

由球形原子构成的多种周期性介电结构的光子能带计算

陈铁岐 涂克琰

(上海复旦大学物理系激光与光学实验室, 上海 200433)

摘 要 采用矢量平面波方法计算了由球形空气原子构成的体心立方结构和六角密堆结构的光子能带, 两种结构下都看到了贯通整个布里渊区的禁带。本文预言周期性介电结构的最大折射率调制和最大禁带宽度对应于同样的原子体积分数, 而且这个最佳的原子体积分数是结构无关的。文中还计算了由各向异性介电小球构成的面心立方结构的光子能带并看到了禁带, 这与各向同性介电小球构成的面心立方结构很不相同。

关键词 光子晶体, 禁带, 球形原子, 折射率调制, 各向异性介电小球。

1 引 言

早在六十年代人们就发现在周期性介质中传播的电磁波与晶体中的电子具有某种相似性^[1, 2], 但是直到八十年代中叶人们才认识到它的重要性。这还要归功于 Gabrielse 等^[3]和 Hulet 等^[4]两个开创性的实验。1985 年, Hulet 等用间距小于 $1/2$ 辐射波长的平板电容成功抑止了处于其间的铯原子从 $(n = 22, |m| = 21)$ 态到 $(n = 21, |m| = 20)$ 态的自发辐射。由此人们想到可以利用周期性介电结构产生的电磁模禁带来抑止某些自发辐射(如载流子的辐射复合等), 从而大大提高半导体器件的效率(例如可降低半导体激光器的阈值电流, 可提高太阳能电池的最大输出电压等等)^[5, 6]。由于周期性介电结构(作者称之为光子晶体)是一种人为结构, 可将电磁模禁带的位置调整在人们所需要的从微波到可见的任何频率上, 这将具有深远的意义。

1989 年, Yablonovitch 和 Gmitter^[7]率先造出了一块具有 8000 个“原子”的光子晶体, 在微波波段观察到了一个隙禁带, 掀起了对光子晶体研究的热潮。理论上, 人们先是沿用了晶体中电子的处理方法, 对电磁场作标量近似, 很多的方法(平面波法^[8, 9]、KKR 法^[10]、缀加平面波法^[11])一致预言了: 当小球和间隙的介电常数之比超过临界值(~ 3)时, 面心立方(FCC)结构将产生贯通布里渊区的禁带。然而这个预言与实验不能一致。九十年代初人们发展了矢量平面波方法^[12-14], 获得了与实验^[7, 15]一致的结果。

本文将计算小球形空气原子构成的体心立方(BCC)和六角密堆(HCP)结构、以及由各向异性介电小球构成的面心立方(FCC)结构的光子能带。

2 光子晶体和电子晶体

所谓光子晶体,就是周期性介质结构,由低损耗的介电材料构成,可以其介电常数或折射率呈周期性分布。为了与通常所说的天然晶体区别起见,可以将天然晶体称为电子晶体。虽然光子在光子晶体中的传播与电子在电子晶体中的行为有相似性,但它们之间仍有本质区别(见表1)。

Table 1.

	electron	photon
dispersion relation of free space	parabola	linear
spin	1/2	1
theory description	Schrödinger equation	Maxwell equations
accuracy of energy band theory	The band theory is approximate description due to coulomb repulsion	The band theory is exact description due to free of photon interaction

3 矢量平面方法

由麦克斯韦方程组有:

$$\nabla \times (\nabla \times E) = -\frac{1}{c^2} \epsilon_r(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}, \quad \nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon_r(\mathbf{r})} \nabla \times H \right] = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 H}{\partial t^2}. \quad (1)$$

对相对介电常数 $\epsilon_r(\mathbf{r})$ 呈周期性分布的介质结构,可作如下展开:

$$\epsilon_r(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad \frac{1}{\epsilon_r(\mathbf{r})} = \sum_{\sigma} \eta_{\sigma} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}). \quad (2)$$

这里 \mathbf{G} 为倒格矢。由布洛赫定理,(1)式的解可写成如下形式:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\sigma} E_{\sigma} \exp\{i[(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r} - \omega t]\}, \\ H(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\sigma} H_{\sigma} \exp\{i[(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r} - \omega t]\}. \end{aligned} \quad (3)$$

