

南京大学

---

硕士学位论文

---

介电体超晶格光学性质的研究

---

姓名：陈延彬

---

申请学位级别：硕士

---

专业：凝聚态物理

---

指导教师：朱永元;祝世宁

---

2001. 6. 1

## 摘要

准位相匹配材料和光子晶体的研究是当今科学界关注的热点问题，这不仅在于经典波（光波和声波）在这二种人工超结构中的传播和激发是一个非常基本的科学问题，而且这二种人工结构有着广泛的应用前景。本论文在这二个领域中做了如下的工作：

- (1) 讨论了在一维三组元 Fibonacci 准周期光学超晶格中的二次谐波和三次谐波的产生，并在实验上成功地制备出具有该结构的钽酸锂光学超晶格。在这个结构中实现了多波长的二次和三次谐波的产生，在其倍频谱中清楚地显示出该结构具有自相似性。
- (2) 理论上研究了由理想金属构成的二维光子晶体。理论计算表明在该系统中，只要满足金属的占空比超过一定的值，在该系统中总是能够实现二维光子晶体全带隙。
- (3) 理论上研究了由超导体的圆柱构成的二维光子晶体的能带。计算表明该系统的能带依赖与温度，在一定的温度范围，该光子晶体的能隙可以随温度调节。
- (4) 利用金属的表面非线性光学性质和二维金属光子晶体的宏观周期性可以实现二次谐波的有效产生，我们利用 Green 函数和平面波展开方法对这一问题进行了理论研究，所得出的结果和倍频光在一维光学超晶格中的产生的结果非常相近。

## Abstract

Recently, researches on dielectric superlattices (including quasi-phase-matching material and photonic crystals) become hot topics. This is so due to the following facts: the propagation and generation of the classic waves (includes sonic and electromagnetic waves) in dielectric superlattices is a basic problem in science, and these materials will have many promising uses in future. In this thesis, some works have been done which are described as follows:

[1] We studied the second harmonic and third harmonic generation in three-component Fibonacci quasi-periodic optical super-lattice and fabricated Lithium Tantalate optical superlattice with this structure. The corresponding optical experiments show that the multiple wavelength's second harmonic generation and third harmonic generation can be realized in this structure. The intrinsic self-similarity in three-component Fibonacci structure can be shown clearly in the second harmonic generation spectrum.

[2] The two-dimensional perfect metal photonic crystals were studied theoretically. Calculations show that in this system, if the filling ratio of metal is larger than a threshold value, the complete photonic band gap can be realized in this system.

[3] The energy band of two-dimensional photonic crystals composed by superconductor cylinders is studied theoretically. The energy band in this system is dependent on the temperature. In a temperature range, the gap in this system can be tenable through changing temperature.

[4] By means of the surface nonlinearity in the metal and the macroscopic periodicity in two-dimensional metal photonic crystals, the second harmonic generation can be realized efficiently. We studied this problem theoretically with the help of the Green

function and plane wave expansion. The main features of the second harmonic generation in two-dimensional metal photonic crystals are the same as those of the second harmonic generation in one-dimensional optical superlattice.

## 第一章 引言

波的传播是物理学中一个经典问题。固体物理学从根本上说研究的是电子波和晶格振动(格波)在周期结构中的传播[1]。由于周期结构的存在,当波矢接近 Brillouin 区边界时,形成 Bragg 反射,相应的波不能够在晶格中稳定传播,产生所谓的带隙。根据带隙的大小,可以将晶体分成绝缘体,半导体,导体。波在周期结构中的传播有丰富的物理内涵,同样波在有缺陷的晶格或者完全无序的结构中的传播也具有丰富的物理内容[2]。波在有缺陷的晶格中可以形成缺陷态,在无序的结构中会形成 Anderson 局域态,等等。

在过去的近 80 年间,人们已经对量子波在完整晶体,缺陷晶体,无序晶体中的传播的研究取得了很大的进展。近二十年来,人们把研究量子波的方法用于研究经典波(光波,声波)在完整的、带有缺陷的、无序的人工超晶格系统中的传播问题[3, 4, 5, 6, 7]。典型的人工超晶格系统之一是介电体超晶格,按所调制的物性的不同可分为如下几类。如果受调制的是二级非线性光学系数(例如由一均匀铁电材料构成,但是其自发极化矢量受到人工调制),则这样的超晶格系统被称为准位相匹配材料;如果受调制的是折射率(该系统由二种或者二种以上的介质构成),那么这样的系统被称为光子晶体;如果受调制的是弹性系数,则被称为声子晶体。现在分别介绍准位相匹配材料和光子晶体研究领域的一些进展。

就准位相匹配材料的研究而言,自 1962 年 Bloembergen 提出准位相匹配理论以来,准位相匹配材料的制备和物理效应的研究一直为物理学界、材料界所关注[8]。准位相匹配理论的核心是:利用人工超晶格所提供的倒格矢匹配非线性光学过程中的位相失配,使该非线性光学过程能够有效的产生。应用最广泛的准位相匹配材料是铁电体光学超晶格,在该超晶格中自发极化矢量被人工调制,最终导致在该超晶格中的奇数阶张量被周期或准周期调制。从 80 年代初期我们组就开始进行铁电体超晶格中物理效应的研究工作,并利用提拉法制备出周期结构的铌酸锂(LN)光学超晶格,初步验证了 Bloembergen 的准位相匹配理论。80 年代末将准晶的概念引入到铁电体超晶格中。与周期结构的铁电体超晶格相比,准周期结构的超晶格能够提供更多的倒格矢来匹配在该结构中发生

的非线性光学过程。理论计算表明：在准周期的铁电体超晶格中不仅能够实现多波长的倍频产生，而且在该结构中能够实现倍频和三倍频的级联耦合产生，并且这样实现的三倍频产生的效率与利用二块周期铁电体超晶格实现的同样的三倍频过程效率相当(这里的三倍频是这样产生的：一块产生倍频，另一块让倍频光与基波和频产生三倍频)[9]。90年代中期我们实验室在室温极化制备钽酸锂(LT)超晶格方面取得进展，成功地制备出具有二组元 Fibonacci 准周期结构的准晶超晶格，在该超晶格中实现了效率达 23% 的三倍频产生，第一次证明了准晶在非线性光学中具有应用前景[10]。在这个基础上，我们组又对一系列其他结构的准晶超晶格进行了实验和理论研究，比如：推广的 Fibonacci 结构的准晶超晶格里的倍频、三倍频的研究，Thue-Morse 结构中的相应过程的研究[11, 12]。在国际上该领域的研究至今依然非常热门：比如将一维准位相匹配方案推广到高维空间的准位相匹配，实验中已经观察到高达 60% 的非共线二次谐波在二维六角结构的铌酸锂(LN)光学超晶格中产生[13]；在准位相匹配材料中的光孤子问题等等。

对于光子晶体的研究而言，大致上可以分为线性效应的研究和非线性效应的研究。对于线性效应，最关心的是在什么材料和结构中能够存在近红外光、可见光波段的光子全带隙(即光在各个方向上的传播都受到抑制)[14]。到现在为止这一领域的工作取得的进展比较小。因为对于微加工而言，由于所涉及的加工尺度已经达到亚微米，是半导体微加工的极限，要加工成三维的有序结构将是比较困难的[14]。就材料而言，由于出现全带隙要求折射率的对比必须达到一定的值(比如对于金刚石结构的三维光子带隙，介质散射球与背景的折射率的比值必须大于 2.15，光子全带隙才能出现[15])，在可见光、近红外光波段时其折射率能达到要求的材料屈指可数。目前取得比较大进展的是通过波导型的二维光子晶体实现对红外波段的光( $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$ )实现三维限制。这一方案的主要思想在于：在二维光子晶体中引入一个缺陷模式实现二维限制，在剩下的那一维方向利用光波导对光进行限制，缺陷模式对应的光波满足光波导的零阶模式，这样就在一个二维结构中实现了对光波的三维限制[16, 17, 18]。虽然实现全带隙是线性光子晶体所关注的焦点，但是利用光子晶体作为其他功能器件的工作也做了不少。利用具有特殊外场响应的材料作为光子晶体的基本单元

实现功能器件,比如利用液晶物质的折射率能够随外界电场变化(外加电场诱导液晶从无序相到向列相的转变)实现光子带隙的可调等等[19, 20, 21]。

对于光子晶体的非线性效应的研究也比较引人注目,构成这种光子晶体的基元至少要有一种具有非线性光学效应(比如二级非线性光学效应、Kerr 效应等等)。在光子晶体中非线性效应的研究中倍频的产生研究得较清楚。就倍频产生的机制而言可以概括为:基元提供倍频产生的源,而周期结构使得这些单个的倍频产生能够相干叠加,从而有效地实现频率转换。具体的例子是空气柱在钽酸锂的母体里排成六角点阵中可以实现有效的倍频转换[22]。

本论文的工作是在上述背景下进行的。论文的第一部分,我们推广了在二组元 Fibonacci 结构的准周期超晶格中的工作。三组元 Fibonacci 准周期结构是二组元 Fibonacci 准周期结构的自然推广,我们计算了在该结构中的倍频和三倍频产生并成功地制备出具有该结构的钽酸锂(LT)光学超晶格。非线性光学实验表明:在三组元 Fibonacci 准周期光学超晶格中能够实现多波长的倍频和三倍频产生,倍频谱可以清楚地显示出在该准周期结构中固有的自相似性。理论计算和实验结果符合得都很好。论文的第二部分,对二维光子晶体的线性和非线性效应进行了较为细致的理论研究。详细地推导了用于二维完整光子晶体能带计算的平面波展开方法[23],推导了用于二维有限光子晶体透射谱计算的多重散射方法[24],并编制了相应的程序。利用这二个程序计算了一些系统的能带图和透射谱,如:含有一个缺陷的有限二维光子晶体的缺陷模式和一些普通介质构成的光子晶体的透射谱和能带图;由理想金属构成的有限二维光子晶体的透射谱,计算表明当金属的占空比超过一定的值,具有全带隙的二维光子晶体在该系统中是可以实现的;利用超导体作为光子晶体的组成基元,计算了超导体柱子在空气中排成二维正方结构的系统的能带图,结果表明它的能带可以随温度的变化而变化,在一定的温度范围可以对光子晶体的带隙进行调节。最后我们利用平面波展开方法和 Green 函数方法,研究了金属光子晶体中金属表面的二次谐波的相干产生的可能性,结果和一维光学超晶格中的情况类似[19]。

## 【参考文献】

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, ed. 6, 1996)
- [2] J. Ziman, *Models of disorder* (Cambridge, 1979)
- [3] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2059 (1987)
- [4] S. John, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2486 (1987)
- [5] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn, *Photonic Crystals* (Princeton, New York, 1995)
- [6] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus and I. Kim, *Science*, 284, 1819 (1999)
- [7] T. Suzuki and K. L. Yu. Paul, *J. Mech. Phys. Solids*, 46, 115 (1998)
- [8] M. M. Fejer, G. A. Magel, D. H. Jundt and R. L. Byer, *IEEE J. Quantum Electron*, 28, 2631, (1992)
- [9] Y. Y. Zhu and N. B. Ming, *Phys. Rev. B*, 42, 3676 (1990)
- [10] S. N. Zhu, Y. Y. Zhu and N. B. Ming, *Science*, 278, 843 (1997)
- [11] X. J. Liu, Z. L. Wang, X. S. Jiang and N. B. Ming, *J. Phys. D: Appl. Phys*, 31, 2502 (1998)
- [12] Y. Q. Qin, Y. Y. Zhu, S. N. Zhu, G. P. Luo, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett*, 75, 448 (1999)
- [13] N. G. R. Broderick, G. W. Ross, H. L. Offerhaus, D. J. Richardson and D. C. Hanna, *Phys. Rev. Lett*, 84, 4345 (2000)
- [14] T. F. Krauss and Richard M. De. La. Rue, *Progress in Quantum Electronics* 23, 51 (1999)
- [15] K. M. Ho, C. T. Chan and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett*, 65, 3152 (1990)
- [16] S. Noda, A. Chutinan and M. Imada, *Nature*, 407, 608 (2000)
- [17] M. E. Zoorob, M. D. B. Charlton, G. J. Parker, J. J. Baumberg and M. C. Netti, *Nature*, 404, 740 (2000)
- [18] E. Chow, S. Y. Lin, S. G. Johnson, P. R. Villeneuve, J. D.

- Joannopoulos, J. R. Wendt, G. A. Vawter, W. Zubrzycki, H. Hou and A. Alleman, *Nature*, 407, 983 (2000)
- [19] S. W. Leonard, J. P. Mondia, H. M. Van Driel, O. Toader, S. John, K. Busch, A. Birner and U. Gosele, *Phys. Rev. B*, 61, 2309 (2000)
- [20] K. Busch and S. John, *Phys. Rev. Lett*, 83, 967 (1999)
- [21] P. Halevi and F. Ramos-Mendieta, *Phys. Rev. Lett*, 85, 1875 (2000)
- [22] K. Sakoda and K. Ohtaka, *Phys. Rev. B*, 54, 5742 (1996)
- [23] M. S. Plihal, A. A. Maradudin and P. Sheng, *Opt. Commun*, 80, 199 (1991)
- [24] L. M. Lie and Z. Q. Zhang, *Phys. Rev. B*, 58, 9587 (1998)

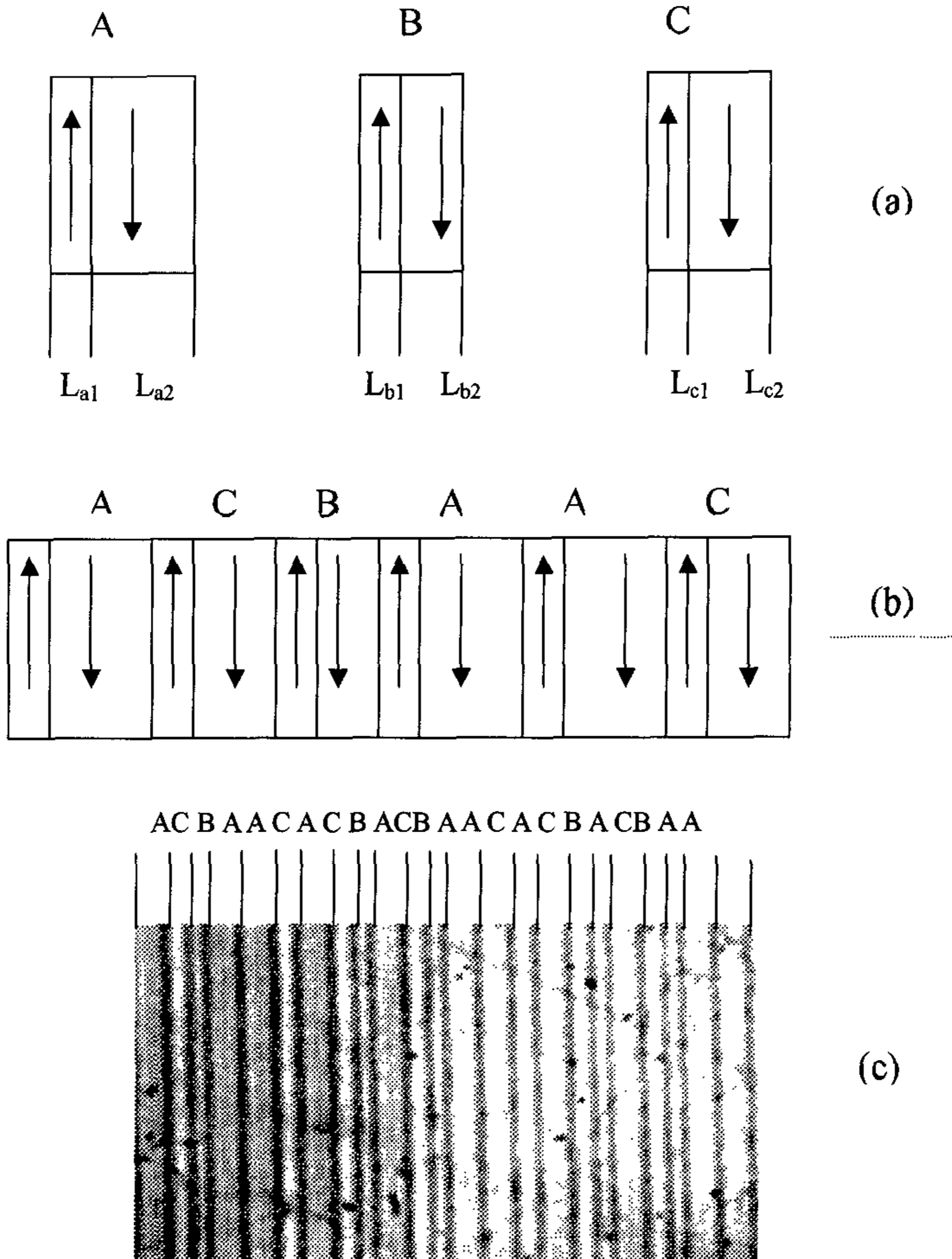
## 第二章 三组元 Fibonacci 准周期光学超晶格中 激光倍频、三倍频的研究

### § 2.1 历史回顾

自从 1962 年 Bloembergen 提出利用准位相匹配方案增强非线性光学效应以来, 科学界为了实现这一方案进行了不懈的努力。所谓的准位相匹配方案就是利用人工超晶格材料提供的一个倒格矢来补偿非线性光学过程中的波矢失配, 使相应的非线性光学过程能够有效地进行。最常见的准位相匹配材料是铁电体材料, 其自发极化方向周期性的反向。我们将其称之为光学超晶格。八十年代末期, 我们组将准周期引入到光学超晶格中, 理论计算表明二组元 Fibonacci 结构的光学超晶格能够实现倍频和三倍频的有效耦合。九十年代中期我们组在室温极化钽酸锂光学超晶格方面取得成功, 制备出具有二组元 Fibonacci 结构的钽酸锂光学超晶格, 并在实验上观测到转换效率达 23% 的三倍频, 表明了准晶有可能在非线形光学领域中具有应用价值[1]。之后我们组又对其他一些结构的光学超晶格进行了研究, 比如广义的 Fibonacci 光学超晶格、Thue-Morse 光学超晶格等等。应该指出准位相匹配材料的制备和科学研究依然是当今科学界非常关注的一个热点, 比如将一维准位相匹配理论推广到二维或高维空间, 实验上在二维六角结构的铌酸锂光学超晶格中已观察到效率达 60% 的非共线的二次谐波产生; 又比如准位相匹配材料中光孤子的产生等等。这些问题有着丰富的物理内涵和应用前景。本章的内容就是在这些工作的基础上和背景下进行的, 从理论和实验上研究了三组元 Fibonacci 结构的光学性质。三组元 Fibonacci 结构是二组元 Fibonacci 结构的自然推广, 它们在倒空间有非常相似的结构, 所以在三组元光学超晶格中应该能够实现许多在二组元 Fibonacci 光学超晶格中能够实现的类似过程。

### § 2.2 理论计算和实验研究

三组元 Fibonacci 准周期光学超晶格是二组元 Fibonacci 光学超晶格的自然推广。准位相匹配理论的核心是利用超晶格的倒格矢去补偿非线性光学过程



图(2.1) a.) 组成三组元 Fibonacci 光学超晶格的三个基本单元。B.) 三组元 Fibonacci 光学超晶格示意图。C.) 三组元 Fibonacci 钽酸锂光学超晶格的+C面腐蚀图。

中的波矢失配，由于三组元 Fibonacci 结构和二组元 Fibonacci 结构非常相近，所以在二组元 Fibonacci 光学超晶格中能够实现的光学过程（比如多波长下的倍频产生，耦合的倍频和三倍频级联产生）也应该能够在三组元 Fibonacci 光学超晶格中实现。基于这个想法，我们对三组元 Fibonacci 结构的特征和在该结构中的倍频和三倍频的产生进行了一些数值计算，之后进行了实验验证。

三组元 Fibonacci 序列可以按如下反复迭代的规则产生： $A \rightarrow AC, B \rightarrow A, C \rightarrow B$ 。即由 A 迭代得到 AC，由 AC 迭代得到 ACB，如此反复迭代我们就可以得到如下序列： $ACBAACACB\dots$ 。A, B, C 中任何一个基本单元均包括一对自发极化矢量相反的铁电畴。基元 A, B, C、三组元 Fibonacci 序列、以及实验制备出的三组元 Fibonacci 结构的钽酸锂光学超晶格 Y 面的腐蚀图分别如图 2.1(a)、2.1(b)、2.1(c) 所示。对比图 2.1(b) 和图 2.1(c)，可以看出最后制备出的三组元 Fibonacci 光学超晶格和预先设计的图样符合得非常好。关于室温极化光学超晶格的方法在我们以前发表的论文中已有详细介绍[8]，这里仅对图 2.1(c) 中所涉及到的参数说明如下：基元 A, B, C 的正畴长度~负畴长度分别为  $4.0\sim 13.7 \mu\text{m}$ ,  $4.0\sim 4.26 \mu\text{m}$ ,  $4.0\sim 8.1 \mu\text{m}$ 。

根据准位相匹配理论，二倍频和三倍频的有效产生必须满足如下二个匹配条件：

$$\Delta k_{\omega, \omega \rightarrow 2\omega} = k_{2\omega} - 2k_{\omega} - G_{m,n,l} = 0 \quad \text{倍频} \quad (2.1)$$

$$\Delta k_{\omega, 2\omega \rightarrow 3\omega} = k_{3\omega} - k_{2\omega} - k_{\omega} - G_{m',n',l'} = 0 \quad \text{三倍频} \quad (2.2)$$

式中的  $k_{\omega}, k_{2\omega}, k_{3\omega}$  分别代表基波光，倍频光和三倍频光的波矢，而  $G_{m,n,l}$  则代表三组元 Fibonacci 结构的倒格矢。根据理论推导，三组元 Fibonacci 结构中的倒格矢  $(m, n, l)$  可表示如下：

$$G_{m,n,l} = \frac{2\pi(m\eta_1 + n\eta_2 + l\eta_3)}{D} \quad (2.3)$$

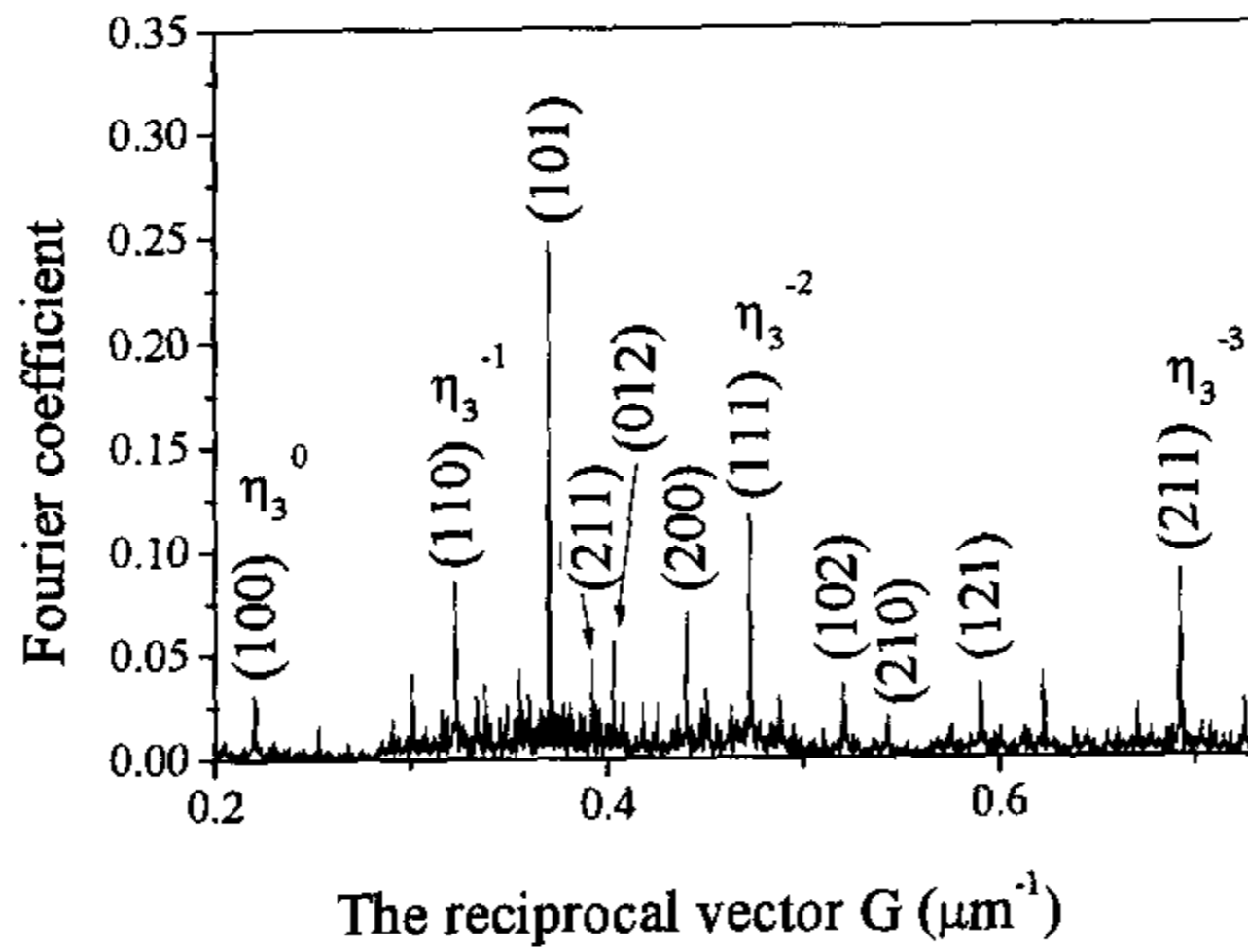
式中的  $m, n, l$  均为整数，而  $\eta_1, \eta_2, \eta_3$  是三个常数，它们分别近似为

$$\eta_1 = 1.0 \quad \eta_2 \approx 0.4656 \quad \eta_3 \approx 0.6823$$

$D$  是三组元 Fibonacci 结构的平均周期：

$$D = l_a \eta_1 + l_b \eta_2 + l_c \eta_3 \quad (2.4)$$

式中的  $l_a, l_b, l_c$  分别代表 A, B, C 基元的长度。我们数值计算了三组元 Fibonacci 结构的 Fourier 谱 (见图 (2.2))。数值计算得到的倒格矢的位置和公式 (2.3) 一致。图中的  $\eta_3^{-n}$  指标与准周期结构的自相似性质有关, 具体说明如下:



