



基于 Dirichlet-to-Neumann 映射计算半无限二维光子晶体的表面模式

摘要

介绍了一种基于 Dirichlet-to-Neumann (DtN) 映射的计算半无限二维光子晶体表面模式的有效数值方法. 首先利用三种不同单元晶格的 DtN 算子构造出超级晶胞的 DtN 映射, 然后在超级晶胞的两条边界上建立特征值问题来计算光子晶体表面模式, 建立的特征值问题是线性的, 而且其中的矩阵比较小. 最后用两个数值算例验证了数值方法的有效性.

关键词

Dirichlet-to-Neumann 映射; 光子晶体; 超级晶胞; 表面模式

中图分类号 O242

文献标志码 A

收稿日期 2016-05-16

资助项目 中央高校基本科研业务费专项资金 (2015B19614)

作者简介

王依翠, 女, 硕士生, 主要研究偏微分方程数值解. 141312010010@hhu.edu.cn

胡真 (通信作者), 男, 博士, 副教授, 主要研究偏微分方程数值解. huzhen@hhu.edu.cn

0 引言

光子晶体表面模式是指光子晶体与另外一种介质在交界处所形成的表面波. 表面波沿两种介质的交界面传播, 在垂直于介质交界面的方向上呈指数型衰减. 光子晶体表面模式理论及相关应用研究受到很多学者的关注. 2007 年, Khoo 等^[1] 利用三维有限时域差分方法研究了在光子晶体表面转弯处的传输效率, 通过表面模式把光限制在光子晶体和空气的交界处, 再通过改变转角处单元晶格中介质柱半径大小及折射率实现了在光子晶体转弯处的较高传输效率. 2010 年, Hsu 等^[2] 利用耦合模式理论和有限元方法研究了利用光子晶体波导耦合激发表面模式, 通过改变表面介质柱大小, 可以实现同向耦合和异向耦合, 结果可以用于设计新型光子晶体器件. 2013 年, Erim 等^[3] 利用平面波方法和时域有限差分方法基于光子晶体表面模式设计了双偏振波导, 可用于光子晶体集成电路中. 此外, 基于光子晶体表面模式的还有表面模式微腔^[4]、表面模式生物传感器^[5]、表面慢光^[6]等. 在光子集成电路中, 引入内部线性缺陷的传统光子晶体波导作为重要的光学元件. 2006 年, Rahachou 等^[7] 提出了基于表面模式的一种新型波导结构, 即表面模式波导, 为高效传输波提供了新途径.

对于计算光子晶体表面模式, 有效的数值方法是非常重要的. 光子晶体表面模式可以通过平面波展开法^[8]、频率域有限元方法^[2]、时域有限差分方法^[1]、递归格林函数方法^[7] 得到. 平面波展开法建立的特征值问题直接以频率为特征值, 对于非色散介质建立的特征值问题是线性的, 但是对于色散介质建立起的特征值问题却是非线性的; 有限元方法对于比较复杂的光子晶体也可以模拟, 但建立起的特征值问题中的矩阵相对较大; 时域有限差分方法处理脉冲传播在时域下更加方便, 而光子晶体表面模式的特征值计算问题主要是求角频率 ω 和布洛赫波数 β 之间的关系, 在频率域下考虑更加容易计算; 递归格林函数方法能够得到较小矩阵特征值问题, 但在具体计算过程中需要先将总的晶格结构分解, 再逐列迭代, 计算过程较为复杂.

单元晶格的 Dirichlet-to-Neumann (DtN) 映射把边界上的波动场映射成波动场的法向导数, 避免了在单元晶格内部离散, 只需要在单元晶格的边界上考虑问题, 从而减少了未知数个数. 对于相同的单元

¹ 河海大学 理学院, 南京, 211100

晶格,只需要计算一次 DtN 映射,从而进一步减少计算量.目前 DtN 映射已经被用来分析二维光子晶体的带隙结构^[9-10]、波导管^[11]、透射光谱和反射光谱^[12]等.Huang 等^[11]基于单元晶格的 DtN 映射分析了二维光子晶体波导,通过超级晶胞的 DtN 映射建立起较小矩阵的线性特征值问题计算了二维光子晶体波导中的传播模式.

本文拓展了 Huang 等^[11]分析二维光子波导所用的 DtN 映射方法,进一步计算了半无限二维光子晶体与空气介质交界面处的表面模式,把表面模式问题转化成角频率 ω 为给定的参数,布洛赫波数 β 的函数为特征值的线性特征值问题.首先建立三种不同单元晶格的 DtN 映射,再基于不同单元晶格的 DtN 映射建立超级晶胞的 DtN 映射,然后把光子晶体表面模问题转化成较小矩阵线性特征值问题求解.

