

## 第一章 绪论

### § 1.1 前言

对新材料的探索一直是人类孜孜不倦追求的目标和进步手段。人类社会的文明和进步总是与新材料的诞生、研制成功密切相关的。从远古的石器时代、铁器时代、铜器时代，到不锈钢、塑料、高分子材料、半导体光电材料、光纤、超导体材料、纳米材料以及光子晶体，无不引发起生产力的一场重大变革，巨大地推动社会的发展。如上个世纪对半导体材料的研制导致了一场轰轰烈烈的电子工业革命，我们的科技和生活水平有了一个突飞猛进的跨越，并藉此进入了以计算机和信息高速公路为标志的信息时代。电子器件、半导体器件对社会和科技发展进步的作用是非常巨大的，但是随着科技的进步，它们已经不能满足需求，人们必须寻找速度更快、效率更高的新一代材料。

信息科学和产业梦寐以求的是如何实现更快速、大容量、抗干扰性强以及更低能耗的信息传输。目前的电子学技术已接近理论极限，因此，人们自然想到能否利用光子作为信息载体呢？因为光子有着电子所不具备的十分突出的优点：传播速度快，频带宽（可达到几十兆赫兹），光子之间没有相互作用，因此能耗低，非电子性抗干扰能力强。目前光通讯中所使用的光纤传输，仅仅起传输功能，信息的输入和输出方法仍旧依靠传统的电子器件，因而大大地限制了传输效率。

人们期盼的是全光型的集成功能器件：新型的微型激光源、光波导（光子晶体光纤）、光开关、光放大器、光调制器以及高密度集成的波分复用器等。光子晶体的提出和研制成功，使人类梦想成真。控制光子的流动，就像控制金属和半导体中的电子一样。这样一来，将有可能实现全光通讯，制造光子计算机。光子晶体这一新型材料在未来的电子产业中具有极其诱人的应用前景。

光子晶体一旦走出实验室，走上生产线，必将为人类社会带来又一场科技革命。因此对光子晶体及其与光的相互作用的研究，不但使人们对光与物质的相互

作用的基本知识有所了解,而且它的应用和发展使得我们能够探索性地去找寻新型材料,这类材料将会导致全新的“光子学器件”的出现,从而给科学技术的进步和人类文明的发展带来新的推动力。光子晶体的研究已不仅仅是通讯领域的问题,它同时对其他相关产业都将产生巨大的影响。

### § 1.2 光子晶体

光子晶体的物理概念首先提出于 1987 年,是由美国贝尔通讯研究中心的 Yablonovitch[1]和普林斯顿大学物理系的 John[2]在研究周期性电介质结构对材料中的光传播行为的影响时分别独立地提出来的。

光子晶体是由不同介电常数的介电材料所形成的周期性结构,它具有一些特殊的频率范围,在这个频率范围内的电磁波在光子晶体里沿任何方向都不能传播。光子晶体的提出和研制成功使得人们能够像控制金属和半导体中的电子一样可以灵活地控制光子。

其实,早在 1945 年, E. M. Purcell[3]在原子自旋能级的回顾中就预见性的提出,自发辐射很可能是可以被控制的。1958 年, P. W. Aderson [4]在其开拓性的定域化理论中提到光的传播也是可以在某一特定的材料中得到控制而定域其中的。1975 年, B. Bykov[5]提出一维周期性同轴线可能会影响到自发辐射。这些思想展现了人们在早期对于光子晶体这一类材料的设想和探索。1985 年, Kleppner[6]等首先发现了被放置在金属波导内的 Rydberg 原子的自发辐射受到抑制,这个现象引起了人们的注意。由于金属波导在高频段的损耗较大,所以这一微波段的实验不能扩展到红外和可见光区域,但是这毕竟指出了一条研究的道路,接着人们开始考虑使用拥有正介电常数的电介质所组成的结构,在这个基础上, Yablonovitch 为了控制材料的自发辐射特性,而 John 则着眼于光子在无序介质中的局域化效应的研究,分别提出了光子晶体的概念,从而掀起了全世界范围内的研究热潮。由于光子晶体的许多新的性质及其广阔的应用前景,在其以后的十几年里得到了广泛的研究。

