

由光子晶体局域模对称关系分析其简并性*

孙志红

(兰州理工大学应用物理系, 兰州 730050)

摘要 使用平面波展开法计算了二维正方格子介质柱光子晶体在改变中央介质柱半径的情况下谐振腔的模式, 根据所计算的局域模式场分布的对称关系, 研究了二维光子晶体谐振腔模式的简并性. 结果表明: 具有 C_{4v} 对称群光子晶体谐振腔, 存在着二重简并偶极模和二重简并六极模, 同时也存在非简并单极模和四极模, 二重简并模的 90° 旋转态与其形成简并对. 模式的简并与非简并可以直观地通过考察模式场分布的对称关系而得到.

关键词 光子晶体; 简并性; 平面波展开法; 局域模

中图分类号 O488 **文献标识码** A

0 引言

光子晶体是近几年来发展迅猛的科学研究领域, 它吸引越来越多的人关注. 由于存在光子带隙, 光子晶体禁止该禁带内的任何电磁波传播. 光子晶体的另一个重要性质就是在光子晶体的周期性介电结构中引入缺陷, 破坏它的周期, 这样会在光子晶体的带隙中出现定域化的缺陷模. 一个模式(或一组模式)则可在光子带隙内发现一对应频率(一组频率). 将辐射频率落在光子禁带范围的原子或分子置于光子晶体中, 它的自发辐射将会被完全抑制. 如果原子的辐射频率和引入缺陷出现的定域化的缺陷模频率一致, 将原子放在缺陷附近, 原子的自发辐射将会得到提高. 应用有点缺陷的光子晶体做激光器的谐振腔, 可以大大降低谐振腔的损耗, 提高激光器的品质因子(Q)值, 光子晶体缺陷模在半导体激光器及高Q值谐振腔的应用中有很重要的作用^[1]. 有点缺陷的光子晶体还应用在光子晶体某方向光学极窄带的选频滤波器^[2-5]及微腔^[6-8]中. 另外, 利用光子晶体的线缺陷制成的波导及其组合器件中, 可以使光在任意弯曲的地方传播且损耗很小, 可以通过在波导内或附近引入缺陷制作在两个平行波导之间的通道下载器件及不串扰的波导连接器件^[2,9].

光子晶体中引入缺陷是非常容易的, 文献[10]已报道, 通过减少光子晶体一个介质柱的介电常数或通过移去光子晶体介质材料, 在光子晶体带隙底边产生受主模. 另外, 通过增加介电常数或局域增大介质尺寸, 在光子带隙顶端产生施主模. 因此, 缺陷模频率可以很方便通过变化缺陷的形状、尺寸及

介电系数而改变.

对二维单缺陷正方格子光子晶体谐振腔模式, 根据缺陷的不同显示出各种模式场分布对称性. 由群论知识可知, C_{4v} 群光子晶体谐振腔存在双简并模式和非简并模式. 由于平面波展开法对计算光子晶体谐振腔场分布具有结果稳定、并且准确等特点, 因此, 本文针对二维光子晶体谐振腔使用超平面波展开法^[11]在频域内计算缺陷模式的场分布, 由场分布直观地讨论模式的简并性, 区分简并对和非简并对.

1 二维光子晶体缺陷模

在理想的光子晶体中获得缺陷的方法有: (1) 移区晶胞; (2) 缺陷柱采用不同的介电常数; (3) 改变一个或几个光子晶体介质柱的形状和大小等. 对二维正方圆柱格子光子晶体缺陷模的研究, Villeda^[6]等人通过改变一个介质柱尺寸讨论了谐振模的特性, Sakoda 和 Shiroma^[12]计算了在改变缺陷介电常数情况下的本征频率和本征函数.

为了研究二维光子晶体缺陷模的性质, 我们使用空气中的无限长正方排列光子晶体介质柱为研究对象. 光子晶体晶格常数为 a , 介质柱半径 $r = 0.2a$, 折射率为 $n = 3.4$, 空气的折射率取 1, 计算过程中所取的超胞包括 7×7 二维正方晶胞. 对二维正方排列光子晶体介质柱当介质柱半径

$r = 0.2a$ 时, 对 TE 模则无带隙, 由于 TE 和 TM 模是各自独立的, 可分别讨论, 本文仅研究 TM 极化缺陷模.

