

doi: 10.3788/gzxb20154411.1123001

# 基于紧束缚理论的一维多镜像光子晶体特性研究

陈颖<sup>1</sup>, 石佳<sup>1</sup>, 王宁<sup>2</sup>, 陈卫东<sup>2</sup>

(1 燕山大学 电气工程学院, 河北省测试计量技术及仪器重点实验室, 河北 秦皇岛 066004)

(2 燕山大学 信息科学与工程学院, 河北省特种光纤与光纤传感器重点实验室, 河北 秦皇岛 066004)

**摘要:** 基于紧束缚理论, 分析了一维多镜像光子晶体中多缺陷模的产生及缺陷模式分裂的机理, 建立了缺陷模频率与缺陷层相对位置的关系模型. 采用传输矩阵理论研究了双镜像光子晶体的光学传输特性, 并讨论了光子晶体周期层数、入射角度、介质层厚度等及介质的相对折射率差等参数对光子晶体缺陷模特性的影响. 模拟结果表明, 调整光子晶体参数和缺陷层的相对位置可有效调控光子晶体的缺陷模特性, 可为光子晶体多通道滤波器等光学器件的设计和应用提供一定的理论参考.

**关键词:** 光子晶体; 紧束缚理论; 传输矩阵法; 缺陷模; 透射谱; 光子禁带; 谐振

中图分类号: O436

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2015)11-1123001-5

## Study on Property of One-dimensional Multiple Mirror Photonic Crystal Based on the Tight-binding Theory

CHEN Ying<sup>1</sup>, SHI Jia<sup>1</sup>, WANG Ning<sup>2</sup>, CHEN Wei-dong<sup>2</sup>

(1 Hebei Province Key Laboratory of Test/Measurement Technology and Instrument, School of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China)

(2 Key Laboratory of Special Fiber and Fiber Sensor of Hebei Province, School of Information Science and Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China)

**Abstract:** Based on the tight-binding theory, the generation and split mechanism of one-dimensional multiple mirror photonic crystal defect modes were analyzed theoretically, and the relationship between defect mode frequencies and the relative location of defect layers was established. The transfer matrix method is used to analyze the optical transmission properties of the dual mirror photonic crystal, at the same time, the influences on defect mode properties by periodical layer number, incident angle, dielectric layer thickness and relative refractive index difference of photonic crystal are discussed. The simulation results show that adjusting parameters and defect layer relative locations of photonic crystal can control defect mode properties effectively, which can provide certain theoretical references for the design and application of photonic crystal multi-channel filters.

**Key words:** Photonic crystal; Tight-binding theory; Transfer matrix method; Defect mode; Transmission spectra; Photonic band gap; Resonance

**OCIS Codes:** 230.5298; 160.5293; 230.4555

## 0 引言

1987年, E. Yablonovitch 和 S. John 借鉴半导体晶体及其电子带隙的原理, 分别独立提出了光子晶体<sup>[1-2]</sup>这一概念, 作为一种介电常数在空间呈周期性变化的人工微结构光学材料, 光子晶体最基本的光学特性为光子禁带特性<sup>[3]</sup>和光子局域特性<sup>[4]</sup>. 若在完整的光子

晶体中掺杂多个缺陷, 将破坏光子晶体的周期性结构, 从而增加相应频率光子的态密度, 局域在不同缺陷层的电磁波发生耦合作用, 使得缺陷模发生分裂, 光子禁带中会出现多个缺陷模. 采用不同的结构和材料可以得到不同的带隙分布, 因而可通过调控光子晶体结构参数有效地控制光在光子晶体结构中的传输性能, 并且具有结构简单、易于集成和抗电磁干扰等优点. 因

**基金项目:** 国家自然科学基金项目 (Nos. 61201112, 61172044, 61475133)、河北省自然科学基金项目 (No. F2013203250)、河北省普通高校毕业生青年拔尖人才计划项目 (No. BJ2014056) 和燕山大学青年教师自主研究计划项目 (No. 14LG013) 资助

