

手征材料构成的简立方光子晶体光子带 结构计算——平面波法*

金崇君 秦 柏 秦汝虎

(哈尔滨工业大学应用物理系, 哈尔滨 150001)

摘 要 发展了适于计算由手征材料组成的光子晶体的光子带结构的平面波法。在此基础上, 研究了由手征材料组成的简立方光子晶体的光子带结构。计算表明: 手征材料“球形原子”在电介质中排列所组成的简立方光子晶体和电介质“球形原子”在手征材料中排列所组成的简立方光子晶体, 不仅都存在光子带隙, 而且存在截止频率, 在该频率以下的区域无传播模存在。本文也讨论了这种光子晶体的潜在应用。

关键词 手征材料, 光子晶体, 光子带结构, 光子带隙。

1 引 言

光子晶体是一种介质在另一种介质中周期排列所组成的人造晶体, 它极大地修正了光子的色散关系, 在其中可能存在着类似于半导体能带结构中的禁带, 称之为光子带隙^[1]。频率落在光子带隙内的电磁波不能在光子晶体中传播, 因此它具有许多特异的物理现象。如自发辐射的抑制, 零点脉动的消失, 能量转移^[2], 光子压缩态^[3], 光双稳和光开关^[4]等。由于这些独特的性质, 它已吸引了越来越多的研究者的关注。

对光子晶体能带结构的研究, 其中大部分是研究无损耗非活性电介质周期排列的光子带结构^[2, 5-7], 但也有少数研究了吸收和色散介质周期排列的光子带结构^[8, 9], 金属组成的光子晶体的光子带结构^[10], 克尔(Kerr)介质周期排列的光子带结构^[11]以及各向异性介质组成的光子晶体的光子带结构^[12]。关于光子晶体的制造, 主要有两种方法: 一是通过对介质进行化学腐蚀、激光打孔或离子束刻蚀等方法加工出空间结构; 二是通过约束球形或条形电介质在液体或气体中有序排列而得到实现^[14, 15]。但人们在制造光子带隙在可见光区的三维光子晶体上遇到了困难, 即在电介质中加工亚微米量级的空间立体结构是现有技术所不可能实现的, 只能通过约束球形电介质粒子在液体中的有序排列来实现。但由于光子能带的简并, 介电常数为 ϵ_a 的电介质球在介电常数为 ϵ_b 的基质中排列, 当 $\epsilon_a > \epsilon_b$ 时, 仅金刚石结构能出现光子带隙^[6], 虽然在面心立方结构中也能出现光子带隙, 但所用介质却是各向异性介质^[12], 这两种结构都很难实现。针对这一困难, 本文研究了光子晶体的周期势场, 发现所有光子晶体

* 国家自然科学基金资助项目。

收稿日期: 1996-11-20; 收到修改稿日期: 1997-01-25

的周期势均由介电常数或电导率的周期调制实现的。手征介质是一种光学活性介质, 这种光学活性具有时间反演不变性, 而不存在空间反演不变性^[13]。因此, 当光子晶体的周期势由介电常数和旋波量的周期变化调制时, 由于空间反演不变性的破坏, 光子带的简并度必降低, 在 $\epsilon_a > \epsilon$ 的情况下, 可能会出现光子带隙。为此, 本文拓展了平面波法, 研究了由手征介质组成的简立方光子晶体的光子带结构。计算结果表明: 当 $\epsilon_a > \epsilon$ 时, 在适当的条件下存在光子带隙, 而且存在截止频率, 在这频率以下的区域无传播模存在。从而为通过约束球形电介质粒子在液体中有序排列而制造在可见光区存在光子带隙的三维光子晶体提供了理论依据。

2 理论与计算方法

频率为 ω 的单色电磁波在手征介质中的传播可以表达为^[13]

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1)$$

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

$$\mathbf{D} = \epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} + i\mathcal{Y}(\mathbf{r})\mu_0\mathbf{H} \quad (3)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H} - i\mathcal{Y}(\mathbf{r})\mu_0\mathbf{E} \quad (4)$$