将(2)式和(3)式代入(1)式可得:

$$\begin{aligned} & -(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times [(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times E_{\sigma}] \\ & = (\omega^2/c^2) \sum_{\sigma'} \epsilon_{\sigma-\sigma'} E_{\sigma'} - \sum_{\sigma'} \eta_{\sigma-\sigma'} \{(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times [(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times H_{\sigma'}]\} \\ & = (\omega^2/c^2) H_{\sigma}. \end{aligned} \quad (4)$$

将(4)式中的各空间分量展开,则有:

$$\sum_{\nu} [|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\nu\nu} - (k_{\nu} + G_{\nu})(k_{\nu} + G_{\nu})] E_{\sigma\nu} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\sigma'} \epsilon_{\sigma-\sigma'} E_{\sigma'}, \quad (5a)$$

$$\sum_{\sigma'} \sum_{\nu} \eta_{\sigma-\sigma'} [(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \delta_{\nu\nu} - (K_{\nu} + G'_{\nu})(K_{\nu} + G_{\nu})] H_{\sigma'\nu} = \frac{\omega^2}{c^2} H_{\sigma\nu}. \quad (5b)$$

这里 $\nu, \nu' = 1, 2$ 或 3 。(5)式是一个本征值问题,截断后可数值求解,算出本征值 ω 和本征函数 E_{σ} 或 H_{σ} 。如果计算时采用 N 个倒格点,那么需要对一个 $3N \times 3N$ 的矩阵对角化。考虑到电磁波的横波特性, E_{σ} 和 H_{σ} 的一个空间分量可化去,但这样做的代价是破坏了(5)式的厄米

对称性。

一般(5a)式称为 E -方法, (5b)式称为 H -方法, 两式的精确解是完全等价的, 但截断后的数值解的精度各不相同^[16]。假设构成原子和间隙的介质相对介电常数分别为 ϵ_a 和 ϵ_b 。考虑单个小球处于均匀电场中的情况: 当 $\epsilon_a > \epsilon_b$ 时, 电场被原子“吸引”而趋向于与原子表面垂直, 由于界面处只有电场的切向分量和磁场的法向分量连续, 因此 H -方法比 E -方法能获得更好结果; 而当 $\epsilon_a < \epsilon_b$ 时, 电场被原子“推斥”而趋向于与原子表面平行, 因此 E -方法比 H -方法更精确。

4 球形原子

由于光子晶体是一种人为结构, 因此原子可以是任何形状, 也可以相互交叠。对球形原子, 若不考虑原子交叠, 相对介电常数 ϵ_r 可写成:

$$\epsilon_r(\mathbf{r}) = \epsilon_b + (\epsilon_a - \epsilon_b) \sum_j \theta\left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}{R_j}\right) \quad (6)$$

式中 \sum_j 是对原胞内原子求和, R_j 为原子半径, \mathbf{r}_j 为原子位置, 函数 $\theta(x)$ 定义为: 当 $x \leq 1$ 时, $\theta(x) = 1$; 当 $x > 1$ 时, $\theta(x) = 0$ 。(6)式的傅里叶级数展开系数为:

$$\epsilon_0 = \epsilon_b \delta_{\mathbf{G}, 0} + (\epsilon_a - \epsilon_b) \frac{4\pi}{\Omega G^3} \sum_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) [\sin(GR_j) - GR_j \cos(GR_j)] \quad (7)$$

式中 Ω 为原胞体积。(6)和(7)两式所覆盖的范围是:

Table 2.

structure	FCC	diamond	SC	BCC	HCP
volume fraction of the atoms β	0~74%	0~34%	0~52%	0~68%	0~74%

若考虑原子两两交叠, 则(7)式还应减去交叠部分的积分。设相交叠的两个原子位置分别为 $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ 和 $\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$, 半径分别为 R_1 和 R_2 , 相距 $d = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \leq R_1 + R_2$, 那么交叠部分积分

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Omega} \int_{\text{交叠部分}} (\epsilon_a - \epsilon_b) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &= \frac{\epsilon_a - \epsilon_b}{\Omega} \frac{2\pi}{B} \left\{ \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) \int_{(R_1^2 - R_2^2 + d^2)/2d}^{R_1} \exp(iAz) \sqrt{R_1^2 - z^2} J_1(B \sqrt{R_1^2 - z^2}) dz \right. \\ & \quad \left. + \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_2) \int_{(R_2^2 - R_1^2 + d^2)/2d}^{R_2} \exp(-iAz) \sqrt{R_2^2 - z^2} J_1(B \sqrt{R_2^2 - z^2}) dz \right\} \quad (8) \end{aligned}$$