1 单元晶格的 DtN 映射

考虑理想的介质柱成正方形周期性排列的半无限二维光子晶体表面模式.如图 1 所示,左侧是半无限二维光子晶体,介质柱在 z 方向上是无穷长的,右侧是空气介质,离交界面最近的一排介质柱为表面介质柱,而且表面介质柱半径和普通介质柱半径不同.正方形单元晶格的长度为 L ,普通介质柱半径为 r ,表面介质柱的半径记作 r_s ,普通介质柱和表面介质柱的折射率均为 n_1 ,周围介质的折射率为 n_2 ,对于 z 方向上折射率不变的二维光子晶体, E 偏振模式下电磁波在 xy 平面传播,频率域下的麦克斯韦方程组可以化简为下面的控制方程:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + k_0^2 n^2 u = 0, \quad (1)$$

其中 u 是电场的 z 分量, $k_0 = \omega/c$ 是真空中波数, ω 是角频率, c 是真空中光速, $n = n(x, y)$ 是介质的折射率分布函数.

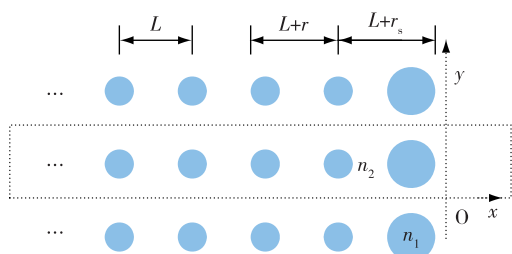


图 1 半无限二维光子晶体

Fig. 1 Semi-infinite two-dimensional photonic crystals

本文的计算是基于三种正方形单元晶格的 DtN 映射,把正方形单元晶格的边界记为 Γ ,用 ν 表示单位法向量,DtN 映射的作用是把单元晶格边界上的波动场映射成边界上波动场的法向导数,即

$$\mathbf{A}u|_{\Gamma} = \frac{\partial u}{\partial \nu} \Big|_{\Gamma}. \quad (2)$$

Yuan 等^[9]和 Huang 等^[12]均介绍了该映射的构造方法.如图 2 所示,取图 1 中研究结构的一个周期,其中包含三种正方形单元晶格, $\Omega, \Omega^{(m)}, \Omega^{(0)}$ 分别代表包含介质柱的普通单元晶格,介质柱半径变化的单元晶格和不包含介质柱的均匀介质的单元晶格.在笛卡尔坐标系下,对于介质柱位于单元晶格的中心的情况,把坐标原点设在半径为 a 的介质柱的中心或者正方形单元晶格的某一顶点上,正方形单元晶格每一点的坐标就可以表示出来.在极坐标系下,根据 $x = r \cos \theta, y = r \sin \theta$,控制方程(1) 有下面的通解:

$$u(x, y) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_j \Phi_j(r, \theta), \quad \Phi_j(r, \theta) = \phi_j(r) e^{ij\theta}. \quad (3)$$

其中 C_j 为系数, Φ_j 为柱面波解, ϕ_j 和两类贝塞尔函数 J_j, Y_j 有关.当 $r < a$ 时, $\phi_j(r) = J_j(k_0 n_1 r)$;当 $r > a$ 时, $\phi_j(r) = A_j J_j(k_0 n_2 r) + B_j Y_j(k_0 n_2 r)$,其中的系数 A_j, B_j 可通过介质柱边界上的连续性条件得到.对于正方形单元晶格,每条边离散 N 个点,即离散的单位距离为 L/N ,总的离散点数为 $4N$ 个.每边离散的第一个点位置最好取 $L/2N$ 长度,这样离散可以保证中间的离散距离都为 L/N ,离散点数 N 一般取 7.DtN 映射就是把边界上的电场映射到边界上的法向导数.为了把 DtN 映射近似求出,将式(3) 写成 $4N$ 项:

$$u(x, y) = \sum_{j=-2N}^{2N-1} C_j \Phi_j(r, \theta). \quad (4)$$

利用式(4)和式(4)的法向导数可以将系数 C_j 消掉,得到 DtN 映射 \mathbf{A} 的一个 $(4N) \times (4N)$ 近似矩阵.

相同结构的普通单元晶格的 DtN 算子是相同的,半径不同的单元晶格的 DtN 算子和不包含介质柱的单元晶格的 DtN 算子都需要重新构造.

