

太赫兹波在二维三角晶格光子晶体中的传播特性

闫昕¹, 郑义^{1,2}

(1. 郑州大学河南省激光与光电信息技术重点实验室, 河南 郑州 450052; 2. 北京交通大学理学院, 北京 100044)

摘要:用平面波展开法研究了太赫兹波在二维三角晶格光子晶体中的传播特性。数值计算了以硅为背景的空气圆柱构成的二维三角晶格光子晶体的能带结构和态密度, 计算表明 $r=0.50a$ 和 $r=0.46a$ 时, E 偏振和 H 偏振分别出现最大光子带隙, 带隙宽度分别 0.1097THz 和 0.1935THz , 在 $r=0.48a$ 出现最大完全光子带隙, 带隙宽度为 0.0759THz , 光子晶体态密度的分布也表明了存在光子带隙的范围, 研究结果为太赫兹器件的开发提供了理论依据。

关键词:太赫兹波; 光子晶体; 平面波展开法; 三角格子; 光子能带结构; 光子晶体态密度

中图分类号: O431.1

文献标识码: A

Propagation Characteristic of 2D Triangular Lattice Photonic Crystals in THz Range

YAN Xin¹, ZHENG Yi^{1,2}

(1. Henan Key Laboratory of Laser and Opto-electric Information Technology of Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China;
2. Institute of Science Beijing Jiaotong University; Beijing 100044, China)

Abstract: Propagation characteristic of two-dimensional triangular lattice photonic crystals in THz range was studied by using PWM. The band gap structure and density of photon states of two-dimensional triangular lattice photonic crystals constructed from air in Si dielectric matrix was calculated. It was found that it can generate maximum photonic band gap with 0.1097THz and 0.1935THz when the radius was $0.50a$ and $0.46a$, and when the radius was $0.48a$. It can generate maximum absolute photonic band gap with 0.0759THz . The photonic band structure was also shown by the photonic density of states. This research provides a theoretic basis for the development of THz devices.

Key words: THz wave; photonic crystal; plan wave expansion method; triangular lattice; photonic band structure; density of photon states

1 引言

太赫兹 (THz) 波^[1-3]是指频率从 100GHz 到 10THz , 相应波长从 3mm 到 $30\mu\text{m}$ 范围内, 介于毫米波与红外光之间的电磁波。太赫兹波具有频率高、脉冲短等特性, 在信息科学、医学诊断、天文学等领域有着广阔的应用前景和应用价值。近年来, 对太赫兹波导的最新研究领域是将光子晶体运用到太赫

兹波的传播中^[4-5]。光子晶体的概念是 Yablono-vitch^[6] 和 John^[7] 于 1987 年分别提出的。光子晶体具有低色散、低损耗等特性, 它的重要特征是具有光

基金项目:国家自然科学基金 (No. 60671036); 高等学校博士学科点专项科研基金 (No. 20040056010) 资助。

作者简介: 闫昕 (1977 -), 男, 助教, 研究生, 主要从事太赫兹波方面的研究。E-mail: yxllj68@126.com

收稿日期: 2007-08-24; **修订日期:** 2007-10-17

子带隙,当电磁波的频率落在光子带隙中,电磁波在光子晶体中的传播就被禁止。利用光子晶体中的这种特性,就可以制造出对特定波谱范围内有透射或过滤作用的太赫兹波导器件。

目前,计算光子晶体的理论方法有平面波展开法(PWM)、时域有限差分法(FDTD)、转移矩阵法(TMM)等。本文用平面波展开法研究了太赫兹在二维三角晶格光子晶体中的传播特性。在晶格常数为 $a=0.1\text{mm}$ 的二维三角晶格光子晶体以硅为背景的空气介质柱中,研究了光子晶体的最大带隙宽度与 (r/a) 的变化,获得了不同太赫兹范围内的带隙结构等。这些研究结果为太赫兹器件开发提供了理论参考,具有潜在的应用价值。

2 平面波展开法的理论和计算

平面波展开法主要通过将电磁场在倒格失空间以平面波叠加的形式展开,可将 Maxwell 方程组化为一个本征方程,求解本征值即可得到传播光子的本征频率和本征模态,从而获得光子晶体的光子禁带和光子晶体的光子能态密度分布。

由 Maxwell 方程组得到电磁波在光子晶体的传播方程:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{x}_{11})} \nabla \times \vec{E} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E} \quad (1)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{x}_{11})} \nabla \times \vec{H} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H} \quad (2)$$