其中, J_1 为一阶贝塞尔函数, $A = \mathbf{G} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/d$, $B = \sqrt{G^2 - A^2}$ 。若不考虑原子的进一步交叠, 以上计算已覆盖的范围是:

Table 3.

structure	FCC	diamond	SC	BCC	HCP
volume fraction of the atoms β	0~96%	0~90%	0~97%	0~94%	0~96%

表 3 所列原子体积分数的范围对设计和制造光子晶体是足够了。

5 多种周期性结构的光子能带 ($\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 16$)

作者采用 E-方法计算了 $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 16$ 时面心立方、金刚石、SC、体心立方和六角密堆结构的光子能带。截断时取了约 100 个最近的倒格点，低能带的计算精度约为 1%。除面心立方结构以外，其它结构都形成了贯通布里渊区的禁带。本文对 SC、面心立方和金刚石三种结构的计算结果与国外文献[12~14, 17, 18]的计算结果(不同介电材料)相吻合。

面心立方结构是人们最早注意的一种结构，这是因为在所有结构中面心立方的第一布里渊区形状最接近于球形，在布里渊区边界能带的交叠最小，应最容易形成禁带。但是人们发现，由于面心立方结构的对称性太高，第二、三能带在 W 点发生简并，无法形成禁带。金刚石结构在面心立方结构中附加的原子降低了面心立方结构的对称性，W 点的能带简并因此被消除，所以能形成很宽的禁带。计算表明，X-W 的能带是二度简并的，这样能带交叠更小，对形成禁带更有利；当原子体积分数 $\beta \approx 35\% \sim 95\%$ 时禁带出现在第二、三能带之间，在 $\beta \approx 80\%$ 附近禁带最宽，相对宽度(即禁带宽度与中心频率之比) $\Delta_{23} \approx 32\%$ (见图 1)。SC 结构也能形成禁带，当 $\beta \approx 65\% \sim 90\%$ 时禁带出现在第五、六能带之间，在 $\beta \approx 80\%$ 附近最宽， $\Delta_{56} \approx 8\%$ (见图 2)。体心立方结构的能带在 H 点三度简并，当 $\beta \approx 72\% \sim 87\%$ 时禁带出现在第

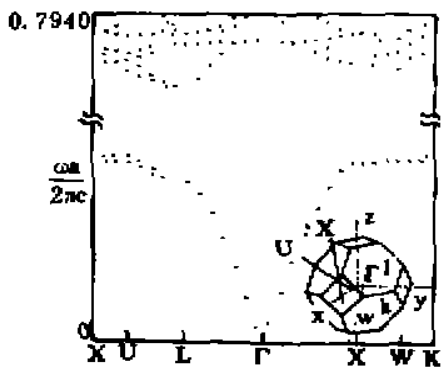


Fig. 1 The photonic bands of the diamond structure (sphere atoms; $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 16, \beta = 80.9\%, \Delta_{23} \approx 32\%$)

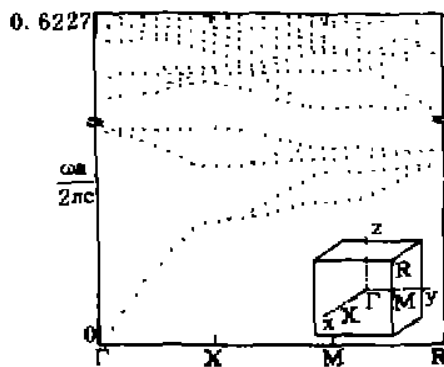


Fig. 2 The photonic bands of the SC structure (sphere atoms; $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 16, \beta = 79.8\%, \Delta_{56} \approx 8\%$)

六、七能带之间，在 $\beta \approx 80\%$ 附近最宽， $\Delta_{67} \approx 3\%$ (见图 3)。六角晶格的第一布里渊区形状离球形较远，因此六角密堆结构的能带交叠较厉害，尽管这样，当 $\beta \approx 68\% \sim 83\%$ 时在第十六、十七能带之间出现了禁带，在 $\beta \approx 80\%$ 附近最宽， $\Delta_{16,17} \approx 3\%$ (见图 4)。

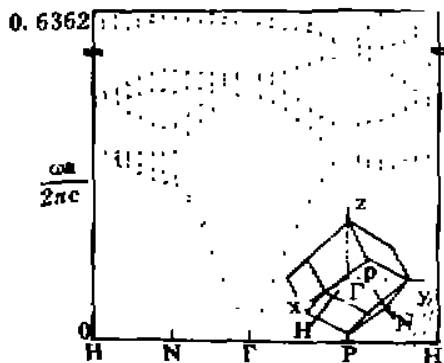


Fig. 3 The photonic bands of the BCC structure (sphere atoms; $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 16, \beta = 75.7\%, \Delta_{67} \approx 3\%$)

