# 各向异性材料对二维六角晶格光子晶体中 狄拉克点的影响

温 菲<sup>1</sup> 谢 康<sup>1</sup> 张 维<sup>1,2</sup>

1合肥工业大学仪器科学与光电工程学院,安徽合肥 230009

2合肥工业大学电子科学与应用物理学院,安徽合肥 230009

**摘要** 光子能带结构中的狄拉克点是目前光子晶体研究中新兴的热点。选用双轴材料,用六边形介质柱构成了六角晶格各向异性光子晶体。该光子晶体有三个各异的主介电常数  $\epsilon_{xx}$ 、 $\epsilon_{yy}$ 、 $\epsilon_{zz}$ 。依据麦克斯韦方程组,垂直极化 (TE)波中的狄拉克点会受到  $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy}$ 的影响,即可以通过调制双轴材料中 X、Y 方向的主折射率  $N_x$ 、 $N_y$ 得到光子 晶体中 TE 波的狄拉克速率,从而调节 TE 波中狄拉克点在能带结构图中的位置(即调节狄拉克点的归一化频率及 其在布里渊区的位置)。研究了  $N_x$ 、 $N_y$ (对应  $\epsilon_{xx}$ 、 $\epsilon_{yy}$ )与 TE 波中狄拉克点的存在性的关系,并通过仿真实验验 证了提出的观点。这些研究可为研发新型光学器件以及构建光子芯片提供更多的可能。

关键词 材料;光子晶体;狄拉克点;各向异性;六角晶格

中图分类号 O436.3 文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201636.0516003

## Effect of Anisotropic Materials on Dirac Point in Two-Dimensional Photonic Crystals Arranged in a Hexagonal Lattice

Wen Fei<sup>1</sup> Xie Kang<sup>1</sup> Zhang Wei<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> School of Instrument Science & Opto-Electronics Engineering, Hefei University of Technology, Hefei, Anhui 230009, China <sup>2</sup> School of Electronic Science and Applied Physics, Hefei University of Technology, Hefei, Anhui 230009, China

Abstract Dirac point in photonic band structures is a research focus in the present photonic crystal field. The hexagonal rods arranged in a hexagonal lattice anisotropic photonic crystals using bi-axial materials are presented. In the photonic crystals, there are three different primary dielectric constants,  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$  and  $\varepsilon_{zz}$ . Based on the Maxwell's equations, the Dirac point in transverse electric (TE) wave is affected by  $\varepsilon_{xx} \neq \varepsilon_{yy}$ . The Dirac velocity in the TE wave can be obtained by modulating the principal refractive index  $N_x$  and  $N_y$  in the X and Y directions of bi-axial materials, and thus the position of the Dirac point in the energy band structure can be changed by adgusting TE wave. That is to say, the normalized frequency of the Dirac point and its position in the Brillouin zone can be changed. The relationship between  $N_x$ ,  $N_y$  (corresponding to  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ) and existence of the Dirac point in TE wave is studied, and the proposed opinion is demonstrated by simulation experiments. The characteristics will provide more possibility for the design of novel photonic components and photonic chip architectures.

Key words materials; photonic crystals; Dirac point; anisotropic; hexagonal lattice

**OCIS codes** 160.1160;270.5580; 250.7360; 070.7345

1 引 言

狄拉克锥源自基于狄拉克方程的相对论性粒子理论,在 Novoselov 等<sup>[1]</sup>成功制备出单层石墨晶体后受到了越来越多的关注<sup>[2]</sup>。在石墨烯的能带结构中,其布里渊区边界的高对称点上存在具有线性色散关系的

收稿日期: 2015-11-03; 收到修改稿日期: 2016-01-25

基金项目:国家自然科学基金(60588502,60607005,60877033)