由二维光子晶体的周期性,可把 $\varepsilon^{-1}(\vec{x}_{11})$, $\vec{H}_3(\vec{x}_{11}, \omega)$ 展开成傅里叶级数:

$$\varepsilon^{-1}(\vec{x}_{11}) = \sum_{\vec{G}} \vec{K}(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{x}_{11}} \quad (3)$$

$$\vec{H}_3(\vec{x}_{11}, \omega) = \sum_{\vec{G}} A(\vec{K} + \vec{G}) e^{i(\vec{K} + \vec{G})\vec{x}_{11}} \quad (4)$$

其中, $\vec{K}$ 是被限制在第一 Brillouin 区的波矢量,可以表示为 $\vec{k} = k_1 \vec{x}_1 + k_2 \vec{x}_2$; $\vec{G} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2$ 是晶格的二维倒格失, h_1, h_2 是整数;三角格子的基本倒格矢为:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left(1, -\frac{\sqrt{3}}{3} \right); \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left(0, -\frac{2\sqrt{3}}{3} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

我们首先考虑 H 偏振(或 TE 模),此时 H 和 E 可写成:

$$\vec{H}(\vec{x}_{11}, t) = \vec{H}_0(\vec{x}_{11}, \omega) e^{-i\omega t} = (0, 0, \vec{H}_3(\vec{x}_{11}, \omega)) e^{-i\omega t} \quad (6)$$

$$\vec{E}(\vec{x}_{11}, t) = \vec{E}_0(\vec{x}_{11}, \omega) e^{-i\omega t} = (\vec{E}_1(\vec{x}_{11}, \omega), \vec{E}_2(\vec{x}_{11}, \omega), 0) e^{-i\omega t} \quad (7)$$

其中, $\vec{x}_{11}$ 为由 x_1, x_2 坐标轴构成的平面上的矢量。先把式(2)展开,然后把式(6)和式(7)代入,消去 E_1 和 E_2 ,得到 H_3 的表达式:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{x}_{11})} \frac{\partial H_3}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{x}_{11})} \frac{\partial H_3}{\partial x_2} \right) = -\frac{\omega^2}{c^2} H_3 \quad (8)$$

把式(3)和(4)代入式(8),得:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{G}} K(\vec{G} - \vec{G}') (\vec{k} + \vec{G}') (\vec{k} + \vec{G}) A(\vec{k} + \vec{G}') \\ = \frac{\omega^2}{c^2} A(\vec{k} + \vec{G}) \end{aligned} \quad (9)$$

式(9)TE 偏振的电磁波在光子晶体的传播问题变成了求解对称矩阵的本征值和本征函数的问题。对于 E 偏振(或 TM 模),同理可得如下方程:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{G}} K(\vec{G} - \vec{G}') (\vec{k} + \vec{G}')^2 B(\vec{k} + \vec{G}') \\ = \frac{\omega^2}{c^2} B(\vec{k} + \vec{G}) \end{aligned} \quad (10)$$

式(9)和式(10)分别是对无限多个倒格矢的求和。本文中用 N 个倒格矢的和来代替。这样这两个方程分别变成含有 $2N \times 2N$ 个矩阵元的本征值方程,我们可以采用数值计算的方法来求解。考虑每个原胞由介质常数分别为 $\varepsilon_a, \varepsilon_b$ 的两种材料组成,此时式(9)和(10)中的系数可表示为:

$$\vec{K}(\vec{G}) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_a} f + \frac{1}{\varepsilon_b} (1-f), \vec{G} = 0 \\ \left(\frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) f \frac{2J_1(\vec{r}\vec{G})}{r|\vec{G}|}, \vec{G} \neq 0 \end{cases}$$

$$\text{式中 } f = \frac{S_r}{S_a} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{r^2}{a^2}. \quad (11)$$

其中, J_1 为一阶贝塞尔函数; f 为填充因子。将式(11)代入式(10)和(9),即可求出 H 偏振和 E 偏振

的本征频率。

3 数值计算结果与分析

3.1 物理模型

图1(a)是介电常数为 $\epsilon_a = 1$ 圆柱嵌在介电常数为 $\epsilon_b = 11.6$ 的硅中所形成的三角晶格,其中晶格常数 $a = 0.1\text{mm}$,单位晶格的形状为正六边形,圆柱半径为 r ,相邻两圆柱柱心相距为 a ,从图1和式(11)可知 $0 < r < a/2$,图1(b)为三角格子的第一Brilliouin区。在二维光子晶体中,入射电磁波分解为 H 偏振和 E 偏振,即磁场平行于介质柱的TE模和电场平行于介质柱的TM模。

