

文章编号: 1001-5078(2011)03-0314-05

· 光电材料与器件 ·

二维金属型光子晶体带隙研究

杨波^{1,2}, 梁静秋¹, 梁中翥¹, 崔乃迪^{1,2}, 周建伟^{1,2}, 宁永强¹, 王维彪¹
(1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033
2 中国科学院研究生院, 北京 100039)

摘要: 考虑金属的色散特性, 运用时域有限差分方法计算了分别由 Ag Al 两种金属构成的三角晶格二维金属型光子晶体的带隙结构, 得出了带隙结构与填充率的关系曲线。以 Ag 填充率为 0.6 为例, 三角晶格的第一带隙归一化频率的上限为 0.90 第二带隙的范围为 1.24~1.41; 正方晶格第一带隙归一化频率的上限为 0.70 第二带隙的范围为 0.84~1.06。研究结果表明三角晶格金属光子晶体相对正方晶格具有更宽阔的第一带隙和中心频率更高的第二带隙。

关键词: 光子晶体; 带隙; 时域有限差分 (FDTD); 金属; 填充率

中图分类号: O431.1; O734 **文献标识码:** A

Study on the band gaps of 2-D metallic photonic crystals

YANG Bo^{1,2}, LIANG Jing-qiu¹, LIANG Zhong-zhu¹, CUI Nai-di^{1,2},
ZHOU Jian-wei^{1,2}, NING Yong-qiang¹, WANG Wei-biao¹

(1. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China
2. Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract Considered the dispersive nature of metal, the band structures of 2-D triangular lattice metallic photonic crystals is analyzed using the FDTD method. Two kinds of metal Ag and Al are considered. Taking Ag for example, the first band gap's upper limit frequency of the triangular lattice is 0.90 and the second band gap's bound is 1.24~1.41, while the first band gap's upper limit frequency of the square lattice is 0.70 and the second band gap's bound is 0.84~1.06 when the filling factor is 0.6. The research results indicate that the triangular lattice has a wider first band gap and a higher second band gap.

Key words photonic crystal; band gap; finite difference time domain (FDTD); metal; filling factor

1 引言

光子晶体是一种介电常数 (或折射率) 周期性调制的结构, 其自发辐射抑制和光子局域化性质使其可以简便而有力地限制和调控光子。Yablono-vitch 和 John 最早于 1987 年分别提出了光子晶体的概念^[1-2]。光子晶体的产生有着重大的科学意义。目前, 光子晶体主要应用在光通讯、激光器、光子器件等领域, 现正在逐步向光计算方面发展。光子晶体分为很多种类型, 从结构上可分为一维、二维或三维周期结构; 对于构成材料来说, 目前常见的是半导体介质型, 此外还包括金属型^[3]和金属介质混合

型。通常介质型光子晶体, 第一带隙的上部和下底频率的电场被高度集中在介质棒和空气中。而金属光子晶体中, 电场没有被集中在金属棒, 带边模将它们的波的能量集中在空气区 (背景介质)。金属型光子晶体与半导体介质型相比, 有很多优良特性。首先, 对 E 极化波来说, 在零频率和截止频率之间有一个很宽的光子带隙, 而半导体介质型不存在; 其

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No. 60877031) 资助。

作者简介: 杨波 (1987-), 男, 硕士研究生, 主要从事红外金属光子晶体及器件方面的研究。E-mail: yangbo8123@163.com

收稿日期: 2010-10-29

次,在微波波段,二维金属光子晶体可用于性能优良的滤波器、偏振器和反射器。由于金属对电磁波的吸收非常小,接近完全反射,对电磁波的调控作用非常强^[4],因此金属光子晶体器件的维度尺寸要比通常半导体介质材料光子晶体要小得多,这在体积上来说具有一定的优势,更加有利于器件集成;另外,金属光子晶体能承受更高的功率。金属层厚几百纳米的一维金属-介质光子晶体对可见光传输的可行性也得到了理论和实验上的证实^[5]。

