

基于 COMSOL 的二维光子晶体特性仿真

曾恒亮^{1, 2}, 张萌^{1, 3}, 寇杰^{1, 2}, 姚本溪^{1, 2}

(1, 中国科学院大学, 北京 100190;

2, 光电技术研究所, 成都 610209;

3, 半导体研究所, 北京 100083)

Simulation of 2D Photonic Crystal With COMSOL

Zeng Hengliang^{1,2}, Kou Jie^{1,2}, Yao YBenxi^{1,2}, Zhang Meng^{1,3}

(1, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190;

2, Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Sciences, Chengdu 610209;

3, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

摘要: 介绍了光子晶体的概念, 光子晶体常用的研究方法及应用。并从麦克斯韦方程组出发, 推导光子晶体泛函数形式, 利用 COMSOL Multiphysics 对二维线型缺陷、点缺陷等光子晶体进行仿真, 直观有效反映了光子晶体器件的特性。

关键词: 光子晶体; COMSOL 模拟; 本征方程; 缺陷模

Abstract: This paper introduces the concept, research methods and application of photonic crystals. Starting from Maxwell's equations, the functional form of a photonic crystal is derived. Using COMSOL Multiphysics, some kinds of two-dimensional photonic crystals are simulated. It effectively shows the basic properties of photonic crystals instruments.

Key words: photonic crystal; COMSOL simulation; intrinsic equation; defect mode

1 引言

光子晶体是折射率呈周期性变化的人造带隙材料, 光子晶体的概念是 1987 年由 S.John 和 E.Yablonovitch 分别提出来的。光子晶体又称为光的半导体, 它提供了一种全新的光子控制机制。由于其独特的性质, 光子晶体可以制作全新概念和以前不能做的高性能光学器件, 因此它极有可能取代传统的光学器件。光子晶体波导、光子晶体光纤、光分束器、光滤波器等器件的研究中已经取得了巨大的成果。

在对应的半导体晶体中, 原子的周期性排列, 产生周期势场, 电子受原子周期排列所构成的周期势场的作用, 它的能谱呈带状结构。由于原子的布拉格散射, 在布里渊区边界上能量变得不连续, 出现带隙, 电子被全反射。在光子晶体中, 也存在类似的周期性势场, 它是由介电函数在空间的周期性变化所提供的, 它是由高介电常数介质材料和

低介电常数介质材料在空间上作周期交替排列而得到的。当介电函数的变化幅度较大且变化周期与光的波长相比拟时, 介质的布拉格散射也会产生带隙, 相应于此带隙区域的那些频率的光将不能通过介质, 而是被全部反射出去, 从而形成光子禁带。

如果光子晶体的内部结构的周期性受到破坏, 引入几何尺寸的缺陷破坏了光子晶体原有的周期性, 在光子带隙中就有可能出现频率极窄的缺陷态。与缺陷态频率吻合的光子会被局域在出现缺陷的位置, 一旦偏离缺陷位置光将迅速衰减。

本文主要通过从麦克斯韦方程组出发推导出光子晶体的泛函形式, 从而分析光子晶体的基本工作原理。并且利用 COMSOL 软件对特定的光子晶体进行仿真, 分析它们的性质特征。

2 光子晶体能带结构的数值推导

在光子晶体中，研究的对象是电磁波，其行为可以用麦克斯韦方程组准确描述。

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \varepsilon \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\mu_0 \partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{E} = \rho \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (4)$$

式中 \mathbf{E} 和 \mathbf{H} 分别是电场强度和磁场强度， \mathbf{J} 是电流密度矢量， ε 是相对介电常数， ρ 是电荷密度，所有这些变量均是空间位置 r 和时间 t 的函数， c 是电磁波在自由空间中的传播速度。在光子晶体中一般取 $\mathbf{J}=0$ 和 $\rho=0$ 。将方程组中的第三式和第四式稍做变形后，取旋度并互相替换可以得到以下两个方程，并且我们假定电磁场为时谐场，电场强度和磁场强度可表示为