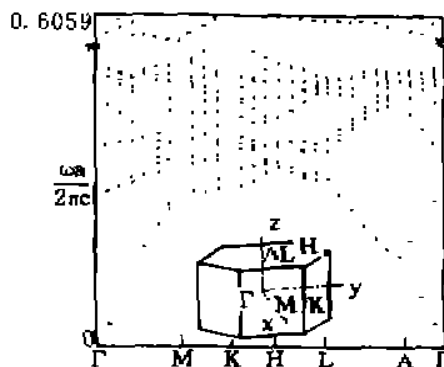


Fig. 4 The photonic bands of the HCP structure (sphere atoms; $\epsilon_a = 1, \epsilon_b = 16, \beta = 78.3\%, \Delta_{16,17} \approx 3\%$)

6 折射率调制度

在计算中发现，可以通过折射率调制度 n_M 的极大值点来预言对应禁带最宽或最有可能出现禁带的原子体积分数 β 值。 n_M 定义如下：

$$n_M = \frac{1}{\bar{n}} \left\{ \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} [n(r) - \bar{n}]^2 d^3r \right\} \tag{9}$$

式中 $n(r) = [\epsilon_r(r)]^{1/2}$, $\bar{n} = (1/\Omega) \int_{\Omega} n(r) d^3r$, \int_{Ω} 表示对原胞内积分。当只有两种介电材料时，(9)式变为：

$$n_M = \frac{\sqrt{\beta(1-\beta)}}{|\beta + n_b/(n_a - n_b)|} \tag{10}$$

其中， $n_a = \sqrt{\epsilon_a}$, $n_b = \sqrt{\epsilon_b}$ ，这时 n_M 是结构无关的。当 $\beta = n_b/(n_a + n_b)$ 时(10)式有极大值。若 $\epsilon_a = 1$, $\epsilon_b = 16$ ， n_M 的极大值出现在 $\beta = 80\%$ 处，这时禁带宽度也最大(如果存在禁带的话)。这一结论不仅得到了第六小节对五种结构计算结果(球形原子)的证实(见图 5)，也得到了国外文献[14, 17, 18]的计算结果(包括非球形原子)的证实(见图 6)。图 5 中某些 β 值时的禁带相对宽度变为负，是表示原来形成禁带的上下能带这时发生交叠，上能带跑到了下能带的下面。

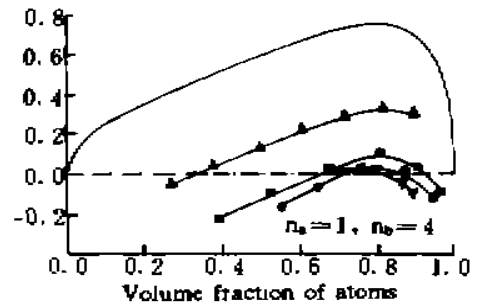


Fig. 5 The refractive index modulation and the gap to midgap ratio versus the volume fraction of the atoms (sphere atoms)
— Modulation of refractive index, \blacktriangle Gap/MidGap of diamond, \blacksquare Gap/MidGap of SC, \bullet Gap/MidGap of BCC, \blacktriangledown Gap/MidGap of HCP

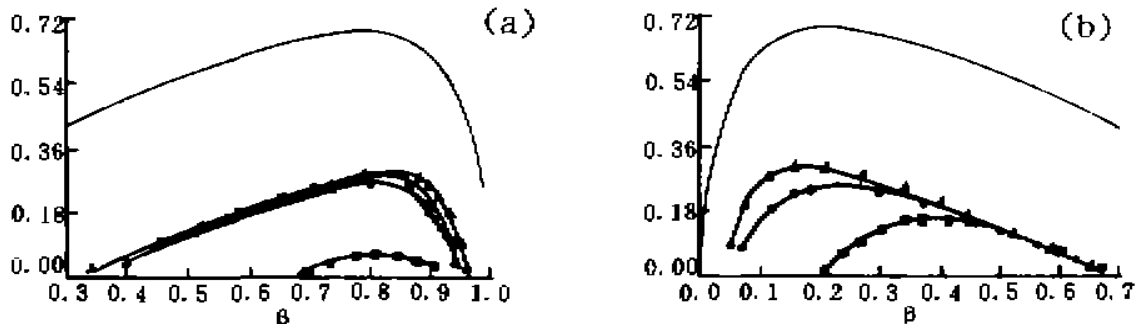


Fig. 6 The refractive index modulation and the gap to midgap ratio versus the volume fraction of the atoms (data from the literature)