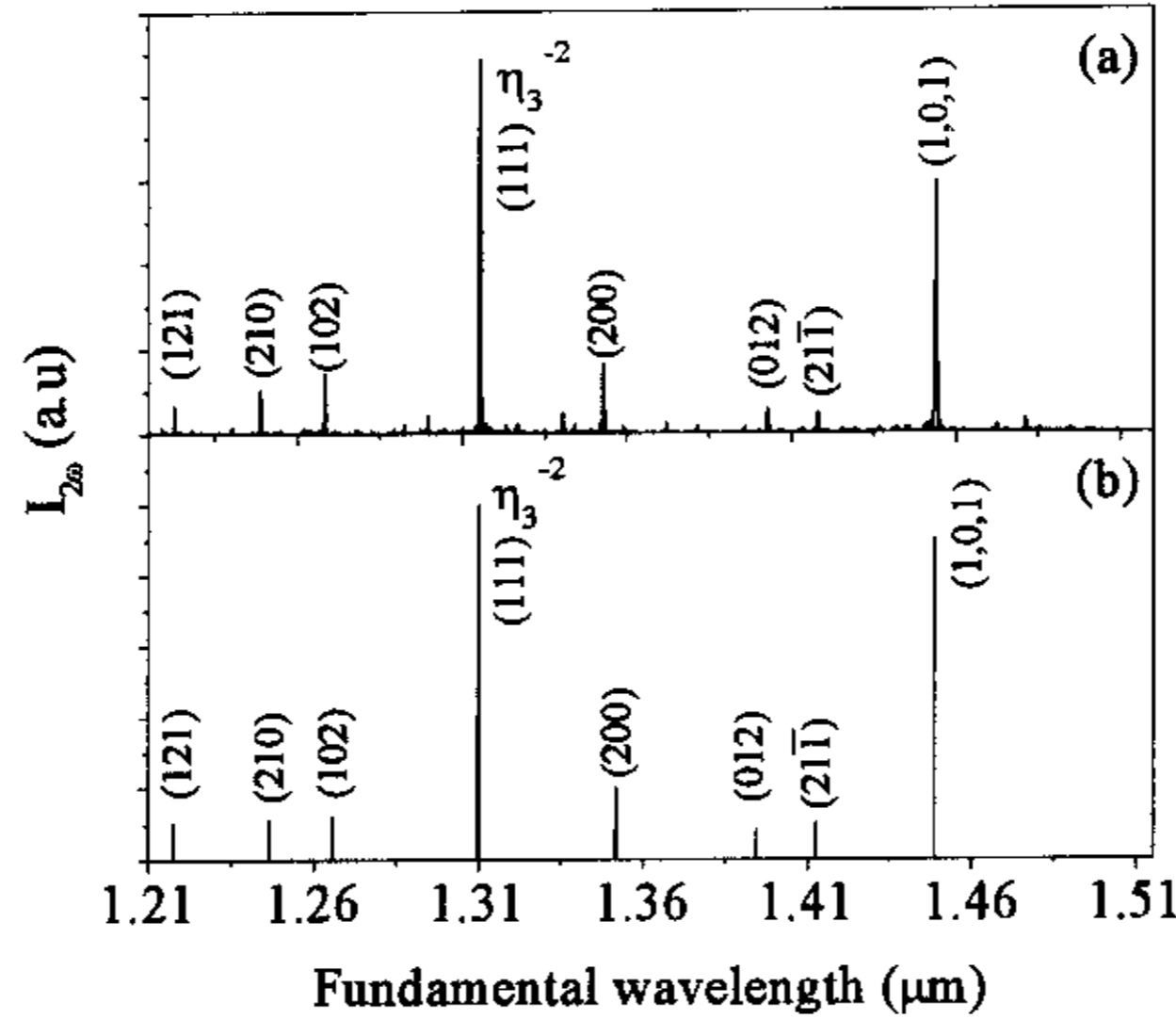
图(2.2) 三组元 Fibonacci 光学超晶格的 Fourier 谱。

研究表明准周期结构没有平移对称性, 但具有自相似性。具体表现在任一处于  $[\eta_3^p, \eta_3^{p-1})$  之间的倒格矢可以由一个在  $[\eta_3^{p+1}, \eta_3^p)$  中的倒格矢乘以因子  $\eta_3^{-1}$  而得到。比如(210) 可以由(101)得到, (121)可由(21 $\bar{1}$ )得到, 等等。这一自相似性在二组元 Fibonacci 结构中也存在, 不过在后一种情况下所乘的因子是黄金分割数 1.618。

对所制备的样品进行了激光频率转换实验。所用的基波光源是一个由 0.532  $\mu\text{m}$ , 10ns, 10Hz 的 Nd-YAG 激光泵浦的 OPO 系统, 基波光的可调范围是 1.20  $\mu\text{m}$  到 1.50  $\mu\text{m}$ , 平均功率是 9.0 mW, 在样品中的光束聚焦半径约为 80  $\mu\text{m}$ 。测得的倍频谱如图(2.3)所示, 相应的倍频转换效率从 2 % 到 20 %。图中倍频所使用的指标对应于所使用的倒格矢。为了便于比较, 理论计算的倍频谱同示于该图。比较这二张图可以看出, 理论计算和实验结果符合得非常好。由于基波光可调的范围的限制, 该图中仅部分显示出三组元 Fibonacci 结构中的自相似性。

在实验中我们观测到在二个波长处同时有二倍频和三倍频的产生, 它们分别

对应的基波波长是 1.347 和 1.442  $\mu\text{m}$ 。在这二个波长下的倍频光转换效率分别是 2.2 % 和 16.1 %，而相应的三倍频转换效率是 0.9 % 和 5.8 %。在这二个波长处用于匹配二倍频和三倍频的失配的倒格矢和相应的 Fourier 系数列于表(一)。根据我们以前的分析可以知道，三倍频的转换效率和所用到的倒格矢所对应的 Fourier 系数的关系如下式所示：



图(2.3) a.) 计算的在三组元 Fibonacci 光学超晶格中二次倍频谱。 b.) 实验测出的在三组元 Fibonacci 光学超晶格中的二次倍频谱。

三倍频的光强  $I(3\omega)$

$$I(3\omega) \propto \left( d_{33}^2 f(G_{m,n,l}) f(G_{m',n',l'}) \right)^2 \quad (2.5)$$

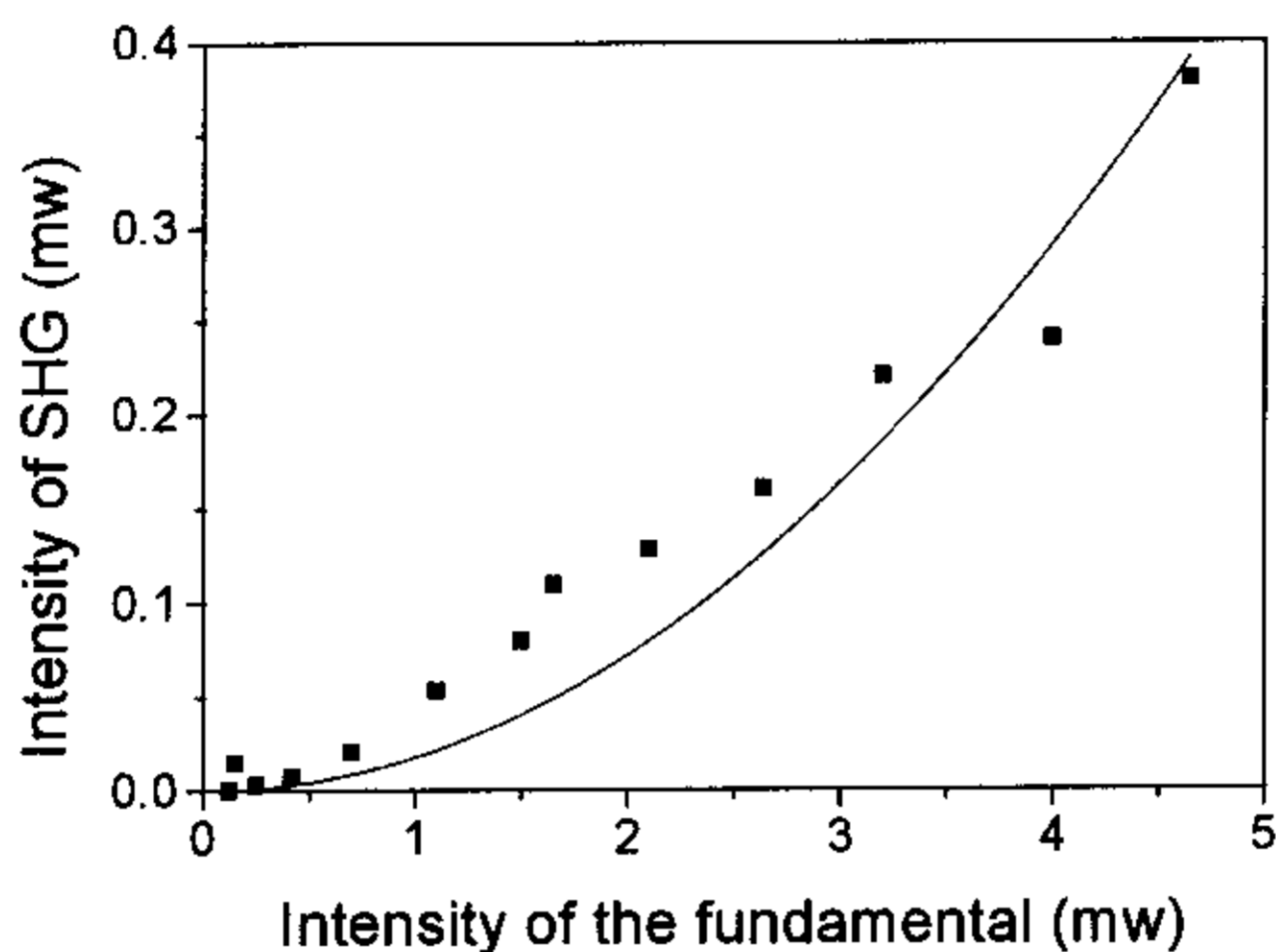
表格(一). 用于补偿二倍频和三倍频的波矢失配时所用的倒格矢以及相应的 Fourier 系数。

Measured fundamental Wavelength ( $\mu\text{m}$ )	The reciprocal vector used in SHG and its corresponding Fourier coefficient	The reciprocal vector used in THG and its corresponding Fourier coefficient
1.347	(200) 0.075	(206) 0.01
1.442	(101) 0.23	(204) 0.009

根据表(一)所列的 Fourier 系数可以得到在这二个波长下的三倍频的光强比为

$$\left( \frac{f(G_{200}) \cdot f(G_{206})}{f(G_{101}) \cdot f(G_{204})} \right)^2 = \left( \frac{1.0}{2.76} \right)^2 = 0.131 \quad (2.6)$$

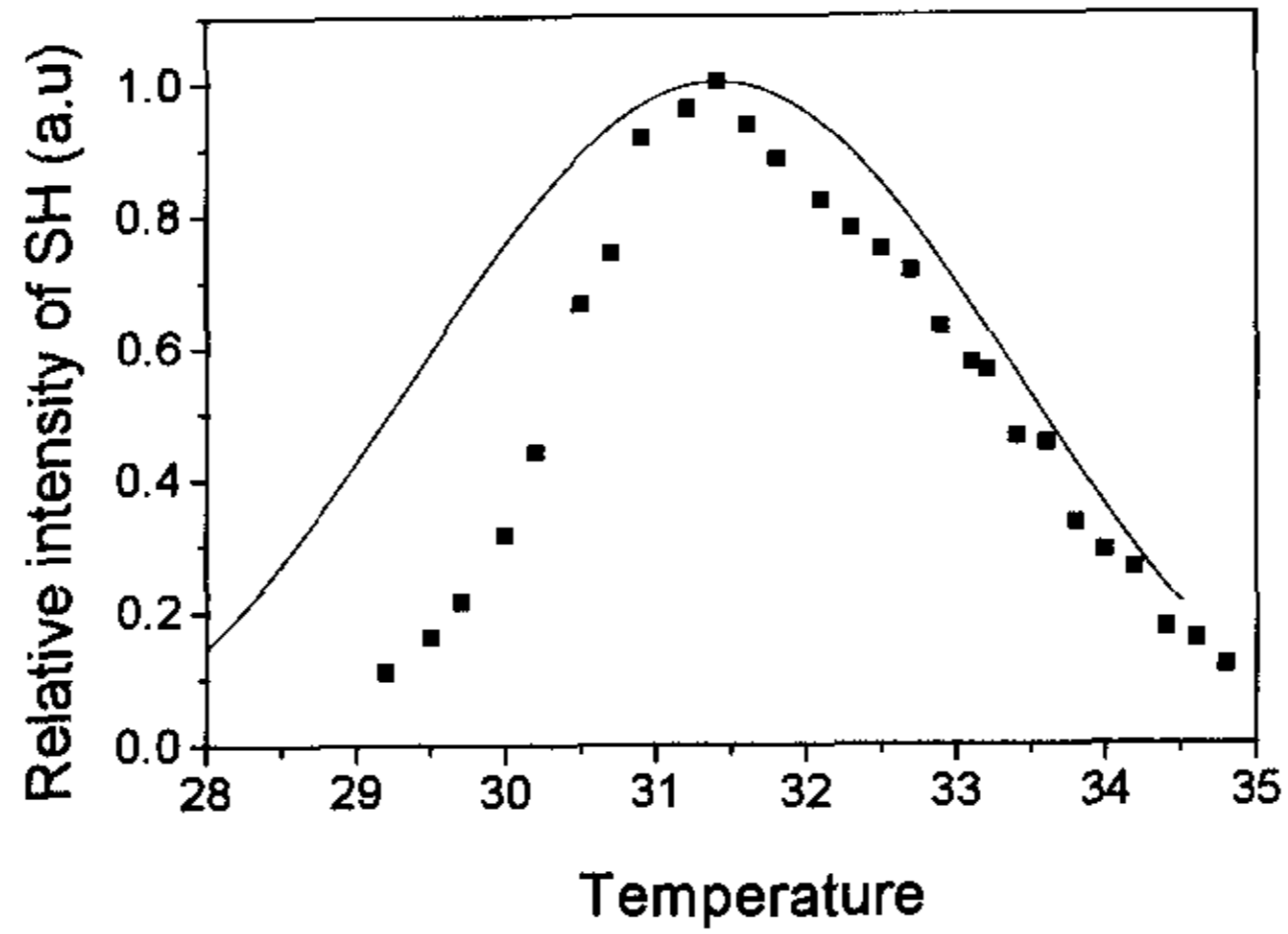
而实验测到的这个比值是 0.155，可以看出二者符合得还是比较好的。



图(2.4) 倍频光的光强和基波光强的关系。

对  $1.442\mu\text{m}$  处的倍频光的光强和基波光强的关系进行了测量，结果如图(2.4)所示。图中的方块点为实验所测数据，实线为最小二乘法所做的拟合曲线，可以看出倍频光的光强基本上满足如下关系

$$I(2\omega) \propto I^2(\omega) \quad (2.7)$$



图(2.5) 倍频光随温度变化的依赖关系。

对在这一波长下的倍频光的温度特性的测量如图(2.5)所示。图中的黑线是计算结果，方块是实验结果。实验结果表示最佳的匹配温度是 31.5 度，这和我们开始设计的最佳匹配温度是吻合的。

综上所述：在三组元 Fibonacci 结构的超晶格中，多波长的二倍频产生、倍频和三倍频的耦合产生均可以实现。其倍频谱可以反映出 Fibonacci 准周期结构固有的自相似性。测得的结果均和理论计算符合的比较好。

【参考文献】

- [1] S. N. Zhu, Y. Y. Zhu and N. B. Ming, *Science*, 278, 843 (1997)
- [2] N. G. Broderick, G. W. Ross, H. L. Offerhaus, D. J. Richardson and D. C. Hanna, *Phys. Rev. Lett*, 84, 4345 (2000)
- [3] V. Y. Shur, E. L. Romyantsev, E. V. Nikolaeva, E. L. Shishkin, M. M. Fejer and R. L. Byer, *Appl. Phys. Lett*, 76, 143 (2000)
- [8] S. N. Zhu, Y. Y. Zhu, H. F. Wang, Z. Y. Zhang and N. B. Ming, *J. Phys: D*, 28, 2389 (1995)
- [9] Y. Y. Zhu and N. B. Ming, *Phys. Rev. B*, 42, 3676 (1990)

### 第三章 平面波展开方法与多重散射方法的介绍

#### § 3.1 引言

光子晶体是最近十年内一个非常引人关注的问题。从科学角度而言，它提供了一个在实验上验证 Anderson 局域化等关于波传播的特性的实验系统；从实用角度而言，它可以实现许多传统光学器件难以实现的功能，诸如零域值激光器、实现光路的 90 度拐弯等等。对于一个实际的光子晶体，重要的问题是它是否具有全带隙，这涉及光子晶体能带结构。通常实验上直接测量的是光波沿一些特殊方向的透射谱，因此透射谱的理论计算同样很重要。由于光波的矢量性，在三维情况下进行能带和透射谱的计算是比较复杂的，因此本论文仅讨论二维光子晶体。

对于能带计算而言，最简单的是平面波展开方法。这种方法对于普通介电材料构成的光子晶体的能带的计算很有效，所得结果能和实验很好吻合。对于透射谱的计算，考虑到任何实验样品都是有限的，多重散射方法是一个比较好的方法。利用这一方法计算出来的结果与实验结果符合得也非常好。本章详细地推导了这二种方法。

#### § 3.2 平面波展开方法计算能带的介绍

平面波展开方法是能带计算方法中最简单的一种。研究光子晶体的能带结构需考虑电磁波的矢量性。本章不准备广泛地描述这一方法，仅推导在二维情况下如何计算一个光子晶体的能带。

电磁波可以分成二种模式。这二种模式是这样区分的：假设该光子晶体在 Z 方向是无限大的，而组成光子晶体的二种材料在 XY 平面按平面六种 Bravais 格子中的任何一种排列，如图(3.1)所示。

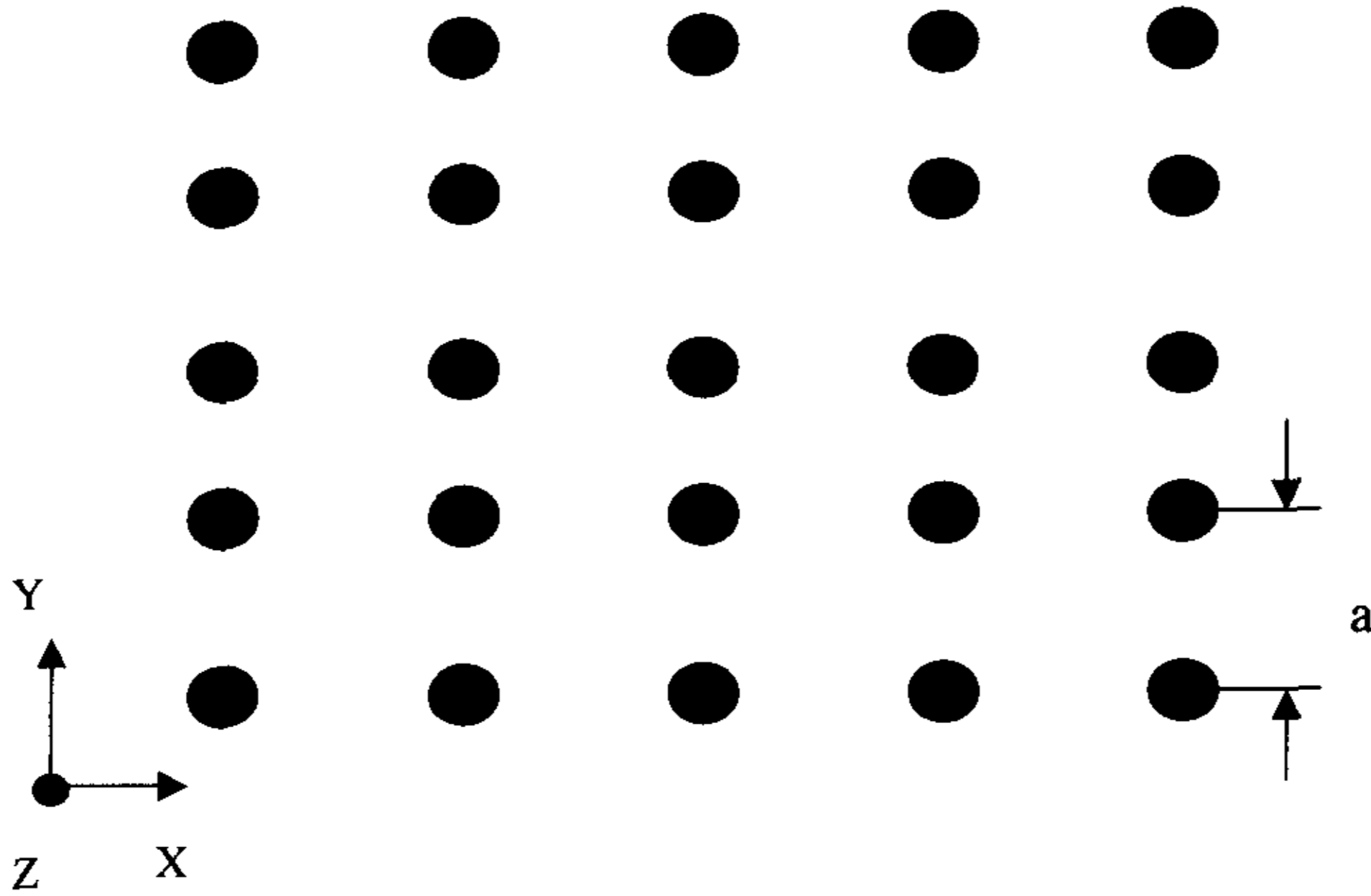


图 (3.1) 二维正方结构的光子晶体示意图

介质的形状可以是圆柱形，也可以是方形等。当电场的方向平行于 Z 方向时，这种电磁波称为 E 模，当磁场沿着 Z 方向时称为 H 模。虽然下面的处理方法对于磁性介质同样适用，这里我们忽略介质的磁性。以下的推导是按文献[1,2,3]中的方法进行的。对于这二种模式，我们从 Maxwell 方程组出发：

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}\end{aligned}\quad (3.1)$$

考虑到介质的介电函数(不考虑有各向异性)和磁性本构方程，我们有

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} \quad \vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \quad (3.2)$$

代入方程(3.1)，可以得到如下的波动方程：

$$\nabla \times \frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} \nabla \times \vec{H} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H} \quad (3.3)$$