其中 $\epsilon(\mathbf{r})$ 为介电常数函数, μ 为介质的磁导率, $\mathcal{Y}(\mathbf{r})$ 为介质的旋波量函数。把方程(3)和(4)代入(1)和(2), 则频率为 ω 的单色电磁波的传播方程变为:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega[\mu_0\mathbf{H} - i\mathcal{Y}(\mathbf{r})\mu_0\mathbf{E}] \quad (5)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega[\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} + i\mathcal{Y}(\mathbf{r})\mu_0\mathbf{H}] \quad (6)$$

对(5)式两边取旋度, 同时把(6)式代入, 得

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \omega^2\mu_0\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} + i\omega^2\mu_0^2\mathcal{Y}(\mathbf{r})\mathbf{H} + \omega\nabla \times [\mathcal{Y}(\mathbf{r})\mu_0\mathbf{E}] \quad (7)$$

利用旋度公式 $\nabla \times (\mathcal{Y}\mathbf{E}) = \mathcal{Y}\nabla \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \nabla\mathcal{Y}$, (7)式变成:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \omega^2[\epsilon(\mathbf{r})\mu_0 - \mu_0^2\mathcal{Y}^2(\mathbf{r})]\mathbf{E} + 2\omega\mu_0\mathcal{Y}(\mathbf{r})\nabla \times \mathbf{E} - \omega\mu_0\mathbf{E} \times \nabla\mathcal{Y}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

把 $\epsilon(\mathbf{r})$ 、 $\mathcal{Y}(\mathbf{r})$ 和 $\mathcal{Y}^2(\mathbf{r})$ 按傅里叶形式展开

$$\begin{cases} \epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \epsilon_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \\ \mathcal{Y}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathcal{Y}_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \\ \mathcal{Y}^2(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathcal{Y}_{\mathbf{G}}^2 \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \end{cases} \quad (9)$$

其中 \mathbf{G} 为倒格矢。根据布洛赫理论, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 可按布洛赫波展开

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r} \quad (10)$$

其中 \mathbf{k} 为波矢。此时把(9)式和(10)式代入(8)式, 可得如下本征值方程

$$\begin{aligned} -(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) &= \omega^2 \sum_{\mathbf{G}'} [\mu_0\epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \mu_0^2\mathcal{Y}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^2] \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \\ &+ 2i\omega\mu_0 \sum_{\mathbf{G}'} \mathcal{Y}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \\ &+ i\omega\mu_0 \sum_{\mathbf{G}'} \mathcal{Y}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{G} - \mathbf{G}') \times \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \end{aligned} \quad (11)$$

由于(11)式是一复系数的本征值方程, 本征值不易求得。为此可使 $i\omega/c = \nu$, 则(11)式变成为

实系数的本征值方程, 从而极大地简化了本征值的求解过程。

$$\begin{aligned}
 -(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = & -v^2 c^2 \sum_{\mathbf{G}'} [\mu_0 \epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \mu_0^2 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^2] \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \\
 & + 2v c \mu_0 \sum_{\mathbf{G}'} \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \\
 & + v c \mu_0 \sum_{\mathbf{G}'} \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{G} - \mathbf{G}') \times \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \quad (12)
 \end{aligned}$$

记

$$\mathbf{E}_x = \begin{bmatrix} E_{1x} \\ E_{2x} \\ E_{3x} \\ \vdots \\ E_{Nx} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E}_y = \begin{bmatrix} E_{1y} \\ E_{2y} \\ E_{3y} \\ \vdots \\ E_{Ny} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E}_z = \begin{bmatrix} E_{1z} \\ E_{2z} \\ E_{3z} \\ \vdots \\ E_{Nz} \end{bmatrix} \quad (13)$$

然后截取 n 个平面波重新表达(12)式, 得

$$v^2 Q_2 \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} + v Q_1 \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} + Q_0 \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = 0 \quad (14)$$

其中 Q_2 、 Q_1 和 Q_0 分别为

$$Q_2 = - \begin{bmatrix} [c^2(\mu_0 \epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \mu_0^2 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^2) \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}]_{n \times n} & 0 & 0 \\ 0 & [c^2(\mu_0 \epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \mu_0^2 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^2) \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}]_{n \times n} & 0 \\ 0 & 0 & [c^2(\mu_0 \epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \mu_0^2 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^2) \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}]_{n \times n} \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 0 & [-A - B]_{n \times n} & [C + D]_{n \times n} \\ [A + B]_{n \times n} & 0 & [-E - F]_{n \times n} \\ [-C - D]_{n \times n} & [E + F]_{n \times n} & 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