**第一作者:** 陈颖 (1980-), 女, 教授, 博士, 主要研究方向为光子晶体应用技术. Email: chenying@ysu.edu.cn

**收稿日期:** 2015-06-05; **录用日期:** 2015-07-29

<http://www.photon.ac.cn>

此,光子晶体在光学器件的设计与应用中具有极为广泛的应用前景,目前已广泛应用于光子晶体滤波器<sup>[5]</sup>、光子晶体激光器<sup>[6]</sup>、光子晶体光开关<sup>[7]</sup>和光子晶体传感器<sup>[8]</sup>等诸多方面。

目前,有关一维缺陷态光子晶体光学特性的研究和应用较为广泛,陈林坤等<sup>[9]</sup>在光子晶体两个表面掺杂金属缺陷,提出了一种基于 Tamm 态耦合的可调谐双频光子晶体滤波器;M. -I. Georgaki 等<sup>[10]</sup>采用疏水性材料和亲水性材料交替排列制作缺陷态聚合物光子晶体传感器,来实现环境湿度的测量.可以发现,在一维缺陷态光子晶体的设计与研究中,大多是采用替换式或间歇式掺杂另一种缺陷材料实现的,而镜像结构作为一种独特的缺陷构造方式,具有结构简单、可重复性强等优势,在光学器件的设计与应用中具有广泛的应用前景.辜康乐等<sup>[11]</sup>研究了镜像对称缓变准周期结构一维光子晶体的缺陷模特性;冯瑞婷等<sup>[12]</sup>提出了一种镜像异质三周期光子晶体,并基于介观压光效应,设计加速度传感器。

本文提出了一维多镜像光子晶体结构,从麦克斯韦方程出发,结合缺陷态光子晶体理论模型,利用紧束缚理论<sup>[13]</sup>研究了光子晶体中缺陷模式的产生及缺陷模式分裂的机理,并讨论了缺陷层相对位置对缺陷模分裂程度的影响.以双镜像缺陷光子晶体为例,结合传输矩阵理论<sup>[14]</sup>研究了一维光子晶体光学传输特性,分别讨论了入射角度、介质层厚度及周期层介质的相对折射率差等参数对光子晶体缺陷模频率、Q 值及光子禁带的影响。

## 1 理论分析

在完整的周期性光子晶体结构中改变某一层的厚度或在某层掺杂其它介质材料,均可在周期性光子晶体结构中引入缺陷.缺陷层的引入使得光子晶体的周期性结构遭到破坏,可以增加相应频率光子态密度,从而增强了对应频率处的受激辐射,从而在光子禁带中将会出现局域模,局域在不同缺陷处的电磁波能量之间将会相互影响,从而发生耦合作用,缺陷模将发生分裂,光子禁带中将会出现多条缺陷模。

光子局域特性类似于半导体中的电子局域态,描述光子晶体缺陷模的本征方程类似于量子力学能量的本征方程<sup>[15]</sup>,可以表示为

$$-\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

式中, $\omega$  为缺陷模的本征频率, $c$  为真空中的光速, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  为缺陷模的本征模式, $\epsilon(\mathbf{r})$  为缺陷层的介电常数。

若在周期性光子晶体中掺杂单个缺陷,电磁波在该缺陷层处局域,光子禁带中会出现一个频率为  $\omega_0$  的强局域模,满足式(1),即

$$-\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\omega_0^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

若在周期性光子晶体中掺杂两个缺陷,缺陷模的本征模式将分  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  列为两个单独的模式  $\mathbf{E}_i(\mathbf{r})$  和  $\mathbf{E}_i(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ ,可表示为

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = C_1 \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) + C_2 \mathbf{E}_i(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \quad (3)$$

式中, $\mathbf{R}$  是两缺陷的相对位置, $C_1$ 、 $C_2$  为相关系数,光子晶体的本征频率  $\omega_0$  就会分裂成两个相互耦合的缺陷模式  $\omega_1$  和  $\omega_2$ ,两个缺陷模频率之间满足关系式

$$\begin{cases} \omega_1 = \omega_0 \left( \frac{1+J_0+J_1+J_2}{1+J_2} \right)^{1/2} \\ \omega_2 = \omega_0 \left( \frac{1+J_0-J_1-J_2}{1-J_2} \right)^{1/2} \end{cases} \quad (4)$$