作者简介:温 菲(1990-),男,硕士研究生,主要从事光子晶体狄拉克点和光子晶体光纤等方面的研究。

E-mail: 840524879@qq.com

导师简介:谢 康(1965-),男,博士,教授,主要从事光学工程和微波光电子学等方面的研究。

E-mail: kangxie@hfut.edu.cn

上下锥形结构,这些锥形结构的中心点被称为狄拉克点。由于光子晶体与电子晶体具有相似的微结构, Zhang 等<sup>[3-6]</sup>在光子晶体的布里渊区边界高对称点上实现了狄拉克点。随后,Huang 等<sup>[7]</sup>在光子晶体的布里 渊区中心对称点 Γ处也实现了狄拉克点。在狄拉克点的研究中,已经发现了许多奇妙的波传输特性,例如 单向边缘态<sup>[8-12]</sup>、零折射效应<sup>[13]</sup>、异常投射<sup>[3,14-17]</sup>以及消相干背散射<sup>[18-19]</sup>等。通过这些特性能够制得多种主 流的光纤<sup>[20-21]</sup>、耦合器/滤波器<sup>[22]</sup>以及激光器<sup>[23-24]</sup>。同时,狄拉克的这些宏观特性极大地促进了量子系统的 发展,并给新型狄拉克材料的研发奠定了理论基础。

以上研究都是基于各向同性的材料,认为二维光子晶体中狄拉克点的存在性仅依赖于晶体的对称 性<sup>[25]</sup>,而与晶体的介电常数无关。本文讨论的各向异性光子晶体<sup>[26-30]</sup>,其垂直极化(TM)波中的狄拉克点同 样符合上述规律。但其水平极化(TE)波中的狄拉克点却打破了这一认知,这类狄拉克点的存在性会受两个 主介电常数( $\epsilon_{xx}$ 和 $\epsilon_{yy}$ )的影响,并且通过这两个参数还能调制狄拉克点的归一化频率。研究发现光子晶体中 的狄拉克点并非只能在布里渊区的高度对称点  $K \ K'$ 或 $\Gamma$ 上实现,事实上,调节  $\epsilon_{xx}$ 和  $\epsilon_{yy}$ 能使狄拉克点能在 其他多处实现。这一发现催生了一种调制狄拉克点的方法,能够有效地控制狄拉克点的存在性或者改变狄 拉克点在布里渊区中的位置。

#### 2 理论分析

设计的二维各向异性光子晶体由六边形介质柱排列而成。介质柱轴线平行于 Z 轴,在与柱体垂直的 X-Y 平面上呈现二维六角晶格的周期性排列。该结构如图 1(a)所示,晶格常数为 Q=1  $\mu$ m,基底为空气,折射率为 1。六边形介质柱边长  $R_{\text{HEX}} = 0.125Q$ ,主折射率  $N_x$ 和  $N_y$ 在 2~9之间变化。通过仿真实验和文献<sup>[25,31]</sup>得知,上述条件下狄拉克点具有良好的线性色散效果,且狄拉克点可在 KM 段任意调节,使用碲化物 在改变温度和掺杂的共同作用下可达到折射率要求。



图 1 二维各向异性光子晶体结构。(a)六边形介质柱排列而成的六角晶格;(b)第一布里渊区以及一些高对称点 Fig. 1 Structure diagrams of two-dimensional anisotropic photonic crystal. (a) Hexagonal rods arranged in hexagonal lattice; (b) first Brillouin zone and several points of high symmetry marked

与各向同性材料具有标量型介电常数的特点不同,各向异性材料的介电常数是一个二阶张量:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{r} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix},$$
(1)

选用双轴材料的介电张量只有对角元素,即存在三个各异的主介电常数  $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ 。对应于介质柱沿 X、Y和Z方向的主折射率为  $N_x$ 、 $N_y$ 和  $N_z$ (材料的导磁率不变,介电常数的变化与折射率的变化呈正相关)。

可用麦克斯韦方程组描述各向异性介质中的电磁波在时间与空间中的传播。 $\nabla \times e = -\mu_0 \frac{\partial h}{\partial t} - m, \nabla \times h = \varepsilon_0 \mathbf{s}_r \frac{\partial e}{\partial t} + j$ ,其中 *e* 为电场强度(V/m),*h* 为磁场强度(A/m),*j* 为电荷电流密度(A/m<sup>2</sup>),*m* 为磁荷电流 密度(V/m<sup>2</sup>), $\mu_0$ 为自由空间的磁导率, $\varepsilon_0$ 为自由空间的介电常数。