(a) $\epsilon_a = 1$, $\epsilon_b = 13$, — The refractive index modulation vs β , \blacksquare Δ_{36} vs β . The SC structure, spherical atoms (after H. S. Sözlter and J. W. Haus [18]), \blacktriangle Δ_{23} vs β . The diamond structure, spherical atoms (after K. M. Ho et al., [14]), \blacktriangledown Δ_{23} vs β . The diamond structure, non-spherical atoms, ball and stick (after C. T. Chan et al. [17]), \bullet Δ_{23} vs β . The diamond structure, non-spherical atoms, cylindrical rod (after C. T. Chan et al. [17]); (b) $\epsilon_a = 13$, $\epsilon_b = 1$. — The refractive index modulation vs β , \blacksquare Δ_{23} vs β . The diamond structure, spherical atoms (after K. M. Ho et al., [14]), \blacktriangle Δ_{23} vs β . The diamond structure, non-spherical atoms, ball and stick (after C. T. Chan et al. [17]), \bullet Δ_{23} vs β . The diamond structure, non-spherical atoms, cylindrical rod (after C. T. Chan et al. [17])

7 由 BaTiO₃ 小球构成的面心立方结构

以 H-方法为例，对于由各向异性介质构成的周期性结构，同样可作如下展开：

$$\epsilon^{-1} = \sum_G \eta_G \exp(iG \cdot r) \tag{11}$$

这里， ϵ^{-1} 为介电张量的逆张量，傅里叶级数展开系数 η_G 也是张量。同样由布洛赫定理可得如下方程：

$$-\sum_{G'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \{ \boldsymbol{\eta}_{G-G'} \cdot [(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{G'}] \} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_G \quad (12)$$

将(12)式中的各空间分量展开, 则有:

$$\sum_{G'} \sum_{\alpha} M_{G\alpha, G'\alpha} H_{G'\alpha} = \frac{\omega^2}{c^2} H_{G\alpha} \quad (13)$$

这里,

$$M_{G\alpha, G'\alpha} = \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\gamma'} \sum_{\beta'} (k_{\beta} + G_{\beta}) (\boldsymbol{\eta}_{G-G'})_{\gamma\gamma'} (k_{\beta'} + G_{\beta'}) \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta'\gamma'} \quad (14)$$

其中符号 $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 定义为: $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = -\epsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\epsilon_{\alpha\gamma\beta} = -\epsilon_{\gamma\beta\alpha}$, $\epsilon_{123} = 1$ 。对于主轴系统, 当 $\alpha \neq \beta$ 时, $(\boldsymbol{\eta}_G)_{\alpha\beta} = 0$ 。本文采用 H -方法计算了 BaTiO_3 小球在面心立方结构下的光子能带。截断时取了 113 个最近的倒格点, 低能带的计算精度优于 1%。 BaTiO_3 晶体具有各向异性, 而且在低频波段 ($\sim 10^6 \text{ Hz}$) 具有很大的介电常数(在主轴系统中 $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 2920$, $\epsilon_3 = 168$)。如果用 BaTiO_3 小球构成面心立方结构, 并使 BaTiO_3 晶体主轴 Z 轴与面心立方结构的 $[001]$ 方向重合, 则可方便地计算这个面心立方结构的光子能带。这种结构的能带与由各向同性介电材料构成的面心立方结构的能带相比有较大不同: 各向同性介电材料构成的面心立方结构, 由于 W 点的能带简并不存在禁带; 而对各向异性介电材料构成的面心立方结构, 由于对称性较低, W 点的能带简并被消除, 当 $\beta \approx 13.4\%$ 时在第二、三能带之间出现宽为 5% 的禁带(见图 7)。

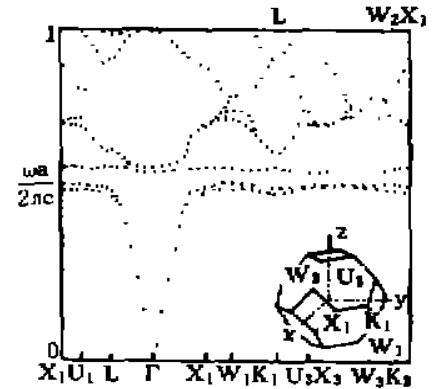


Fig. 7 The photonic bands of the FCC structure (BaTiO_3 spheres; $\epsilon_1 = 1$; $\beta = 13.4\%$; $\Delta_{23} \approx 5\%$)