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-j\omega t} \quad (5)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-j\omega t} \quad (6)$$

代入得：

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} [\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

在二维光子晶体中，存在两种偏振模式，即横电场(TE)模式和横磁场(TM)模式。在横电场模式下，电场平行于波传播的平面，而磁场垂直于这个平面，即 $\mathbf{H}=(0,0,H)$ ；同理， $\mathbf{E}=(0,0,E)$ 。因此，简化的 TE 模式和 TM 模式的麦克斯韦方程组为：

$$-\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \cdot [\nabla \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (9)$$

$$-\nabla \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

设定 Φ 代替偏振模式情况下的 \mathbf{H} 和 \mathbf{E} ，上面两式可简化为：

$$-\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \cdot [\nabla \Phi] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \Phi \quad (11)$$

$$-\nabla \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \Phi \quad (12)$$

根据 Bloch 理论，可以得到

$$\Phi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}) \quad (13)$$

其中 \mathbf{k} 是第一布里渊区域 C 的波矢量， \mathbf{r} 为位置矢量， $\phi(\mathbf{r})$ 是在空间位置 \mathbf{r} 的本征函

数值。将 (13) 式分别代入(11)和(12)式，可以得到：

$$-(\nabla + i\mathbf{k}) \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla + i\mathbf{k}) \Phi \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \Phi \quad (14)$$

$$-\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla + i\mathbf{k})^2 \Phi = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \Phi \quad (15)$$

将(14)式展开可得：

$$-\nabla \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi - i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi - i\mathbf{k} \cdot \nabla \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \cdot \Phi \right] + k^2 \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \cdot \Phi = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \Phi \quad (16)$$

移项可得：

$$-\nabla \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi - i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi - i\mathbf{k} \cdot \nabla \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \cdot \Phi \right] + [k^2 \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2] \Phi = 0 \quad (17)$$

则式 (17) 中算符为：

$$\mathbf{o} = -\nabla \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi - i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi - i\mathbf{k} \cdot \nabla \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \cdot \Phi \right] + [k^2 \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2] \Phi \quad (18)$$

$$\mathbf{v}=0 \quad (19)$$

因此，泛函为

$$F(\Phi) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{o}\Phi, \Phi \rangle \quad (20)$$

又根据(17)式可知

$$\langle \mathbf{o}\Phi, \Phi \rangle = \iint \left\{ \left[-\nabla \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi \right] \Phi - i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \Phi \Phi - i\mathbf{k} \cdot \nabla \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \cdot \Phi \right] \Phi + [k^2 \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} - (\omega/c)^2] \Phi^2 \right\} d\Omega \quad (21)$$

即

$$\langle \mathbf{o}\Phi, \Phi \rangle = \iint \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \Phi)^2 - i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \Phi \cdot \nabla \Phi + [k^2 \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} - (\omega/c)^2] \Phi^2 \right\} d\Omega \quad (22)$$

则 TE 偏振模式的泛函为

$$F(\Phi) = \frac{1}{2} \iint \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \Phi)^2 - 2i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \Phi \cdot \nabla \Phi + [k^2 \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} - (\omega/c)^2] \Phi^2 \right\} d\Omega \quad (23)$$

也即

$$F(\phi) = \iint \left\{ \frac{1}{\epsilon(r)} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right] - 2ik \cdot \nabla \phi + [\epsilon(r)k^2 - (\omega c)^2] \phi \right\} d\Omega \quad (24)$$

同理，可以得到 TM 偏振模式的泛函

$$F(\phi) = \iint \left\{ \frac{1}{\epsilon(r)} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right] - 2ik \frac{1}{\epsilon(r)} \cdot \nabla \phi + [\epsilon(r)k^2 - (\omega c)^2] \phi \right\} d\Omega \quad (25)$$