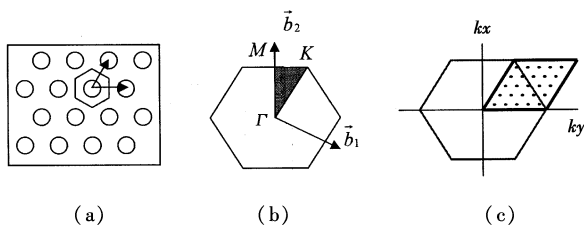


图1 (a)圆柱组成二维三角结构;(b)三角格子的第一Brilliouin区;(c)三角晶格倒晶格空光子晶体间取样方式

Fig.1 (a) the cylinder constitutes of 2D of triangular lattice photonic crystal structure;(b) triangular lattice of Brillouin region;(c) space sampling method of reciprocal space lattice

3.2 带隙计算

在固定介电常数和晶格常数不变的情况下,采用961个平面波进行展开。图2是二维圆柱三角晶格光子晶体的最大带隙宽度随 (r/a) 的变化曲线。图2中实线是TM模,虚线是TE模,当 $r/a = 0.50$ 时TM出现最大带隙宽度, $r/a = 0.46$ 时TE模出现最大带隙宽度, $r/a = 0.48$ 时出现最大完全带隙。

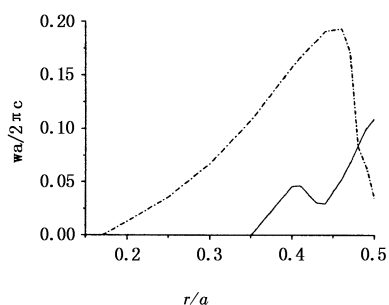


图2 最大带隙宽度随 r/a 的变化曲线
Fig.2 maximum photonic band gap with the variety curve of r/a

TM; Band structure of a 2D triangular photonic band structure

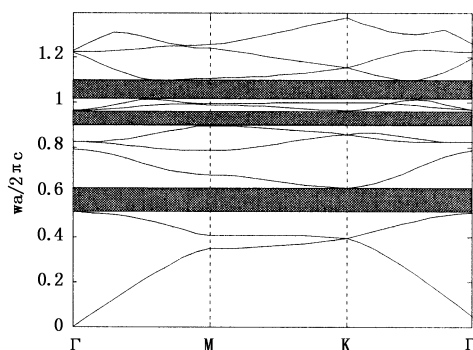


图3 (a) TM模光子能带结构($r/a = 0.50$)

Fig.3 (a) the photonic-band structure of TM mold($r/a = 0.50$)

TM; Band structure of a 2D triangular photonic band structure

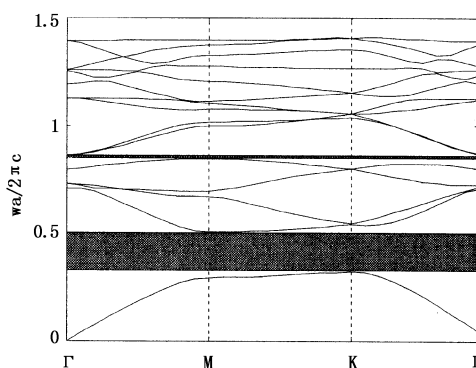


图3 (b) TE模光子能带结构($r/a = 0.46$)

Fig.3 (b) the photonic-band structure of TMmold($r/a = 0.55$)

TM/TE; Band structure of a 2D triangular photonic band structure

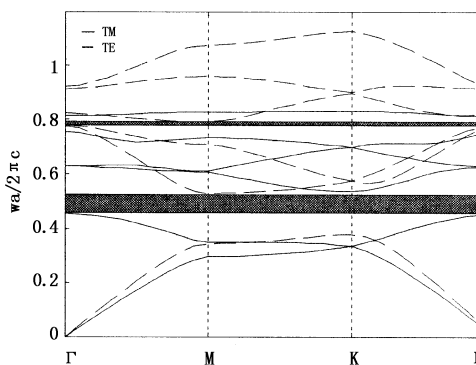


图3 (c) 完全带隙光子能带结构($r/a = 0.48$)

Fig.3 (c) the absolute photonic band gap structure($r/a = 0.48$)

图3主要分析了TM模、TE模以及最大完全带隙的能带结构,横坐标表示波矢量,纵坐标表示约化频率。图3(a)为TM模光子能带结构,由图可知,当 $r/a = 0.50$ 时,TM模出现最大带隙,带隙范围为 $0.6216 \sim 0.5119\text{THz}$ 带隙波长范围 $586.05 \sim 482.63\mu\text{m}$,带隙宽 0.1097THz ,中心频率为