式中, $J_0$  为单缺陷作用项, $J_1$  和  $J_2$  为两分裂缺陷模的耦合系数.缺陷的距离越小,缺陷层之间耦合作用越强, $J_1$  和  $J_2$  就越大,缺陷模分裂就越明显,缺陷模的间距就越大。

同理,若在周期性光子晶体中掺杂  $n$  个缺陷,缺陷模的本征模式将会分裂成  $n$  个相互耦合的模式,缺陷模的本征频率  $\omega_0$  率就会分裂成  $n$  个相互耦合的缺陷模频率  $\omega_1, \omega_2 \dots \omega_n$ ,从而光子禁带中就会出现  $n$  个局域模.缺陷模频率与光子晶体掺杂缺陷的相对位置以及光子晶体结构参数密切相关,通过调控缺陷层的相对位置及光子晶体参数,即可调控光子晶体缺陷模特性。

## 2 数值模拟及分析

在一维周期性光子晶体  $(AB)_g A$  中心掺杂介质材料 B,以此可构造形如  $(AB)_m (BA)_m$  的一维镜像光子晶体结构,光子晶体中心层 BB 可以看做谐振腔,光波进入该层后,会在该层前后两个界面反复的反射和透射,满足式(5)将形成谐振。

$$\frac{2\pi}{\lambda_d} n_B (2d_B) \cos \theta_B = k\pi, \quad (k=1, 2, 3 \dots) \quad (5)$$

式中, $\lambda_d$  为谐振波长, $n_B$ 、 $d_B$ 、 $\theta_B$  分别为介质层 B 的折射率、厚度和光入射到介质层 B 的角度。

同理,在一维周期性光子晶体  $(AB)_g A$  中心对称掺杂两层介质材料 B 可以构造双镜像光子晶体  $(AB)_m (BA)_n B (BA)_m$ ,如图 1 所示,光子晶体中存在两个相互耦合的谐振腔,由紧束缚理论,光子晶体的缺陷模频率会分裂为两个互相耦合的缺陷模,缺陷模的位置与光子晶体的参数密切相关。

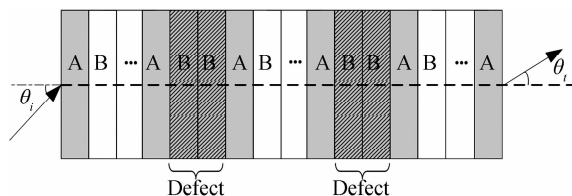


图 1 光子晶体结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram structure of photonic crystal

电磁波在周期性层状介质中的传播特性由 Maxwell 方程决定,根据薄膜光学理论,可用传输矩阵法逐层分析其传输特性.缺陷模的特性与光子晶体掺杂缺陷的相对位置及光子晶体结构参数相关,现以双镜像对称光子晶体为例,分析掺杂缺陷的位置以及光子晶体结构参数对双缺陷模特性的影响.

### 2.1 周期层数 $m$ 、 $n$ 对缺陷模的影响

在周期性光子晶体中掺杂两个缺陷,由上边的分析可知,两缺陷处的电磁波相互耦合,缺陷模发生分裂,光子禁带中出现两个缺陷模,两缺陷的中心距离对缺陷模的分裂模式有较大的影响.当光垂直入射到一维光子晶体中,不考虑材料的吸收和色散,假设光子晶体周期性材料分别为  $n_A=2.6$  的  $\text{TiO}_2$  及  $n_B=1.45$  的  $\text{SiO}_2$ ,材料厚度  $d_A=134.62$  nm,  $d_B=241.38$  nm,周期层数  $n=3$  固定不变,即两缺陷层间距不变,利用传输矩阵法对  $m$  取不同值时的一维光子晶体的透射谱线进行数值模拟,如图 2.