2 超级晶胞的 DtN 映射

如图 2 所示,计算光子晶体表面模式的一个周期是无限长的,表面模式在 y 方向上传播,在 x 的正负方向上是指数量衰减到 0 的.因此在计算过程中可以把无限长的计算区域截断为由有限个正方形单元晶格所构成的区域(超级晶胞),如图 3 所示.对于超级晶胞,有三种不同的初基胞,也就有三种不同的 DtN 映射.包含介质柱的普通单元晶格的 DtN 映射记

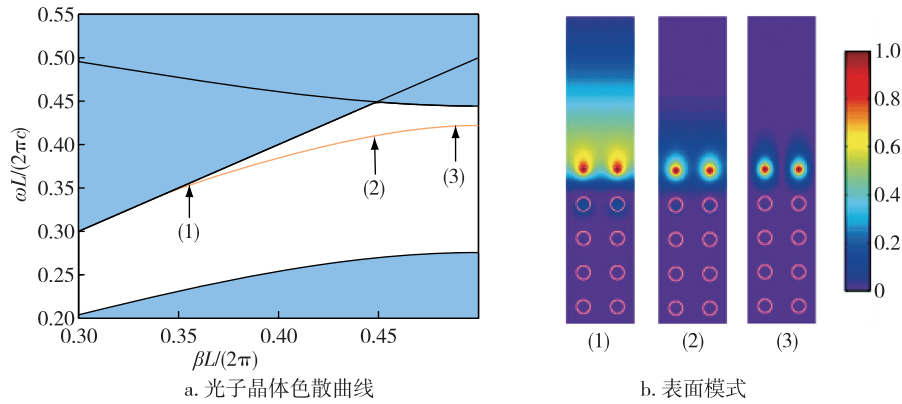


图 4 E 偏振模式下表面介质柱半径为 $0.1L$ 的光子晶体色散曲线以及相应点处的表面模式

Fig. 4 The dispersion curve (for the E polarization) of photonic crystals with $r_s = 0.1L$ (a) and the surface modes at the corresponding points (b)

系数 C_j , 再将整个超级晶胞区域进行离散, 将每个点的位置带入式(4), 即可求得整个区域每个点的电场值 u , 图 4b 所示为归一化的电场模式. 由图 4b 可以看出, 该情况只有一种表面模式, 波沿光子晶体和空气的交界面上传播, 在上侧空气中逐渐衰减到 0, 在下侧光子晶体中快速衰减到 0. 与表面模式图一致, 因为所求的表面模式是一种特解, 这种解只能在光子晶体和空气的交界面上传播, 不能在空气和光子晶体中传播.

再考虑光子晶体表面介质柱半径为 $0.34L$ 的情况, 其他参数和表面介质柱半径为 $0.1L$ 的光子晶体相同. 如图 5 所示, 本文同样计算了该结构的色散关系, 图 5a 中橘黄色曲线和绿色曲线都表示角频率 ω 和布洛赫波数 β 之间的关系. 每条曲线上取两个点分别画出了表面模式(图 5b). 色散关系和表面模式

的计算过程和上面的情况类似, 也是每个单元晶格离散 7 个点, 分别计算 3 种单元晶格的 DtN 映射再计算超级晶胞的 DtN 映射, 把问题最终转化到(12)式求解. 由图 5b 可以看出, 该情况有两种表面模式, 波只能在光子晶体和空气的交界面处传播, 不管在空气还是在光子晶体中都是快速衰减到 0 的, 这也正符合表面模式所具有的特征. 由图 5 可知本文的计算结果和 Rahachou 等^[7]的计算结果完全一致.

用两个字母 D (Decaying) 和 E (Extended) 来描述各个区域的名称, 图 4a 和图 5a 中天蓝色部分实际包含 3 部分即: 波在空气和光子晶体中都能传播的 EE 区域; 波在光子晶体中能传播, 但在周围空气中不能传播的 DE 区域; 波在周围空气中能传播而在光子晶体中不能传播的 ED 区域. 本文计算的表面模式, 波只能在光子晶体和空气介质交界处传播, 不

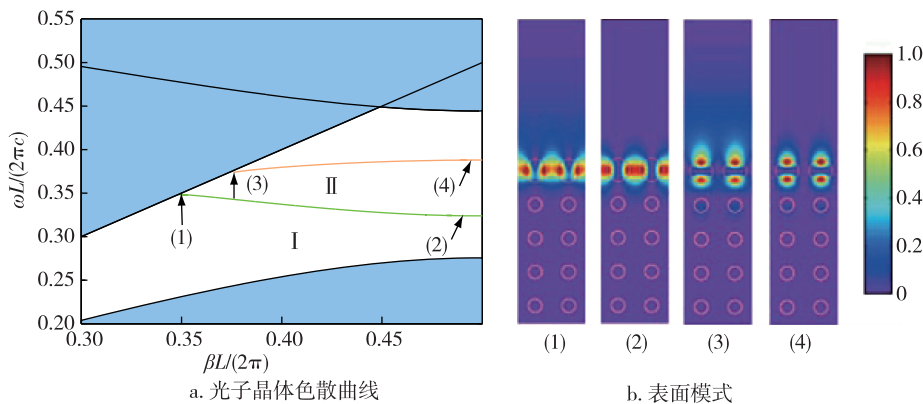


图 5 E 偏振模式下表面介质柱半径为 $0.34L$ 的光子晶体色散曲线以及相应点处的表面模式

Fig. 5 The dispersion curves (for the E polarization) of photonic crystals with $r_s = 0.34L$ (a) and the surface modes at the corresponding points (b)

能在空气和光子晶体中传播,这样的解在上述3个区域内不可能找到,所以只需要在3个区域外寻找,即在空白区域中寻找解.空白部分对应的是波不能在空气和光子晶体中传播的DD区域.各区域中第一个字母表示波在空气中传播或衰减,第二个字母表示波在光子晶体中的传播或衰减.