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \epsilon_r(\vec{r}) \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E} \quad (3.4)$$

我们已假设波取  $\exp(-i\omega t)$  形式。在以下讨论中均仅考虑波的波矢方向在 XY

平面内。对于 E 模式，电场仅有 Z 分量，利用方程(3.4)，二重旋度变成普通的 Laplace 算符，方程(3.4)变为：

$$\frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) E_z = \frac{\omega^2}{c^2} E_z \quad (3.5)$$

考虑到介电函数是位置的周期函数，将之用倒格矢展开，

$$\frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}'} \varepsilon(\vec{G}' - \vec{G}) \exp(i(\vec{G}' - \vec{G}) \cdot \vec{r}) \quad (3.6)$$

同时由于周期介质的影响，在该介质中传播的波必须满足 Bloch 条件，即：

$$E_z = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_k(\vec{r}) \quad (3.7)$$

式中的  $\vec{k}$  是 Bloch 波矢，仅在第一个 Brillouin 区中取值。其中  $u_k(\vec{r})$  是位置的周期函数，也可以用倒格矢展开。

$$E_z = \sum_{\vec{G}} u_k(\vec{G}) \exp(i(\vec{G} + \vec{k}) \cdot \vec{r}) \quad (3.8)$$

将方程(3.7), (3.8) 代入方程(3.5) 可得系数  $u_k(\vec{G})$  满足的本征方程

$$\sum_{\vec{G}'} u_k(\vec{G}') \varepsilon_r(\vec{G}' - \vec{G}) (\vec{k} + \vec{G})^2 = \frac{\omega^2}{c^2} u_k(\vec{G}') \quad (3.9)$$

由于这个方程不是对称矩阵，我们用另一个量代表  $u_k(\vec{G})$

$$u_k'(\vec{G}) = |\vec{k} + \vec{G}| u_k(\vec{G}) \quad (3.10)$$

这样得到一个对称的本征方程

$$\sum_{\vec{G}'} u_k'(\vec{G}') \varepsilon_r(\vec{G}' - \vec{G}) |\vec{k} + \vec{G}| |\vec{k} + \vec{G}'| = \frac{\omega^2}{c^2} u_k'(\vec{G}') \quad (3.11)$$

这是求解 E 模式光子晶体能带的最基本的方程。

对于 H 模式而言，由于磁场仅有 Z 分量(3.3)式可以写成：

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} \frac{\partial}{\partial x} H_z(\vec{r}) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} \frac{\partial}{\partial y} H_z(\vec{r}) = -\frac{\omega^2}{c^2} H_z(\vec{r}) \quad (3.12)$$

将  $H_z(\vec{r})$  和介电函数按 Bloch 函数和倒格矢展开，可以得到关于  $H_z(\vec{G})$  系数的本征方程

$$\sum_{\vec{G}} \varepsilon_r(\vec{G} - \vec{G}') (\vec{k} + \vec{G}) \cdot (\vec{k} + \vec{G}') H_z(\vec{G}) = \frac{\omega^2}{c^2} H_z(\vec{G}') \quad (3.13)$$

该方程是一个对称方程。求解本征方程 (3.11) 和 (3.13) 可以得到光子晶体的能带关系图。

一个细节问题是如何计算介电函数的 Fourier 展开系数，通常的情况下该系数没有解析表达式。不过，对于圆柱的情况，介电函数的 Fourier 展开系数有解析解。排成正方点阵时该表达式为：

$$\varepsilon_r(\vec{G}) = \begin{cases} 2f \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) \frac{J_1(GR)}{GR} & |\vec{G}| \neq 0 \\ \frac{f}{\varepsilon_c} + \frac{1-f}{\varepsilon_b} & |\vec{G}| = 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

详细的推导可以在附录(1)中找到。式中的  $f$  是填充率，它定义为圆柱面积与原胞面积的比值。 $\varepsilon_c$ ,  $\varepsilon_b$  分别是圆柱和背景的介电常数。附录(1)中还给出了当圆柱排成石墨结构时介电函数展开的 Fourier 系数表达式。有了介电函数的 Fourier 系数后，就可以利用通用的对称矩阵的对角化程序计算 Bloch 波矢所对应的本征值。

需要强调的是如果组成光子晶体的介电材料其介电函数是一个常数并且大于零，那么利用平面波展开方法是可以很准确地计算出它的能带结构的，具体例子见下一章。但是当介电函数与频率有关时、或有虚部时，或是负数时，该方法的收敛性较差，此时必须利用别的方法进行能带计算，如 KKR 方法[8, 9, 10]。

### § 3.3 多重散射方法计算二维有限光子晶体透射谱的介绍

前面已经说过，和实验结果能够直接比较的是光子晶体的透射谱，而且应该考虑到任何实验系统都是个有限系统。透射谱的计算有转移矩阵法和时域有限差分方法等，本节介绍多重散射方法。下面的推导是按照 Z. Q. Zhang 发表的一系列文章进行的[4, 5, 6, 7]。

首先介绍一下这种方法计算的系统。整个系统是一个由  $N$  个相同柱子组

成的有限的光子晶体，这  $N$  个柱子中的任何二个均不互相重叠，柱子的半径为  $R$ 、而介电常数是  $\epsilon_r$ ，最近邻的柱子间的间距为  $a$ ，背景是另一种材料，其介电常数设为 1.0，当然这并不影响该方法的普适性。该系统如图(3.2)所示。

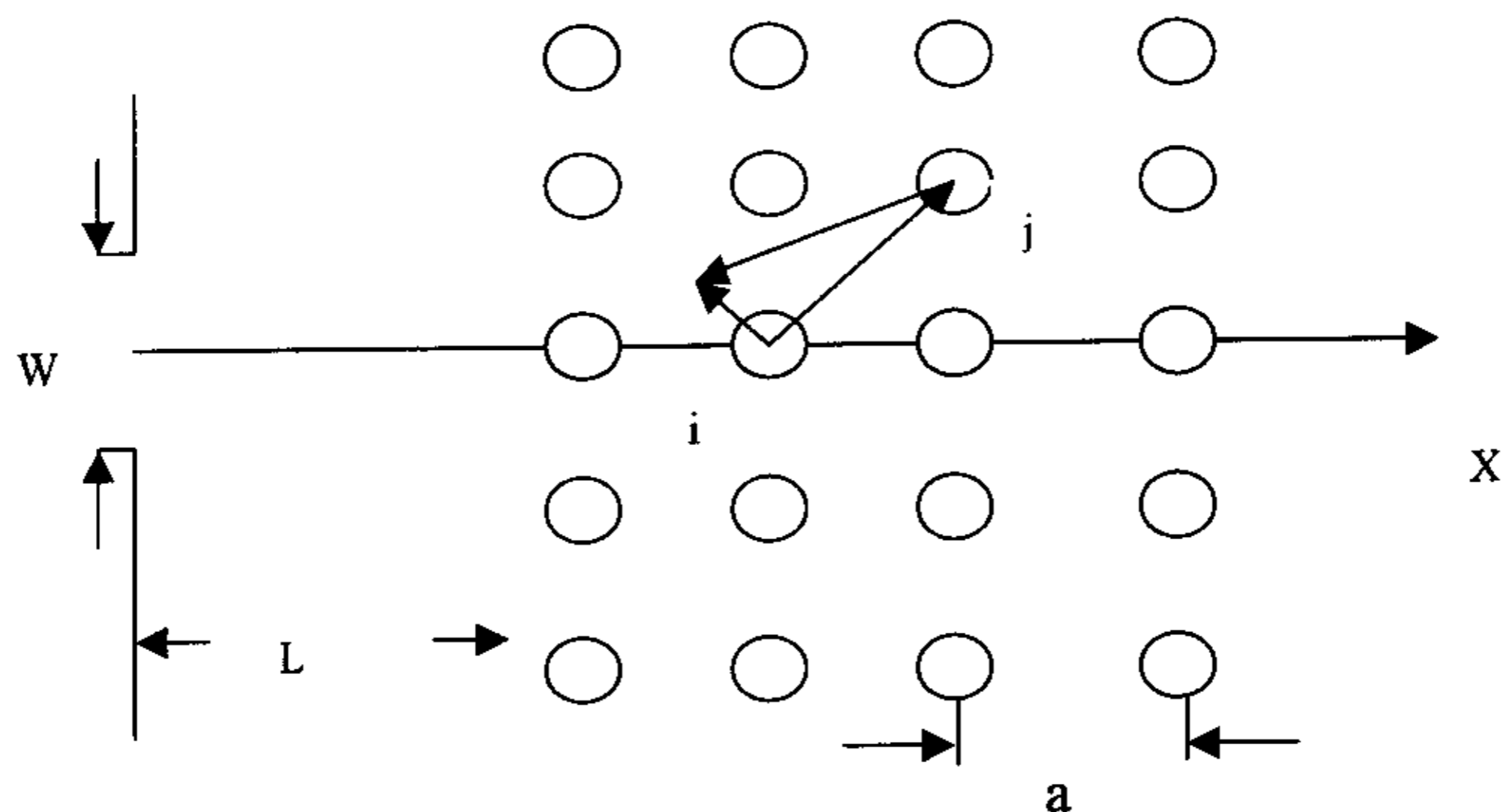


图 (3.2) 利用多重散射方法计算二维光子晶体透射谱的系统。

对于任何一个柱子，在柱内和柱外均满足 Helmholtz 方程。先考虑 E 模式，电场在园柱外满足如下方程：

$$\nabla^2 E_z + k_0^2 E_z = 0 \quad k_0^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (3.15)$$

在园柱内满足

$$\nabla^2 E_z + k^2 E_z = 0 \quad k^2 = \epsilon_r \frac{\omega^2}{c^2} \quad (3.16)$$

相应的解为：

$$E_z = \begin{cases} \sum_m A_m J_m(k_0 r_i) \exp(im\phi_i) + \sum_m B_m H_m(k_0 r_i) \exp(im\phi_i) & \text{柱外} \\ \sum_m C_m J_m(k r_i) \exp(im\phi_i) & \text{柱内} \end{cases} \quad (3.17)$$

柱内的解已经考虑到电场在圆心处必须有限，所以第二类 Bessel 函数的解被舍去。式中的  $J_m, H_m$  分别代表第一类和第三类 Bessel 函数， $A_m, B_m, C_m$  分别是展开系数。考虑到圆柱内和圆柱外的场在圆柱边界处的连续条件，可以得到  $A_m, B_m$

之间满足如下的关系：

$$A_m = B_m / D_m$$

$$D_m = \frac{kJ_m(k_0R)J_m'(kR) - k_0J_m'(k_0R)J_m(kR)}{k_0J_m(kR)H_m'(k_0R) - kH_m(k_0R)J_m'(kR)} \quad (3.18)$$

式中上标代表相应函数的一阶导数。这个关系对于每个柱子都满足。式(3.17)中，柱外的场的二项有明确的物理意义：第一项代表入射到该柱子的入射场，包括二部分：一部分是外界入射波的贡献，另一部分是其它柱子散射到该柱子的贡献；第二项代表该柱子的散射场。根据场的叠加原理，式(3.17)中柱外的场的第一项可以写成：

$$\sum_m A_m(i)J_m(k_0r_i)\exp(im\phi_i) = \sum_m A_m^{(0)}(i)J_m(k_0r_i)\exp(im\phi_i) + \sum_{j \neq i} \sum_m B_m(j)H_m(k_0|r_i - \vec{R}_{ij}|)\exp(im\phi_{\vec{r}-\vec{R}_{ij}}) \quad (3.19)$$

式中右边第一项代表外界场以该柱子为中心的展开，它依赖于入射外场的具体形式，附录中给出了三种外场下该系数的形式；第二项代表其它柱子散射到该柱子的场强。

根据 Bessel 函数的加法定理(该加法定理可以在附录(2)中查到)，可以将式(3.19)中的第二项改写为：

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(i)J_m(k_0\rho_{\alpha})\exp[im\phi_{\alpha}] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m^{(0)}(i)J_m(k_0\rho_{\alpha})\exp[im\phi_{\alpha}] + \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{j \neq i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n(j)H_{m-n}(k_0\rho_{ij})\exp[i(n-m)\phi_{ij}]J_m(k_0\rho_{\alpha})\exp[im\phi_{\alpha}] \quad (3.20)$$

将上式代入式(3.19)，比较相同阶贝赛尔-傅立叶级数的系数可得，

$$A_m(i) = A_m^{(0)}(i) + \sum_{j \neq i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n(j)H_{m-n}(k_0\rho_{ij})\exp[i(n-m)\phi_{ij}] \quad (3.21)$$

再将式(3.18)代入式(3.21)，可以得到关于所有柱子的各阶散射系数  $B_m$  所满足的一个线性耦合方程组

$$-A_m^{(0)}(i) = -\frac{B_m(i)}{D_m} + \sum_{j \neq i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n(j)H_{m-n}(k_0\rho_{ij})\exp[i(n-m)\phi_{ij}] \quad (3.22)$$

通过散射系数可以得到观测点的场强。根据场的叠加原理，观测点的场强可以表示为：

$$E_z(\vec{r}) = E_z^{incident} + \sum_i \sum_m B_m(i) H_m(k_0 |\vec{r} - \vec{R}_i|) \exp(i(m\phi_{\vec{r}-\vec{R}_i})) \quad (3.23)$$

进一步由下式推出磁场的表达式

$$\vec{B} = \frac{1}{i\omega} \nabla \times \vec{E} \quad (3.24)$$

根据 Poynting 矢量的定义

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} = \frac{1}{i\omega\mu_0} \vec{E} \times \nabla \times \vec{E} \quad (3.25)$$

可得 Poynting 矢量沿径向向外传播的分量为

$$S_{\rho} = \frac{1}{i\omega\mu_0} E_z \frac{\partial}{\partial r} E_z \quad (3.26)$$

至此光子晶体的透射谱原则上已求出。

下面我们针对具体情况推导出一种透射率的表达式。对于光子晶体，一般比较关心的是远场的性质。这时一般或是让外界的入射波取 Bessel 函数形式，或是让平面波进入光子晶体前先通过一个狭缝(如图(3.2)所示)。考虑到 Bessel 函数的大宗量展开形式，式(3.23)可以写成：

$$E_z(\vec{r}) = (a_0(\theta) + f_s(\theta)) \frac{\exp(ik_0 r)}{\sqrt{r}} \quad (3.27)$$

式中假设外界入射的光场可以大宗量展开成：

$$E_z^{incident}(\vec{r}) = a_0(\theta) \frac{\exp(ik_0 r)}{\sqrt{r}} \quad (3.28)$$

而  $f_s(\theta)$  则可以根据 Bessel 函数的大宗量形式写成如下形式

$$f_s(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k_0}} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \sum_{i=1}^N \sum_m \exp(ik_0 R_i \cos(\phi_{\vec{R}_i} - \theta)) \times (-i)^m \exp(im\theta) B_m(i)$$

这样远场的径向 Poynting 矢量为：

$$\vec{S}_{\rho} = \frac{1}{i\omega\mu_0 r} \left[ a_0(\theta) + f_s(\theta) \right]^2 \quad (3.29)$$

定义广义的透射率为上式的径向 Poynting 矢量与外界入射波的远场的径向 Poynting 矢量之比即：

$$T(\theta) = \left| \frac{a_0(\theta) + f_s(\theta)}{a_0(\theta)} \right|^2 \quad (3.30)$$

由此可以清楚地看出，如果知道了入射波的  $a_0(\theta)$  和光子晶体中所有柱子的各阶散射系数  $B_m(i)$ ，就可以通过式(3.30)计算出光子晶体的透射谱。下一章我们将计算二种谱：一种是沿 X 方向的透射率(即当  $\theta = 0$  时的透射率)，它揭示的是光子晶体沿特殊方向的透射谱；另一种是将式(3.30)进行角度积分，即

$$T = \int_0^{2\pi} T(\theta) d\theta \quad (3.31)$$

这样得到的是光子晶体的全带隙的信息。

下面我们将 2 种入射外场在大宗量情况下的展开总结在下面：

(1). 入射波取 Bessel 函数形式，即：

$$u_{incident} = A_0 H_0(k_0 r) \quad (3.32)$$

那么利用 Bessel 函数的大宗量形式就可以得到：

$$a_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi k_0}} \exp\left(-i \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.33)$$

(2). 入射波是平面波但在进入光子晶体前先通过一个狭缝(如图(3.2)所示)。入射平面波通过一个狭缝后的场分布可以用下式表示：

$$u_{incident} = \frac{k_0}{4} \int_{-w/2}^{w/2} dy' \left[ H_0(k_0 |\vec{r} - y' \vec{e}_y|) + i \frac{x}{|\vec{r} - y' \vec{e}_y|} H_1(k_0 |\vec{r} - y' \vec{e}_y|) \right] \quad (3.34)$$

考虑到  $r \gg y'$  和 Bessel 函数的大宗量展开，可得：

$$a_0(\theta) = \exp\left(-i \frac{\pi}{4}\right) \sqrt{\frac{k_0}{2\pi}} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \frac{2 \sin(k_0 w/2 \sin \theta)}{k_0 \sin \theta} \quad (3.35)$$

利用上面推导的结果就可以计算出光子晶体的透射谱。

最后要说明的是多重散射方法不仅可以计算有限光子晶体的透射谱，而且可以计算无限大光子晶体的能带图，当处理场有衰减的情况时，该方法优于平面波展开方法[8, 9, 10]。

【参考文献】

- [1] M. Plihal, A. A. Maradudin and P. Sheng, *Opt. Commun*, **80**, 199 (1991)
- [2] M. Plihal, A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B*, **44**, 8565 (1991)
- [3] W. Y. Zhang, A. Hu and N. B. Ming, *J. Phys: C*, **9**, 541 (1997)
- [4] L. M. Lie and Z. Q. Zhang, *Phys. Rev. B*, **58**, 9587 (1998)
- [5] L. M. Lie, Z. Q. Zhang and X. D. Zhang, *Phys. Rev. B*, **58**, 15589 (1998)
- [6] X. D. Zhang, Z. Q. Zhang, L. M. Lie, C. Jin, D. Zhang, B. Man and B. Cheng, *Phys. Rev. B*, **61**, 1892 (2000)
- [7] Y. Chow, L. M. Lie, Z. Q. Zhang and C. T. Chan, *Phys. Rev. B*, **60**, 8050 (1999)
- [8] N. A. Nicorovici, P. C. McPhedran and L. C. Botten, *Phys. Rev. Lett*, **75**, 1507 (1995)
- [9] N. A. Nicorovici, P. C. McPhedran and L. C. Botten, *Phys. Rev. B*, **52**, 1135 (1995)
- [10] H. V. Lem and A. Moroz, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt*, **2**, 395 (2000)

## 第四章 若干二维光子晶体的能带和透射谱的理论研究

### § 4.1 引言

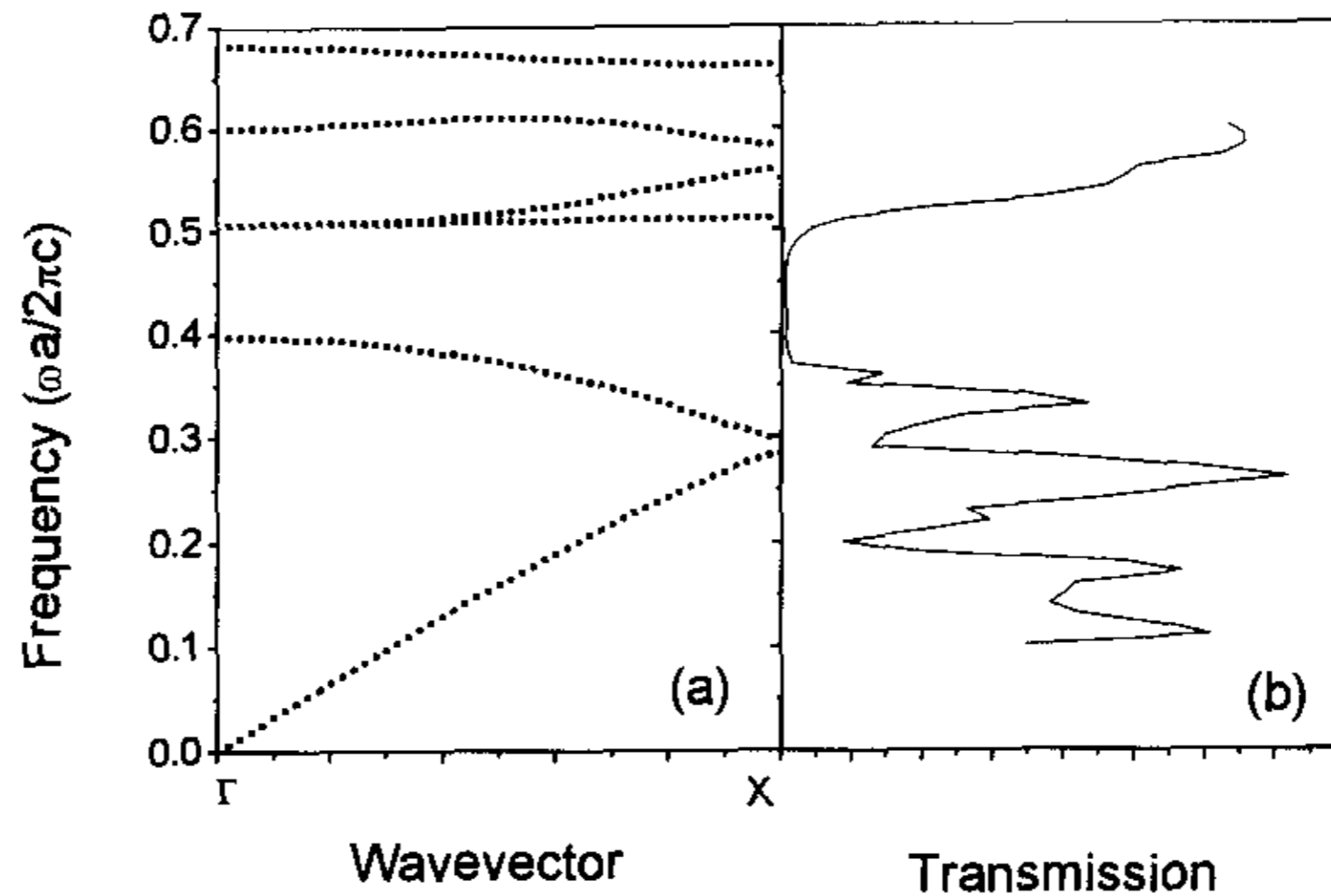
二维光子晶体由于其制备较三维光子晶体容易，因此到目前为止制备全带隙光子晶体实验上主要的进展是在利用二维光子晶体的波导结构中实现对光的约束。一个例子就是 Southampton 大学的一个组在  $\text{SiO}_2\text{-SiN-SiO}_2$  波导结构的系统中实现了二维准晶的光子全带隙[1]。对于二维常规周期结构的光子晶体总共有六种 Bravais 格子[2]，最容易出现光子带隙的是六角结构的光子晶体。

为了验证我们的程序正确与否，本章首先重复了一个已发表结果的计算。接着，利用上一章介绍的方法计算了普通介电材料构成的光子晶体的能带图，讨论了带隙与构成该光子晶体材料的介电常数之间的关系；计算了含有缺陷时的透射谱；计算了由理想金属构成的光子晶体的透射谱，计算结果表明只要该光子晶体中金属的占空比超过一定的值，就一定存在全带隙；最后讨论了由超导体构成的光子晶体的能带图，发现该系统中的光子能带可以随温度的改变而改变，其带隙在一定的温度范围内可以通过温度调节。

### § 4.2 普通介电体材料构成的二维光子晶体的能带和透射谱

这一节仅考虑六角结构和正方结构的二维光子晶体。对氧化铝的陶瓷柱子排成的正方晶格的透射谱和能带图进行了重复计算[4]。图(4.1)是我们利用平面波展开方法和多重散射方法计算的能带图和透射谱，这里仅考虑 H 模式。为了检收敛的好坏，在能带计算中我们分别使用了 289 个平面波和 441 个平面波展开计算同一能带，发现二种结果仅在小数点第四位有差别。在计算透射谱时，角动量的阶数展开到 2 (即  $m=-2, -1, 0, 1, 2$ )，收敛性很好。计算透射谱时外界入射场设为在离样品  $5a$  处放一个点源 (所处位置设为坐标系的原点)，该点源发出  $H_0\left(\frac{\omega}{c}r\right)$  的入射场。在 X 方向上有 5 排柱子，在 Y 方向有 51 个柱子，整

