时的带隙

3 结论

利用时域有限差分法,对二维正方圆柱光子晶体的传输函数进行了详细的数值分析,得出如下结论:

- (1) 在完整的光子晶体中,光源采用TE模式入射比TM模式入射可以得到更宽的带隙,2种模式的带隙有重叠;
- (2) 在完整的光子晶体中,可以通过改变圆柱的材料、背景材料的介电常数、圆柱体的半径,达到改变禁带宽度的目的;
- (3) 在完整的光子晶体的中间抽去若干层,可以在禁带中出现缺陷模,利用这一现象可用来选频.

参考文献:

- [1] YABLONOVICH E. Inhibited Spontaneous Emission in Solid State Physics and Electronics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58(20): 2059–2062.
- [2] 万钧,张淳. 光子晶体及其应用 [J]. *物理*, 1999, 28(7): 393–398.
- [3] MARTIN MALDOVAN, EDWIN L T, CRAIG W C. Layer-by-Layer Diamond-Like Woodpile Structure with a Large Photonic Band Gap [J]. *Applied Physics Letters*, 2004, 84(3): 362–364.
- [4] 汤炳书. 二维周期复合介质构成的光子晶体能带结构 [J]. *吉首大学学报(自然科学版)*, 2001, (4): 63–66.
- [5] WANG Li, WANG Zhan-shan, WU Yong-gang, et al. Enlargement of the Nontransmission Frequency Range of Multiple-Channeled Filters by the Use of Heterostructures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2004, 95(2): 424–426.
- [6] 汤炳书. 二维光子晶体中的无序数值模拟研究 [J]. *量子光学学报*, 2001, 7(3): 108–112.
- [7] QIU M, JASKORZYNSKA B, SWILLO M, et al. Time Domain 2D Modeling of Slab-Waveguide Based Photonic-Crystal Devices in the Presence of Out-of-Plane Radiation Losses [J]. *Microwave Opt. Techn. Lett.*, 2002, 34(5): 387–393.
- [8] HE Y Z, SHI F G. Finite-Difference Imaginary-Distance Beam Propagation Method for Modeling of the Fundamental Mode of Photonic Crystal Fibers [J]. *Optics Communications*, 2003, 225: 151–156.
- [9] 王秉中. 计算电磁学 [M]. 北京: 科学出版社, 2002.
- [10] YEE K S. Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media [J]. *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, 1966, 14(3): 302–308.
- [11] QIU M. Effective Index Method in Heterostructure Slab Waveguide Based Two-Dimensional Photonic Crystals [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2002, 81(7): 1163–1165.

FDTD Simulation Band Gap of Two-Dimensional Square Cylinder Photonic Crystal

TANG Bing-shu, ZHOU Yan-wei, XU Jian-liang

(Department of Physics, Lianyungang Teacher's College, Lianyungang 222006, Jiangsu China)

Abstract: This paper applies finite difference time domain method to calculate transmission coefficient of two-dimensional square cylinder photonic crystal. The calculated results obviously show that band gap exists. Band gap width is related to Polarization of incident ray, cylinder's index of refraction and the existence of defects.

Key words: two-dimensional photonic crystal; finite difference time domain method; transmission coefficient; band gap