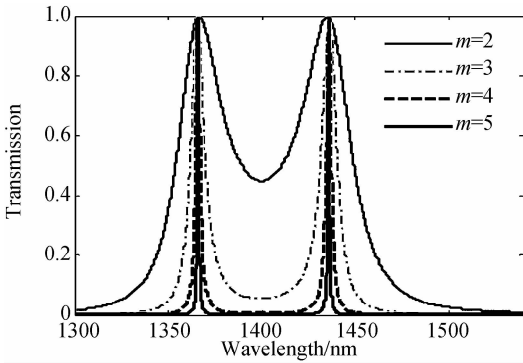


图 2 周期层数  $m$  取不同值光子晶体的透射谱  
Fig. 2 Photonic crystal transmission spectrum under different number of cycle layer  $m$

可以发现,当周期层数  $n$  固定不变时,光子晶体的光子禁带中出现两个分裂的缺陷模,两缺陷模波长均处于 1365 nm 和 1435 nm 处,其位置并未随周期层数  $m$  的增加而发生变化,这是因为周期层数  $n$  固定不变时,两缺陷层的中心距离不变,两缺陷层的相互耦合作用不变,因而缺陷模的位置没有发生变化.而随着周期层数  $m$  的增大,两缺陷模的半高全宽逐渐减小,相应的  $Q$  值不断增大,透射峰越精细.

当周期层数  $m$  固定为 5,而周期层数  $n$  取不同值时光子晶体的透射谱线如图 3 所示.周期层数  $m$  固定不变时,随着周期层数  $n$  的增加,两缺陷层的距离不断增大,缺陷层间的耦合作用越来越弱,由紧束缚理论可得,两缺陷模的间距越来越小,当缺陷层间的耦合作用弱到一定程度,近似为 0 时,两缺陷模频率  $\omega_1 = \omega_2 = \omega_0$ ,在透射谱中表现为单缺陷模,与前边的理论分析相符.可以看出,通过调整周期层数  $m$  和  $n$  的值,可以分别调整光子禁带中缺陷峰的  $Q$  值和两缺陷模的距离.

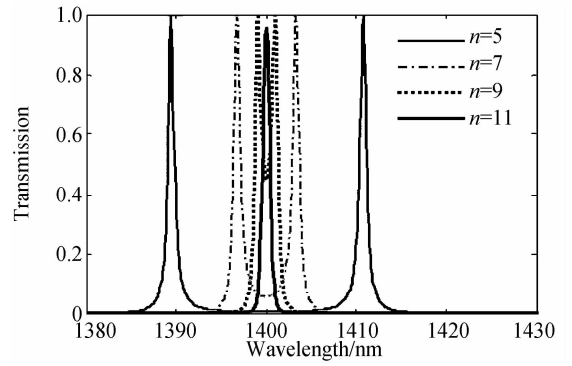


图 3 周期层数  $n$  取不同值光子晶体的透射谱  
Fig. 3 Photonic crystal transmission spectrum under different numbers of cycle layer  $n$

### 2.2 入射角度对缺陷模的影响

若只改变入射光的角度,一维光子晶体的缺陷模特性会发生相应的变化.假设周期层数  $m=5$ ,  $n=2$  固定不变,当光入射到为  $n_A=2.6$ ,  $n_B=1.45$ ,  $d_A=134.62$  nm,  $d_B=241.38$  nm 的光子晶体  $(\text{AB})_5(\text{BA})_2\text{B}(\text{BA})_5$  中,TE 模式下入射角度对光子晶体透射谱线的影响如图 4.

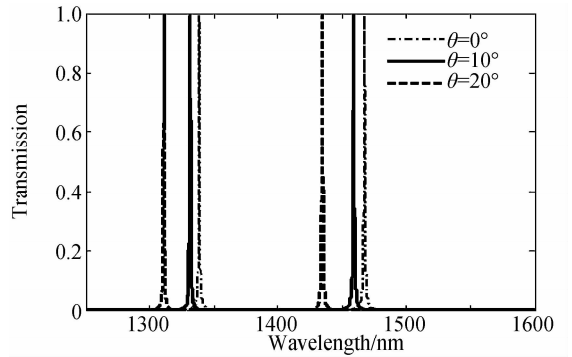


图 4 入射角度对缺陷模的影响  
Fig. 4 Influences of different incident angles on defect modes

从图 4 中可以看出,当入射角度  $\theta$  从  $0^\circ$  增加到  $20^\circ$  时,禁带中两缺陷模均向短波方向移动,这是因为当周期层数  $m$ 、 $n$  固定不变时,两缺陷模的耦合作用不变,即耦合系数不变,由式(4)可得,两分裂的缺陷模频率与光子晶体的本征频率呈正比关系.又因为随光子晶体入射角度  $\theta$  的增大,  $\theta_B$  不断增大,由式(5)可知本征缺陷模波长减小,从而两缺陷模均向短波方向移动,而两缺陷模的  $Q$  值和透射率几乎没有发生变化.