在本文研究的光子晶体结构中,TE 波和 TM 波的麦克斯韦方程组是解耦合的,即

$$TE_{\varepsilon_{0}}\varepsilon_{xx}\frac{\partial e_{x}}{\partial t} = \frac{\partial h_{z}}{\partial y} - j_{x}, \quad -\varepsilon_{0}\varepsilon_{yy}\frac{\partial e_{y}}{\partial t} = \frac{\partial h_{z}}{\partial x} + j_{y}, \quad \mu_{0}\frac{\partial h_{z}}{\partial t} = \frac{\partial e_{x}}{\partial y} - \frac{\partial e_{y}}{\partial x} - m_{z}, \quad (2)$$

$$TM_{z} - \mu_{0} \frac{\partial h_{x}}{\partial t} = \frac{\partial e_{z}}{\partial y} + m_{x}, \quad \mu_{0} \frac{\partial h_{y}}{\partial t} = \frac{\partial e_{z}}{\partial x} - m_{y}, \quad \varepsilon_{0} \varepsilon_{zz} \frac{\partial e_{z}}{\partial t} = \frac{\partial h_{y}}{\partial x} - \frac{\partial h_{x}}{\partial y} - j_{z}.$$
(3)

所以 TE 波的狄拉克点受 ε<sub>xx</sub>、ε<sub>yy</sub>的共同影响, 而 TM 波中的狄拉克点只受 ε<sub>xx</sub>的影响。

由 Sakoda<sup>[32]</sup>的研究可知,在二维六角晶格中,只要满足如表 1 所示的对称条件<sup>[25]</sup>,狄拉克点便能够存在。表 1 中的 G 和 G<sub>k</sub>分别代表光子晶体的点群和 k 的点群。需要注意的是,狄拉克锥的出现只和系统对称 性相关。

	表 1 各种对称条件中狄拉克锥的存在性
Table 1	Existence of Dirac cones in various symmetry conditions

G	$G_k$	k	Туре
C <sub>3v</sub> or C <sub>6v</sub>	$C_{3v}$	Brillouin zone corner	Deterministic
$C_6$	$C_3$	Brillouin zone corner	Deterministic
$C_{3v}$ or $C_3$	$C_3$	Brillouin zone corner	Accidental
Arbitrary	$C_1$	General <b>k</b>	Accidental
With mirror	$C_{S}$	Certain <b>k</b>	Accidental

对于 TM 波,由于只受到  $\epsilon_{zz}$ 的影响,而  $\epsilon_{zz}$ 的改变不会改变六角晶格的对称性,所以改变  $\epsilon_{zz}$ 只能调节 TM 波中狄拉克点的归一化频率。对于 TE 波,当  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ 时,晶格 C<sub>3v</sub>的对称性使得系统在布里渊区 K 点 实现了狄拉克点。引入各向异性后,使得

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{r} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{xx} + \Delta_{1} & 0 & 0\\ 0 & \boldsymbol{\varepsilon}_{yy} + \Delta_{2} & 0\\ 0 & 0 & \boldsymbol{\varepsilon}_{zz} \end{bmatrix},$$
(4)

当 x 方向和 y 方向介电常数的变化量不相等时,即  $\Delta_1 \neq \Delta_2$ 时,六角晶格的空间反演对称性被破坏。当  $C_{3v}$  对称性退化至不再满足表 1 时,能带中 K 点的简并点被破除,狄拉克点即被打开。所以  $\varepsilon_{xx}$ 、 $\varepsilon_{yy}$ 不仅影响 TE 波中狄拉克点的归一化频率,还能影响其存在性。

上述光子晶体系统可用广义的特征问题表述: $H(r)\Psi_k(r) = \omega_k^2 \epsilon_r^{-1} \Psi_k(r)$ ,其中 H(r)为哈密顿量,  $\Psi_k(r)$ 是与简化的布洛赫波矢 k 以及本征频率 $\omega_k$ 相关的本征态。