关于光子晶体带隙特性的数值分析,目前有很多种方法,其中主要包括平面波展开法^[6-7]、时域矩阵法^[8]、时域有限差分法(FDTD)^[9]、空域有限差分法^[10]、周期矩量法(PMM)^[11-12]等。FDTD方法具有概念简单,计算和存储量较小,只与网格数目成正比,能模拟复杂的金属和半导体介质结构等特点,在电磁场分析和计算中得到了很广泛的应用^[13]。这种方法于1966年由Yee提出来,1995年,C.T.Chan等人把该方法用于计算光子晶体的能带结构^[14],Sakoda等人在2001年把FDTD推广到金属光子晶体^[15]。目前,对金属光子晶体的研究相对较多的是二维的^[16-18],二维的也基本上以正方形为晶格^[19-21]。2005年,王华娟等人采用时域有限差分方法,研究了太赫兹波在二维正方晶格金属光子晶体中的传播特性^[19];2007年,杨光杰等人比较了不同金属材料之间的带隙差异^[20];2009年,闫斌英等人研究了太赫兹波段金属光子晶体的带隙及缺陷特性^[21]。这些文献对金属光子晶体的设计和制作提供了很好的理论依据,但全部基于正方晶格。本文应用FDTD数值分析方法,设计了一种三角晶格的二维金属光子晶体。考虑金属的色散特性^[22],结合Ag和Al具体的材料参数,给出了不同填充率下的带隙结构。计算结果表明,三角晶格金属光子晶体比正方晶格具有更宽阔的第一带隙和中心频率更高的第二带隙。此类功率型金属光子晶体可用于提升和扩展光子器件如滤波器、波导等的性能和应用范围。

2 理论模型

由于三角晶格和正方晶格在工艺上相对容易实现,因此本文所讨论的结构基于这两种模型。图1所示为三角晶格二维金属光子晶体,金属柱沿Y轴方向无限长,XZ平面内为具有周期性的三角晶格阵列。金属柱截面为圆形,直径为R,晶格常数为a,背景为空气,相对介电常数 $\epsilon_0 = 1$ 。

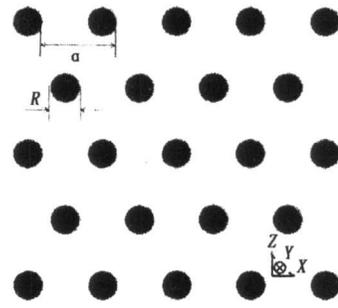


图1 三角晶格二维金属光子晶体
FDTD方法从麦克斯韦方程组出发^[15]:

$$\hat{y} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (1)$$

$$\hat{y} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \{ \mathbf{D}_0(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}_d(\mathbf{r}, t) \} \quad (2)$$

式中, $E(\mathbf{r}, t)$, $H(\mathbf{r}, t)$ 和 μ_0 分别表示电场、磁场和自由空间的磁导率; $P_d(\mathbf{r}, t)$ 表示振荡偶极距,有:

$$\mathbf{P}_d(\mathbf{r}, t) = \mu \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \exp(-i\omega t) \quad (3)$$

式中, μ 和 r_0 分别表示偶极距的大小和位置; δ 是单位冲击函数。电位移矢量 $D_0(\mathbf{r}, t)$ 通常表示成电场强度和介电响应函数 $\Phi(\mathbf{r}, t)$ 的卷积积分:

$$\mathbf{D}_0(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt' \Phi(\mathbf{r}, t-t') \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') \quad (4)$$

式中, ϵ_0 是自由空间的介电常数; $\Phi(\mathbf{r}, t)$ 为介电响应函数,它是介电常数的时域表达式,即频域介电常数 $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$ 的傅里叶逆变换:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \epsilon(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t) \quad (5)$$

$\Phi(\mathbf{r}, t)$ 在 $t < 0$ 时满足:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (6)$$

金属的介电常量满足Dudde模型:

$$\epsilon_m(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon_\infty \left[1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega + i\delta)(\omega + i\gamma)} \right] \quad (7)$$

式中, ϵ_∞ 是在频率足够高的时候的介电常数; ω_p 是金属的等离子体频率; γ 是金属的弛豫率; δ 是一个正的无穷小量,引入它的目的是为计算Fourier积分时使实轴无极点。通过式(5)积分得到:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \epsilon_\infty \delta(t) + \frac{\epsilon_\infty \omega_p^2}{\gamma} [1 - \exp(-\gamma t)] \theta(t) \quad (8)$$