首先采用平面波展开法计算, 当介质柱半径 $r = 0.2a$ 时, 所对应理想的二维正方格子介质柱光子晶体周期结构. 计算结果如图 1, 可以看出对 TM 模在 $f = 0.285c/a$ 和 $f = 0.421c/a$ 之间存在较大的带隙. 下面在已经计算出的理想的二维正方格子介质柱光子晶体周期结构情况下计算缺陷模.

*兰州理工大学优秀青年教师资助基金项目

Email: zhsun01@yahoo.com.cn

收稿日期: 2004-06-23

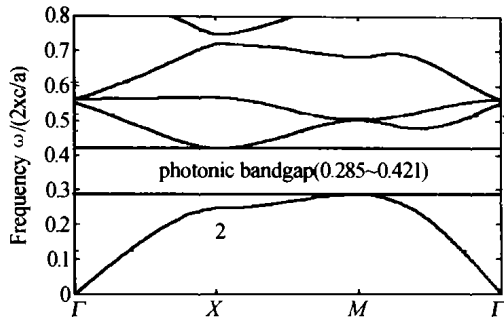


图1 二维正方圆柱光子晶体色散曲线. TM 模在 $f = 0.285c/a$ 和 $f = 0.421c/a$ 之间存在较大的带隙

Fig. 1 2D band diagram of the square lattice composed of circular dielectric cylinders, a large gap for TM modes is found between the frequency $f = 0.285c/a$ and $f = 0.421c/a$

图2给出了采用超胞法计算当中央介质半径由 $r = 0$ 变化到 $r = 0.8a$ 时缺陷模的频率对应关系. 当介质柱半径 $r = 0.2a$ 时, 对应理想的周期结构, 然后慢慢减小中央点缺陷柱的半径, 在大于 $r = 0.15a$ 范围内, 由于微扰尺寸太小, 无法在光子晶体内产生局域模. 直到 r 接近 $0.15a$ 时出现单极模(曲线 a). 此缺陷是由于减少介质材料所引起的, 故缺陷频率靠近带隙频率比较低的一端. 进一步减少中央柱的尺寸, 单极模的谐振频率随着 r 的减少而增加, 直到当 $r = 0$ (对应完全移去中央柱情况), 缺陷模频率达到 $f = 0.380c/a$. 若逐渐增大缺陷尺寸, 由于是增加介质引起缺陷模, 所以从 $r = 0.25a$ 开始在带隙的较高频率一端出现双简并偶极模(曲线 b), 这个双简并偶极模频率随着缺陷半径的增加而降低, 直到 $r = 0.40a$ 时消失在带隙所对应的较低频率. 进一步增加缺陷的半径, 大量的缺陷模式从带隙的较高频率一端产生, 同样也消失在带隙的较低频率一端.

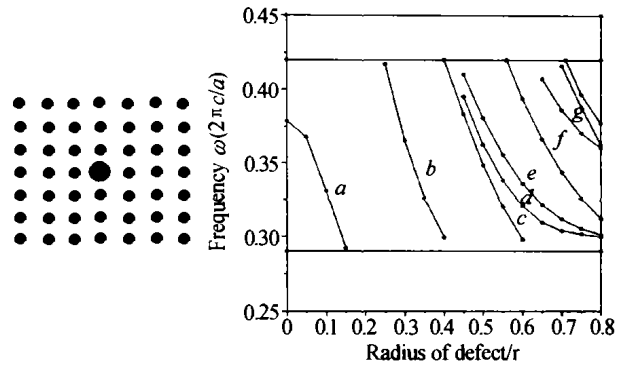


图2 缺陷模的频率和中央介质柱半径的关系. 当 $r = 0.2a$ 对应理想的周期结构, 当 $r = 0$ 对应中央柱完全移走的情况, 水平线表示带隙的边界

Fig. 2 The eigenfrequencies of the defect modes for different radius in a square array of dielectric rods. The defect is introduced by varying the radius of a single rod. The horizontal lines indicate the edges of the band gap

随后出现的是两个四极模(曲线 c 和 d), 二阶单极模(曲线 e), 双简并六极模(曲线 f)等.