同时依据  $k \cdot P$  微扰理论, K 点附近的  $\Psi_k(r)$  可被扩展为一对正交的本征态:

$$\Psi_{k}(r) = \exp(\mathrm{i}\Delta k \cdot r) [A_{1}\Psi_{1}(r) + A_{2}\Psi_{2}(r)], \qquad (5)$$

式中 Δk 为狄拉克点在波矢轴上的偏移量。将(5)式代入哈密顿公式可建立一个扰动问题:

$$\sum_{i=1,2} H'_{ij} A_j = 2\omega_k \Delta \omega A_i , \qquad (6)$$

式中线性扰动哈密顿量 $H' = \Delta \mathbf{k} \cdot p, p$ 为向量算符, $\Delta \omega$ 为K点狄拉克点归一化频率 $\omega_k$ 的变化量。所以,本征值H'提供了狄拉克速率( $\Delta \omega / \Delta \mathbf{k} = p / 2\omega_k$ ),狄拉克点在布里渊区中的位置发生了变化。对于 TE 波,介电常数  $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ 中  $\boldsymbol{\varepsilon}_{xx}, \boldsymbol{\varepsilon}_{yy}$ 的差值能够产生一个线性扰动,得到  $\Delta k$ ,从而调节狄拉克点在布里渊区的位置。

3 仿真实验

对于 TE 波, 狄拉克点的存在性随  $N_x$  和  $N_y$  的变化如图 2(a)所示, 其中深蓝色变化曲线近似于一个线 性关系式:

$$N_x = 0.8857 N_y + 1.0286, \tag{7}$$

在  $2 \le N_x \le 10, 2 \le N_y \le 10$  范围内,只有  $N_x$  和  $N_y$  处于蓝色区域时,即

$$N_x < 0.8857 N_y + 1.0286, \tag{8}$$

才存在如图 2(b)所示的狄拉克点,图中 c 为真空中的光速, $\lambda$  为光波长。一旦  $N_x$ 过大或者  $N_y$ 过小,狄拉克 点便如图 2(c)所示被打开,此外,当  $3 < N_x < 7, 3 < N_y < 7$ 且不满足(8)式时,上下能带间形成带隙。

光子晶体中狄拉克点归一化频率的变化如图 2(d)所示,图中 5 条曲线依次代表 N<sub>x</sub>为 2、3、4、5、6 的情况下,当狄拉克点出现时归一化频率随 N<sub>y</sub>的变化规律。归一化频率会随着 N<sub>x</sub>和 N<sub>y</sub>的增大而减小。改变 N<sub>x</sub>和 N<sub>y</sub>可在 0.3~0.55 范围内调节狄拉克点的归一化频率。在 2<N<sub>x</sub><6 和 2<N<sub>y</sub><9 的范围内,固定 N<sub>x</sub>,狄拉克点的归一化频率会随着 N<sub>y</sub>呈近似线性的改变,这一性质可以用来进行狄拉克点归一化频率以 及介质主折射率的预判。



图 2 六边形介质柱构成晶体中的狄拉克点及其归一化频率变化。(a)狄拉克点的存在条件;(b)TE能带结构中的狄拉克点; (c)被打开并形成能带的狄拉克点;(d)狄拉克点的归一化频率随折射率变化

Fig. 2 Normalized frequency and Dirac points in the photonic crystals composed of hexagonal rods.

(a) Existing condition of Dirac point; (b) Dirac point in the TE band structure;

(c) Dirac point is opened and a band appears; (d) normalized frequency of Dirac point changing with refractive index

对于 TE 波,改变  $N_x$ 和  $N_y$ ,光子晶体中狄拉克点在波矢轴上会出现如图 3(a)所示的偏移,移动量如图 3(b)所示,随着  $N_y$ 增大,狄拉克点从 K 点逐渐移向 M 点。当  $N_x \ge 3$  时,改变  $N_y$ 可使狄拉克点在如图 3(c) 所示的 M 点实现,并且越过 M 点向布里渊区中心点  $\Gamma$  移动,但并不能到达  $\Gamma$  点(布里渊区边界的任意一点 以及部分  $M\Gamma$  线段上都能实现狄拉克点)。