其中

$$\begin{aligned}
 A &= 2c\mu_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}')_z \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, & B &= c\mu_0 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{G} - \mathbf{G}')_z \\
 C &= 2c\mu_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}')_y \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, & D &= c\mu_0 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{G} - \mathbf{G}')_y \\
 E &= 2c\mu_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}')_x \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, & F &= c\mu_0 \gamma_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{G} - \mathbf{G}')_x
 \end{aligned}$$

$$Q_0 = \begin{bmatrix} [(H^2 - F^2) \delta_{ij}]_{n \times n} & (HI \delta_{ij})_{n \times n} & (HJ \delta_{ij})_{n \times n} \\ (IH \delta_{ij})_{n \times n} & [(H^2 - F^2) \delta_{ij}]_{n \times n} & [(IJ) \delta_{ij}]_{n \times n} \\ [(JH) \delta_{ij}]_{n \times n} & [(JI) \delta_{ij}]_{n \times n} & [(J^2 - F^2) \delta_{ij}]_{n \times n} \end{bmatrix} \quad (17)$$

其中 $H = (\mathbf{k} + \mathbf{G})_x$, $I = (\mathbf{k} + \mathbf{G})_y$, $J = (\mathbf{k} + \mathbf{G})_z$, $F = |\mathbf{k} + \mathbf{G}|$

其中 $[x]_{n \times n}$ 表示 $n \times n$ 的方阵, x 表示矩阵元。方程(14)是一般非线性本征值方程。它的本征值可以通过线性化方案, 求解一个如下的等效矩阵而得到

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -Q_2^{-1} Q_0 & -Q_2^{-1} Q_1 \end{bmatrix} = 0 \quad (18)$$

其中 Q_2 为非奇异矩阵。

$\epsilon(\mathbf{r})$ 和 $\gamma(\mathbf{r})$ 是周期函数, 在半径为 R 的球体内, $\epsilon(\mathbf{r})$ 和 $\gamma(\mathbf{r})$ 分别为 ϵ_a 和 γ_a , 在球外, $\epsilon(\mathbf{r})$ 和 $\gamma(\mathbf{r})$ 分别为 ϵ_b 和 γ_b 。它们可表达为:

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_b(\epsilon_a - \epsilon_b)\Gamma[\mathbf{r} - R - a(L)] \quad (19)$$

$$\gamma(\mathbf{r}) = \gamma_b + (\gamma_a - \gamma_b)\Gamma[\mathbf{r} - R - a(L)] \quad (20)$$

其中

$$\Gamma(x) = \begin{cases} 1 & |x| < R \\ 0 & |x| > R \end{cases}$$

$a(L)$ 为晶格的位矢。由(19)式和(20)式以及(9)式, 可得:

$$\epsilon_c = 3f(\epsilon_a - \epsilon_b) \frac{\sin(|GR|) - |GR| \cos(|GR|)}{(|GR|)^3} \quad (21)$$

$$\gamma_c = 3f(\gamma_a - \gamma_b) \frac{\sin(|GR|) - |GR| \cos(|GR|)}{(|GR|)^3} \quad (22)$$

$$\gamma_c^2 = 3f(\gamma_a^2 - \gamma_b^2) \frac{\sin(|GR|) - |GR| \cos(|GR|)}{(|GR|)^3} \quad (23)$$

其中 f 为球形原子在晶格中所占的体积比, $f = 4\pi R^3/3a^3$, a 为晶格常数。

因为系统是由无损耗、非增益的介质组成的, 所以本征值 ω/c 是正实数, 否则, 则是无物理意义的。但在求解方程(18)时, 所得的本征值为 $\omega/c = \text{Re} + i \text{Im}$ 。当截取 165 个平面波而产生一个 990×990 的本征矩阵时, 计算表明 Re 有近一半是负值, 这是解非线性方程引起的; 同时 Im 并不等于零, 但 Re 的绝对值一般比 Im 的绝对值大 5 个数量级, 有些 Im 和 Re 可相比, 这也是由于方程的非线性引起的, 是无物理意义的。本文取阈值 $|\text{Im}| \leq 10^{-2} \text{Re}$, 符合这一条件的, 略去 Im , 本文认为这是本征值。