图3给出由二维平面波展开法, 采用超胞法计算出当改变中央缺陷尺寸, 对应 $r = 0.1a, 0.3a, 0.6a$ 时的谐振腔的模式场分布. (a) 当 $r = 0.1a, \omega a/2\pi c = 0.331$ 时所对应的单极模及 $r = 0.6a, \omega a/2\pi c = 0.336$ 时对应二阶单极模; (b) 当 $r = 0.3a, \omega a/2\pi c = 0.365$ 时对应两个偶极模; (c) 当 $r = 0.6a, \omega a/2\pi c$ 分别为 0.298 和 0.321 时对应两个四极模; (d) 当 $r = 0.6a, \omega a/2\pi c = 0.394$ 时对应两个六极模. 不同的模式表现出不同的旋转对称性. 根据它们场分布的旋转对称性, 将腔的模式分为四种: 偶极模、四极模、六极模和单极模. 偶极模在旋转 360° 与始态分布重合; 四极模在旋转 180° 后与始态重合; 六极模当旋转 60° 后, 而单极模在旋转 90° 后

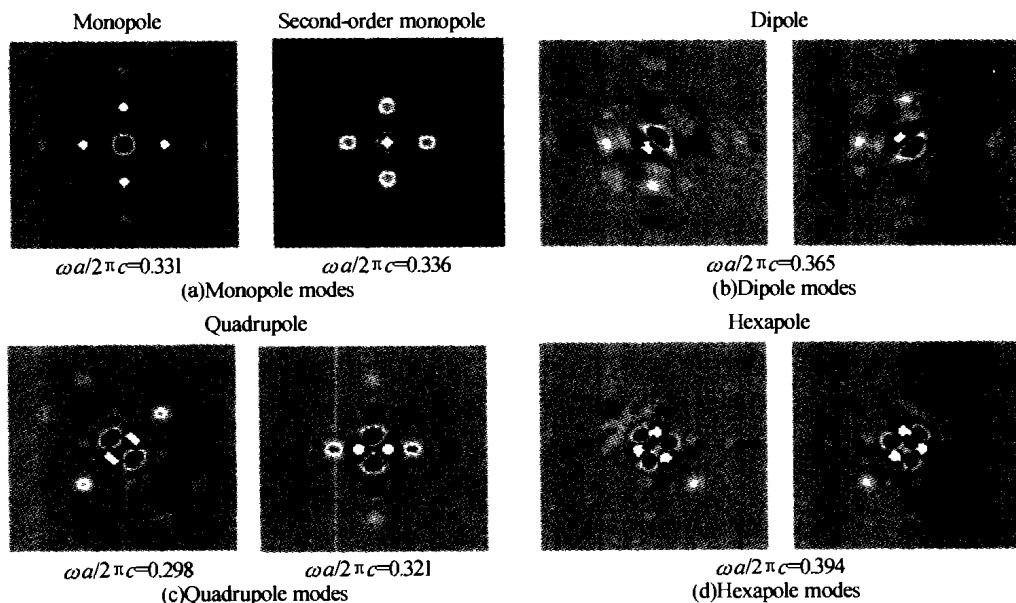


图3 改变二维正方形格子单缺陷腔缺陷尺寸, 当 $r = 0.1a, 0.3a$ 和 $0.6a$ 时得到四种场分布模式

Fig. 3 Electric-field distributions of four resonant modes in the 2D square photonic band gap single defect cavity with $r = 0.1a, 0.3a$ and $0.6a$

皆与它们自身的初始模式场分布相同。

2 简并性分析

正方格子点缺陷光子晶体谐振腔存在 C_{4v} 对称性. 此处4表示晶体结构具有 $2\pi/4$ 的旋转不变性. 即如果围绕腔的中心旋转晶体 90° , 晶体结构的几何形状保持不变. 典型结构是方格子光子晶体激光器谐振腔. 对单缺陷 C_{4v} 对称群谐振腔的模式可通过求解下列哈密顿本征方程而得到

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

为了表示清楚, 在此采用狄拉克右括号表示谐振腔的模式, 不同的模式具有不同的旋转对称性.