基于以上分析及二维光子晶体的泛函形式可以利用 COMSOL 进行特性仿真。

3 仿真

本章利用 COMSOL 软件对于光子晶体的两个基本特征——光子带隙和缺陷态进行了模拟仿真，分析了光子晶体几种典型缺陷态中的光传输。

3.1 线缺陷方形光子晶体

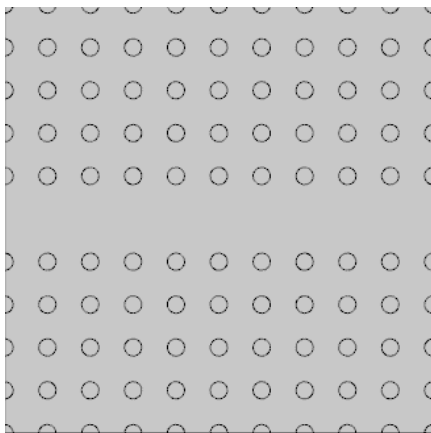


图 3-1-1 二维线缺陷方形光子晶体模型

图 3-1-1 所示为二维线缺陷方形光子晶体的几何图形，介电材料交替排列 10 个周期，晶格常数 $a=0.6 \mu m$ ，基质为空气，介电常数 $\epsilon_1=1$ ，介质柱半径为 $r=0.2*a$ ，介电常数 $\epsilon_2=4.4$ 。中间部位为直线缺陷，左侧为光波入射窗口，通过 COMSOL 可以模拟得到光子晶体线缺陷右侧透射光振幅-频率的分布图，如图 3-1-2 所示。

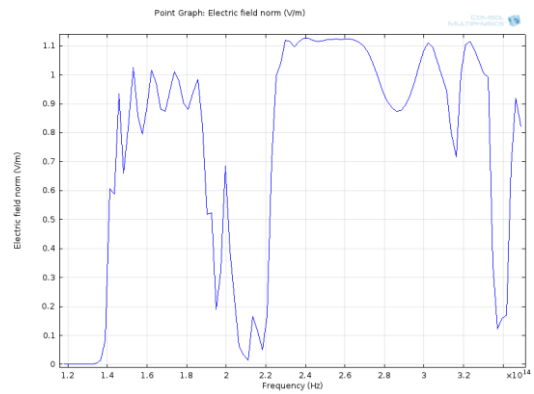


图 3-1-2 线缺陷光子晶体出口处电场振幅-频率分布图

从图中可以看出，当光子频率处于 $(1.4-1.9) \times 10^{14}$ Hz 和 $(2.2 - 3.35) \times 10^{14}$ 范围内时，光波的透过率很高，即此波段的电磁波大部分都沿着线缺陷传播，只有很少的一部分损失掉了。该波段的电磁波在光子晶体中不能传播，即处在光子带隙的范围内。而其他频段的电磁波由于在光子带隙频率范围外，在晶体中可以传播，散射得比较厉害，所以这些波段的电磁波沿着线缺陷传播并最终投射出去的很少，几乎为零。由于仿真时取右端一个点为参考点，利用软件画出了不同频率的电磁波传输到该点时的电场强度，随机性很大，但在一定程度上可以反映出光子晶体线性缺陷波导的特性。

图3-1-3为当入射电磁波的频率分别为 1.555787×10^{14} Hz 和 2.057843×10^{14} Hz 时电磁波通在线缺陷中的传输。当入射电磁波频率为 1.555787×10^{14} Hz 时，线缺陷就像导线一样，引导光子禁带频率范围内的电磁波向前传输，即光子晶体波导的作用。当入射波的频率为 2.057843×10^{14} Hz 时，由于入射波频率在光子禁带范围外，因此其在光子晶体中可以沿四面八方传播，由于各个方向上的散射，所以沿线缺陷方向的光波能量迅速衰减，无法到达出口。