3 计算结果与讨论

当手征介质“球形原子”在电介质中以简立方晶格周期排列时, 本文取系统的参数为: $f = 0.325$, $\epsilon_a = 5.0\epsilon_0$, $\epsilon_b = 1.5\epsilon_0$, $\gamma_a = 0.09$, $\gamma_b = 0.0$ 。所得结果如图 1 所示。在 $1.316 < \omega a/2\pi c < 1.430$ 之间, 存在一光子带隙, 隙的宽度相对于中心频率的宽度为 8.3%。在 $\omega a/2\pi c$ 小于 0.1350 时, 无可传播的光子模存在, 称之为截止频率。为确信截止频率的存在, 而不是由于求本征值时截取的平面波有限而引起的, 本文也采用 100 和 150 以及 165 个平面波进行了计算。在三种计算中, 发现随波数增加, 在截止频率以下, 出现的本征值 $\omega/c = \text{Re} + i \text{Im}$ 的 $|\text{Im}/\text{Re}|$ 值增大, 且大于 10^{-2} , 即虚部(损耗)增大, 因此是无物理意义的。表明这些本征值的排除不是由于截取的平面波数有限而引起的, 而是由非线性引起的, 故截止频率的出现是可信的。当电介质“球形原子”在手征材料中以简立方晶格周期排列时, 取系统的参数为: $f = 0.426$, $\epsilon_a = 5.0\epsilon_0$, $\epsilon_b = 2.5\epsilon_0$, $\gamma_a = 0.0$, $\gamma_b = 0.07$ 。光子带结构如图 2 所示。在 $0.4519 < \omega a/2\pi c < 0.4900$ 之间, 存在一个光子带隙, 隙的宽度相对于中心频率的宽度为 8.1%。在 $\omega a/2\pi c$ 小于 0.3570 时, 也存在一截止频率。同时, 本文在计算手征性 γ 的大小对光子带隙宽度及截止频率的影响时发现: 当 γ 小于一定值时, 光子带隙关闭, 而且不再出现截止频率, 其原因仍有待于进一步研究。

从光子带结构看, 由手征材料组成的光子晶体, 由于旋波量的存在, 使晶体中不存在空间反演对称性, 从而使对称点的对称性下降, 简并度降低, 因而光子带结构变得平坦, 这有利于光子带隙的存在, 因此手征材料组成的光子晶体中容易出现光子带隙。而且从图中也可

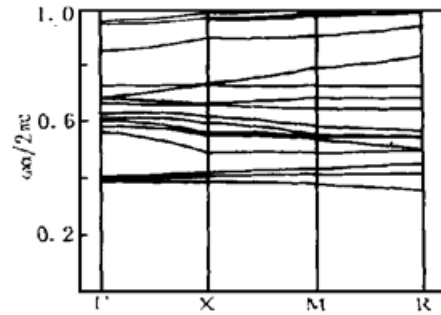
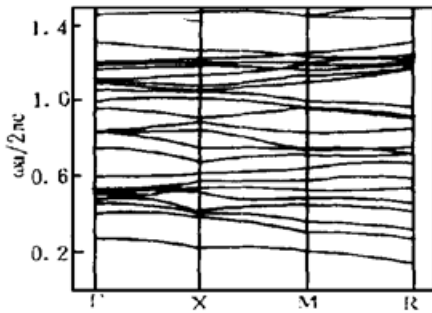


Fig. 1 The photonic band structure of the simple cubic lattice, $f = 0.325$, $\epsilon_a = 5.0\epsilon_0$, $\epsilon_b = 1.5\epsilon_0$, $\gamma_a = 0.09$, $\gamma_b = 0.0$

Fig. 2 The photonic band structure of the simple cubic lattice, $f = 0.426$, $\epsilon_a = 5.0\epsilon_0$, $\epsilon_b = 2.5\epsilon_0$, $\gamma_a = 0.0$, $\gamma_b = 0.07$