本文使用平面波展开法计算出二维正方格子点缺陷光子晶体谐振腔可能的谐振模式, 图3给出了 C_{4v} 对称群光子晶体四种典型的模式分布. 这种方法有很大的优越性, 所有可能的来自基态的相互正交态(甚至在缺少简并模式的情况)都能获得. 然而, 由于平面波数的限制及相邻超胞之间的耦合, 可能无法得到其模式对应的频率准确值. 由群论可知, C_{4v} 对称群光子晶体谐振腔中应该存在双简并模, 但是它无法指出那种模式构成一对简并对. 根据图3中模式的形状似乎可以推测两个偶极模, 两个四极模和两个六极模分别构成简并对; 然而根据本文所选取的 r 值, 由平面波展开法计算出的对应频率值, 可知道两个偶极模及两个六极模简并, 无法得出两个四极模构成简并对.

以下根据二维光子晶体谐振腔模式的简单对称关系, 说明模式场分布的旋转特性与它们的简并性是密切相关的. 首先证明对偶极模和六极模存在二重简并, 单极模和四极模是非简并, 从而说明如何根据二维光子晶体谐振腔模式场分布的简单对称关系来区分简并对和非简并对.

2.1 简并模(偶极模和六极模)

对 C_{4v} 对称群谐振腔的模式, 哈密顿算符等效为 90° 旋转操作 \hat{R} , 即: $[\hat{\Theta}, \hat{R}] = 0$. 如果, $|u\rangle$ 是一个本征态, 则 $\hat{R}|u\rangle, \hat{R}^2|u\rangle, \hat{R}^3|u\rangle$ 仍是本征态, 满足同样本征方程. 通常, 这四种状态不是线性独立, 存在一个相互正交小于4的状态数. 这些态构成的基可以表示为 $\hat{R}^p|u\rangle$ 的线性组合. 如果存在两个这样的基, 则称二重简并模.

首先简单证明二维 C_{4v} 对称群光子晶体谐振腔存在二重简并模.

任意给定态 $|u\rangle$, 寻找一个形式为 $|v\rangle = (\hat{R}^p + \hat{R}_q)|u\rangle$ 的另一个状态, 它与 $|u\rangle$ 正交. 即满足

$$\langle v|u\rangle = \{(\hat{R}^p + \hat{R}^q)|u\rangle\}^T |u\rangle = \langle u|(\hat{R}^{4-p} +$$

$$\hat{R}^{4-q})|u\rangle = \langle u|\hat{R}^{4-p}|u\rangle - \langle u|\hat{R}^{2-q}|u\rangle \quad (2)$$

为保证差值为零, 则 p 和 q 的可能值为: $(p, q) = (4, 2), (3, 1), (2, 4), (1, 3)$. 由于 $\hat{R}^2 = -I$ 和 $\hat{R}^4 = I$, 在每一组 p 和 q 的可能值中, 当 $(p, q) = (4, 2)$ 或 $(2, 4)$ 时, 得到 $|v\rangle = 0$. 故其 $|v\rangle$ 态只能表示成 $\hat{R}|u\rangle$ 和 $\hat{R}^3|u\rangle$ 的线性组合.

如果 $|v\rangle$ 在线性组合中含有三项, 即表示为: $|v\rangle = (\hat{R}^p + \hat{R}^q + \hat{R}^r)|u\rangle$, 为了满足 $\langle v|u\rangle = 0$, $|v\rangle$ 中至少一项必须为 $\pm I$, 否则它们中的两项必须相等或者为零. 如果 $\hat{R}^r = \pm I$, 为了使内积 $\langle v|u\rangle = 0$, \hat{R}^p 或 \hat{R}^q 必须为 $\mp I$. 这就意味 $|v\rangle$ 只能包含两项. 故无法得到形式为 $|v\rangle = (\hat{R}^p + \hat{R}^q + \hat{R}^r)|u\rangle$ 的正交态. 同理, 可以证明对于态 $|u\rangle$, 不存在线性组合中多于三项的正交态: $|v\rangle = (\hat{R}^p + \hat{R}^q + \hat{R}^r + \hat{R}^s + \dots)|u\rangle$. 因此, 对于 C_{4v} 对称群光子晶体只存在二重简并模.