式中, $\theta(t)$ 为单位阶跃函数。

FDTD方法分离麦克斯韦方程式的差分形式为:

$$H_z |_{i,j}^{n+1/2} = H_z |_{i,j}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_i} \left\{ \frac{E_y |_{i,j+1}^n - E_y |_{i,j}^n}{\Delta x} \right\} \quad (9)$$

$$H_x |_{i,j}^{n+1/2} = H_x |_{i,j}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_i} \left\{ \frac{E_y |_{i,j+1}^n - E_y |_{i,j}^n}{\Delta z} \right\} \quad (10)$$

$$E_y |_{i,j}^{n+1} = \frac{\epsilon_{i,j} - \sigma_{i,j} \Delta t / 2}{M} E_y |_{i,j}^n +$$

$$\frac{\Delta}{M} \left(\frac{H_x |_{i,j}^{n+1/2} - H_x |_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{H_z |_{i,j}^{n+1/2} - H_z |_{i,j-1}^{n+1/2}}{\Delta x} \right) \quad (11)$$

电磁场边界条件满足 Bloch理论^[23]:

$$E(\mathbf{r} + \boldsymbol{\alpha}, t) = \exp(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}) E(\mathbf{r}, t) \quad (12)$$

$$H(\mathbf{r} + \boldsymbol{\alpha}, t) = \exp(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}) H(\mathbf{r}, t) \quad (13)$$

式中, \mathbf{k} 为第一布里渊区波矢量, $\boldsymbol{\alpha}$ 为基元点阵矢量。

3 计算结果及分析

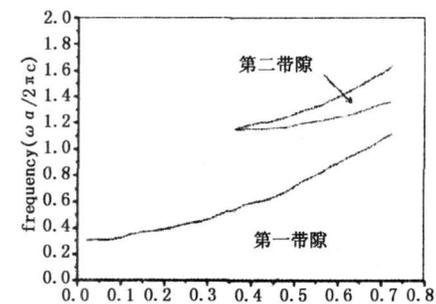
本文所讨论的带隙, 全部针对于 TM 模式, 也即电场方向平行于单个金属柱所在的方向。晶格常数定为 1 μm , 改变金属柱直径的大小, 使填充率 R/a 从 0.02 变化到 0.76 分析分别由两种金属 Ag 和 Al 构成的三角晶格二维光子晶体的带隙结构。Ag 和 Al 的介电常量有如下的 Druede 模型参数^[24]:

$$\text{Ag } \omega_p = 2\pi \times 2175 \text{ THz } \gamma = 2\pi \times 4.35 \text{ THz}$$

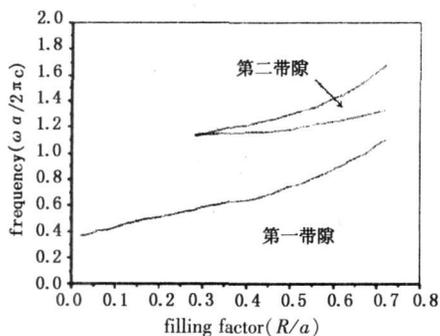
$$\text{Al } \omega_p = 2\pi \times 3570 \text{ THz } \gamma = 2\pi \times 19.4 \text{ THz}$$

计算结果表明, 金属光子晶体对于 TM 模式来说存在一个截止频率, 也就是说从零到截止频率这一个频段, TM 模式是不能传播的, 以下简称为第一带隙。金属光子晶体对 H 极化波是透明的, 不存在明显的光子带隙^[21], 所以金属光子晶体对于 TE 模式来说, 不存在这种特性。增大金属柱的直径, 第一带隙会随着增宽, 当填充率超过某一个值时, 在截止频率之上将会出现第二个光子带隙, 以下简称第二带隙。

