文章编号：0258-7025(2002)Supplement-0017-02

光子晶体中矢量场的 Bloch 定理

王 华 袁晓东 曾 淳 季家熔 叶卫民
（国防科学技术大学光电工程系，长沙 410073）

提要 Bloch 定理是光子晶体理论中平面波方法和传输矩阵法的重要理论基础。运用量子力学中的算符理论，将 Bloch 定理由标量场推广到矢量场；发现这是电介质材料具有空间平移对称性的直线结论。

关键词 Bloch 定理，光子晶体，光子带隙
中图分类号 O732^{+}.1 文献标识码 A

Bloch′s Theorem in Photonic Crystals

WANG Hua YUAN Xiao-dong ZENG Chun JI Jia-rong YE Wei-min
(*Department of Photoelectrical Engineering, National University of Defense Technology, Changsha* 410073)

Abstract Bloch′s theorem is the foundation of plane wave method and transfer matrix method in the theory of photonic crystals. In this chapter, the theory about operator in quantum mechanics is generalized to vector field and Bloch′s theorem with vector is given. This is the direct conclusion of the spatial translational symmetry of dielectric materials.

Key words Bloch′s theorem, photonic crystal, photonic band gap

1 引 言

众所周知，在半导体中，由于势场的周期性，使得电子的能量呈带状结构，带和带之间可能有间隙——带隙；它可以通过解周期场下的薛定谔方程来得到。光场的亥姆霍兹方程与薛定谔方程十分相似；因而当介电常数具有周期性时，在光电子晶体能带结构中也可能存在带隙，频率落在光子带隙内的光波不能在光子晶体中传播。这种类似半导体的周期性电介质结构称为光子晶体。这种材料有一个显著的特点是它可以利用带结构中可能存在的带隙，如人所愿地控制光子的运动[1~3]。光子晶体的应用非常广泛，可以制作高性能器件；新型的平面天线、光子晶体波导、光子晶体微腔、光子晶体光纤、光子晶体超棱镜等[4~9]。研究光子晶体常用的方法有矢量平面波方法[10,11]和传输矩阵法[12]。两种方法中用到一个很重要的结论，即矢量场的 Bloch 定理。文献[3]中有对矢量场的 Bloch 定理的简单分析，但我们认为其主要存在的不足是，平移算符的本征函数 $e^{iK\cdot r}$ 是凭经验选择的，因而定理所体现的物理意义不太明确。本文运用量子力学中的算符理论，将 Bloch 定理由标量场推广到矢量场；发现矢量场的 Bloch 定理也是系统具有空间平移对称性的直接结论。

2 光子晶体中的本征方程

光子晶体中的 Maxwell 方程组可以化简成[3,11]

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(r)} \nabla \times \boldsymbol{H}(r) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \boldsymbol{H}(r)$$

令

$$\Theta(r) = \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(r)} \nabla \times, \quad \lambda = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$$

则

$$\Theta(r)\boldsymbol{H}(r) = \lambda \boldsymbol{H}(r) \tag{1}$$

即光子晶体中的本征方程。

设 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$ 代表光子晶体的三个基矢，则格矢

$$\boldsymbol{R} = m_1 \boldsymbol{a}_1 + m_2 \boldsymbol{a}_2 + m_3 \boldsymbol{a}_3$$

其中 m_1、m_2、m_3 是整数，定义 $\hat{T}$ 代表与使位矢 $\boldsymbol{r}$ 变到位矢 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}$ 的平移操作相当的算符，即

$$\hat{T}f(r) = f(r + \boldsymbol{R})$$

电介质具有周期性结构，即介电常数 $\varepsilon(r)$ 具有晶格的周期性。

3 光子晶体的 Bloch 定理

设光子晶体本征方程的相应于本征值 λ 的两

个线性无关解(对于非简并和多重简并的情况方法相同):$\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r})$和 $\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r})$,设彼此正交归一。有

$$\hat{T}\Theta \boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}) = \lambda \boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \quad (i=1,2) \tag{2}$$

$$\Theta\hat{T}\boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}) = \Theta \boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \quad (i=1,2) \tag{3}$$

由于 $\hat{T}$ 与 Θ 可对易[3],所以

$$\Theta \boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \lambda \boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \quad (i=1,2) \tag{4}$$

即 $\boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$ 也是相应于本征值 λ 的本征函数,因此可以表示成 $\boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r})$ 的线性叠加

$$\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = c_{11}\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r}) + c_{12}\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

$$\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = c_{21}\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r}) + c_{22}\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r}) \tag{6}$$