### 2.3 周期层材料 B 的厚度对缺陷模的影响

当光垂直入射到为  $n_A=2.6$ ,  $n_B=1.45$ ,  $d_A=134.62$  nm 的光子晶体  $(\text{AB})_5(\text{BA})_2\text{B}(\text{BA})_5$  中,介质层 B 的厚度与波长对应的透射光强分布如图 5.

当光子晶体缺陷层厚度增大时,本征缺陷模波长不断增大,又因当周期层数  $m$ 、 $n$  固定不变时,两分裂的缺陷模频率与光子晶体的本征频率呈正比关系,从而两缺陷模均向长波方向移动.从图 5 可以看出,在

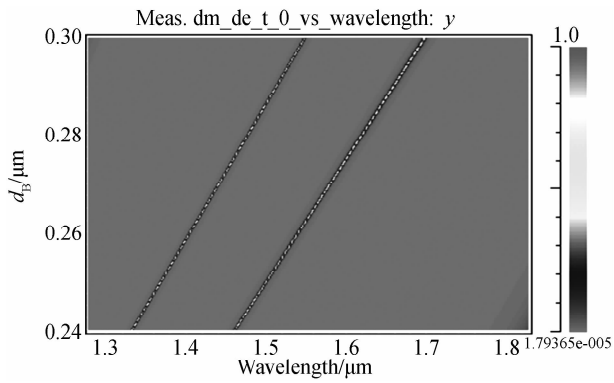
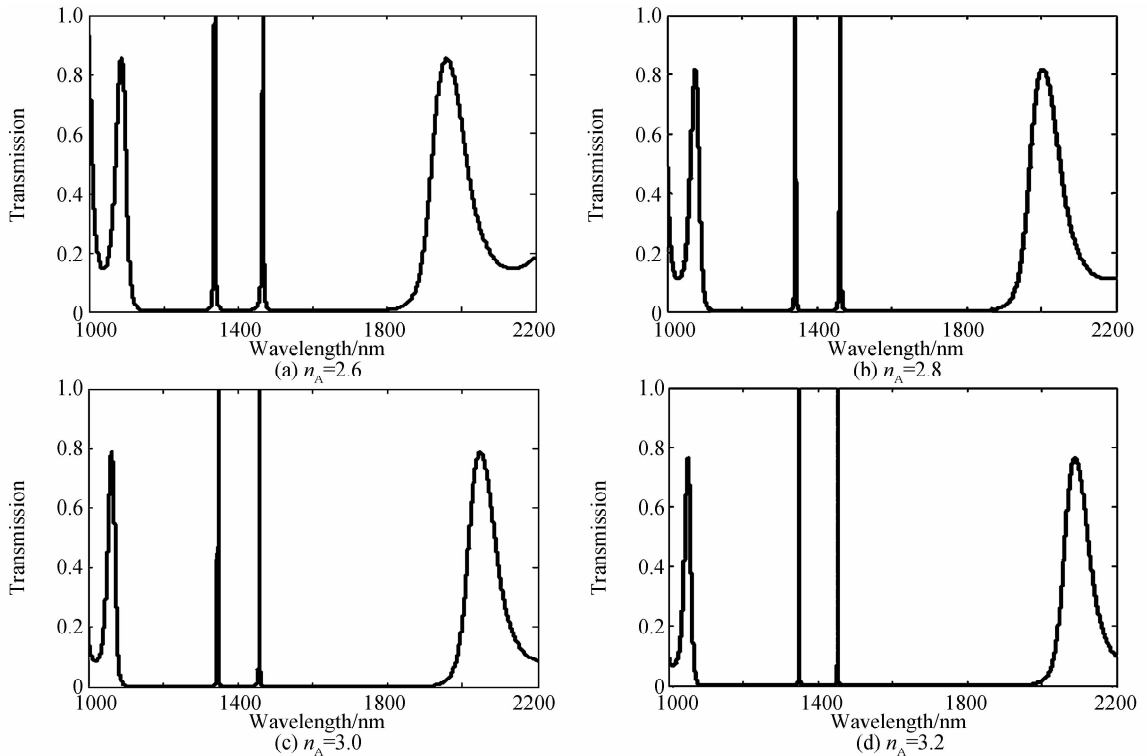
图5  $d_B$  与波长对应的透射光强分布Fig. 5 Transmission light intensity distribution of  $d_B$  and wavelength