任意给定态 $|A\rangle = |u\rangle$, 对具有 C_{4v} 群对称的光子晶体取与 $|u\rangle$ 正交态

$$|B\rangle = (\hat{R}^3 - \hat{R})|u\rangle \quad (3)$$

则 $|A\rangle$ 和 $|B\rangle$ 之间的内积为

$$\langle A|B\rangle = \langle u|(\hat{R}^3 - \hat{R})|u\rangle = \{\langle u|\hat{R}^3|u\rangle - \langle u|\hat{R}|u\rangle\} = 0 \quad (4)$$

由于 $\hat{R}|u\rangle$ 和 $\hat{R}^3|u\rangle$ 相对于 $|u\rangle$ 态来说模式分布相同, 故上式差值为零. 对 C_{4v} 群可给出下列 2×2 不可约矩阵表示, 这些矩阵表示也满足群旋转操作乘法表.

$$\hat{R} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{R}^2 \leftrightarrow \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \hat{R}^3 \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{R}^4 \leftrightarrow I \quad (5)$$

由不可约表示得: $\hat{R}^3 - \hat{R} = -2\hat{R}$. 故对给定态, 经过 90° 旋转操作则得到其正交态. 以上证明了对具有 C_{4v} 群对称的光子晶体谐振腔模式分布中存在二重简并模, 且二重简并模的 90° 旋转态与其形成一简并对. 由图3(b)和(d)可以清楚地看出, 对偶极模和六极模存在二重简并, 其 90° 旋转态与其形成一简并对.

2.2 非简并模(单极模和四极模)

如果在旋转操作 \hat{R}^2 和 \hat{R} 作用下所得到的模式分布与原始态相同, 则此模式为非简并模. 如图3中的单极模和四极模属于这两种情况. 对四极模, 由于 $\hat{R}^2 = I$, 仅有两种旋转操作: $\hat{R} = -I$ 和 $\hat{R} = I$. 对于给定的 $|u\rangle$, $|v\rangle = (\hat{R}^p + \hat{R}^q)|u\rangle$ 要么与 $|u\rangle$ 是同一态, 要么是零. 故不能构造出任何与 $|u\rangle$ 正交的态. 同理, 对单极模, 由于 $\hat{R} = I$, 很明显也是非简并的. 所以对二维正方格子光子晶体四极模和单极模是非简并的. 故可以通过简单的考察模式的对称性确定

其简并性. 这就说明如图 3(a) 和 (c) 所计算出的四极模和单极模应该非简并模.

3 结论

我们将对称关系应用于二维具有 C_{4v} 对称性的光子晶体谐振腔的模式研究. 可以证明对 C_{4v} 谐振腔存在双简并模式, 谐振模可分为双简并模(如: 偶极和六极模式)和非简并模(四极和单极模). 这种分类通过考察其对称关系很容易得到. 首先, 考察它们的旋转对称性. 即, 单极模旋转 360° 后与它的初始状态重合, 四极模旋转 180° 与它的初始状态重合, 六极模旋转 120° 与它的初始状态重合, 偶极模直到旋转 360° 才能与其初始状态重合. 我们可以根据这些对称关系将谐振腔的模式进行分类, 并根据 C_{4v} 对称群光子晶体谐振腔模式对称关系确定二维光子晶体谐振腔模式的简并性:

(i) 任意给定态 $|u\rangle$, 若在旋转操作 \hat{R} 作用下所得到的模式场分布与原始态相同, 则此模式为非简并模, 对应如图 3(a) 表示的非简并单极模.

(ii) 对一个给定态 $|u\rangle$, 若在旋转操作 \hat{R}^2 作用下所得到的模式场分布与原始态相同, 则此模式为非简并模, 对应如图 3(c) 表示的非简并四极模.

(iii) 若不满足 (i) 和 (ii), 对 C_{4v} 对称性的光子晶体谐振腔存在二重简并模, 二重简并模的 90° 旋转态与其形成一简并对, 对应如图 3(b)、(d) 表示的简并偶极和六极模.