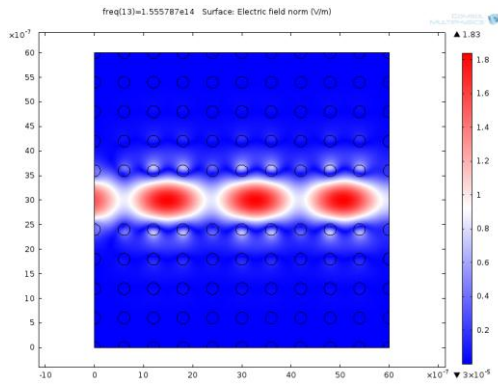


图 3-1-3 (a) 入射电磁波频率为 1.555787×10^{14} Hz 时线型光子晶体中光场分布

能。

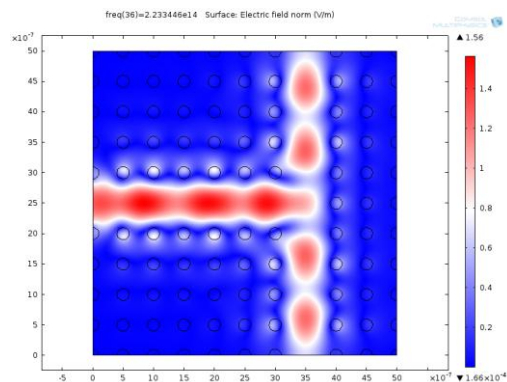


图 3-3-1 T 型波导中光场分布

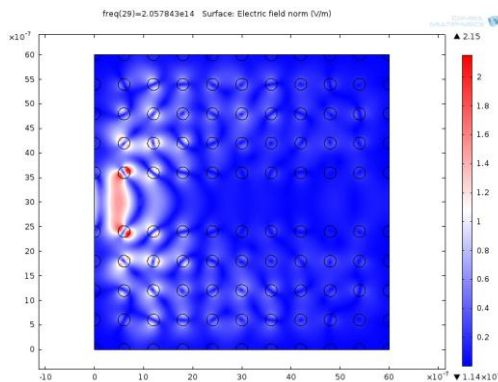


图 3-1-3(b) 当入射电磁波频率为 2.057843×10^{14} Hz 时线型光子晶体中光场分布

线缺陷光子晶体可以做成波导来引导电磁波的传播，波导中的传输模式即为光子晶体带隙中的频率，又由于电磁波频率在光子带隙内时，在光子晶体中被禁止传播，因此波导中的导模几乎可以无损地传输到出口处。而光子晶体的带隙与材料的介电常数和尺寸有关，因此可以改变材料的介电常数或者尺寸，或者只改变线缺陷两侧介质柱的参数就可以调节光子晶体带隙的中心频率和带宽，从而获得具有选择性的优质波导。

3.2 T 型缺陷光子晶体

前面已经论述了线缺陷引导光束传播的原理，而 T 型波导则是线缺陷应用的推广。从图中可以看出，沿着线缺陷传播的光束在拐角处分成两束沿着两个分支继续传播。在拐角处光的散射很少，实现了光束能量的高效传输。这样 T 型波导可以实现分光镜的功

3.3 点缺陷耦合光子晶体

对于空位型点缺陷，由于光子的对称性遭到破坏，光子晶体的能带出现简并，能带数增加，并且光子晶体禁带中出现一条平坦的单一能带，即缺陷模。当缺陷模的频率与空位点缺陷的共振频率接近时，耦合最强，该频率的电磁波就会被“下载”到该空位点缺陷形成的微腔。