图6 介质层折射率差对缺陷模的影响

Fig. 6 Influences on the defect modes by the refractive index differences of dielectric layer

从图中可以发现,随着介质层折射率差的增大,光子禁带宽度不断增大,两缺陷模 Q 值不断增大,而两缺陷峰的位置几乎没有发生变化,这是因为缺陷腔的折射率、厚度及入射角度均未发生变化,故本征缺陷模波长不变,又因为周期层数  $m$ 、 $n$  固定不变时,两缺陷模的耦合作用不变,从而分裂的两缺陷模的波长不变。

### 3 结论

结合紧束缚理论,分析了缺陷态光子晶体中多缺陷模的产生及模式分裂的机理,建立了缺陷模频率与缺陷层相对位置的关系模型;在此基础上,以双镜像对称光子晶体为例,从传输矩阵理论出发,研究了光子晶体的参数和缺陷层的相对位置对缺陷模特性的影响。

光子禁带中局域两条明显的透射峰,随介质层 B 厚度的增大,两缺陷模均发生红移,与理论分析相符,并且从图中可以看出,两缺陷模波长与介质层厚度有较高的线性关系。

#### 2.4 介质相对折射率差对缺陷模的影响

光垂直入射到  $d_A=134.62\text{ nm}$ 、 $d_B=241.38\text{ nm}$  的光子晶体  $(AB)_5(BA)_3B(BA)_5$  中,通过改变高折射率介质的折射率来改变介质 A、B 的相对折射率差,取  $n_B=1.45$  不变,当  $n_A=2.6$ 、 $2.8$ 、 $3.0$ 、 $3.2$  时即 A、B 两层介质的相对折射率差分别为 1.15、1.35、1.55 和 1.75 时光子晶体的透射特性如图 6。

数值模拟结果表明,对于双镜像对称光子晶体,其禁带中存在两条分裂的缺陷峰,两缺陷层间距越大,两缺陷模分裂越不明显,直至合并为单缺陷模;随着入射角度和介质层厚度的增大,两缺陷模均发生红移;随周期层介质相对折射率差的增大,缺陷模的品质因子不断增大,因此,可以通过调整光子晶体参数实现特定频率的选频以及缺陷模品质的增强,并且以镜像结构在光子晶体中引入缺陷,结构简单,可重复性强,可为光子晶体多通道滤波器等光学器件的制备提供一定的理论参考。

#### 参考文献

- [1] ZHANG Juan. The maximum photonic bandgap extension of omni-directional reflectors based on cascaded one-dimensional photonic crystal[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, **43**(10):