0.5668THz。由图3(b)可知,在 $r/a=0.46$ 时,TE模出现最大带隙,范围为0.5142~0.3207THz,带隙波长范围935.45~583.43 μm ,带隙宽度为0.1935THz,中心频率为0.4175THz。由图3(c)可知,在 $r/a=0.48$ 时,TE模和TM模出现最大完全带隙,带隙范围为0.5294~0.4535THz,带隙波长范围611.52~566.68 μm 带隙宽度为0.0759THz,中心频率为0.49145THz。三个带隙的波长范围都属于太赫兹波段。

3.3 态密度的计算

光子态密度(density of photon states, DOS)为单位频率下所存在的能态数目,其数学表达式为 $\text{DOS} = \sum_{\vec{k}} \delta(\omega - \omega(\vec{k}))$,计算中先对第一 Brillouin 区取样 Bloch 向量^[8],以平面波展开法求出所对应的本征模态,然后统计模态数目对能量的分布,即可求得光子态密度,它与光子晶体的透射率及许多实验上观察到的光学性质有密切的关系。

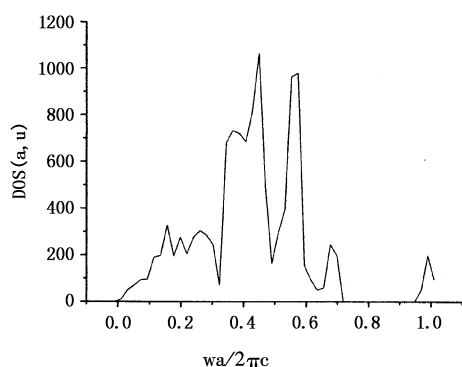


图4 (a)电场极化下,三角晶格光子晶体的态密度

Fig.4 (a) under electrical poling, the density of triangular lattice photonic crystals

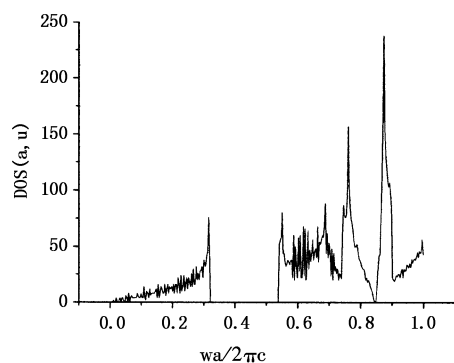


图4 (b)磁场极化下,三角晶格光子晶体的态密度

Fig.4 (b) under magnetical poling, the density state of of state of triangular lattice photonic crystals

在三角晶格的倒晶格空间中,我们使用图1(c)

的方式对 Bloch 向量取样,取样的点数为5776,在计算公式(9)和(10)上我们使用了961平面波,图4(a)为 $r/a=0.50$ 时电场极化下的光子能态密度(DOS)分布图,频率在0.9480~0.7188THz有能隙存在,图4(b)为磁场极化下 $r/a=0.46$ 时的光子能态密度(DOS)分布图,频率在0.5381~0.3217THz有能隙存在,与图3(a)(b)光子晶体的能带图的带隙范围符合得较好,二维三角晶格圆柱光子晶体光子态密度的分布也为其存在的能带结构提供了有力的依据。

4 结论

本文研究了太赫兹波段的二维三角晶格光子晶体的传输特性。在固定介电常数和晶格常数不变的情况下,分析了最大带隙宽度随 (r/a) 的变化曲线,确定了TE模、TM模以及完全带隙的最大带隙宽度 (r/a) 的比值。最后计算了光子态密度,与能带图的带隙范围符合得较好。这些理论可以用在太赫兹波段滤波器、反射器等方面,具有实际应用价值。

参考文献:

- [1] Siegel P H. Terahertz technology [J]. IEEE Trans Trans Micro-wave theory Tech, 2002, 50: 910.
- [2] Cao J C. Interband impact ionization and nonlinear absorption of terahertz radiation in semiconductor heterostructures [J]. Phys. Rev. Lett., 2003, 91: 237401.
- [3] Liu H C, Song C Y, Wasilewski Z R, et al. Coupled electron-phonon modes in optically pumped resonant intersubband lasers [J]. Phys. Rev. Lett., 2003, 90: 077402.
- [4] A Bingham, Y G Zhao, D Grischkowsky. THz parallel plate photonic waveguides [J]. Appl. Phys. Lett., 2005, 87: 051101-1-3.
- [5] H Liu, J Yao, et al. Propagation characteristics of two-dimensional photonic crystals in the terahertz range [J]. Applied Physics B, 2007, 87: 57-63.
- [6] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 58(20): 2059.
- [7] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 58(23): 2486.
- [8] K. Busch, S John. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems [J]. Phys. Rev. E, 1998, 58: 3896.