光子晶体中的 Floquet 定下:如进行适当的线性叠加,总可以找到两个解 $\boldsymbol{H}_1(\boldsymbol{r})$、$\boldsymbol{H}_2(\boldsymbol{r})$具有下列简单的特性:

$$\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \alpha \boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}) \quad (i=1,2) \tag{7}$$

令

$$\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}) = A\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r}) + B\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r}) \tag{8}$$

由(5)式~(8)式得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) &= (Ac_{11}+Bc_{21})\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r}) + \\ &\quad (Ac_{12}+Bc_{22})\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \alpha[A\boldsymbol{h}_i(\boldsymbol{r}) + B\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r})] \tag{10}$$

由 $\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{r})$和 $\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{r})$的正交归一性

$$Ac_{11} + Bc_{21} = \alpha A \tag{11}$$

$$Ac_{12} + Bc_{22} = \alpha B \tag{12}$$

这是 A,B 的线性齐次方程组,它们有非零解的充要条件为

$$\begin{vmatrix} c_{11}-\alpha & c_{21} \\ c_{12} & c_{22}-\alpha \end{vmatrix} = 0 \tag{13}$$

这是 λ 的二次方程,总能找到它的两个根 α_1 和 α_2。分别用 α_1 与 α_2 代入(11)式、(12)式,可求出 A,B 的两组解,并将它们代入(6)式,即求得相应的两个波函数 $\boldsymbol{H}_1(\boldsymbol{r})$,$\boldsymbol{H}_2(\boldsymbol{r})$。它们是满足(7)式的。(7)式显然可以推广

$$\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}+n\boldsymbol{R}) = \alpha^n \boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}) \tag{14}$$

$$(n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

若 α 的模大于 1,则当 n 超于正无穷时,$|\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}+n\boldsymbol{R})|$就趋于无穷,即在无究远处 $\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{r}+n\boldsymbol{R})$是无界的,因此,$\alpha$ 的模不能大于1。类似的 α 的模也不能小于 1。所以只能是 α 的模等于 1。不妨取

$$\alpha = e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}} \tag{15}$$

若

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = \beta_1\boldsymbol{H}_1(\boldsymbol{r}) + \beta_2\boldsymbol{H}_2(\boldsymbol{r}) \tag{16}$$

则

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) \tag{17}$$

考虑到复指数函数的周期性(周期为2π),不妨把 $\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}$ 限制在

$$-\pi \leqslant \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R} \leqslant \pi \tag{18}$$

这就是平面波方法中的简约 Brillouin 区(或称第一 Brillouin 区)。(17)式中,令

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}_K(\boldsymbol{r}) \tag{19}$$

其中 $\boldsymbol{K}$(实向量)待定。(17)式变为

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = e^{i\boldsymbol{K}\cdot(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})}\boldsymbol{u}_K(\boldsymbol{r}) \tag{20}$$

由(19)式

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = e^{i\boldsymbol{K}\cdot(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})}\boldsymbol{u}_K(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \tag{21}$$

所以

$$\boldsymbol{u}_K(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \boldsymbol{u}_K(\boldsymbol{r}) \tag{22}$$

即光子晶体中的矢量场 H 满足 Bloch 定理。

从上述的推导过程可看出,光子晶体中的 Bloch 定理是电介质具有空间平移对称性的直接结论。

4 结 论

证明过程表明:

1) 由于只要求算符 $\hat{T}$ 与 Θ 可对易,所以光子晶体中的乔量场 $\boldsymbol{E}$ 也满足 Bloch 定理;

2) 平面波方法中的简约 Brillouin 区是由(18)式确定,类似的可以确定第二 Brillouin 区、第三 Brillouin 区等。

参 考 文 献

1 E. Yablonovitch. *Phys. Rev. Lett.*, 1987,**58**:2059
2 S. Jhon. *Phys. Rev. Lett.*, 1987,**58**:2486
3 J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, J. N. Winn. *Photonic Crystals*. Princeton: Princeton University Press, 1995. Chapter 2
4 A. Mekis *et al.*. *Phys. Rev. Lett.*, 1996,**77**:3787
5 J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, S. Fan. *Nature*, 1997,**386**:143
6 I. Abram, G. Boudon. *Phys. Rev. A*, 1996,**54**:3476
7 G. S. Agrwal, S. D. Gupta. *Phys. Rev. A*, 1998,**57**:667
8 S. Y. Lin *et al.*. *Appl. Phys. Lett.*, 1996,**68**:3233
9 S. Y. Lin, V. M. Hietala, L. Wang *et al.*. *Opt. Lett.*, 1996,**21**:1771
10 Z. Zhang, S. Satpathy. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**:2650
11 M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**:3152
12 J. B. Pendry. *J. Mod. Opt.*, 1993,**41**:209