1023001.  
张娟. 级联一维光子晶体全方位反射器的带宽最大化[J]. 光子学报, 2014, **43**(10): 1023001.
- [2] RAHMAT M, MAULINA W, RUSTAMI E, *et al.* Performance in real condition of photonic crystal sensor based NO<sub>2</sub> gas monitoring system[J]. *Atmospheric Environment*, 2013, **79**: 480-485.
- [3] WU Ri-na, YAN Bin, WANG Yan-hua, *et al.* Photonic band gap in one-dimensional SiO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> multilayer photonic crystal[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2011, **40**(5): 872-875.  
乌日娜, 闫彬, 王彦华, 等. SiO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> 多层膜结构一维光子晶体光子禁带研究[J]. 红外与激光工程, 2011, **40**(5): 872-875.
- [4] LIU Qi-neng. Theoretical study of multi-channel polarization tunable filter of photonic crystal[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(2): 305-308.  
刘启能. 光子晶体多通道可调谐偏振滤波器的理论研究[J]. 光子学报, 2008, **37**(2): 305-308.
- [5] CHEN Wei-dong, DONG Xin-yu, CHEN Ying, *et al.* Analysis of the tunable filtering properties of a photonic crystal with symmetric dual defects[J]. *Acta Physica Sinica*, 2014, **63**(15): 154207.  
陈卫东, 董昕宇, 陈颖, 等. 对称双缺陷光子晶体的可调谐滤波特性分析[J]. 物理学报, 2014, **63**(15): 154207.
- [6] CHAKRAVARTY U, KURUVILLA A, HARIKRISHNAN H, *et al.* Study on self-pulsing dynamics in Yb-doped photonic crystal fiber laser [J]. *Optics & Laser Technology*, 2013, **51**: 82-89.
- [7] CHEN Hai-bo, HU Su-mei, GAO Ying-jun. Multiple channeled filters and optical switches using compound photonic crystal with two symmetrical defect layer at the two ports[J]. *Journal of Luminescence*, 2010, **31**(1): 7-11.  
陈海波, 胡素梅, 高英俊. 用两端对称缺陷复合光子晶体实现多通道滤波和光开关[J]. 发光学报, 2010, **31**(1): 7-11.
- [8] CHEN Ying, LU Bo, FAN Hui-qing. High throughput detection based on surface defect photonic crystal with absorbing medium [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2014, **41**(10): 1014002.  
陈颖, 卢波, 范卉青. 基于带吸收介质表面缺陷光子晶体的高通量检测[J]. 中国激光, 2014, **41**(10): 1014002.
- [9] CHEN Lin-kun, FANG Yun-tuan, ZHU Na, *et al.* Implementation of tunable dual-band filter based on the coupling of Tamm state of the 1-D photonic crystal [J]. *Journal of Synthetic Crystals*, 2013, **42**(11): 2406-2411.  
陈林坤, 方云团, 朱娜, 等. 基于一维光子晶体的 Tamm 态耦合实现可调双频滤波器[J]. 人工晶体学报, 2013, **42**(11): 406-2411.
- [10] GEORGAKI M-I, BOTSIALAS A, ARGITIS P, *et al.* 1-D polymeric photonic crystals as spectroscopic zero-power humidity sensors [J]. *Microelectronic Engineering*, 2014, **115**: 50-60.
- [11] GU Kang-le. Defect of mirror symmetry slowly varying quasi-periodic one-dimensional photonic crystal [J]. *Journal of Luminescence*, 2010, **31**(6): 942-945.  
辜康乐. 镜像对称缓变周期结构一维光子晶体的缺陷模 [J]. 发光学报, 2010, **31**(6): 942-945.
- [12] FENG Rui-ting, LI Jun-yang, WEN Ting-dun, *et al.* Acceleration sensor based on mesopiezophotonic effect of mirror structure triply-periodic photonic crystal [J]. *Chinese Journal of Sensors and Actuators*, 2013, **26**(8): 1073-1077.  
冯瑞婷, 李俊漾, 温廷敦, 等. 基于镜像异质三周期光子晶体介观压光效应的加速度传感器 [J]. 传感技术学报, 2013, **26**(8): 1073-1077.
- [13] CAI Xu-hong, LIN Xu-sheng, SHI Quan, *et al.* Resonant frequency shift in coupled photonic crystal defects described by the tight-binding method [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, **56**(5): 2742-2746.  
蔡旭红, 林旭升, 石全, 等. 用紧束缚方法描述光子晶体缺陷耦合的共振频率移动 [J]. 物理学报, 2007, **56**(5): 2742-2746.
- [14] LIU Qi-neng. A new method that study electromagnetic waves transfer in stratified medium [J]. *Laser Journal*, 2009, **30**(3): 14-15.  
刘启能. 一种研究电磁波在分层介质中传输的新方法 [J]. 激光杂志, 2009, **30**(3): 14-15.
- [15] HUANG Xiao-qin, CUI Yi-ping. Degeneracy and split of defect states in photonic crystals [J]. *Chinese Physics Letters*, 2003, **20**(10): 1721.