(b)狄拉克点的偏移量与折射率的关系图;(c)狄拉克点移动至 M 点
Fig. 3 Shifted Dirac point in photonic crystals composed of hexagonal rods. (a) Dirac point shifts from K axis;
(b) amount of shift with different refractive index; (c) Dirac point shifts to M from K axis

### 4 结 论

各向异性材料的介电常数能够影响 TE 波和 TM 波中狄拉克点的归一化频率。在 TE 波中,主介电常数  $\epsilon_{xx}$ 和  $\epsilon_{yy}$ 能够影响狄拉克点的存在性及其在布里渊区的位置。通过仿真实验在一个大的连续的折射率变 化范围内验证了该理论的正确性。研究结果表明,对于二维六角晶格正六边形介质柱光子晶体,在 2 <  $N_x < 9, 2 < N_y < 9$ 范围内,当  $N_x$ 固定时, $N_y$ 与狄拉克点的归一化频率几乎呈线性关联;当主折射率  $N_x$ (对应  $\epsilon_{xx}$ )与 $N_y$ (对应  $\epsilon_{yy}$ )之间满足函数关系(8)式时,狄拉克点才会存在。另外,改变  $N_x$ 和  $N_y$ 能够调制狄拉克点在布里渊区中的位置,使得在布里渊区边界任意一点以及 *M* ( 线段上部分点能实现狄拉克点。这些结果在其他满足  $C_{3y}$ 规则的二维六角晶格光子晶体中也同样能够实现。

#### 参考文献

- 1 Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al.. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene [J]. Nature, 2005, 438(7065): 197-200.
- 2 Rizza C, Palange E, Ciattoni A. Electromagnetic chirality induced by graphene inclusions in multilayered metamaterials
   [J]. Photonics Research, 2014, 2(5): 121-125.
- 3 Zhang X, Liu Z. Extremal transmission and beating effect of acoustic waves in two-dimensional sonic crystals [J]. Physical Review Letters, 2008, 101(26): 264303.
- 4 Mei J, Wu Y, Chan C T, et al.. First-principles study of Dirac and Dirac-like cones in phononic and photonic crystals[J]. Physical Review B, 2012, 86(3): 035141.
- 5 Torrent D, Sáanchez-Dehesa J. Acoustic analogue of graphene: Observation of Dirac cones in acoustic surface waves[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(17): 174301.
- 6 Torrent D, Mayou D, Sánchez-Dehesa J. Elastic analog of graphene: Dirac cones and edge states for flexural waves in thin plates[J]. Physical Review B, 2013, 87(11): 115143.
- 7 Huang X Q, Lai Y, Hang Z H, et al.. Dirac cones induced by accidental degeneracy in photonic crystals and zero-refractive-index materials[J]. Nature Materials, 2011,10(8): 582-586.
- 8 Haldane F D M, Raghu S. Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken timereversal symmetry[J]. Physical Review Letters, 2008, 100(1): 013904.
- 9 Raghu S, Haldane F D M. Analogs of quantum-Hall-effect edge states in photonic crystals[J]. Physical Review A, 2008, 78(3): 033834.
- 10 Ochiai T, Onoda M. Photonic analog of graphene model and its extension: Dirac cone, symmetry, and edge states [J]. Physical Review B, 2009, 80(15): 155103.
- 11 Poo Y, Wu R X, Lin Z, et al.. Experimental realization of self-guiding unidirectional electromagnetic edge states [J]. Physical Review Letters, 2011, 106(9): 093903.
- 12 Rechtsman M C, Zeuner J M, Plotnik Y, et al.. Photonic Floquet topological insulators[J]. Nature, 2013, 496(7444): 196-200.
- Huang Xueqin, Chen Ziting. Dirac-like cones at k=0[J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(18): 184208.
   黄学勤,陈子亭. k=0处的类狄拉克锥[J].物理学报, 2015, 64(18): 184208.
- 14 Sepkhanov R A, Bazaliy Y B. Beenakker C W J. Extremal transmission at the Dirac point of a photonic band structure [J]. Physical Review A, 2007, 75(6): 063813.
- 15 Zandbergen S R, de Dood M J A. Experimental observation of strong edge effects on the pseudo diffusive transport of light in photonic graphene[J]. Physical Review Letters, 2010, 104(4): 043903.
- 16 Bittner S, Dietz B, Miski-Oglu M, *et al*.. Observation of a Dirac point in microwave experiments with a photonic crystal modeling graphene[J]. Physical Review B, 2010, 82(1): 014301.
- 17 Sepkhanov R A, Nilsson J, Beenakker C W J. Proposed method for detection of the pseudospin-1/2 Berry phase in a photonic crystal with a Dirac spectrum [J]. Physical Review B, 2008, 78(4): 045122.
- 18 Sepkhanov R A, Ossipov A, Beenakker C W J. Extinction of coherent backscattering by a disordered photonic crystal with a Dirac spectrum [J]. Europhysics Letters, 2009, 85(1): 014005.
- 19 Weick G, Woollacott C, Barnes W L, et al.. Dirac-like plasmons in honeycomb lattices of metallic nanoparticles [J]. Physical Review Letters, 2013, 110(10): 106801.
- 20 Bock M, Skibina J, Fischer D, et al. Nanostructured fibers for sub-10 fs optical pulse delivery [J]. Laser & Photonics