个系统共有 255 个柱子。计算在 X 方向的透射率随频率的变化规律，也就是计算  $\Gamma \rightarrow X$  的透射谱。能带图的计算结果和 MIT 的符合得很好。另外，由二种方法计算的结果相互对应得也很好，由此验证了我们的程序的有效性。



图(4.1) 二维正方结构的光子晶体的能带和透射谱。a.) 沿 $\Gamma \rightarrow X$ 方向的能带图。  
b.) 沿 $\Gamma \rightarrow X$ 方向的透射谱。

利用上述方法对一实际系统进行了计算。假设系统由介电常数为 10.0 的柱子在空气中排成六角结构，考虑 H 模式。和上一张透射谱不同的是，这一次我们将发射入射场的点源放置在有限二维光子晶体的中间位置，所有柱子的位置被限制在以点源为圆心的半径为  $6a$  的圆内，整个系统包含有 145 个柱子。角动量的展开也限定在 2，对每一个频率的径向 Poynting 矢量进行 360 度的积分，这样计算的结果揭示了光子晶体全带隙的信息，而非沿特殊方向光子能带的信息。

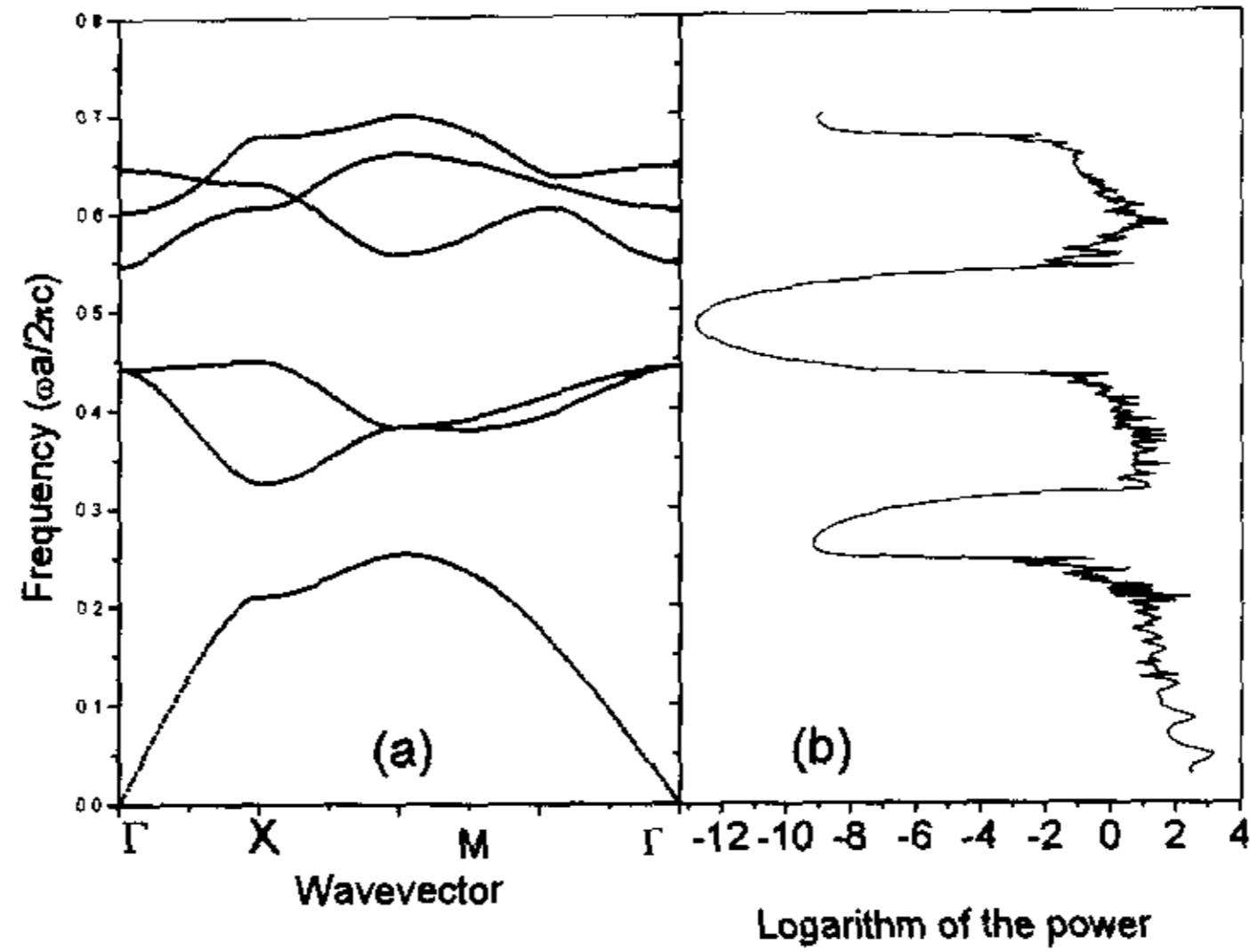


图 (4.2) 二维六角结构的光子晶体的能带图(a)和透射谱(b)。

对比能带图和透射谱，可以看出计算的结果符合得很好。透射谱中谷的位置和能带计算的能隙的位置几乎完全一样。由此进一步验证了我们的推导和程序的编制是正确的。

在前言中已经说明光子晶体最重要的效应之一是实现光子的局域化，这不仅是一个基本的物理问题，而且也有广泛的实用意义。光子的局域化是通过光子晶体中的缺陷实现的。将二维有限的光子晶体中的一个柱子抽掉，就造成一个人工缺陷。计算了第二个带隙里的缺陷模式，图(4.3)所示是含有这一缺陷模式的透射谱。

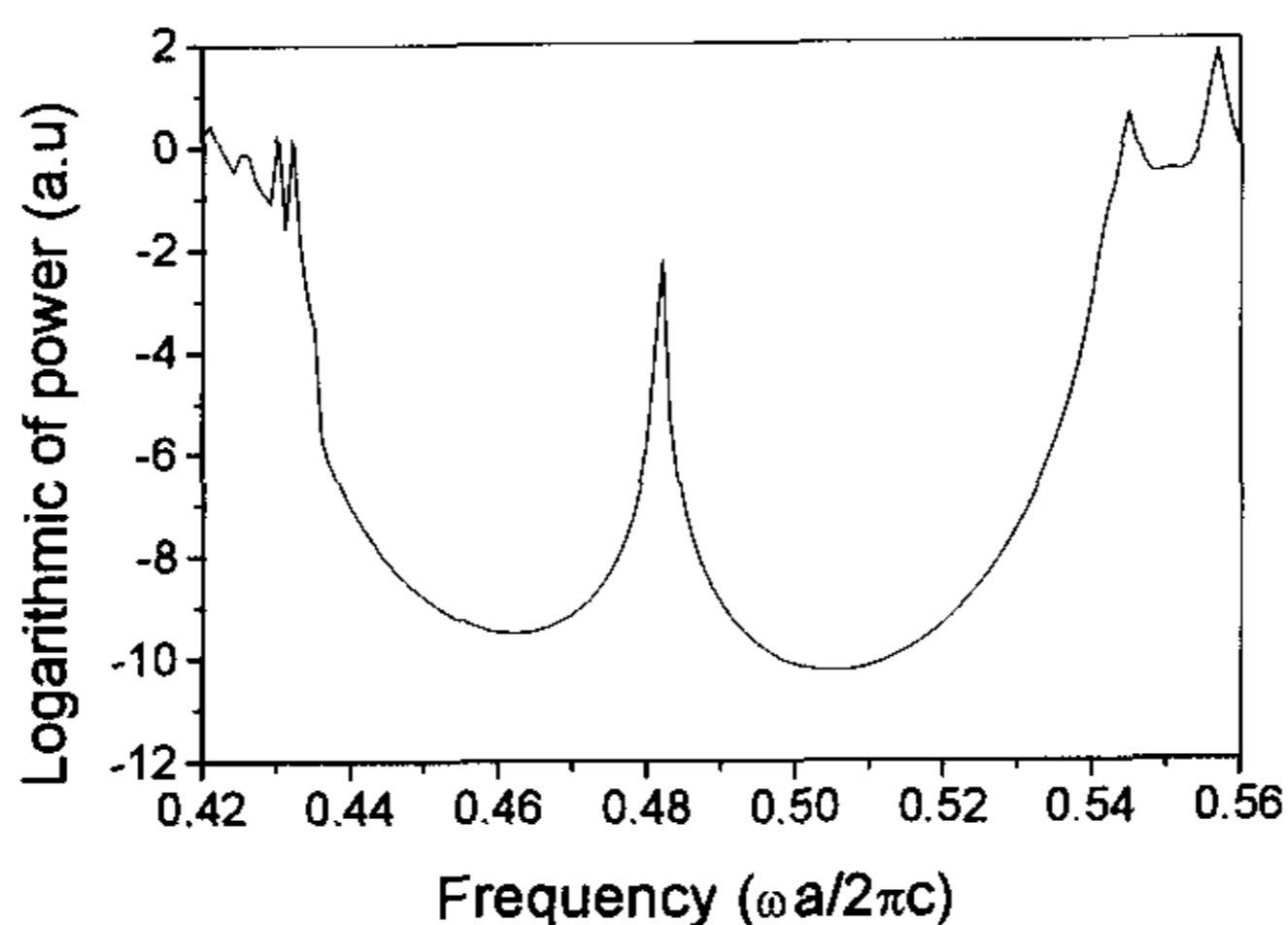
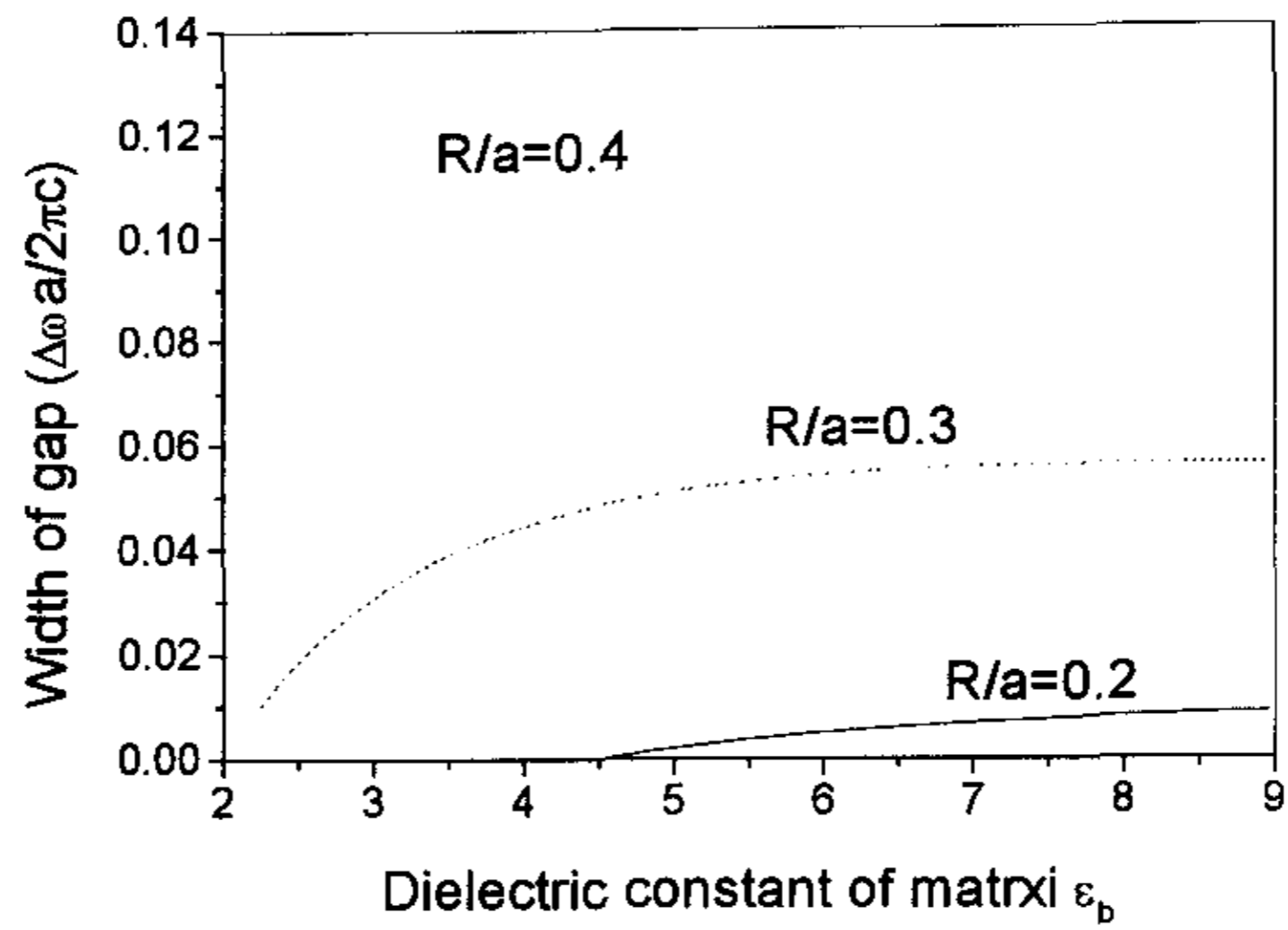


图 (4.3) 含有一个缺陷时的二维正方结构的光子晶体的透射谱。

由此图可以清楚地看出位于 0.481 频率处有一个非常尖锐的透射增强峰，它对应于光子晶体中缺陷导致的一个局域模式。局域模式的品质因子表征了光波局域的程度[5]，从透射谱不能获得，利用更精确的方法计算它还需进一步的工作。

用半导体材料制备光子晶体的一个简单方法是利用腐蚀和光刻技术：图案的形成用光刻技术，用腐蚀方法将不需要的部分去掉。对于这样的系统，利用平面波展开方法我们研究了在不同占空比情况下六角晶格的 H 模式和 E 模式的第一个带隙的情况。

图(4.4)显示了 H 模式在  $R/a = 0.2, 0.3, 0.4$  的情况下第一个带隙的宽度随母体介电常数变化的规律，圆柱的折射率设为 1.0。



图(4.4) 二维六角结构的光子晶体 H 模式的第一个带隙的宽度在三种占空比下和母体介电常数的关系图

可以看出对于 H 模式而言：折射率的对比越大越有利于带隙的出现；在相同的折射率对比的情况下占空比越大，第一个带隙越易于形成。这与 J. D. Joannopoulos 提出的经验规律相符[6]。

图(4.5)显示了在 E 模式的情况下，第一个带隙随母体折射率的变化情况。

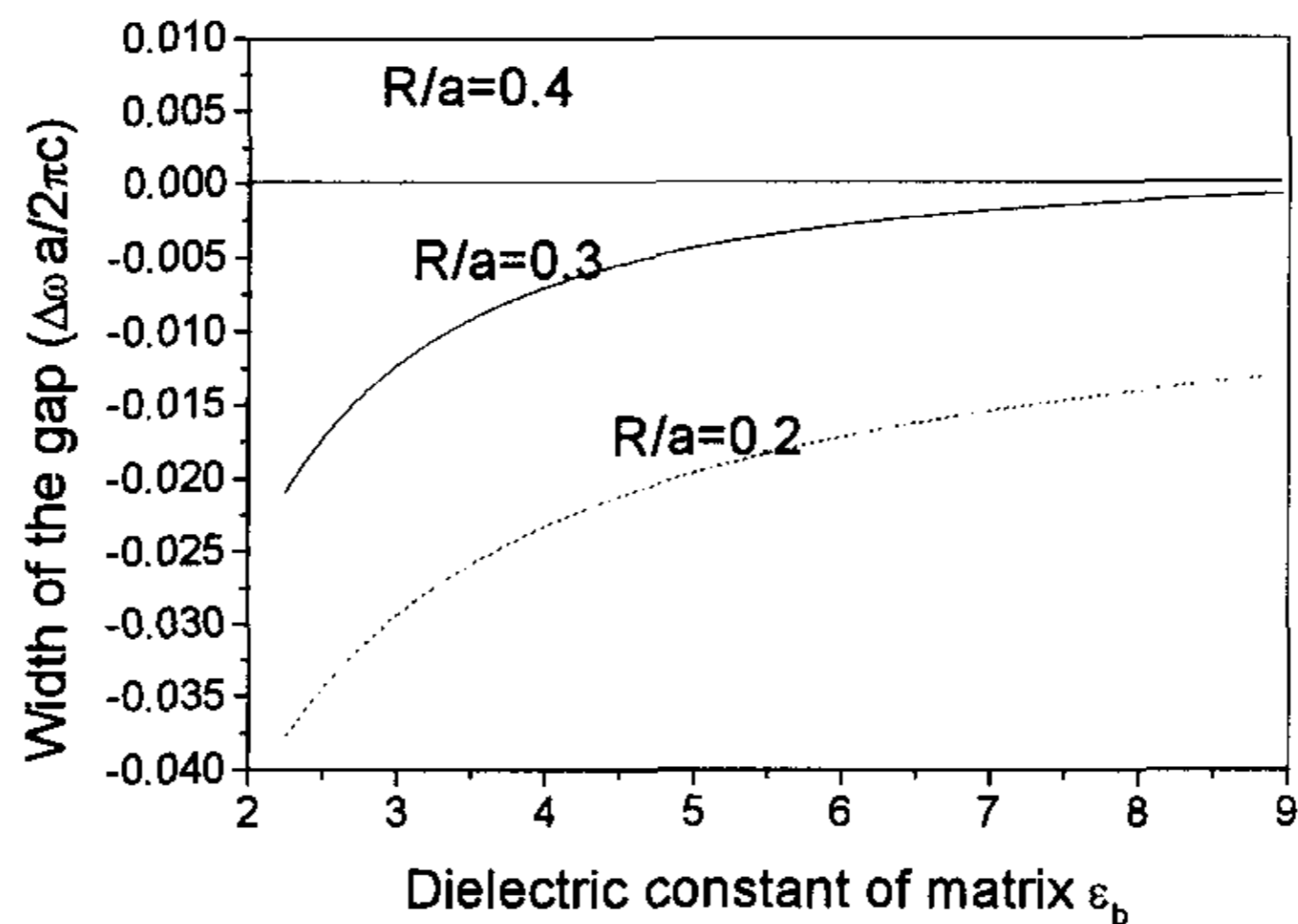


图 (4.5) 二维六角结构的光子晶体 E 模式的第一个带隙的宽度在三种占空比下和母体介电常数的关系图

可以看出，对于 E 模式而言：折射率的对比越大，越有利与第一个带隙的出现；而对于占空比，仅当  $R/a = 0.4$ ，才会出现带隙。由于在可见光区材料的介电常数都比较小，所以不容易形成全带隙(即 E 模式和 H 模式共同的带隙)。在这种情况下出现 H 模式的带隙较为容易些。对于 H 模式的情况，考虑到占空比太大样品的制备比较困难，但又要保持一定的占空比以利于光子带隙的产生。综合考虑到这二点， $R/a = 0.3$  是比较合适的设计参数 [7]。

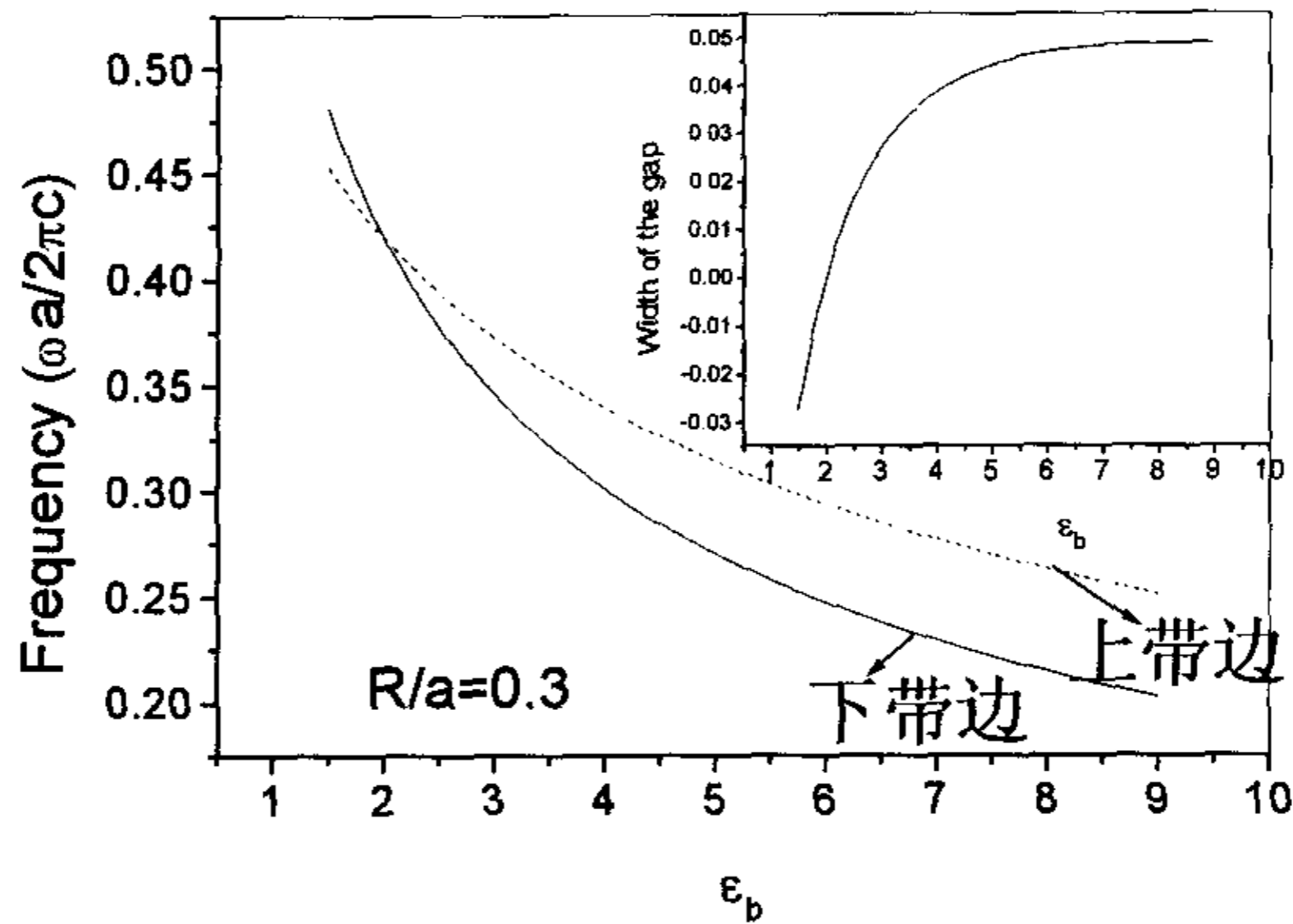


图 (4.6) 二维六角结构的光子晶体 H 模式的第一个带隙的上下二个带边和母介电常数的关系图。插图是该带隙宽度与母体介电常数的关系图。

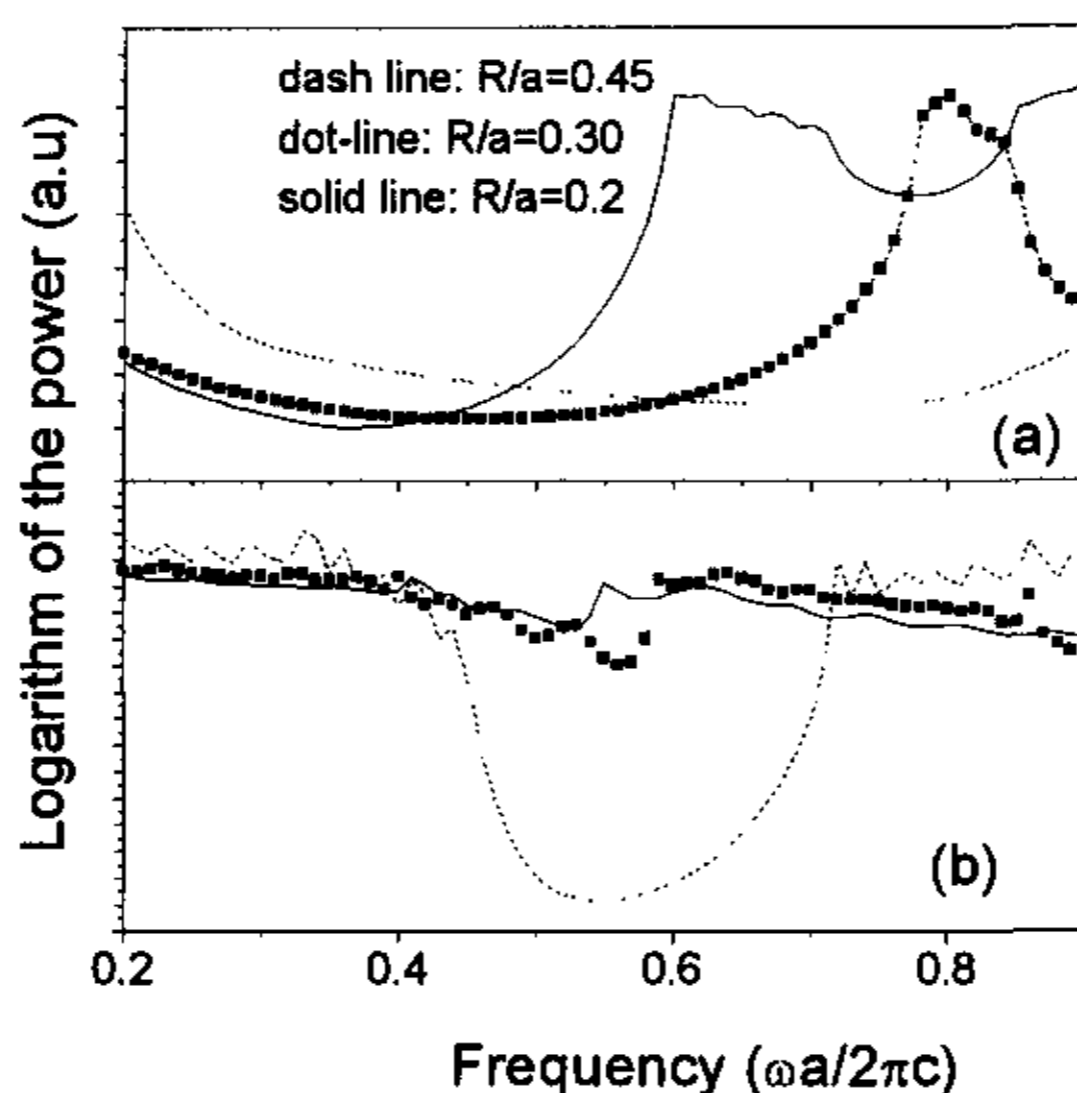
图(4.6)显示出 H 模式的第一个带隙在  $R/a$  为 0.3 时的上下能带边和母体介电常数的关系。可以看出当母体介电常数超过 1.93 时 H 模式的第一个带隙将打开，并且随母体的介电函数的增大而增大。图(4.6)中小插图是该带隙的宽度与母体介电函数的关系，母体介电函数越大越有利于带隙的打开。