看出, 由手征材料组成的光子晶体的光子带结构存在截止频率, 在该频率以下, 无传播模存在, 这与文献[12]中所研究的三维金属条形网络状结构光子晶体的光子带结构相似, 在其中也出现了截止频率, 但由于金属的损耗随频率的增大而增大, 故由其组成的光子晶体只能在 1 THz 以下才能使用, 而本文所研究的光子晶体却能在可见光区使用。

结 论 提出并计算了由手征介质组成的简立方光子晶体的光子带结构。计算表明: 手征介质“球形原子”在电介质中的排列和电介质“球形原子”在手征介质中排列的两种简立方光子晶体均存在光子带隙, 而且在一定条件下, 存在一截止频率, 在这频率以下的区域无传播模存在。在本文所提出的光子晶体中, 其基质的介电常数 $\epsilon_b = 2.5\epsilon_0$ 或 $\epsilon_b = 1.5\epsilon_0$, 因此基质可以选择液体, 则转化为介质球在液体中的有序排列, 可以通过一定的技术, 约束球形粒子在液体中周期排列^[14, 15], 为制造光子带隙在可见光区的光子晶体提供了理论依据。因此本文提出的这种光子晶体具有较大的发展前途。

参 考 文 献

- [1] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23) : 2486~ 2489
- [2] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, Photonic band structure: The face-centered-cubic case. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **63**(18) : 1950~ 1953
- [3] E. Yablonovitch, *Photonic Band Gap and Localization*, Edited by C. M. Soukious, New York, Plenum Press, 1993 : 207~ 233
- [4] Michael Scalora, Jonathan P. Dowling, Charles. M. Bowden *et al.*, Optical limiting and switching of ultrashort pulses in nonlinear photonic band gap materials. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **73**(10) : 1368~ 1371
- [5] 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
- [6] K. M. Ho, C. T. Chen, C. M. Soukoulis, Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(25) : 3152~ 3155
- [7] H. Sami Szer, Joseph W. Haus, Photonic bands: Simple-cubic lattice. *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1992, **10**(2) : 296~ 302
- [8] Toshio Suzuki, Paul K. L. Yu, Dispersion relation at point L in the photonic band structure of the face-center-cubic lattice with active or conductive dielectric medium. *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1995, **12**(4) : 583~ 591

- [9] J. B. Pendry, A. Mackinnon, Calculation of photon dispersion relations. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, **69** (19) : 2772~ 2775
- [10] M. M. Sigalas, C. T. Chan, K. M. Ho *et al.*, Metallic photonic band-gap materials. *Phys. Rev. (B)*, 1995, **52**(16) : 11744~ 11751
- [11] P. Tran, Photonic-band-structure calculation of material possessing Kerr nonlinearity. *Phys. Rev. (B)*, 1995, **52**(15) : 10673~ 10676
- [12] I. H. H. Zabel, D. Stroud, Photonic band structures of optically anisotropic periodic arrays. *Phys. Rev. (B)*, 1993, **48**(8) : 5004~ 5012
- [13] S. Bassiri, C. H. Papas, N. Engheta, Electromagnetic wave propagation through a dielectric-chiral interface and through a chiral slab. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1988, **5**(9) : 1450~ 1459
- [14] Jordi Martorell, N. M. Lawandy, Observation of inhibited Spontaneous emission in a periodic dielectric structure. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, **65**(15) : 1877~ 1880
- [15] Michaeli. M. Burns *et. al.*, Optical matters crystallization and binding in intense optical fields. *Science*, 1990, **249** : 749~ 754

Photonic Band Structure of Simple Cubic Lattice in Chiral Medium —— Plane Wave Method

Jin Chongjun Qin Bai Qin Ruhu

(*Department of Applied Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001*)

(Received 20 November 1996; revised 25 January 1997)

Abstract The plane wave method is developed for calculating photonic band structure in chiral medium, at this basis, the photonic band structure of simple cubic lattice made of chiral medium is calculated. Results show that cutoff frequencies below which there are no propagating modes appear in both of two kinds scc lattices which are the array of “chiral spherical atoms” in dielectric material and the array of “dielectric spherical atoms” in chiral matrix. There is a cutoff frequency below which there are no propagating modes. The potential application of the photonic lattice is discussed.

Key words chiral medium, photonic crystal, photonic band structure, photonic band gap.