本文利用对称关系研究谐振腔的模式, 这种方法的一个很重要的应用是可以通过考察模式的对称性排除掉一些非简并模. 当系统选取特殊参数情况下出现偶然简并^[13], 如: 对本文的二维正方形格子单缺陷腔, 当对应 r 接近 $0.42a$ 时, 两个四极模的模式频率相等, 并且模式分布皆为四极模. 在这种情况下通过考察模式的对称性, 很容易排除这种偶然模式简并. 将谐振模分成简并对和非简并对, 这样的分类也能够帮助分析实验结果, 预测谐振模的简并分裂情况.

由模式场分布对称关系将二维光子晶体模式进行简并性分析, 区分出简并对和非简并, 方法简单直观. 我们相信本文的结果对其它具有对称分布的模

式分析有一定的理论和实验指导意义.

参考文献

- 1 McCalmont J S, Sigalas M M, Tuttle G, *et al.* A layer-by-layer metallic photonic band-gap structure. *Appl Phys Lett*, 1996, **68**:2759 ~ 2761
- 2 Fan S, Villeneuve P R, Joannopoulos J D. Channel drop tunneling through localized states. *Phys Rev Lett*, 1998, **80**:960 ~ 963
- 3 Chen J C, Hans H A, Fan S, *et al.* Optical filters from photonic band gap air bridges. *J Lightwave Technol*, 1996, **14**:2575 ~ 2580
- 4 朱志宏, 叶卫民, 季家榕, 等. 光子晶体滤波特性分析. *光子学报*, 2004, **33**(6): 700 ~ 703
Zhu Z H, Ye W M, Ji J R, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(6): 700 ~ 703
- 5 Ouyang Z B, An H N, Ruan S C, *et al.* Promoting the coupling efficiency of waves by a 2D photonic crystal. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(1): 69 ~ 71
- 6 Villeneuve P R, Fan S, Joannopoulos J D. Microcavities in photonic crystals: Mode symmetry, tenability and coupling efficiency. *Phys Rev*, 1996, **B54**:7837 ~ 7841
- 7 Foresi J S, Villeneuve P R, Ferrera J, *et al.* Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides. *Nature*, 1997, **390**:143 ~ 145
- 8 Ainter O J, Husain A, Scherer A, *et al.* Room temperature photonic crystal defect lasers at near-infrared wavelengths in InGaAsP. *J Lightwave Technol*, 1999, **17**:2082 ~ 2088
- 9 Fan S, Villeneuve P R, Joannopoulos J D, *et al.* Theoretical analysis of channel drop tunneling processes. *Phys Rev*, 1999, **B59**:15882 ~ 15892
- 10 Meade R D, Rappe A M, Brommer K D, *et al.* *Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials.* *Phys Rev*, 1993, **B48**:8434 ~ 8438
- 11 Kazuaki Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals.* Springer, 2001. 13 ~ 21
- 12 Sakoda K, Shiroma K. Numerical method for localized defect modes in photonic lattices. *Phys Rev*, 1997, **B56**:4830 ~ 4835
- 13 约什(王锡跋, 刘秉正等译). *物理学中的群论.* 北京: 科学出版社, 1982. 172 ~ 175
Joshi A W. *Elements of group Theory for Physicist.* Beijing: Academic Press, 1982. 172 ~ 175

Degeneracy Analysis Based on the Symmetry Relations of Two-Dimensional Photonic Crystal Resonant Modes

Sun Zhihong

Department of Physics, Lanzhou Institute of Technology, Lanzhou 730050

Received date: 2004-06-23

Abstract Various resonant modes of single-point defects two-dimensional square dielectric photonic crystals cavity are calculated by using the plane-waves expansion method. The degeneracy of resonant modes is investigated based on the symmetry relation of the cavity modes. The C_{4v} symmetry photonic crystal cavity tends to have either a pair of doubly degenerate modes or non-degenerate modes. Dipoles and hexapoles are doubly degenerate modes, a quadrupole and a monopole are non-degenerate modes, and the 90° rotated state is its orthogonal state for doubly degenerate modes. Thus, we can determine the degeneracy of modes by simply inspecting mode symmetries.

Keywords Photonic crystal; Degeneracy; Plane-waves expansion method; Resonant modes

Sun Zhihong was born in 1965. She graduated from University of Science and Technology of China, and got M. S. degree in 1988. Now, she is an associate professor of Department of Physics in Lanzhou Institute of Technology. Her major research field is photonic crystal.