### § 4.3 理想金属构成的二维光子晶体的透射谱

在前言中已经说明特殊材料作为基元构成的光子晶体是光子晶体研究的

一个非常热门的话题，这一研究方向将特殊材料的介电性质和光子晶体的长程序都考虑起来，对不论是形成全带隙、还是形成新型的光学元器件都起到很重要的作用。对于金属而言，其介电常数在微波段是一个负数，电磁波在金属中是按  $e$  指数衰减。我们研究了在这一情况下 H 模式和 E 模式的透射谱。

金属的介电常数设为  $-111.0$ 。所研究的系统由 150 个柱子构成，它们在空气中排成正方结构，晶格常数设为 1.0，角动量展开到 2 阶。由于这时在柱子内部的场是衰减的，所以相应的 Fourier-Bessel 展开在柱子内部是用虚宗量的 Bessel 函数表示。由于介电常数没有虚部，没有激发起金属中固有的元激发(例如：极化子)，所以如果出现带隙，那是光子晶体的周期散射所导致的带隙，与激发出金属固有的元激发而形成的光子带隙没有关系。



图(4.7) 由理想金属构成的二维正方结构的光子晶体在三种不同占空比情况下的透射谱。a.) E 模式 b.) H 模式。

图(4.7a)显示了 E 模式的散射谱。可以清楚地看出这时光子晶体是一个阻低频滤波器，其占空比越小最低截止频率越小，这与 C. T. Chan 提出的谐振空腔模型相符[8]。相应的 H 模式的透射谱如图(4.7b)所示。可以看出对于 H 模式而言，它就象一个普通介质形成的光子晶体一样，发射谱中的凹陷对应着 Bragg 反射。占空比越大，带隙的宽度就越大。由于该透射谱揭示的是对应模式的全光子带隙的信息，所以从这一张图上可以看出当占空比在 0.45 时，E 模式和 H

模式的带隙在频率从 0.42 到 0.71 之间有重合，因而在该系统中可以实现二维光子全带隙。图(4.8)所示为  $R/a=0.5$  时这二种模式的透射谱。这时柱子已经和柱子相接触，角动量也展开到 2 阶。可以看到这时 E 模式和 H 模式的透射谱比较相像。二种模式在频率为 0.38–0.98 范围内能隙又是重合的。所以在这个情况下，二维金属光子晶体也存在全带隙。

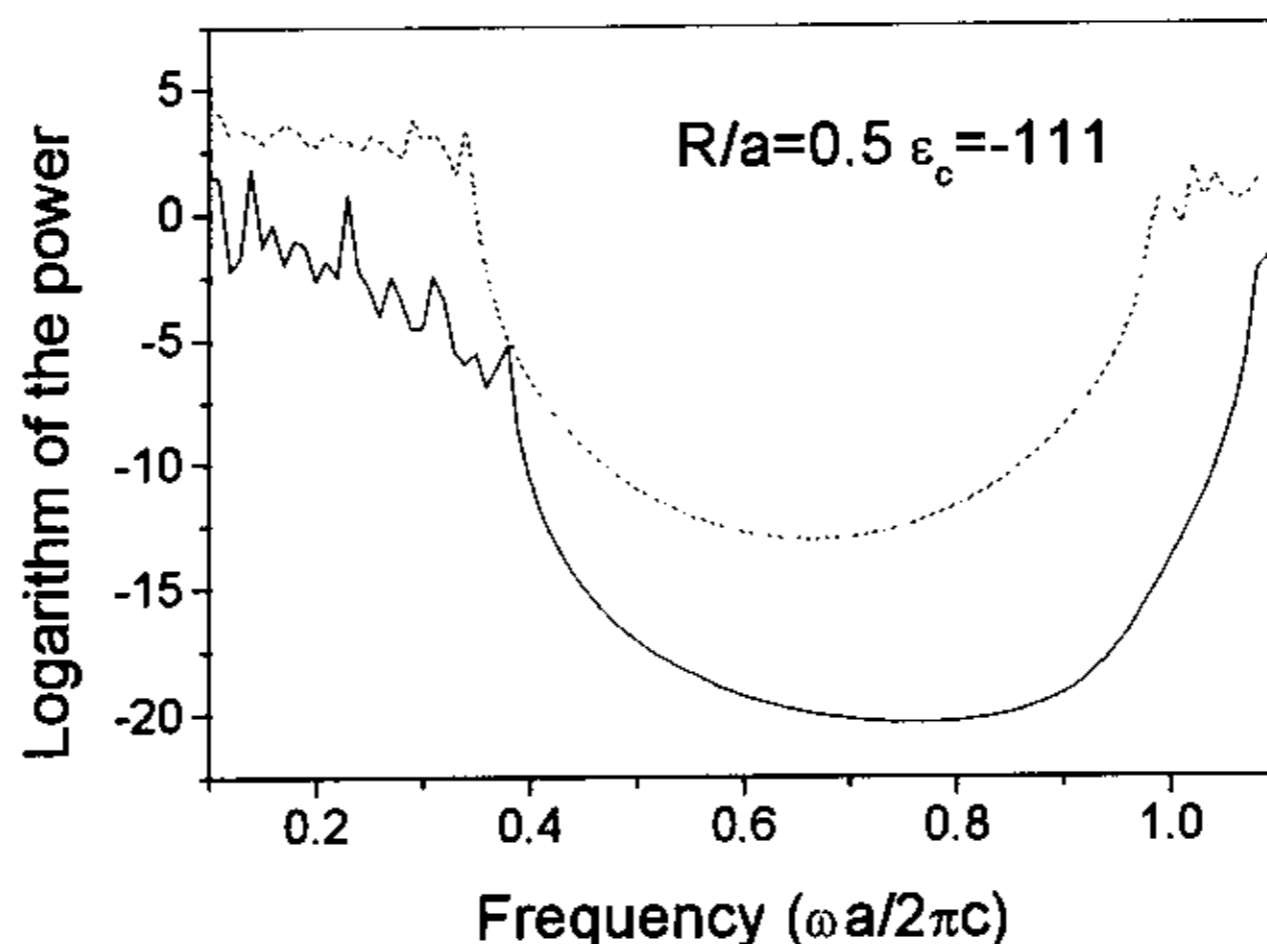


图 (4.8) 理想金属构成的二维正方结构的光子晶体在  $R/a=0.5$  时 E 模式(实线)和 H 模式(点线)的透射谱。

以上计算表明，对于由理想金属构成的二维光子晶体，只要金属的占空比超过一定的值，在该系统中光子全带隙总是存在的。

#### § 4.4 超导体构成的二维光子晶体的能带

本节我们计算了一个由超导体作为基元形成的光子晶体系统，由于超导体特殊的介电性质，计算结果表明该系统可以作为一个带隙可随温度调节的光开关。

一般而言，超导体的介电响应函数是比较复杂的。在一定的近似条件下，超导体的介电响应函数可以写成下面这样的形式，对于这个形式的近似条件可以在文献中找到[9]。

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{c^2}{\omega^2 \lambda_L(0)^2} \left( 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^4 \right) \quad (4.1)$$

如果定义如下的 Plasmon 频率

$$\omega_p^2 = \frac{c^2}{\lambda_L(0)^2} \left( 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^4 \right) \quad (4.2)$$

这里处理的超导体的介电函数非常象普通金属的 Drude 模型的介电函数，不过这时的 Plasmon 频率是温度的函数，而在金属中这是一个常数。以下仅考虑 E 模式，用与第三章相似的方法可以得到如下的本征方程[10]:

$$\sum_{\vec{G}_\parallel'} \left\{ (\vec{k}_\parallel + \vec{G}_\parallel)^2 \delta_{\vec{G}_\parallel, \vec{G}_\parallel'} + f \frac{\omega_p^2}{c^2} 2 \frac{J_1(|\vec{G}_\parallel - \vec{G}_\parallel'|R)}{|\vec{G}_\parallel - \vec{G}_\parallel'|R} \right\} E(\vec{k}_\parallel, \vec{G}_\parallel') \quad (4.3)$$

$$= \frac{\omega^2}{c^2} E(\vec{k}_\parallel, \vec{G}_\parallel)$$

式中的  $f$  是填充率。由此可以用相同的方法计算该系统的能带图，我们还是用 289 个平面波展开来计算。计算了温度在  $0.9T_c$  和  $0.01T_c$  二种情况下的能带图，如图 (4.9a) 和(4.9b)所示。所用的相关的参数为  $f = 0.7$ ,  $\lambda_L(0) = a/2\pi$ 。

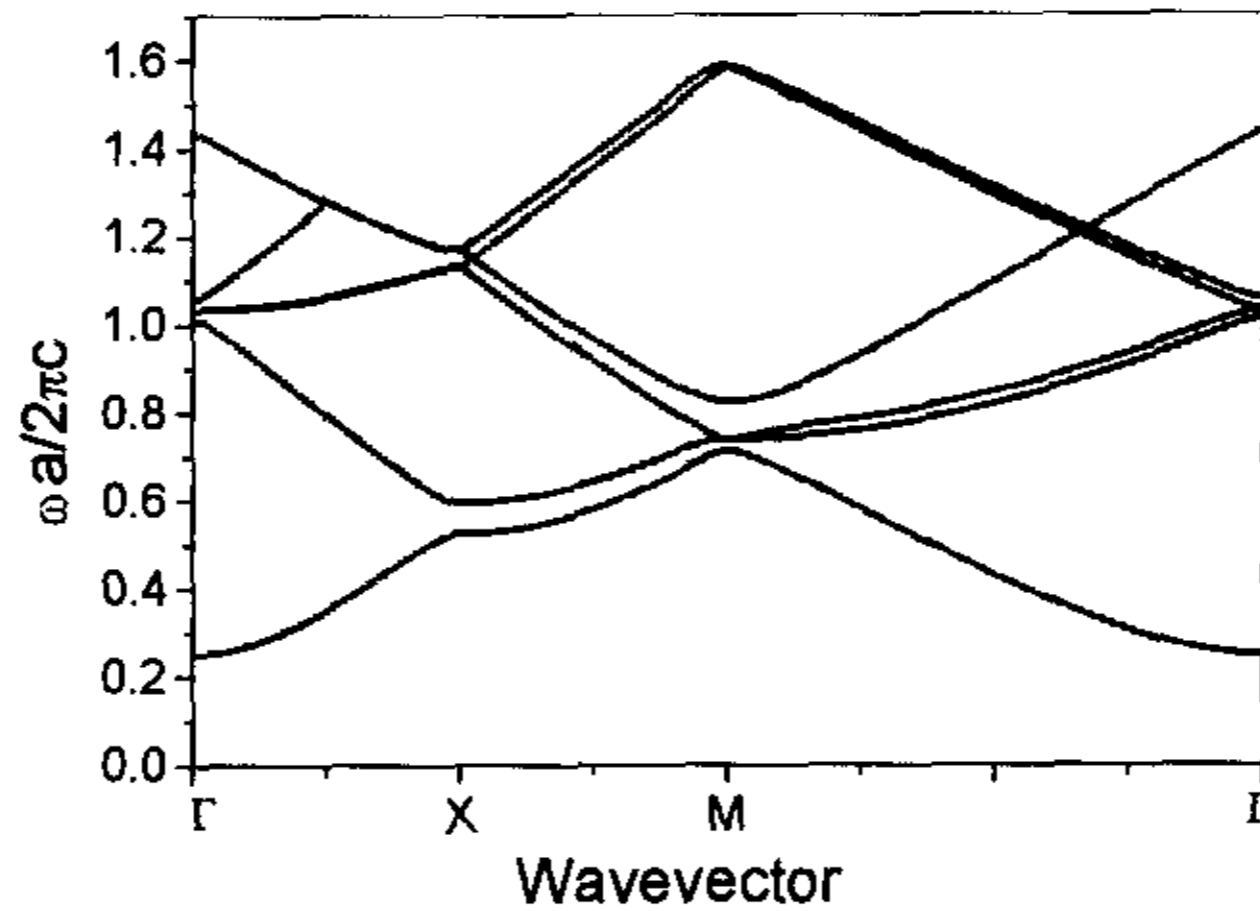


图 (4.9a) 由超导体构成的二维正方结构的光子晶体在温度为  $0.9T_c$  时的能带图。

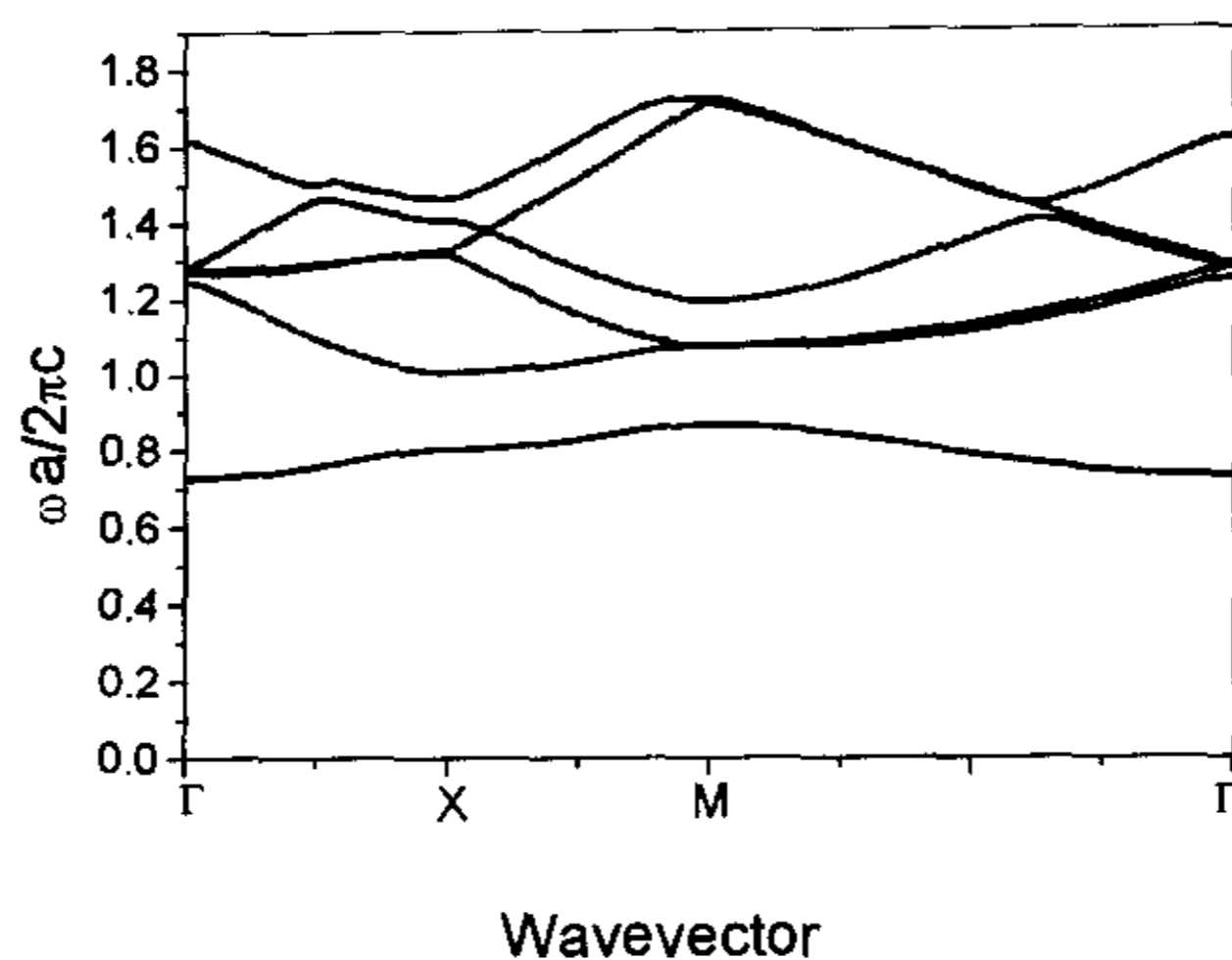
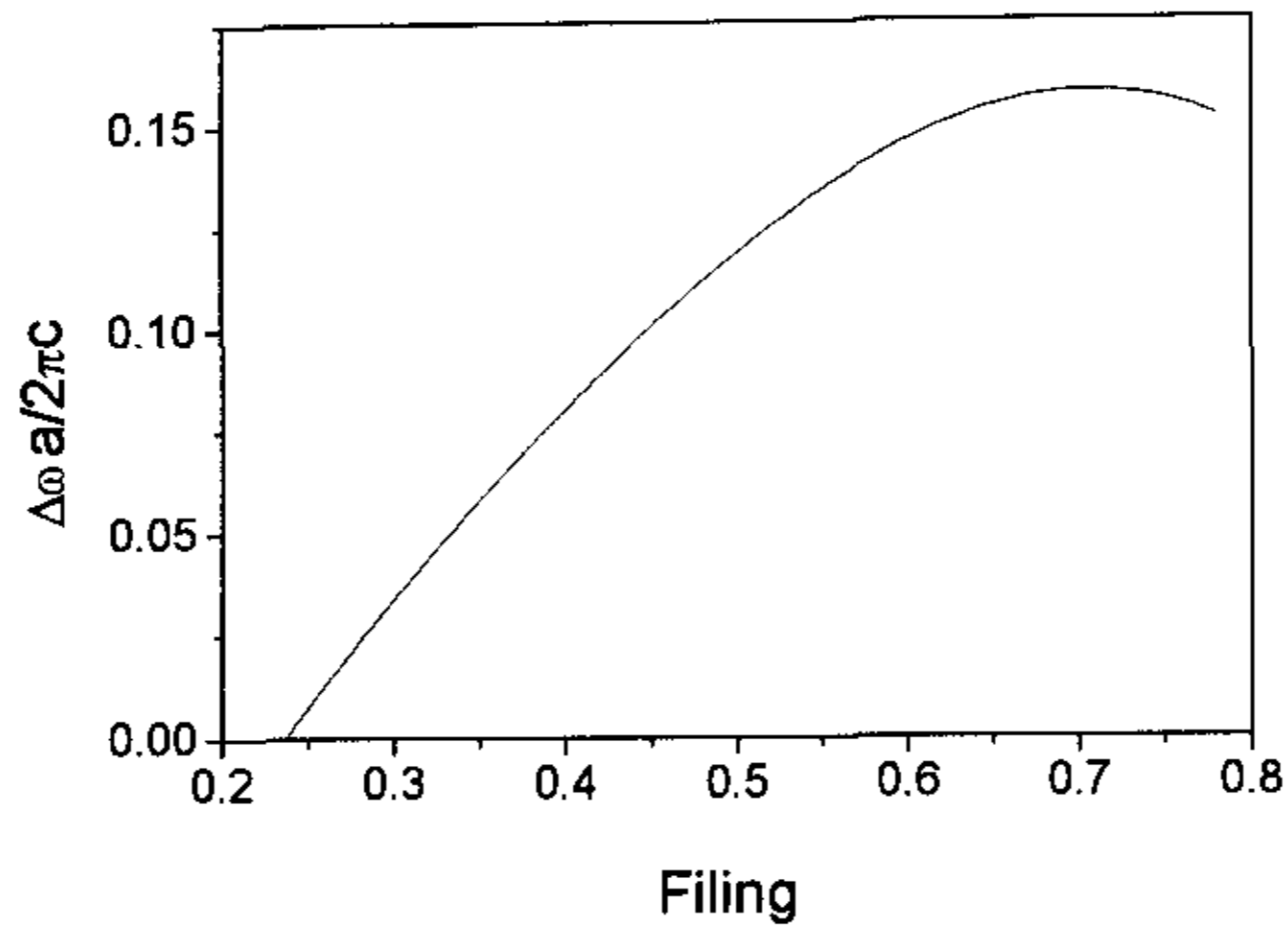


图 (4.9b) 由超导体构成的二维正方结构的光子晶体在温度为  $0.01T_c$  时的能带图。

对比这二张图，可以看出，该系统非常象金属，在低频段它是一个低频滤波器。有意思的是当温度比较低时，最低的一个能带几乎是一个常数，象晶格振动的 Einstein 模型一样。当频率低于 Plasmon 频率时，对比 E 模式满足的波动方程和周期势场的 Schrodinger 方程可以看出  $\omega_p$  所起的作用相当于势阱的深度 [11]。温度越小，相应的势阱越深，邻近井中的波函数之间的交迭就越小。邻近波函数之间的交迭在固体物理里决定了能带的宽度[2]。当温度为  $0.01T_c$  时，由于邻近波函数间的交迭比较小，所以最小的一支能带接近一支平线，因此打开了第一个能隙。我们计算了这个能隙随占空比，零温度下的  $\lambda_z(0)$ ，以及温度变化的关系。图(4.10), (4.11) 和 (4.12)显示了这三个关系。



图(4.10) 超导体构成的二维正方结构的光子晶体在温度为  $0.01T_c$  时的第一个带隙与填充率的关系图。

从图(4.10)可以看出占空比在 0.7 时带隙比较大，这也就是我们在计算图(4.9)是为何要将占空比设为 0.7 的原因。从图(4.11)可以看出：零温度时的 London 穿透深度越小越有利于第一个带隙的打开。从式(4.2)可以看出 Plasmon 频率反比于零温度时的 London 穿透深度，London 穿透深度越小，光子晶体“势阱”的深度越