Ag 和 Al 构成的三角晶格二维金属光子晶体的带隙随填充率的变化关系如图 2(a)、图 2(b) 所示。



(a) Ag



(b) Al

图 2 Ag 和 Al 构成的三角晶格二维金属光子晶体带隙结构

图 3 所示为常见的正方晶格金属光子晶体。图 4(a)、图 4(b) 分别为 Ag 和 Al 构成的此类型光子晶体的带隙结构图。

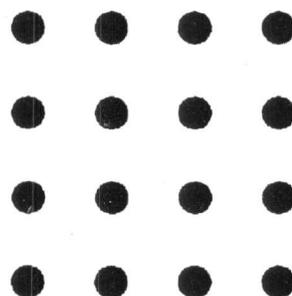
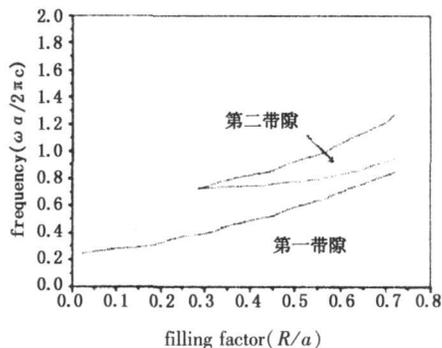
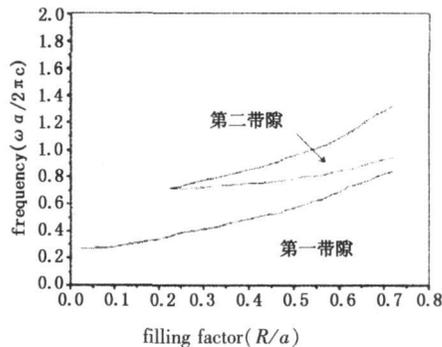


图 3 正方晶格二维金属光子晶体



(a) Ag



(b) Al

图 4 Ag 和 Al 构成的正方晶格二维金属光子晶体带隙结构

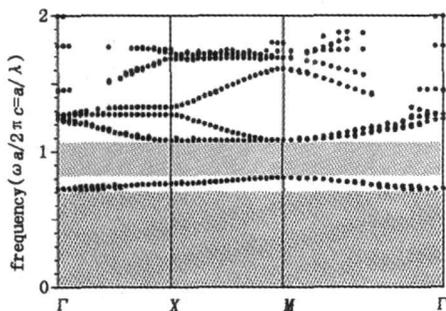
Ag 和 Al 构成的光子晶体都在填充率 f 为某一值时出现第二带隙, Ag 的这个值大于 Al。随着填充率的增加, 两条光子带隙都会增大, 并且带隙曲线的斜率也在变大, 可以看出当填充率趋向于 1 时, 两条光子带隙将合并, 并且变为无限宽。这是因为 R/a 增大, 相邻的金属柱子将会相互接触, 形成金属壁, 阻止所有电磁波的传播。这些计算结果与文献 [17] 绘制的带隙曲线斜率变小, 描述的第二带隙“在 $f = 0.6$ 左右, 三种光子晶体 (Cu, Ag, Al) 的禁带都达到最大”, “在 $f = 0.6 \sim 0.75$ 之间禁带宽度不变, 保持最大值”并不一致。

通过比较图 2 和图 4 不难发现所设计的三角晶格二维金属光子晶体比正方晶格拥有更宽阔的第

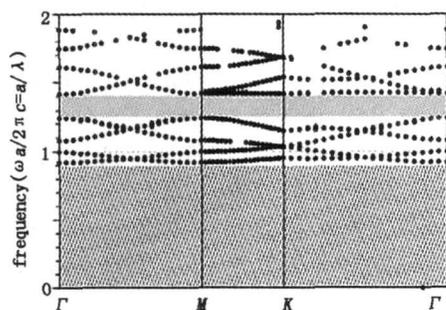
一带隙和中心频率更高的第二带隙。如表 1 所示, 以 A_g 为例, 当填充率 $f=0.6$ 时, 正方晶格的第一带隙归一化频率的上限为 0.70, 第二带隙的范围为 0.84~1.06, 带隙结构如图 5(a) 所示, 阴影部分为禁带所在的区域。

表 1 A_g 带隙结构 (填充率为 0.6 单位 a/λ)

	第一带隙 频率范围	第二带隙 频率范围	第一带隙 宽度	第二带隙 宽度
正方晶格	0~0.70	0.84~1.06	0.70	0.22
三角晶格	0~0.90	1.24~1.41	0.90	0.17



(a) 正方晶格



(b) 三角晶格

图 5 A_g 在填充率 $f=0.6$ 时不同晶格结构的光子带隙

三角晶格的带隙结构如图 5(b) 所示, 相对于正方晶格而言, 第一带隙归一化频率的上限拓宽到 0.90, 第二带隙的范围提高到 1.24~1.41, 但是第二带隙宽度减少了 0.05。在光子晶体中, 人们更感兴趣的是缺陷的引入对电磁波传播特性的影响, 第一带隙的展宽使得缺陷的引入更加方便, 也有利于提升光子晶体器件如波导等的传输效率。由布拉格条件可知, 光子带隙处的电磁波波长与光子晶体的晶格常数相当, 因此, 要得到光子带隙在红外或可见光的光子晶体, 晶格常数应当在微米或亚微米量级。受实际可用材料的特性和制备工艺的限制, 普通光刻技术已很难达到制备要求, 目前制备难度较大, 成本较高。如果光子晶体工作在第二带隙处, 同一波长 λ 下, 第二带隙归一化频率 a/λ 的提高, 相当于光子晶体的周期 a 增大, 使得光子晶体的工艺制作更加可行。