5 总结

本文首先利用柱面波展开法建立起正方形单元晶格的DtN映射,再构造出光子晶体超级晶胞的DtN映射,最后在超级晶胞边界上建立线性特征值问题求解表面模式.利用DtN映射方法建立的特征值问题中的矩阵相对较小,即使介质是色散的,特征值问题仍然是线性的.研究结果对于有效分析光子晶体的表面模式以及以此为基础制造的光子晶体元件具有重要的意义.

目前研究的是理想的由平行圆柱构成的二维光子晶体的表面模式,因此可以利用柱面波展开构造DtN映射.对于比较复杂的光子晶体,如包含半个圆柱或其他形状不规则的介质柱的光子晶体,不能用柱面波展开构造DtN映射,但可以采用边界积分方程构造DtN映射,因而可以进一步分析更加复杂的光子晶体的表面模式.

参考文献

References

- [1] Khoo E H, Cheng T H, Liu A Q, et al. Transmitting light efficiently on photonic crystal surface waveguide bend [J]. Applied Physics Letters, 2007, 91(17): 171109
- [2] Hsu Y, Chen L. Bloch surface wave excitation based on

- coupling from photonic crystal waveguide [J]. Journal of Optics, 2010, 12(9): 095709
- [3] Erim M N, Erim N, Kurt H. Optical surface modes of photonic crystals for dual-polarization waveguide [J]. Photonics and Nanostructures: Fundamentals and Applications, 2013, 11(2): 123-131
- [4] Xiao S, Qiu M. Surface-mode microcavity [J]. Applied Physics Letters, 2005, 87(11): 111102
- [5] Kurt H, Erim M N, Erim N. Various photonic crystal biosensor configurations based on optical surface modes [J]. Sensors and Actuators B-chemical, 2012, 165(1): 68-75
- [6] Kurt H, Erim N, Üstün K. Slow light based on optical surface modes of two-dimensional photonic crystal [J]. Journal of The Optical Society of America B-optical Physics, 2012, 29(6): 1187-1193
- [7] Rahachou A I, Zozoulenko I V. Waveguiding properties of surface states in photonic crystals [J]. Journal of the Optical Society of America B, 2006, 23(8): 1679-1683
- [8] Wang B, Dai W, Fang A, et al. Surface waves in photonic crystal slabs [J]. Physical Review B, 2006, 74(19): 195104
- [9] Yuan J, Lu Y Y. Photonic bandgap calculations with Dirichlet-to-Neumann maps [J]. Journal of the Optical Society of America A, 2006, 23(12): 3217-3222
- [10] 李静, 胡真. 基于 Dirichlet-to-Neumann 映射计算二维蜂巢状光子晶体的带隙结构 [J]. 江南大学学报: 自然科学版, 2015, 14(6): 875-881
- LI Jing, HU Zhang. Computing band structures of two dimensional honeycomb photonic crystals by Dirichlet-to-Neumann maps [J]. Journal of Jiangnan University (Natural Science Edition), 2015, 14(6): 875-881
- [11] Huang Y, Lu Y Y, Li S. Analyzing photonic crystal waveguides by Dirichlet-to-Neumann maps [J]. Journal of the Optical Society of America B, 2007, 24(11): 2860-2867
- [12] Huang Y, Lu Y Y. Scattering from periodic arrays of cylinders by Dirichlet-to-Neumann maps [J]. Journal of Lightwave Technology, 2006, 24(9): 3448-3453

Computing surface modes of semi-infinite two dimensional photonic crystals by Dirichlet-to-Neumann maps

WANG Yicui¹ HU Zhen¹

¹ College of Science, Hohai University, Nanjing 211100

Abstract An efficient numerical method is developed for calculating surface modes of a semi-infinite two dimensional photonic crystals by Dirichlet-to-Neumann (DtN) maps. Using the DtN maps of three different unit cells to construct the DtN map of the supercell, the surface modes are solved from a linear eigenvalue problem on two boundaries of the supercell, leading to relatively small matrices. Finally we use two numerical examples to verify the effectiveness of the method.

Key words Dirichlet-to-Neumann maps; photonic crystals; supercell; surface mode