结 论 本文指出了当 $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 16$ 时在体心立方和六角密堆结构的较高能带之间有可能产生禁带。文中预言了周期性介电结构的折射率调制度和禁带宽度在同样的原子体积分数下达到最大, 而且当只有两种介电材料存在时这个最佳的原子体积分数是结构无关的。本文计算了同各向异性介电材料 BaTiO_3 小球构成的面心立方结构的光子能带, 并看到了禁带, 这与由各向同性介电小球构成的面心立方结构很不相同。

参 考 文 献

- [1] D. Kossel, Analogies between thin-films optics and electronband theory of solids. *J. Opt. Soc. Am.*, 1966, 56 (10) : 1434~1437
- [2] A. 亚里夫, P. 叶著, 于荣金, 金锋译, 晶体中的光波——激光的传播与控制. 北京: 科学出版社, 1991 : 130~147
- [3] G. Gabrielse, H. Dehmelt, Observation of inhibited spontaneous emission. *Phys. Rev. Lett.*, 1985, 55(1) : 67~70
- [4] R. G. Hulet, E. S. Hilfer, D. Kleppner, Inhibited spontaneous emission by a Rydberg atom. *Phys. Rev. Lett.*, 1985, 55(20) : 2137~2140
- [5] E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58 (20) : 2059~2062
- [6] H. O. Everitt, Applications of photonic band gap structures. *Opt. & Phot. News*, 1992, 4(11) : 20~23
- [7] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, Photonic band structure: the face-centered-cubic case. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 63(18) : 1950~1953

- [8] S. Satpathy, Theory of photon bands in three-dimensional periodic dielectric structures. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **64**(11) : 1239~1242
- [9] K. M. Leung, Y. F. Liu, Photon band structures; the plane-wave method. *Phys. Rev. B*, 1990, **41**(14) : 10188~10190
- [10] S. John, R. Rangarajan, Optical structures for classical wave localization; an alternative to the Ioffe-Ragel criterion. *Phys. Rev. B*, 1988, **38**(14) : 10101~10104
- [11] E. N. Economou, A. Zedetsis, Classical wave propagation in periodic structures. *Phys. Rev. B*, 1989, **40**(2) : 1334~1337
- [12] K. M. Leung, Y. F. Liu, Full vector wave calculation of photonic band structures in face-centered-cubic dielectric media. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(21) : 2646~2649
- [13] Z. Zhang, S. Satpathy, Electromagnetic wave propagation in periodic structures; Bloch wave solution of Maxwell's equations. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(21) : 2650~2653
- [14] K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(25) : 3152~3155
- [15] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, K. M. Leung, Photonic band structure; the face-centered-cubic case employing nonspherical atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, **67**(17) : 2295~2298
- [16] H. S. Söztler, J. W. Haus, R. Inguva, Photonic bands; convergence problems with the plane-wave method. *Phys. Rev. B*, 1992, **45**(24) : 13962~13972
- [17] C. T. Chan, K. M. Ho, C. M. Soukoulis, Photonic band gaps in experimentally realizable periodic dielectric structures. *Europhys. Lett.*, 1991, **18**(6) : 563~568
- [18] H. S. Söztler, J. W. Haus, Photonic bands; simple-cubic lattice. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1993, **10**(2) : 296~302

Calculation of Photonic Bands of Multiple Periodic Dielectric Structures Consisting of Spherical Atoms

Chen Tieqi Xu Keshu

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

(Received 27 January 1995)

Abstract In this paper, the photonic bands of the body-centered-cubic and the hexagonal-close-packed structures consisting of spherical air atoms are calculated using vector plane wave method. The results show that complete band gaps (covering the entire Brillouin zone) open up for both structures. It is revealed that the maximum refractive index modulation coincides with the widest band gaps and the optimum volume fraction of the atoms is structure-independent. The photonic bands of the face-centered-cubic (FCC) structure consisting of spherical anisotropic dielectric atoms are also calculated. The results show that a complete band gap opens up, which is quite different from the FCC structure consisting of spherical isotropic dielectric atoms.

Key words photonic crystal forbidden gap, spherical atoms, refractive index modulation, anisotropic dielectric spheres.