为了进一步印证计算结果的正确性, 研究了电磁

波在所设计的金属光子晶体中的传播特性。仍然以 A_g 材料填充率为 0.6 的正方晶格为例, 在其中某一点放置激励源, 相距适中的另一点放置探测器。探测器接收到的信号是激励源产生的电磁波通过该光子晶体传播后得到的能量。得到探测器上的能量分布如图 6 所示, 阴影部分为探测器上能量为零的波段。

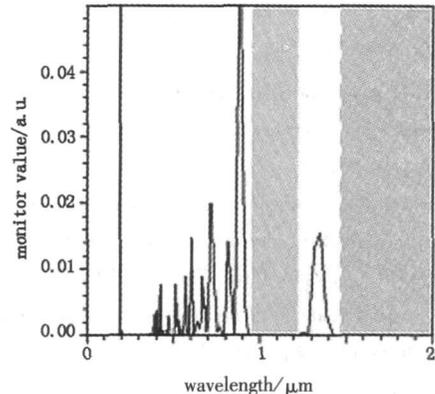


图 6 能量分布图

图 6 中阴影部分分为两个区域, 横坐标波长 λ 的范围①为 0.948~1.199 μm 和 1.433~ $\infty \mu\text{m}$, 也即为此光子晶体结构中不能传输的波长范围, 也就是禁带。前文通过时域有限差分方法计算得到的禁带归一化频率 a/λ 范围为 0~0.70 和 0.84~1.06, 由于晶格常数 $a=1 \mu\text{m}$, 因此禁带波长 λ 的范围②为 0.943~1.190 μm 和 1.429~ $\infty \mu\text{m}$ 。比较波长范围①和②两者吻合得很好。

在实际光子晶体工艺制作时, 填充率在 0.25~0.8 较合理, 这个区间 A_1 的光子禁带比 A_g 稍宽。由于 A_1 存在易氧化性, 在空气中极易生成厚度为数埃的氧化膜, 电磁波在金属材料中的趋肤深度也仅在纳米甚至到亚埃的数量级^[18-21], 因此这层氧化物极易对透光特性造成影响。 A_g 存在材料价格较贵的特点。因此, 在实际制作金属光子晶体器件时应综合考虑这些因素。

4 结论

运用时域有限差分方法计算了三角晶格二维金属光子晶体带隙结构随着填充率变化的关系曲线, 发现它比正方晶格拥有更宽阔的第一带隙和中心频率更高的第二带隙。第一带隙的展宽使得缺陷的引入更加方便, 也有利于提升光子晶体器件如波导等的传输效率。在同一波长 λ 下, 第二带隙归一化频率 a/λ 的提高, 相当于光子晶体的周期 a 增大, 使得光子晶体的工艺制作更加可行。

参考文献:

- state physics and electronics [J]. *Phys Rev Lett*, 1987, 58: 2059–2062
- [2] John S Strong Localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [J]. *Phys Rev Lett*, 1987, 58: 2486–2489
- [3] G Poilasne, P Pouliguen, K M Ahdjubi Experimental radiation pattern of dipole inside metallic photonic band gap material [J]. *Microwave and Optical Technology Letters* 1999, 22(1): 10–16
- [4] Arafah Aly Sangwan Ryu Study of optical properties of metallic photonic crystal [J]. *Proc of SPIE*, 2007, 67221Z: 1–5
- [5] M Scabra M J Bbener A S Pethel et al Transparent metallic-dielectric, one-dimensional photonic band-gap structures [J]. *Appl Phys* 1998, 83(5): 2377–2383
- [6] Chan C T. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures [J]. *Phys Rev Lett*, 1990, 65 (25): 3152–3155
- [7] K M Leung Y F Liu Photoband structures the plane-wave method [J]. *Physical Review B*, 1990, 4 (11): 10188–10190
- [8] J B Pendry, P M Bell Transformatrix techniques for electromagnetic waves [J]. *Photonic Band Gap Materials* 1996, 203–228
- [9] M Thevenot A Reineix B Jecko A new FDTD surface impedance formalism to study PBG structures [J]. *Microwave and Optical Technology Letters* 1998, 18 (3): 203–206
- [10] Lin Baoqin, Yuan Naichang Finite difference analysis of 2-D metallic photonic crystal [J]. *Chinese Journal of Radio Science*, 2006, 21(2): 233–237. (in Chinese)
林宝勤, 袁乃昌. 二维金属型光子晶体的有限差分法分析 [J]. *电波科学学报*, 2006, 21(2): 233–237.
- [11] Lijun Zhang Numerical characterization of electromagnetic band gap materials and applications in printed antennas and arrays [D]. University of California at Los Angeles 2000
- [12] Huang Yu, David Yang Characteristics of guided and leaky waves on multilayer thin-film structures with planar material gratings [J]. *IEEE Trans on MTT*, 1997, 45(3): 428–435
- [13] Gao Benqing Finite difference time domain method [M]. Beijing National Defence Industry Press 1995. (in Chinese)
高本庆. 时域有限差分法 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1995.
- [14] Chan C T, Yu Q I Ho K M. Order-n spectral method for electromagnetic waves [J]. *Phys Rev B*, 1995, 51(23): 16635
- [15] Sakoda K, Kawai N, Ito T. Photonic bands of metallic systems I Principle of calculation and accuracy [J]. *Phys Rev B*, 2001, 64(4): 045116
- [16] Zhang Ling, Liang Liang, Zhang Linli et al Study of band-structure of 1-D photonic crystal [J]. *Acta Photonica Sinica* 2008, 37(9): 1815–1818. (in Chinese)
张玲, 梁良, 张琳丽, 等. 一维光子晶体带隙结构研究 [J]. *光子学报*, 2008, 37(9): 1815–1818
- [17] Gao Qiang, Yan Dunbao, Yuan Naichang et al The properties of one-dimensional metalodielectric photonic crystal [J]. *Journal of National University of Defense Technology* 2005, 27(4): 45–47. (in Chinese)
高强, 闫敦豹, 袁乃昌, 等. 一维金属-介质光子晶体的特性 [J]. *国防科技大学学报*, 2005, 27(4): 45–47.
- [18] Zhao Dapeng, Shi Jianing, Liu Bili et al Study on the spectrum of the one-dimensional metalodielectric photonic crystal [J]. *Laser & Infrared*, 2008, 38(7): 688–691. (in Chinese)
赵大鹏, 时家明, 刘必强, 等. 一维金属-介质光子晶体光谱特性研究 [J]. *激光与红外*, 2008, 38(7): 688–691.
- [19] Wang Huajuan, Bi Gang, Yang Dongxiao et al Characteristic of metallic photonic crystal in THz range [J]. *Journal of Microwaves*, 2005, 21(1): 30–34. (in Chinese)
王华娟, 毕岗, 杨冬晓, 等. 太赫兹波在金属光子晶体中的传播特性 [J]. *微波学报*, 2005, 21(1): 30–34.
- [20] Yang Guangjie, Kong Famin, Mei Liangno Band gaps of photonic crystal composed of metallic cylinders [J]. *Acta Photonica Sinica* 2007, 36(10): 1821–1823. (in Chinese)
杨光杰, 孔凡敏, 梅良模. 金属光子晶体禁带研究 [J]. *光子学报*, 2007, 36(10): 1821–1823.
- [21] Yan Binying, Chen Heming Band gap properties and defect characteristic of metallic photonic crystal in the terahertz region [J]. *Optics & Optoelectronic Technology* 2009, 7(3): 37–40. (in Chinese)
闫斌英, 陈鹤鸣. THz 波段金属光子晶体的带隙及缺陷特性分析 [J]. *光学与光电技术*, 2009, 7(3): 37–40
- [22] Max Born, Emil Wolf Principles of optics [M]. London Pergamon Press 1975
- [23] Ge Debiao, Yan Yubo Finite difference time domain method for electromagnetic waves [M]. Xi'an Xidian University Press 2003. (in Chinese)
葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法 [M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2003
- [24] I E Kady, M M Sigalas, R Biswas et al Metallic photonic crystals at optical wavelengths [J]. *Phys Rev B*, 2000, 62(23): 15299–15302