主要分析空位缺陷相对线性缺陷处于两种不同位置所产生的效果。

当空位点缺陷位于线缺陷一侧时，可以通过观察点缺陷中参考点的电场-频率分布图得出该微腔的谐振频率。

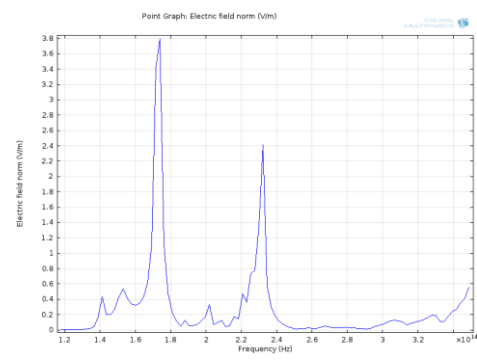


图 3-2-1 点缺陷中参考点的电场强度-频率分布

从图 3-2-1 中可以看出点缺陷中频率为 1.7×10^{14} Hz 的电磁波的电场幅度最大，频率为 2.3×10^{14} Hz 的电场强度比较小。这说明频率为 1.7×10^{14} Hz 的电磁波为微腔的一个共振膜，该频率的电磁波与微腔的耦合最强，能量被转移到微腔中。而频率为 2.3×10^{14} Hz 的电磁波与微腔的耦合程度较小，所以只有一部分能量转移到微腔中。从

图中也可以看出微腔的共振模不止一个。

由图 3-2-2(a)及图 3-2-2(b)可以看出当入射光频率为 $1.715709 \times 10^{14}\text{Hz}$ 时,光波的能量几乎全部转移到微腔中,当入射光频率为 $2.322146 \times 10^{14}\text{Hz}$ 时,光波的能量一部分转移到微腔中,一部分沿着线缺陷波导继续传播。对于第一种情况,可以实现良好的选择性滤波,同时又可以该频率的电磁波通过某种方式转移,实现波分复用。