### § 1.2.1 光子晶体的能带结构

由两种或两种以上的电介质在空间中做周期性排列就得到光子晶体,如图 1-1 所示。光子晶体是根据传统晶体的概念类比而来的。在半导体晶体中,电子受原子周期排列所构成的周期性势场的作用,它的能谱成带状结构。由于原子的布拉格散射,能量在布里渊区边界上变得不连续,出现带隙。在光子晶体中,也存在类似的周期性势场,它是由介电常数在空间的周期性变化所提供的。当介电常数的变化幅度较大并且变化周期与光的波长相比拟时,介质的布拉格散射也会产生带隙,相应于此带隙区域的那些频率的光将不能通过介质,而是被全部反射出去。由于周期性结构的相似性,普通晶体的许多概念都可以被引入光子晶体中,如能带、带隙、能态密度、缺陷态等等。

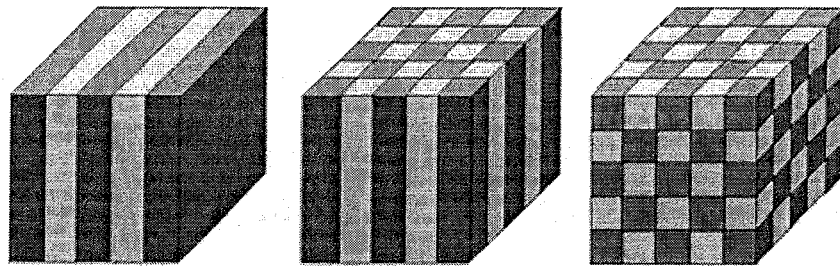


图 1-1 一维、二维和三维光子晶体示意图

#### 1、 电子能带与光子能带的比较

光子能带的概念是把电磁波在周期性的复合介质中的传输和实际晶体中电子的传输相类比,也就是把介电周期结构中的麦克斯韦方程与晶体中的薛定谔方程相类比而引入的。

在固体物理研究中发现,晶体中周期性排列的原子所产生的周期性势场对电子有一个特殊的约束作用。在晶体中,当把电子的运动近似地看作在一个等效势场中运动时,其波函数满足薛定谔方程,即

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi = E\Psi \quad (1-1)$$

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad (1-2)$$

在上式中， $V(\mathbf{r})$  表示势能，具有周期性，其周期为晶格常数  $\mathbf{R}_n$ 。

求解以上方程式可以发现，电子的能量  $E$  只能取某些特殊值，在某些能量区间内该方程无解，也就是说电子的能量不可能落在这样的能量区间内，通常称之为能量禁带。研究还发现，电子在这种周期性结构中的德布罗意波长与晶体的晶格常数具有大致相同的数量级。

由电磁学理论可知，对于频率为  $\omega$  的光在周期性电介质中传播时，其电矢量满足的麦克斯韦方程为：

$$-\nabla^2 \mathbf{E} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (1-3)$$

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) \quad (1-4)$$

其中， $\varepsilon_0$  是介质的平均介电常数， $\varepsilon(\mathbf{r})$  是具体位置的介电常数，当光子在介电常数做周期性变化的介质中传播时，它是一个周期函数。

比较上面两组方程式，可以建立以下的类比关系：

$$\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}) \Leftrightarrow V(\mathbf{r}) \quad (1-5)$$

$$\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0 \Leftrightarrow E \quad (1-6)$$

它们具有类似的形式，即介电常数的周期性变化相当于势能的变化，而  $\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0$  相当于能量本征值。

求解麦克斯韦方程式，可以得到与求解薛定谔方程相似的结果：频率  $\omega$  只能取一些特定的值，而在其他频率取值范围内麦克斯韦方程无解。这说明在介电常数呈周期性分布的介质中，某些频率段的电磁波的传播是被禁止的。这些被禁止的频率区间通常被称为“光子带隙”。频率落在这些带隙中的电磁波是被严格禁止传播的。实际制备的光子晶体多由两种介电常数不同的物质构成，其中低介电物质通常采用空气。如图 1-2 所示。