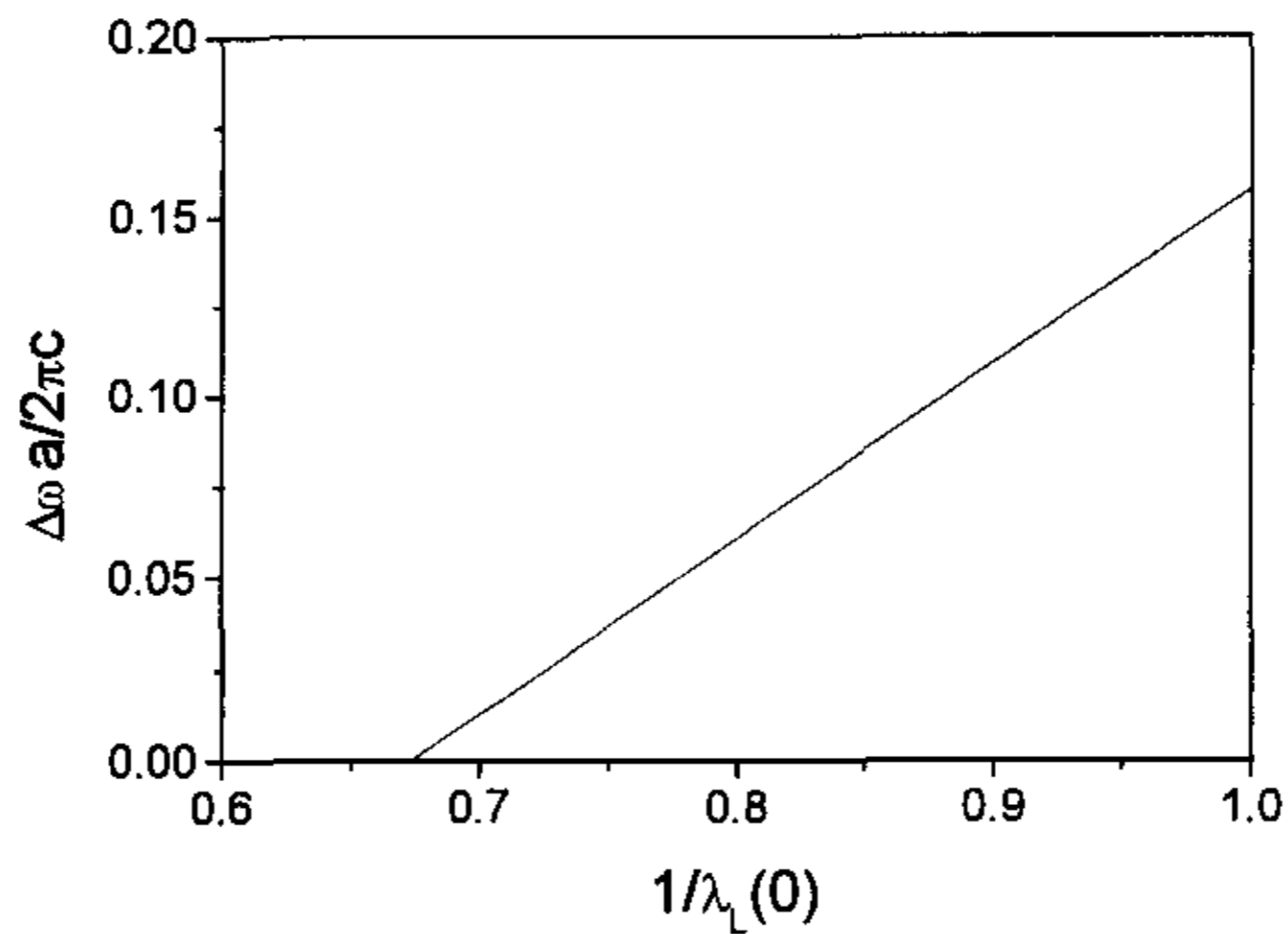


图 (4.11) 超导体构成的二维正方结构的光子晶体在温度为  $0.01T_c$  时的第一个带隙与绝对零度时的 London 穿透深度的关系图。

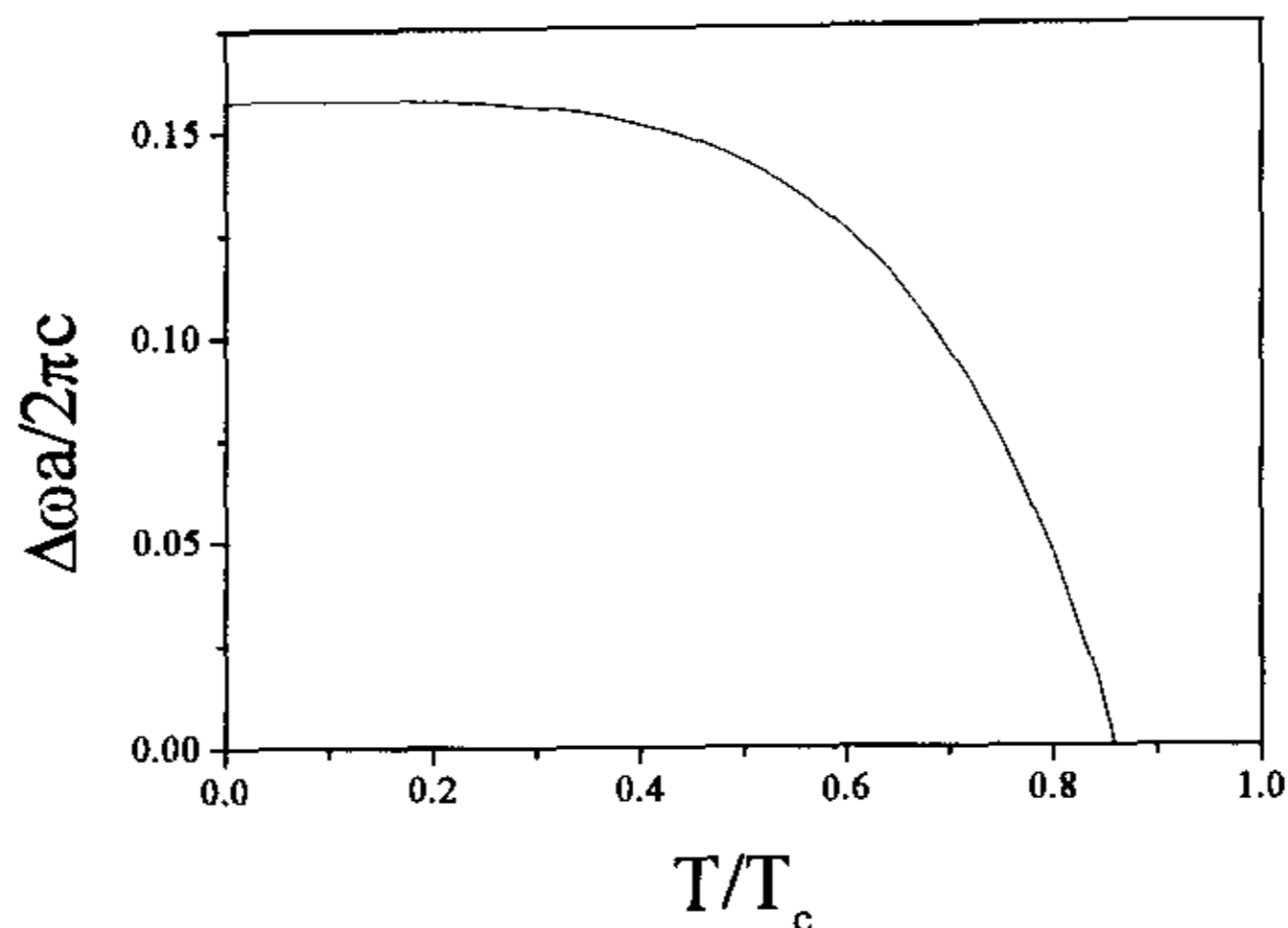


图 (4.12) 超导体构成的二维正方结构的光子晶体的第一个带隙随温度变化的关系图。

大，邻近柱子的波函数的交迭就越小，从而使第一个带隙越宽。图(4.12)显示了第一个带隙随温度的变化关系。这一张图非常有意思，它很象一张序参量随温度的变化关系图[1]，超导体中的序参量是超导体中的超导电子对的粒子数。从中可以看出该光子晶体的“绝缘”—“导通”转变也是个二级相变，不过这里的相变温度与超导体的“超导相”—“普通导体”的相变温度并不重合，当温度达到  $0.86T_c$  时，光子晶体的第一个带隙已经为零。因此，该系统可以作为一个由温度来调节的光开关器件。

【参考文献】

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, (Wiley, New York, ed.6, 1996)
- [2] M. E. Zoorob, M. D. B. Charlton, G. J. Parker, J. J. Baumberg and M. C. Netti, *Nature*. **404**, 740 (2000)
- [3] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, J. N. Winn, *Photonic crystals* (Princeton, New York, 1995)
- [4] W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe and J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2023 (1992)
- [5] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus and I. Kim, *Science*. **284**, 1819 (1999)
- [6] J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve and S. Fan, *Nature*. **386**, 143 (1997)
- [7] E. Chow, S. Y. Lin, S. G. Johnson, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, J. R. Wendt, G. A. Vawter, W. Zubrzycki and A. Alleman, *Nature*. **407**, 983 (2000)
- [8] M. M. Sigalas, C. T. Chan, K. M. Ho and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*. **52**, 11744 (1995)
- [9] C. H. Raymond, T. C. Yeung, C. H. Kam and T. K. Lim, *Phys. Rev. B*. **61**, 5920 (2000)
- [10] V. Kuamiak, A. A. Maradudin and F. Pincemin, *Phys. Rev. B*. **50**, 16835 (1994)
- [11] W. M. Lee, P. M. Hui and D. Stroud, *Phys. Rev. B*. **51**, 8634 (1995)

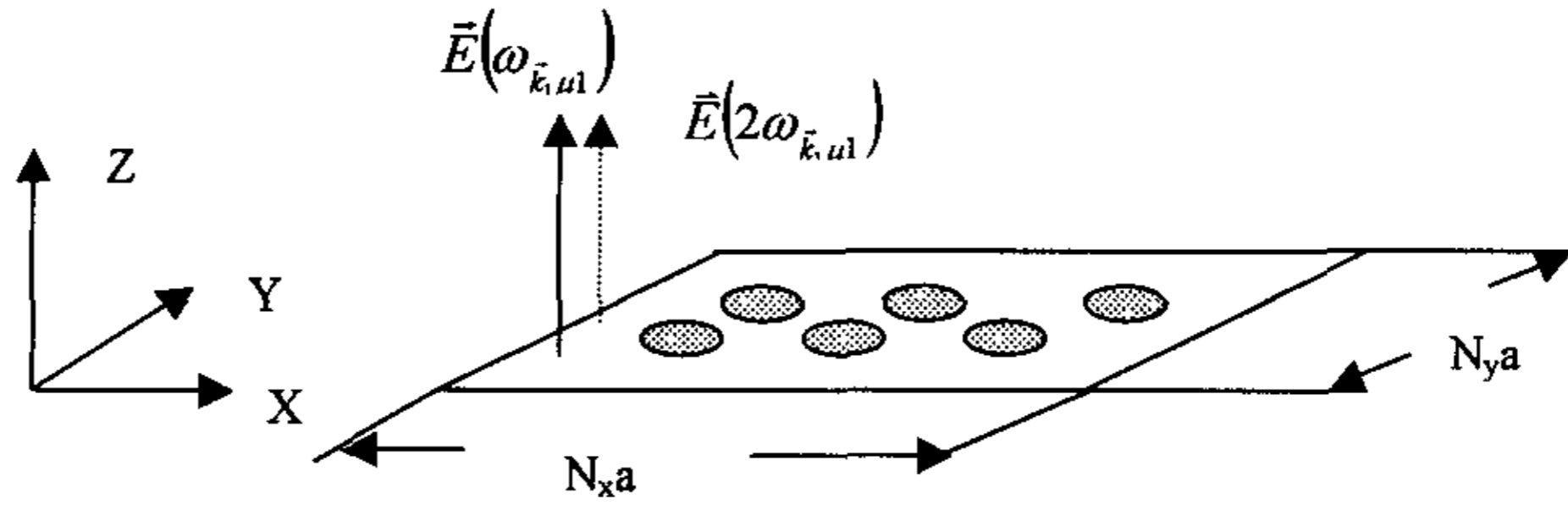
## 第五章 二维金属光子晶体中二次谐波产生的理论研究

### § 5.1 引言

虽然光子晶体的研究主要集中于线性效应，但是对于光子晶体的非线性效应的研究也引起了科学界的关注。对于光子晶体非线性研究比较清楚的是非线性的二次谐波产生，相应的光子晶体的基元中至少要有一种具有二级非线性光学效应，比如铁电材料(铌酸锂、钽酸锂等)，它们具有很大的二级非线性光学系数。二次谐波在光子晶体中产生的机制是：每个基元是产生二次谐波的源，而要使该非线性过程有效地发生，每个基元产生的谐波之间必须相干叠加，即必须满足准位相匹配条件，这就要求所有的基元排成一个有序结构。理论计算表明在由铁电体材料组成的光子晶体(比如空气柱在铌酸锂的母体中排成六角结构的二维光子晶体)中二次谐波能够有效地产生。从二次谐波在光子晶体中产生的机制出发，利用在金属表面的二级非线性光学效应和二维金属光子晶体的宏观周期性，二次谐波同样也可以在二维金属光子晶体中有效地产生。借助 Green 函数和平面波展开方法，我们对这一问题进行了理论研究。结果表明二次谐波可以在该系统中有有效产生，谐波产生的特点和在一维光学超晶格中的特点是一样的。

### § 5.2 二次谐波在二维金属光子晶体中产生的一般特性

首先强调下面计算的是在光子晶体中的二次谐波产生(一种介质在另一种介质中周期分布)，与光学超晶格材料中的谐波发生相对应。图(5.1)是二维金属光子晶体的示意图。在第三章已经讲过，在二维光子晶体中电磁场可以分成二种模式(E 模式和 H 模式)，下面的计算仅考虑 E 模式，但有关的处理方法同样适用于 H 模式。考虑到基波光和二次谐波的偏振方向均沿 Z 方向，所以下面的计算中将省略基波光和倍频光的 Z 指标。金属柱子是二维光子晶体的组成基元，由于金属具有中心对称性，所以二级的体非线性系数为零。但是在柱子



图(5.1) 二倍频在二维光子晶体中产生的示意图, 图中标志出基波和倍频光的偏振方向。

的边界处, 由于表面的存在破坏了中心对称性, 所以表面的二级非线性光学系数不为零[4]。这样每个金属柱子的表面就是一个产生二次谐波的源, 如果要得到二次谐波的有效产生, 那么每个柱子产生的二次谐波之间必须相干叠加, 这依赖于光子晶体的宏观周期性。这样, 电位移矢量的  $Z$  分量在光子晶体系统中为

$$D_z = \varepsilon_0 \varepsilon_r E_z + \varepsilon_0 d_{33}^s E_z^2 \quad (5.1)$$

$$d_{33}^s \begin{cases} \neq 0 & R - \delta \leq r \leq R \\ = 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

上式中的  $d_{33}^s$  是表面的二级非线性系数,  $\varepsilon_r$  是光子晶体的介电分布函数, 而  $\delta$  是金属的趋肤深度。由 Maxwell 方程组, 再考虑到小信号近似, 可以得到二次谐波满足如下方程

$$\left( -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right) E(2\omega_{\vec{k}, \mu}; \vec{x}, t) = -\frac{d_{33}^s}{\varepsilon_r(\vec{r}) c^2} \omega_{\vec{k}, \mu}^2 E_{\vec{k}, \mu}^2 \exp(-i2\omega_{\vec{k}, \mu} t) \quad (5.2)$$

式中的  $E_{\vec{k}, \mu}$  是入射基波。考虑到小信号近似, 该基波满足下式

$$\left[ \frac{\omega_{\vec{k}\mu}^2}{c^2} + \frac{1}{\varepsilon_r(\vec{x})} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] E_{\vec{k}\mu}(\vec{x}) = 0 \quad (5.3)$$

它表明基波是光子晶体中的一个本征模式。由于光子晶体的周期性，所以  $E_{\vec{k}\mu}(\vec{x})$  满足 Bloch 定理[5]

$$E_{\vec{k}\mu} = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_{\vec{k}\mu}(\vec{x}) \quad (5.4)$$

这里  $\vec{k}$  是 Bloch 波矢，并且  $u_{\vec{k}\mu}$  是周期函数。借助于 Green 函数，二次谐波可以写成：

$$E(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}; \vec{x}, t) = -\exp(-i2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} t) \int d\vec{x}' G(\vec{x}, \vec{x}', 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}) E_{\vec{k}_1\mu_1}^2(\vec{x}') \omega_{\vec{k}_1\mu_1}^2 \frac{d_{33}^s(\vec{x}')}{\varepsilon_r(\vec{x}') c^2} \quad (5.5)$$

上式中的 Green 函数满足

$$\left( \frac{(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1})^2}{c^2} + \frac{1}{\varepsilon_r(\vec{r})} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right) G(\vec{x}, \vec{x}', 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (5.6)$$

由于式(5.3)得出的本征函数构成一个完备的正交函数集，所以式(5.6)中的 Dirac Delta 函数可以展成

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}') = \sum_{\vec{k}\mu} E_{\vec{k}\mu}^*(\vec{x}') E_{\vec{k}\mu}(\vec{x}) \quad (5.7)$$

由此可以得到式(5.6)定义的 Green 函数[6]

$$G(\vec{x}, \vec{x}', 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}) = \sum_{\vec{k}\mu} \frac{E_{\vec{k}\mu}^*(\vec{x}') E_{\vec{k}\mu}(\vec{x})}{\frac{(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1})^2}{c^2} - \frac{\omega_{\vec{k}\mu}^2}{c^2}} \quad (5.8)$$

这样二次谐波的场为

$$E(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}; \vec{x}, t) = \omega_{\vec{k}_1\mu_1}^2 \exp(-i2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} t) \sum_{\vec{k}\mu} \frac{E_{\vec{k}\mu}(\vec{x})}{\omega_{\vec{k}\mu}^2 - (2\omega_{\vec{k}_1\mu_1})^2} \int d\vec{x}' E_{\vec{k}\mu}^*(\vec{x}') E_{\vec{k}_1\mu_1}^2(\vec{x}') \frac{d_{33}^s(\vec{x}')}{\varepsilon_r(\vec{x}')} \quad (5.9)$$

式中的积分遍及整个光子晶体。由于函数  $\frac{d_{33}^s(\vec{x}')}{\varepsilon_r(\vec{x}')}$  和本征函数  $E_{\vec{k}\mu}$  都具有周期

性，所以式(5.9)中的积分可以改写为：

$$\int d\vec{x}' E_{\vec{k}\mu}^*(\vec{x}') E_{\vec{k}_1\mu_1}^2(\vec{x}') \frac{d_{33}^s(\vec{x}')}{\varepsilon_r(\vec{x}')} = \sum_{n_x=0}^{N_x} \exp\{i(2k_1 - k)_x n_x a\} \sum_{n_y=0}^{N_y} \exp\{i(2k_1 - k)_y n_y a\} VF(k\mu, 2k_1\mu_1) \quad (5.10)$$

式中的  $(2k_1 - k)_x$  和  $(2k_1 - k)_y$  是二次谐波产生的波矢失配的 X 和 Y 分量。而  $N_x, N_y$  是光子晶体的 X 和 Y 方向的周期数，这二个值在任何实验系统中均是有限值。V 是二维 Weigner-Seitz 原胞的面积。F(kμ, 2k<sub>1</sub>μ<sub>1</sub>) 是有效的表面非线性系数，它定义为：

$$F(k\mu, 2k_1\mu_1) = \frac{1}{V} \iint d\vec{x}' \frac{d_{33}^s(\vec{x}')}{\varepsilon_r(\vec{x}')} u_{\vec{k}_1\mu_1}^2(\vec{x}') u_{\vec{k}\mu}^*(\vec{x}') \quad (5.11)$$

积分限制在一个原胞中，并需考虑式(5.1)的限制。式(5.10)和(5.11)在固体物理中可以找到对应。与 X 射线衍射产生的机制一样，式(5.11)就像一个宏观的“原子散射因子”一样，它是散射的基元；而式(5.10)的级数就像一个“结构因子”决定了在什么方向衍射能够相干叠加，决定了衍射波的出射方向[5]。因此可以利用 Ewald 球等概念和方法来描述谐波在光子晶体中的产生过程。

通过上面的计算可以将倍频的光场写为：

$$E(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}; \vec{x}, t) = \omega_{\vec{k}_1\mu_1}^2 \exp(-i2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} t) \sum_{\vec{k}\mu} \frac{E_{\vec{k}\mu}(\vec{x})}{\omega_{\vec{k}\mu}^2 - (2\omega_{\vec{k}_1\mu_1})^2} F(k\mu, 2k_1\mu_1) V \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x N_x a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x a\}} \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y N_y a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y a\}} \quad (5.12)$$

将分母拆开写为：

$$E(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}; \vec{x}, t) = \omega_{\vec{k}_1\mu_1}^2 \exp(-i2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} t) \sum_{\vec{k}\mu} \frac{E_{\vec{k}\mu}(\vec{x}) V}{2\omega_{\vec{k}\mu}} \left( \frac{1}{\omega_{\vec{k}\mu} - 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}} + \frac{1}{\omega_{\vec{k}\mu} + 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}} \right) \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x N_x a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x a\}} \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y N_y a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y a\}} F(k\mu, 2k_1\mu_1) \quad (5.13)$$

省略掉括号中的第二项，并考虑到群速度的定义  $v_g = \left| \frac{d\omega}{dk} \right|$ ，将对 Bloch 波矢的求和改为对频率的积分，

$$\begin{aligned}
 E(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}; \vec{x}, t) = & \omega_{\vec{k}_1\mu_1}^2 \exp(-i2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} t) \sum_{\mu} \int d\omega_{k\mu} \frac{E_{\vec{k}\mu}(\vec{x})}{\omega_{\vec{k}\mu} - (2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}) + i\varepsilon} F(k\mu; 2k_1\mu_1) V \\
 & \times \frac{1}{v_g} \times \frac{1}{2\omega_{\vec{k}\mu}} \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x N_x a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x a\}} \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y N_y a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y a\}}
 \end{aligned} \quad (5.14)$$

并考虑到下式

$$\frac{1}{\omega_{\vec{k}\mu} - 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} + i\tau} = \frac{P}{\omega_{\vec{k}\mu} - 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}} - i\pi\delta(\omega_{\vec{k}\mu} - 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}) \quad (5.15)$$

式中的  $\tau$  是一个无穷小量,  $P$  代表 Cauchy's 主值。将式(5.15)代入(5.14)中并略去式(5.15)中的第一项, 则得:

$$\begin{aligned}
 E(2\omega_{\vec{k}_1\mu_1}; \vec{x}, t) = & -\pi 2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} \exp(-i2\omega_{\vec{k}_1\mu_1} t) \sum_{\mu} E_{k\mu}(\vec{x}) F(k\mu; 2k_1\mu_1) V \\
 & \times \frac{1}{2v_g} \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x N_x a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_x a\}} \times \frac{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y N_y a\}}{1 - \exp\{i(2k_1 - k)_y a\}} \Big|_{\omega_{k\mu} = 2\omega_{k_1\mu_1}}
 \end{aligned} \quad (5.16)$$

式中对  $\mu$  的求和仅限制在本征频率为  $2\omega_{k_1\mu_1}$  的带的指标。当式中的  $N_x$  和  $N_y$  比较大时, 仅当满足如下条件时二次谐波才能够有效的产生:

$$\begin{cases} (\vec{k} - 2\vec{k}_1)_x = \frac{2\pi m}{a} \\ (\vec{k} - 2\vec{k}_1)_y = \frac{2\pi n}{a} \end{cases} \quad (5.17)$$

式中的  $m, n$  是任意整数。

式(5.17)描述的就是在光子晶体中产生二次谐波必须满足的准位相匹配条件; 而式(5.15)右边的第二项就是二次谐波产生要满足的能量守恒条件。根据式(5.14)可以知道, 二次谐波的功率正比于有效非线性系数的平方, 并且与波矢失配成 Sinc 函数的关系, 这些结论都与二次谐波在一维光学超晶格中的情况是一样的。下一节我们将用这些理论具体计算一个实际系统中二次谐波的产生。