Reviews, 2013, 7(4): 566-570.

- 21 Konstantaki M, Childs P, Sozzi M, et al.. Relief Bragg reflectors inscribed on the capillary walls of solid-core photonic crystal fibers [J]. Laser & Photonics Reviews, 2013,7(3): 439-443.
- 22 Lu J, Ren H, Guo S, et al.. Ultra-wideband optical diode based on photonic crystal 90° bend and directional coupler[J]. Chinese Optics Letters, 2014, 12(10): 102301.
- 23 Shakoor A, Lo Savio R, Cardile P, et al.. Room temperature all-silicon photonic crystal nanocavity light emitting diode at sub-bandgap wavelengths[J]. Laser & Photonics Reviews, 2013, 7(1): 114-121.
- 24 Qureshi K K. Switchable dual-wavelength fiber ring laser featuring twin-core photonic crystal fiber-based filter [J]. Chinese Optics Letters, 2014, 12(2): 020605.
- 25 Lu J, Qiu C, Xu S, et al.. Dirac cones in two-dimensional artificial crystals for classical waves [J]. Physical Review B, 2014, 89(13): 134302.
- 26 Rezaei B, Khalkhali T F, Kalafi M. Tunable out-of-plane band gap of two-dimensional anisotropic photonic crystals infiltrated with liquid crystals[J]. Optics Communications, 2011, 284(3): 813-817.
- 27 Zhang H F, Li H M. Investigating anisotropic photonic band gaps in three-dimensional plasma photonic crystals with simple-cubic lattices doped by the uniaxial material[J]. Optical and Quantum Electronics, 2015, 47(3): 477-490.
- 28 Khalkhali T F, Rezaei B, Ramezani A H. Tuning of full band gap in anisotropic photonic crystal slabs using a liquid crystal[J]. Optics Communications, 2012, 285(24): 5254-5258.
- 29 Pan T, Zhuang F, Li Z Y. Absolute photonic band gaps in a two-dimensional photonic crystal with hollow anisotropic rods [J]. Solid State Communications, 2004, 129(8): 501-506.
- 30 Li G, Ye J, Xu X. Theoretical analysis of the second-harmonic light power in a biaxial crystal[J]. Chinese Optics Letters, 2010, 8(7): 693-696.
- 31 Yang Yibiao, Wang Shuanfeng, Li Xiujie, *et al*.. Band gap characteristics of two dimensional photonic crystals made of a triangular lattice of dielectic rods[J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(7): 5073-5077.
  杨毅彪,王拴锋,李秀杰,等.介质柱型二维 Triangular 格子光子晶体的禁带特性[J].物理学报, 2010, 59(7): 5073-5077.
- 32 Sakoda K. Symmetry, degeneracy, and uncoupled modes in two-dimensional photonic lattices [J]. Physical Review B, 1995, 52(11): 7982-7986.