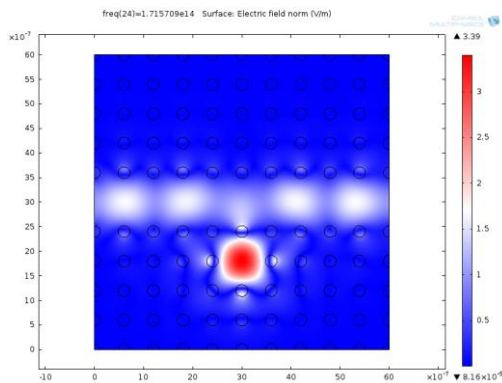


图 3-2-2 (a) 入射光频率为 $1.715709 \times 10^{14}\text{Hz}$ 时点缺陷光子晶体中的光场分布

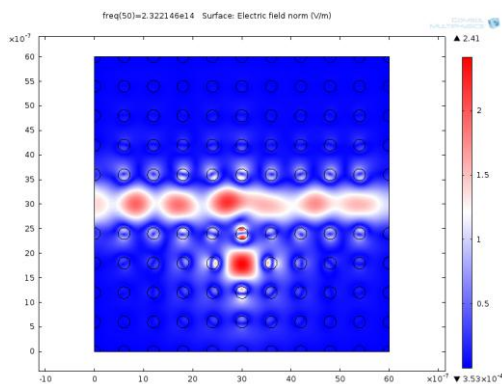


图 3-2-2 (b) 入射光频率为 $2.322146 \times 10^{14}\text{Hz}$ 时点缺陷光子晶体中的光场分布

另一种模型是将空位点缺陷置于波导中,可以通过在光通过微腔前后设置的参考点的电场-频率分布图的对比,分析出电磁波在通过微腔时的变化。

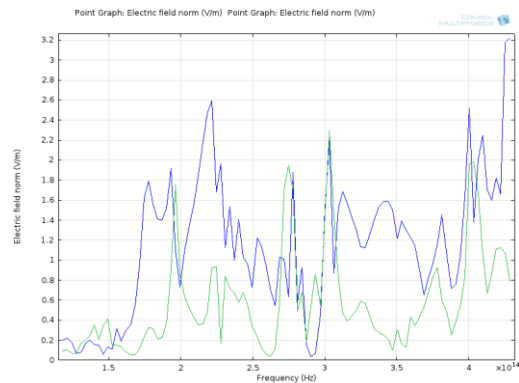


图 3-2-3 点缺陷前后两个参考点的电场-频率分布图

通过对比两个参考点的电场频率分布图可以得出,当频率为 $1.9 \times 10^{14}\text{Hz}$, $2.2 \times 10^{14}\text{Hz}$ 以及 $3.2 \times 10^{14}\text{Hz}$, $3.75 \times 10^{14}\text{Hz}$ 附近时二者电场幅度差距最大,因此这几个频率附近的波在经过微腔时被存储下来,剩余频率的波沿着波导继续传播。

图 3-2-4 为当入射光频率为 $3.250225 \times 10^{14}\text{Hz}$ 时的光路传输模拟,从图中可以看出对于波导的导模,频率处于微腔谐振频率附近的电磁波,通过微腔时被分离出来并驻留在微腔中,而其他频率的电磁波沿线缺陷继续在波导中传播。通过调节微腔周围介质的参数可以调节微腔的共振模,在所设计的共振模附近的频段会从传输的光波中滤除并存储下来,这样可以实现带阻滤波器的功能。

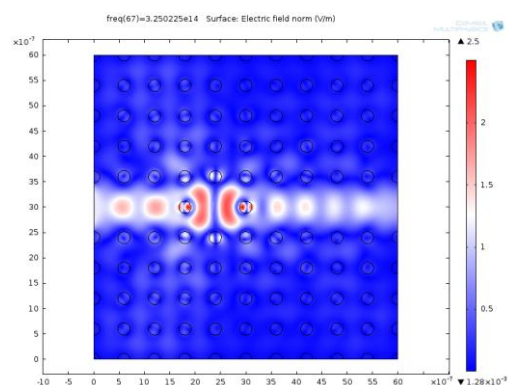


图 3-2-4 入射光频率为 $3.250225 \times 10^{14}\text{Hz}$ 时带阻型光子晶体中的光场分布

4 总结

论述了光子晶体的基本特征,并由麦克斯韦方程组推出二维光子晶体的泛函数形式。利用 COMSOL Mutliphysics 仿真模拟

了光子晶体几种典型结构的光路传输。仿真结果很好地体现了光子晶体特性。同时可以看到线型、中央点缺陷、线-点缺陷同光纤、光滤波器、光波分复用等有一定类似性。进一步研究各种器件影响特性，可以很好实现对光进行控制。

参考文献

- [1] 欧阳征标, 李景镇, 张道中等. 多层光子晶体滤波器研究[J]. 光学学报, 2002.01.017.
- [2] 周利斌, 张良瑞. 由麦克斯韦方程组推导光子晶体本征方程[J]. 科技创新导报, 2010.24.001.
- [3] 臧克宽, 孙晓红, 李大海等. 基于 comsol 软件的光子晶体通信器件模拟 [J]. 光电技术应用, .2010.05.014.
- [4] 梁文耀. 光子晶体光传输特性及其应用的研究 [D]. 中山大学, 2010.
- [5] 池灏, 曾庆济, 姜淳等. 光子晶体光纤的原理、应用和研究进展[J]. 光电子·激光, 2002.05.027.
- [6] 王磊, 殷海荣, 岳玲娜等. 任意形状二维介质光子晶体带结构计算 [J]. 真空电子技术, 2008.02.004.
- [7] 闫明宝. FDTD 方法对二维光子晶体传输特性的研究 [D]. 曲阜师范大学, 2008.
- [8] 李未, 陈小玲. 二维三角形光子晶体带隙与耦合特性研究 [J]. 光通信技术, 2011.03.019.
- [9] 武校刚. 基于有限元法的二维光子晶体能带特性研究 [D]. 燕山大学, 2010.