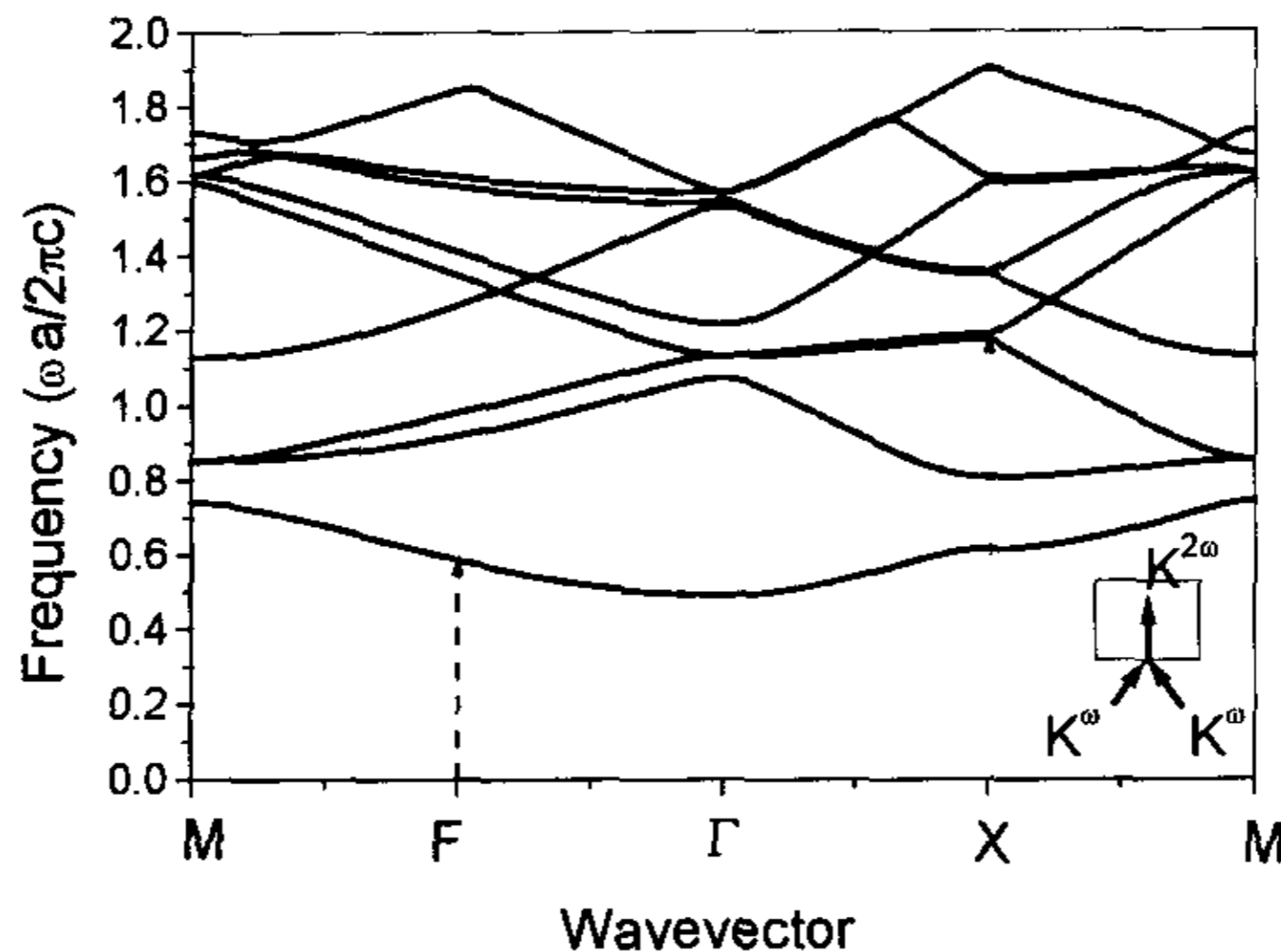
### § 5.3 在金属 Ag 排成的二维金属光子晶体中的二次谐波的产生

金属 Ag 在可见光范围内吸收比较小、且其表面的二级非线性系数比较大,

因此这里选金属 Ag 作为光子晶体材料。Ag 的介电函数在(310nm-520nm)的波长范围内可以很好地用 Drude 模型描述[7]即：

$$\varepsilon_c(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (5.17)$$

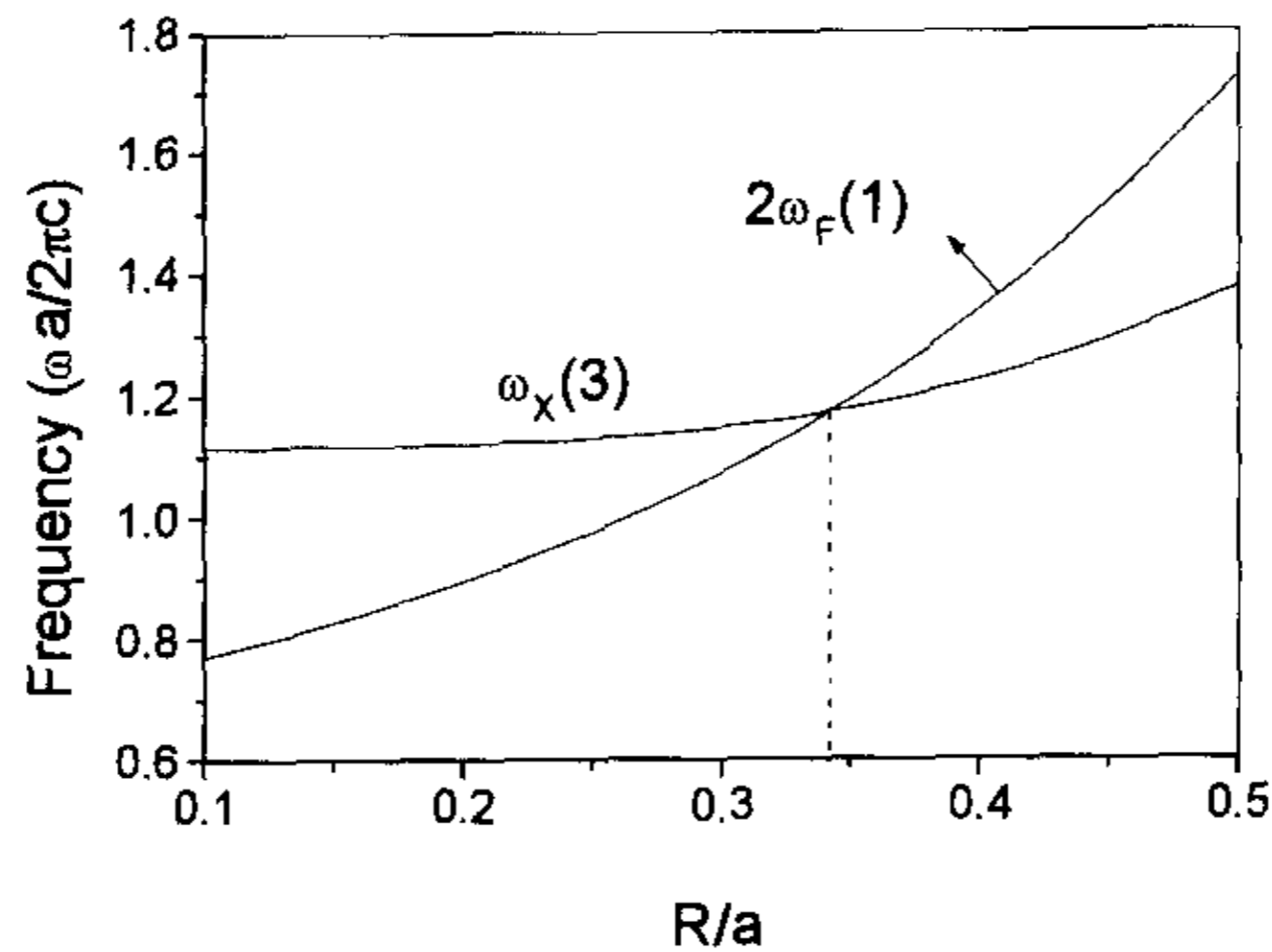
上式中的  $\omega$  和  $\omega_p$  分别代表外界入射波的频率和 Plasmon 频率。设 Ag 柱子排成正方点阵，计算中将 Plasmon 频率设为 1.0，所有光波频率均以  $2\pi c/a$  为约化单位，波矢均以  $2\pi/a$  为约化单位， $a$  是正方结构的晶格常数。先假设入射光波的波矢方向是 F(0.25, 0.25)，和 (-0.25, 0.25)，而二倍频光的波矢方向定为 X(0.0, 1.5)。可以看出这时利用倒格矢  $G_{0,1}$  可以实现该倍频产生的准位相匹配条件，而能量守恒条件可以通过调节光子晶体的占空比来实现。图(5.2)是当占空比为 0.3145 时，该二维金属光子晶体的能带图。



图(5.2) 占空比为 0.3145 时二维金属光子晶体的能带图。图中标出基波和倍频光的波矢。插图中标出了这二个波在实空间的传播方向。

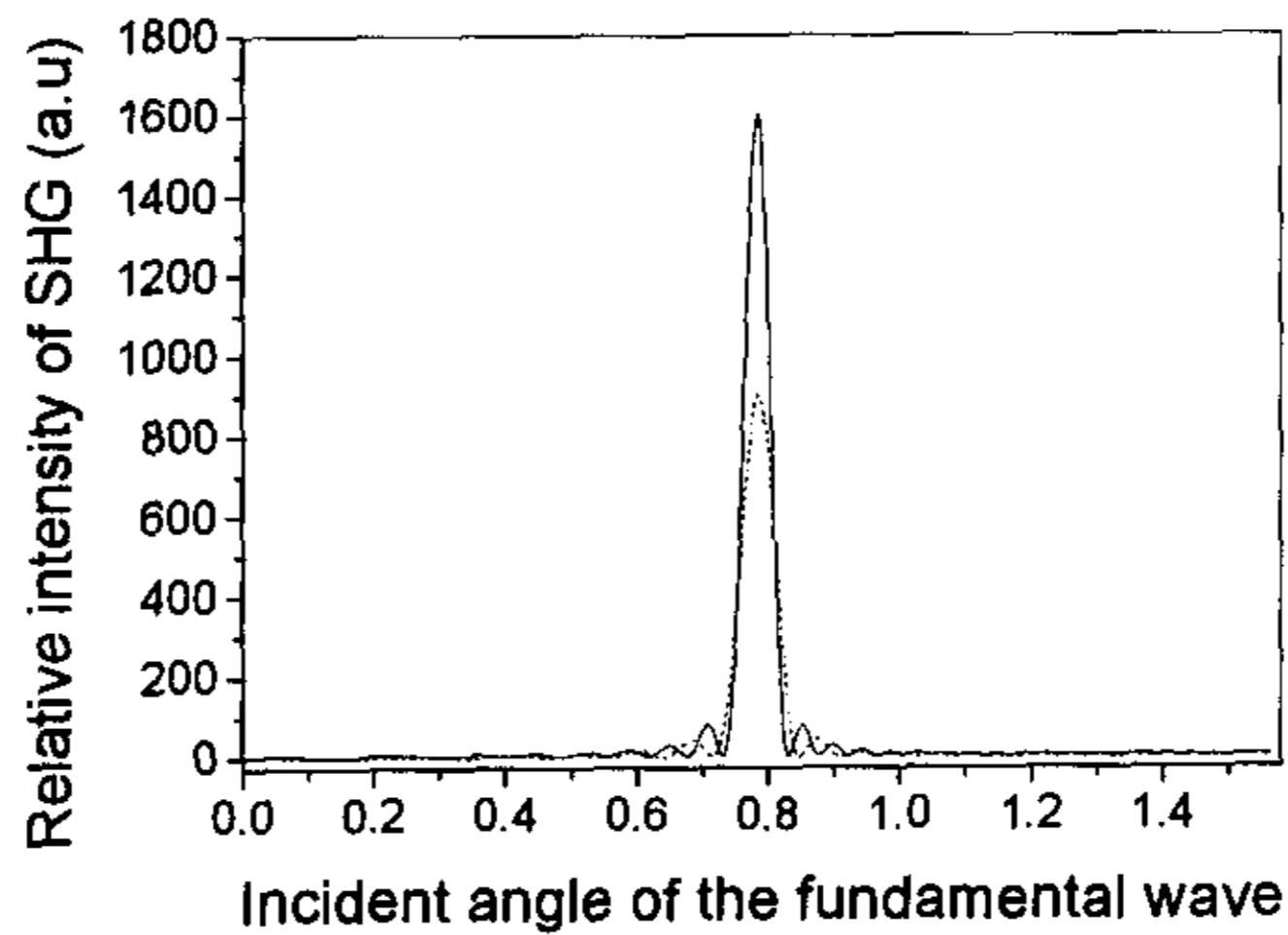
在这个占空比的情况下，能量守恒也能够满足，图(5.3)是 F 点的第一个本征值的二倍与 X 点的第三个本征值随占空比变化的关系图。从该图中可看出：当占空比在 0.3145 时，能量守恒条件可以实现。因此在该系统中二次倍频是可以有

效的产生的。图(5.2)和图(5.3)中的本征频率都是利用平面波展开方法计算出来的，其有效性在第四章中已经说明。一个比较有趣的事是这里的二倍频产生看起来有些象固体物理中的半导体中光学过程的间接跃迁，这也许有可能成为探测光子带隙的一种方法。图(5.4)示意出倍频光和基波光入射角度的关系。实线表示的是在 Y 方向的周期数是 40，虚线表示的是周期数为 30。



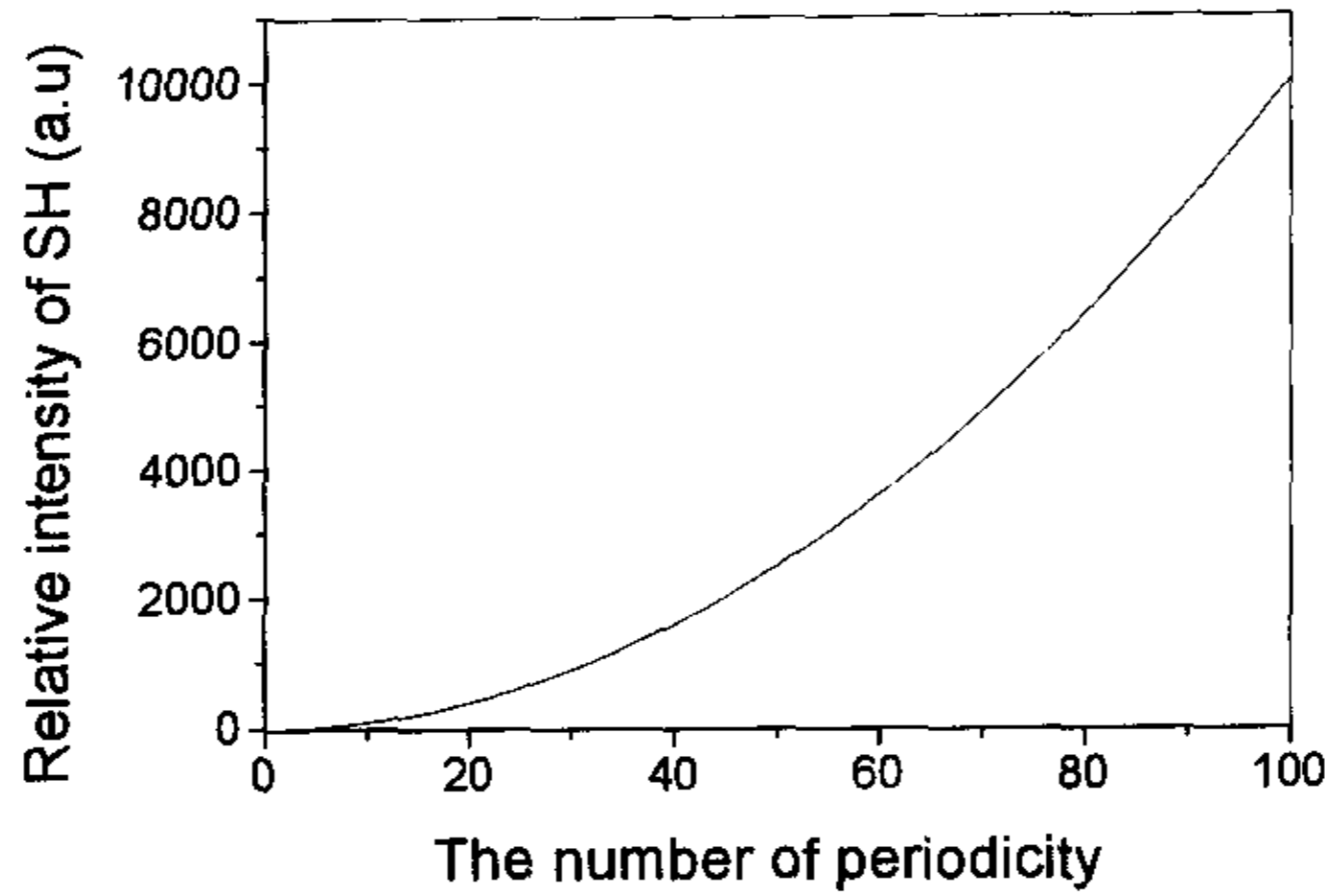
图(5.2) F 点的第一个本征值的二倍和 X 点的第三个本征值随  $R/a$  变化的关系图。

从图(5.4)可以看出当基波光的入射角是  $\pi/4$  时，倍频的强度最



图(5.4) 倍频光强与基波光的入射角的关系图。

大，也就是当满足准位相匹配时，倍频光能够有效的产生。当满足准位相匹配条件时，倍频光的光强与 Y 方向的周期数的关系如图(5.5)所示，



图(5.5) 倍频光的光强在准位相匹配条件满足的情况下随 Y 方向的周期数的关系图。

倍频光随 Y 方向的周期数满足平方关系，这和一维的光学超晶格中的结论是完全一样的。实际上我们可以从关系式(5.16)看出倍频光有如下的关系：

$$I(2\omega_{\vec{k}_1, \mu 1}) \propto |E_{2\vec{k}_1, \mu 1}(\vec{x})|^2 F(\vec{k}, \mu, \vec{k}_1, \mu 1)^2 \text{sinc}^2 \left( \frac{(2\vec{k}_1 - \vec{k})_y N_y a}{(2\vec{k}_1 - \vec{k})_y a} \right) \quad (5.18)$$

式中的 sinc 代表  $\frac{\sin(x)}{x}$ 。表明倍频光正比于有效非线性系数的平方，正比于基波光强的平方。这些结论都和一维光学超晶格中倍频产生的规律完全一样[8]。

综上所述，在二维金属光子晶体中可以实现有效的二倍频产生，其产生机制与 X 射线衍射的产生是一样的，这使我们可以利用 Ewald 球等概念描述这一非线性过程；二倍频强度与各参数之间的关系和在一维光学超晶格中的一样。

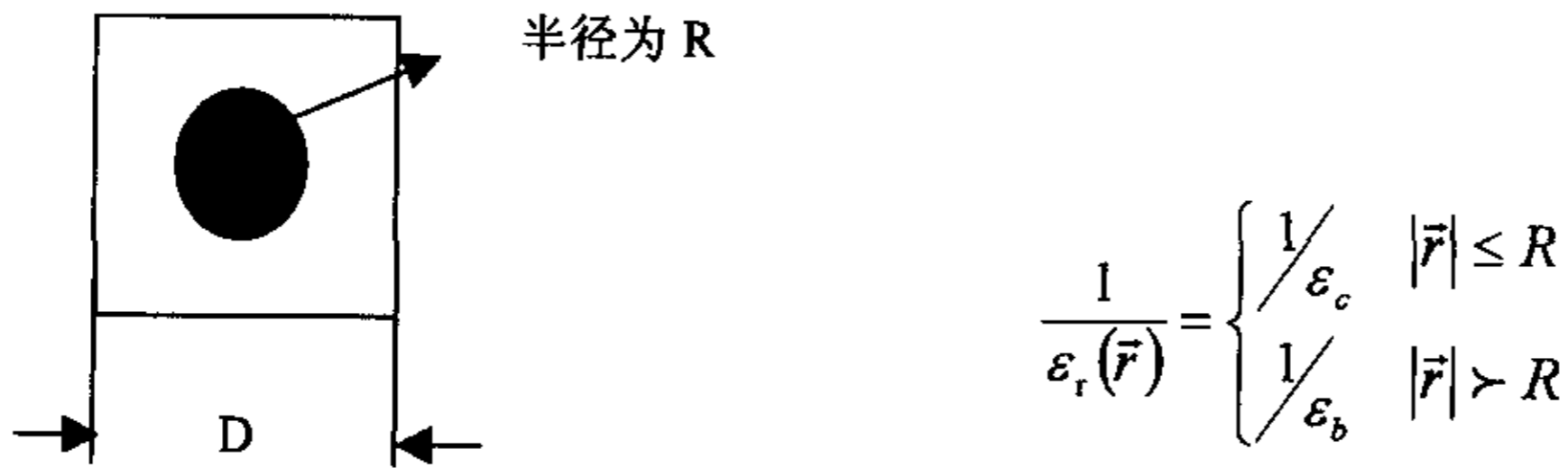
【参考文献】

- [1] M. M. Fejer, G. A. Magel, D. H. Jundt and R. L. Byer, *IEEE J. Quantum Electron.* **28**, 2631 (1992)
- [2] J. Martorell, R. Vilaseca and R. Corbalan, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 702 (1997)
- [3] K. Sakoda and K. Ohtaka, *Phys. Rev. B.* **54**, 5742 (1996)
- [4] Y. R. Shen, *The Principles of Nonlinear Optics* (Wiley, New York, 1984)
- [5] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, ed 6, 1996)
- [6] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, ed .2, 1975)
- [7] P. B. Johnson and R. W. Christy, *Phys. Rev. B*, **6**, 4370 (1972)
- [8] A. Yariv and P. Yeh, *Optical Wave in Crystal* (Wiley, New York, 1984)

## 附录 1. 介电函数在二维正方和石墨结构中的 Fourier 展开系数

介电函数的 Fourier 系数对于光子晶体能带的计算很重要，一般情况下没有解析解。当一种介电质以圆柱形分布在一个背景中时，Fourier 系数有解析解。下面推导介电质分布成二维正方结构和石墨结构情况下的介电函数的 Fourier 展开系数。

假设正方结构的介电函数的分布如下图所示



根据 Fourier 级数的定义可得

$$\frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} \epsilon_r(\vec{G}) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}) \quad (1)$$

其中

$$\epsilon_r(G) = \frac{1}{S} \iint_{WS} \frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) dx dy \quad (2)$$

式中的  $S$  为 Weigner-Seitz 原胞的面积，即在一个 Weigner-Seitz 原胞内积分。

式(2)可以写成

$$\epsilon_r(G) = \frac{1}{S} \iint_{WS} \frac{1}{\epsilon_b(\vec{r})} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) dx dy + \frac{1}{S} \left( \frac{1}{\epsilon_c} - \frac{1}{\epsilon_b} \right) \iint_{\text{圆柱内}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) dx dy \quad (3)$$

容易证明式中第一项为零，而第二式可以如下处理

$$\text{因为} \quad \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) = \sum_m i^m J_m(Gr) \exp(im\phi) \quad (4)$$

式中的  $J_m$  是  $m$  阶第一类 Bessel 函数， $i$  为纯虚数， $\phi$  为  $\vec{r}$  矢量的幅角。将(4)

式代入(3)式并在极坐标中进行积分，则介电函数的 Fourier 系数为：

$$\varepsilon_r(G) = \frac{1}{S} \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) \sum_m i^m \int_0^{2\pi} \exp(im\phi) d\phi \int_0^R J_m(Gr) r dr \quad (5)$$

所以

$$\varepsilon_r(G) = \frac{1}{S} \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 2\pi \int_0^R J_0(Gr) r dr \quad (6)$$

利用 Bessel 函数的性质

$$J_0(x)x = \frac{d}{dx} J_1(x)x \quad (7)$$

代入(6)可得

$$\varepsilon_r(G) = \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 2 \frac{\pi R^2}{S} \frac{J_1(GR)}{GR} \quad (8)$$

而当  $G=0$  时易得

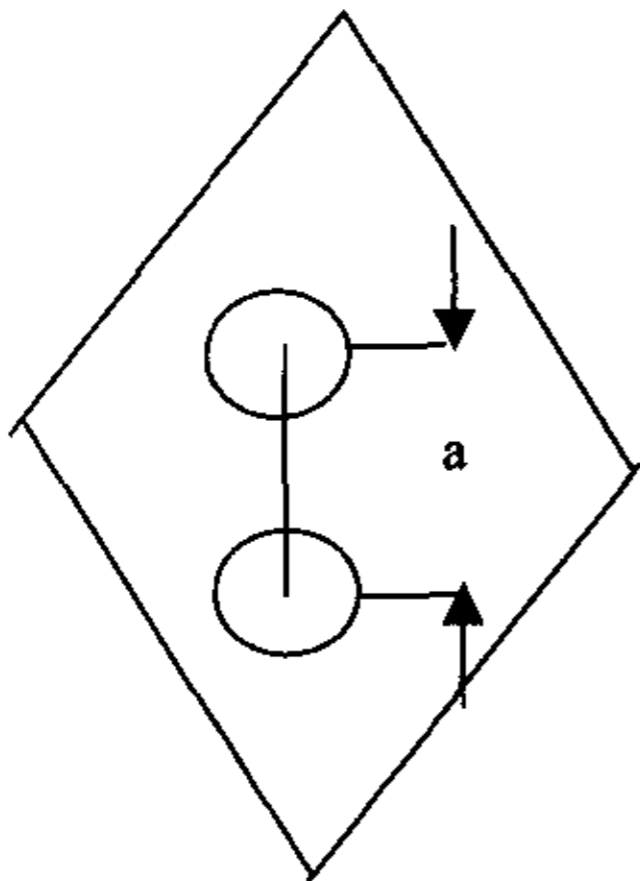
$$\varepsilon_r(G) = \frac{f}{\varepsilon_c} + \frac{1-f}{\varepsilon_b} \quad (9)$$

式中的  $f = \pi R^2 / S$ 。

综上所述可得

$$\varepsilon_r(G) = \begin{cases} \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 2 \frac{\pi R^2}{S} \frac{J_1(GR)}{GR} & |\vec{G}| \neq 0 \\ \frac{f}{\varepsilon_c} + \frac{1-f}{\varepsilon_b} & |\vec{G}| = 0 \end{cases} \quad (10)$$

当这些圆柱排成石墨结构时，由于一个 Weigner-Seitz 原胞内含有二个原子则必须考虑到这二个散射体的相对位相。这时介电函数的分布如下图所示，除了考虑到位相不同之外，上面的处理办法可以完全使用。



将二个圆柱的圆心联线的中点作为原点，这二个圆柱对 Fourier 系数的贡献相差一个位相因子，所以

$$\varepsilon_r(G) = \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 2f \left( \exp(i\vec{G} \cdot \frac{a}{2} \vec{e}_y) \right) \cdot \frac{J_1(GR)}{GR} + \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 2f \left( \exp(-i\vec{G} \cdot \frac{a}{2} \vec{e}_y) \right) \cdot \frac{J_1(GR)}{GR}$$

即

$$\varepsilon_r(G) = \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 4f \cos(\vec{G} \cdot \frac{a}{2} \vec{e}_y) \frac{J_1(GR)}{GR}$$

当 $|\vec{G}|$ 等于零时

$$\varepsilon_r(G) = \left( \frac{2f}{\varepsilon_c} - \frac{1-2f}{\varepsilon_b} \right)$$

所以对于圆柱排成石墨结构时的介电函数的 Fourier 系数是

$$\varepsilon_r(G) = \begin{cases} \left( \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) 4 \frac{\pi R^2}{S} \frac{J_1(GR)}{GR} \cos\left(\vec{G} \cdot \frac{a}{2} \vec{e}_y\right) & |\vec{G}| \neq 0 \\ \frac{2f}{\varepsilon_c} + \frac{1-2f}{\varepsilon_b} & |\vec{G}| = 0 \end{cases} \quad (11)$$

## 附录 2. Bessel 函数的加法定理

加法定理是计算电磁波散射时一个非常重要的定理。所谓加法定理即将一个坐标系的波函数用另一个坐标系的波函数表达出来。现将这一定理的结果在这一附录中给出，详细的推导可以在 Y. Z. Zhou 的“Wave Propagation in the Inhomogeneous Media”中查到。

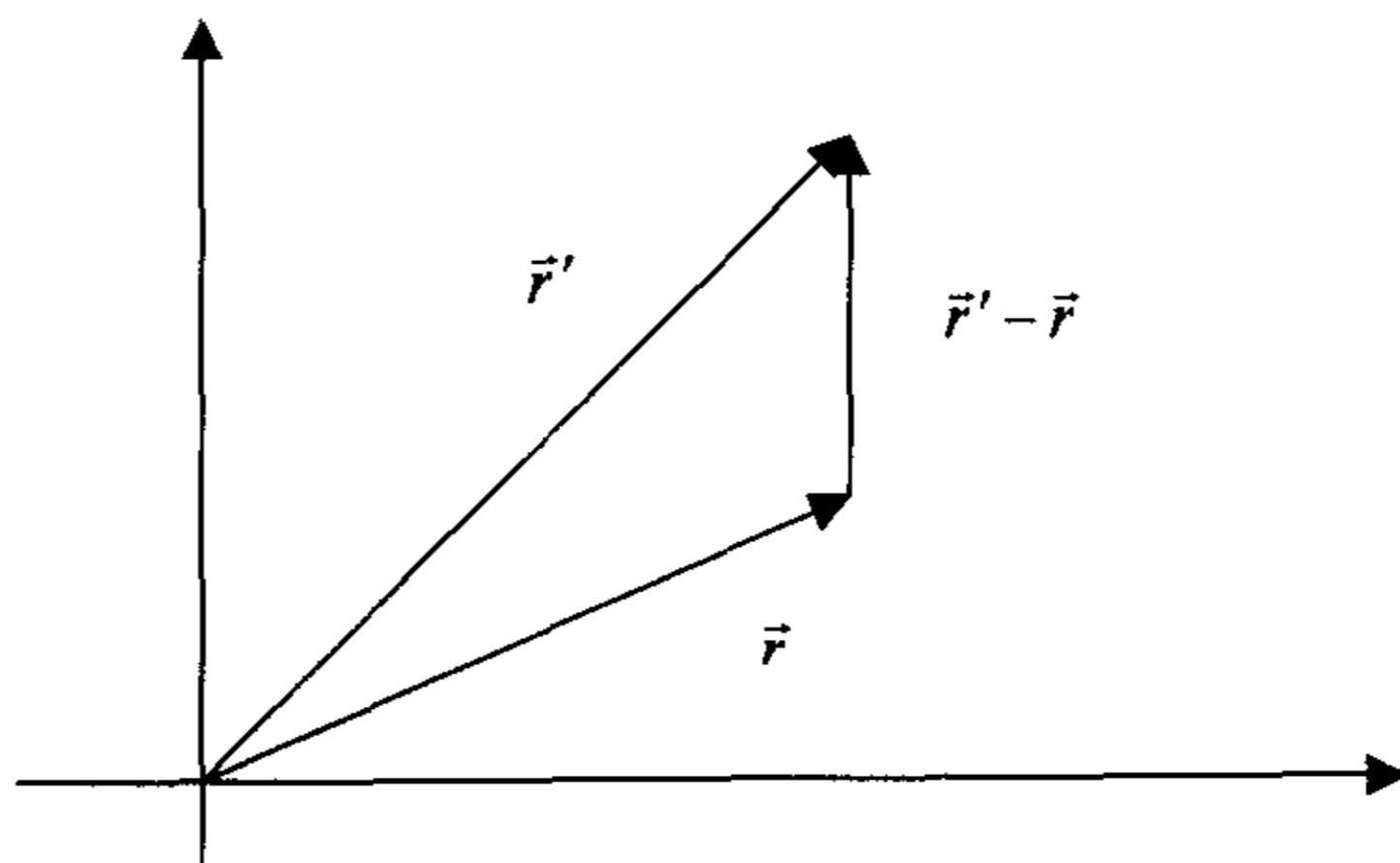


图 (1)

加法定理所涉及的三个矢量示于图(1),  $\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}' - \vec{r}$  相对的幅角分别是  $\phi_{\vec{r}}, \phi_{\vec{r}'}, \phi_{\vec{r}' - \vec{r}}$  那么第三类 Bessel 函数的加法定理按如下形式展开

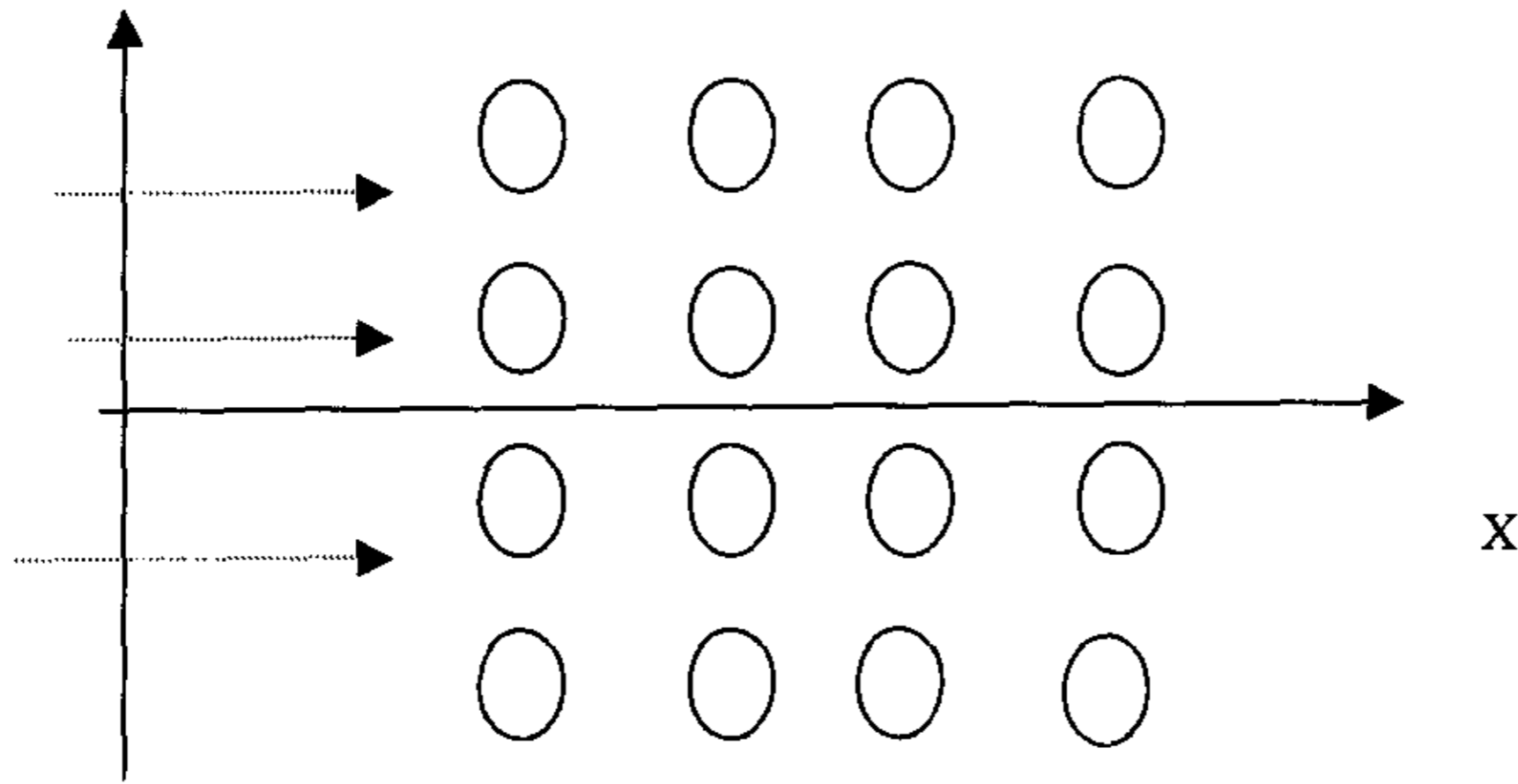
$$H_m^1(k_0|\vec{r}' - \vec{r}|)\exp(im\phi_{\vec{r}' - \vec{r}}) = \begin{cases} \sum_n J_{n-m}(k_0r')H_n^1(k_0r)\exp\{in\phi_{\vec{r}} - i(n-m)\phi_{\vec{r}'}\}, & r > r' \\ \sum_n H_{n-m}^1(k_0r')J_n(k_0r)\exp\{in\phi_{\vec{r}} - i(n-m)\phi_{\vec{r}'}\} & r' > r \end{cases}$$

式中  $H$  的上标 1 代表第三类 Bessel 函数，式中的级数原则上将从负无穷的整数到正无穷。由于 Bessel 函数的形态非常适合描述波的行为，所以仅需展开到有限项，就可以很好的近似描述场的形态。其他类型的 Bessel 函数的加法定理也可以在上面所讲到的书中找到。

### 附录 3. 三种不同外场在以圆柱为中心的局域坐标的展开系数的推导

入射外场在以圆柱为中心的局域坐标的展开系数是多重散射计算透射谱的一个非常关键的问题，现在将比较常见的三种情况列在下面。

(1) 平面波入射到有限的二维光子晶体中，如下图所示：



入射的平面波可以用下式表示：

$$u_{incident} = A \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) \quad (1)$$

而对于任何一个  $\vec{r}$  矢量均可以表示为

$$\vec{r} = \vec{R}_i + \vec{r}_i \quad (2)$$

式中的第二项代表  $\vec{r}$  矢量在坐标原点为  $\vec{R}_i$  的局域坐标的矢量，所以(1)可以写成

$$u_{incident} = A \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}_i + ik_0 r_i \cos(\phi)) \quad (3)$$

式中已经假定波沿着 X 方向传播，式中的  $\phi$  即  $\vec{r}_i$  的幅角，将指数函数按 Bessel 函数展开可得：

$$u_{incident} = A \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}_i) \sum_m i^m J_m(k_0 r_i) \exp(im\phi_{r_i}) \quad (4)$$

所以当平面波入射时，入射场的局域展开系数是

$$A_m^0(i) = A \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}_i) \cdot i^m \quad (5)$$

(2) 当入射波场是 Bessel 函数时，即外场为

$$u_{incident} = \sum_m A_m H_m(k_0 r) \exp(im\phi) \quad (6)$$

因为对于任何一个  $\vec{r}$  矢量均可以表示为

$$\vec{r} = \vec{R}_i + \vec{r}_{\vec{r}_i} \quad (7)$$

利用附录(2)中的加法定理可以将入射场局域展开：

$$\begin{aligned} u_{incident} &= \sum_m A_m H_m(k_0 |\vec{r}_{\vec{r}_i} - (-\vec{R}_i)|) \exp(im\phi) \\ &= \sum_n \left( \sum_m A_m H_{n-m}(k_0 R_i) \exp(-i(n-m)\phi_{\vec{R}_i}) \right) J_n(k_0 r_{\vec{r}_i}) \exp(in\phi_{\vec{r}_i}) \end{aligned} \quad (8)$$

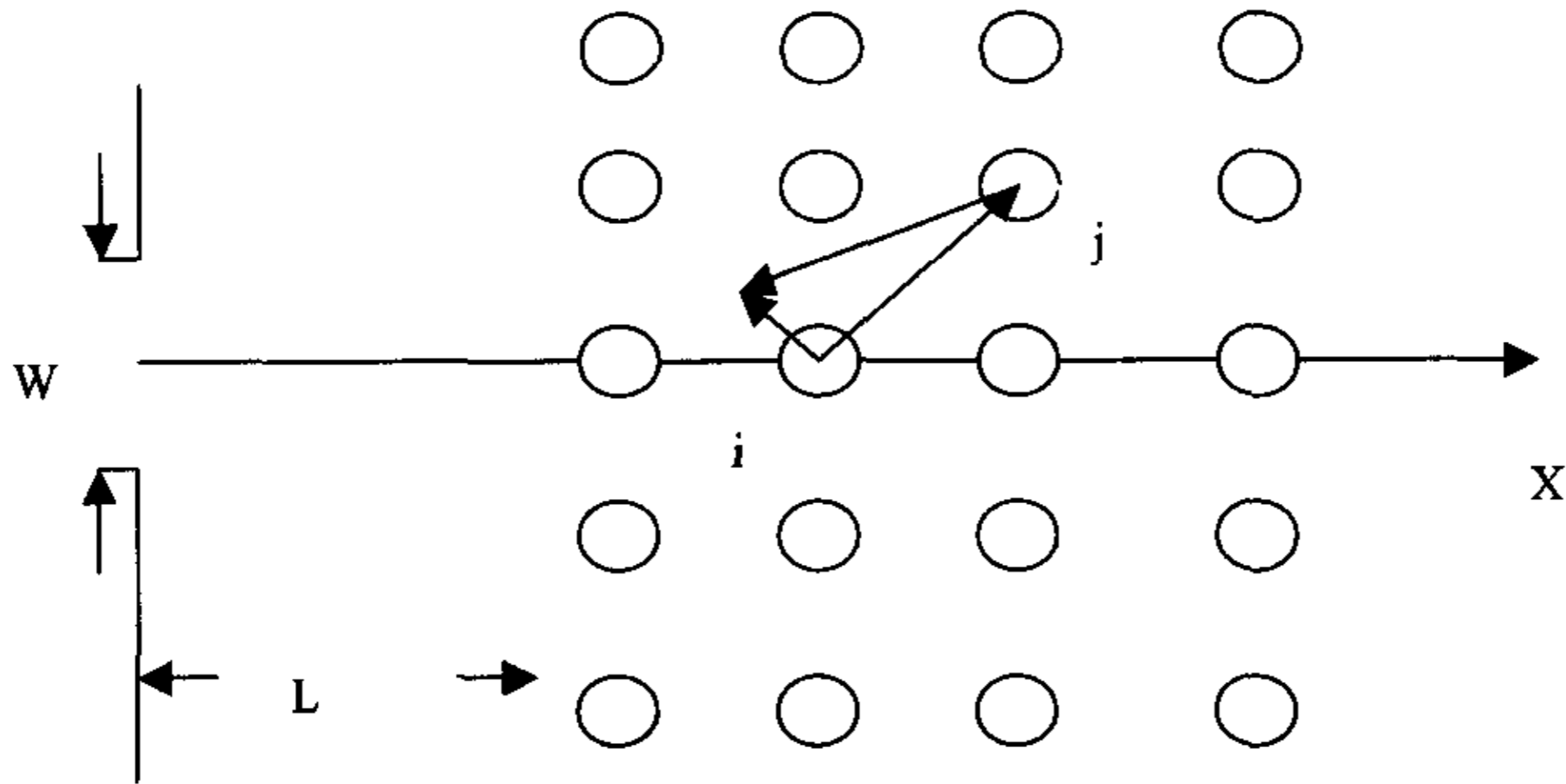
因此入射场的局域展开系数是

$$A_n^0(i) = \sum_m A_m H_{n-m}(k_0 R_i) \exp(-i(n-m)\phi_{-\vec{R}_i}) \quad (9)$$

通常我们假设仅有零阶的谐波入射，这样上式可写为

$$A_n^0(i) = A_0 H_n(k_0 R_i) \exp(-in\phi_{-\vec{R}_i}) \quad (10)$$

(3) 入射波是平面波，但进入光子晶体前被一狭缝挡住的情况(如下图所示)



在狭缝左边的入射波是平面波  $\exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r})$ ，穿过狭缝后的场分布可以按 Kirchhoff 定理得到(这一推导可以在 J. D. Jackson 的电动力学中找到)

$$u_{incident} = \frac{k_0}{4} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} dy' \left[ H_0(k_0 |\vec{r} - y' \vec{e}_y|) + i \frac{x}{|\vec{r} - y' \vec{e}_y|} H_1(k_0 |\vec{r} - y' \vec{e}_y|) \right] \quad (11)$$

$$\text{式中的 } \frac{x}{|\vec{r} - y' \vec{e}_y|} = \cos(\phi_{\vec{r} - y' \vec{e}_y}) = \frac{1}{2} (\exp(i\phi_{\vec{r} - y' \vec{e}_y}) + \exp(-i\phi_{\vec{r} - y' \vec{e}_y}))$$

将上式代入(11)式, 考虑到 Bessel 函数的加法定理, 经过一系列的运算可以得到:

$$u_{incident} = \frac{k_0}{2} \sum_n H_n(k_0 r) \exp(in\phi) Q_n \quad (12)$$

式中的  $Q_n$  等于

$$Q_n = \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \int_0^{\frac{w}{2}} dy' J_n(k_0 y') - i \cos\left(\frac{n+1}{2}\pi\right) \int_0^{\frac{w}{2}} dy' J_{n+1}(k_0 y') - i \cos\left(\frac{n-1}{2}\pi\right) \int_0^{\frac{w}{2}} dy' J_{n-1}(k_0 y')$$

再考虑到关系式(2), 用 Bessel 函数的加法定理, 将式(12)展开

$$u_{incident} = \frac{k_0}{2} \sum_m \left( \sum_n Q_n H_{m-n}(k_0 R_i) \exp(-i(m-n)\phi_{-\vec{R}_i}) \right) J_m(k_0 r_n) \exp(im\phi_{r_n})$$

所以入射场的局域展开系数是

$$A_m^0(i) = \frac{k_0}{2} \left( \sum_n Q_n H_{m-n}(k_0 R_i) \exp(-i(m-n)\phi_{-\vec{R}_i}) \right) \quad (13)$$

对于式(13)中级数到底取到几级必须小心对待。有了入射波的局域展开系数后就可以方便地计算光子晶体的散射问题了。

## 结束语

本论文分成二个部分：一部分从实验和理论上研究了三组元 Fibonacci 光学超晶格中的倍频和三倍频的产生；另一部分从理论上研究了二维光子晶体中若干线性与非线性效应，结论如下：

1. 在三组元 Fibonacci 光学超晶格中能够实现多波长的倍频和三倍频的产生，而且这二个过程能够耦合级联产生，二倍频谱显示出三组元 Fibonacci 准周期结构中固有的自相似性。
2. 在由理想金属构成的二维光子晶体中，如果金属的占空比超过一定的值，在该系统中能够实现二维全带隙。
3. 由超导体构成的二维光子晶体的能带可以随温度的改变而改变，所以在一定的温度范围内，该系统的能隙可以由温度调节。
4. 利用金属表面的二级非线性光学性质和由金属构成的二维光子晶体的周期性，二次谐波可以有效的产生，它产生的机制比较象 X 射线衍射的产生机制，二次谐波在该系统中和相关量的关系与二次谐波在一维光学超晶格中的相应关系是一样的。

## 致谢

在本论文完成之际，心中感慨万千。细细思量在南京读书渡过的七个春秋，特别是在实验室工作的三年半时间，深有感触。

首先要特别感谢朱永元教授，可以说是朱老师手把手把我教出来的。朱老师物理概念清楚，对实际工作中的问题始终保持着高度的关注，对我的培养付出了相当的精力和时间。曾记得朱老师字斟句酌地帮我改文章和提出改进的方案，并鼓励我拓宽自己的视野，对我在新领域中取得的任何进步总是加以鼓励和支持。正是在这样的环境中我学到了许多。

祝世宁教授是我的第二个指导老师。他毫无保留的将自己的实验技能和理论知识传授给我。虽然行政工作占去了他大部分的时间和精力，但对于学生的问题和疑问，总是尽其所能帮助解决或提出解决方案。他对实验工作坚韧的毅力和执著将永远指导着我。

张超同学和我从本科起就同处一实验室，情同兄弟。由于本论文中需要进行大量的数值计算，如果没有张超同学的帮助，我一个人是绝对做不出这些东西的。在实验室中我们就像在一个大家庭中，大家都用心地干好自己的工作，并且互相帮助，相处十分融洽。还要感谢实验室中的杜燕硕士，刘辉博士，刘照伟硕士，魏洪硕士，罗国珍硕士，奚元新硕士，张学进硕士，王飞硕士，以及原来在我们实验室工作过的胡颖同学。正是我们互相鼓励帮助才在多重散射方法计算光子晶体的透射谱工作中取得进展。

感谢我的大哥，大嫂和小侄女。是我的大哥引导我到学术这条路上来，他不仅在生活上照顾我，而且在学术上教育我，把他做学问的经验教训毫无保留地传授给我，和他的讨论使我很快地掌握了许多问题的关键点。大嫂在我来南京的七年中给了我莫大的帮助和鼓励。小侄女的天真可爱给我的生活增添了许多乐趣。

在工作中和胡安教授，张维益教授，金国钧教授，王振林教授的讨论使我受益匪浅。光学实验工作中王慧田教授，何京良教授也传授了我许多知识。

最后感谢我的父亲和母亲，还有所有的亲戚，真是他们一如既往的支持使我能够安心读书。

硕士期间发表的论文:

- [1] "Optical harmonic generation in a quasi-phase-matched three-component Fibonacci superlattice  $\text{LiTaO}_3$ ", **Y. B. Chen**, C. Zhang, Y. Y. Zhu, S. N. Zhu, H. T. Wang, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 577 (2001)
- [2] "Second-harmonic and third-harmonic generation in a three-component Fibonacci optical superlattice", **Y. B. Chen**, Y. Y. Zhu, Y. Q. Qin, C. Zhang, S. N. Zhu and N. B. Ming, *J.phys: Condens. Matt.* **12**, 529 (2000)
- [3] "Domain Reversal in Er:LN by External Field Poling", **Y. B. Chen**, Y. Du, S. N. Zhu, Y. Y. Zhu and N. B. Ming, *Ferroelectrics* (accepted)
- [4] "Tunable Photonic Crystals with Superconductor Constituents", **Y. B. Chen**, C. Zhang, Y. Y. Zhu, S. N. Zhu and N. B. Ming, (preparation)
- [5] "Second Harmonic Generation in two-dimensional metal optical crystals", (preparation)