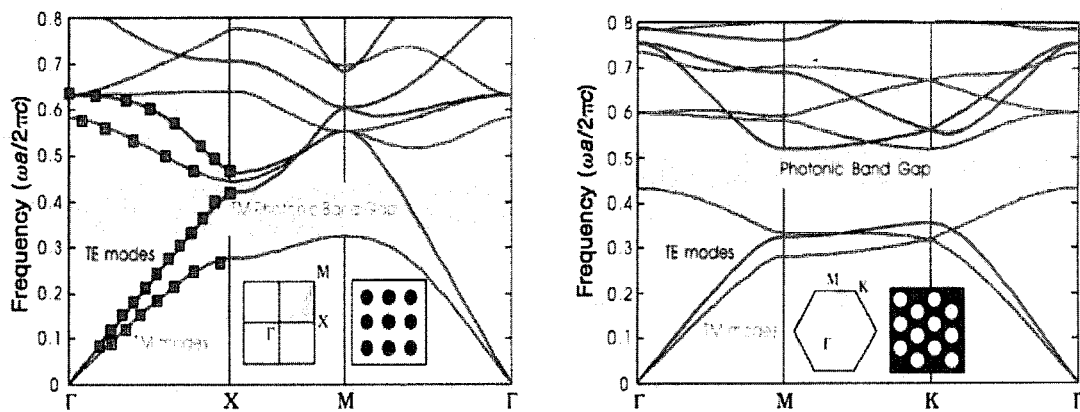


图 1-2 二维光子晶体的带隙结构；左图表示半径为  $r = 0.2a$  的电介质圆柱 ( $\epsilon = 8.9$ ) 排成的格点常数为  $a$  的四方点阵，空气为背景，只对 TM 模式出现不完全带隙；右图是排成三角格子的空洞  $r = 0.48a$  在介质 ( $\epsilon = 13$ ) 中，对 TM 和 TE 模式出现完全带隙。插图中深色均为高介电物质。

## 2、光子带隙

光子晶体最根本的特征是具有光子带隙。光子带隙是指在一定频率范围内的光子，在光子晶体内某些方向上是被严格禁止传播的。光子带隙有完全带隙与不完全带隙的区别。所谓完全带隙，是指光在整个空间的所有传播方向上都有带隙，且每个方向上的带隙能相互重叠；不完全带隙，相应于空间各个方向上的带隙并不完全重叠，或只在特定的方向上有带隙。

光子带隙的出现依赖于以下几个因素：一是光子晶体的结构，二是介电常数的配比，三是光子晶体的几何构形。一般来说，如果光子晶体中两种介质的介电常数的差异足够大，在介质交界面就会发生布拉格散射而且介电常数比越大，入射光将被散射的越强烈，出现光子带隙的可能就越大。现在一般认为要出现比较完整的光子带隙，即对任意偏振方向即传播方向的光都存在禁带，两种介质的折射率之比应该大于 2[7]，对于小于 2 的情况，光在一些特定传播方向或在一定的偏振方向上也会出现带隙。而对于晶格结构而言，由于带隙产生于布里渊区的边界处，原则上完全带隙更容易出现在布里渊区是接近球形的结构中。

通过对一些简单结构的分析知道，面心立方 FCC 是具有最接近球形布里渊

区的空间周期结构（见图 1-3）。图 1-4 表示 FCC 结构中的光在两个不同传播方向上的带隙。下面以面心立方 FCC 为例来讨论完全带隙将在怎样的结构中出现。考虑 FCC 的两个方向， $L$  方向代表立方体的对角线方向， $X$  方向代表立方体任一边的方向。在 FCC 第一布里渊区边界处，即能隙出现的地方， $\omega_L$ （ $L$  方向传播的光频率）与  $\omega_X$ （ $X$  方向传播的光频率）相差约为 14%，因此，必须在每个方向上的能隙足够大，使它们能相互重叠，才可能产生完全带隙，否则只可能是不完全带隙。

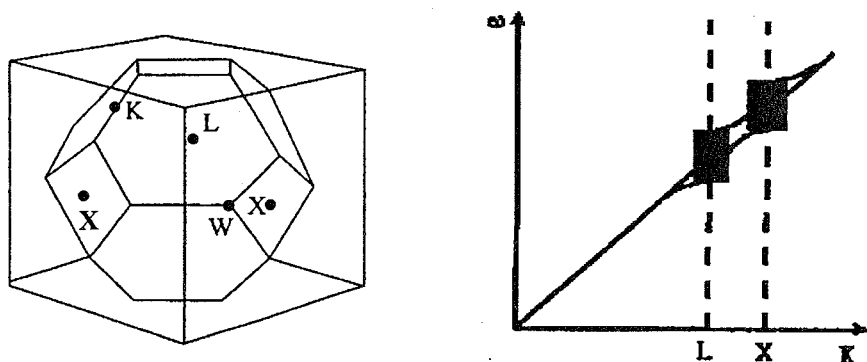


图 1-3 面心立方结构的布里渊区

图 1-4 面心立方结构中，光在两个不同方向上的能隙。

由能带理论计算得知，由球形颗粒构成的面心立方结构具有很高的对称性，对称性引起的能级简并使它只存在不完全的能隙[8-9]。为了得到具有完全能隙的光子晶体结构，需要从两个方面考虑：1) 提高周期性介电函数的变化幅度，即要有高的折射率反差；2) 从结构上消除对称性引起的能级简并，为此，在 FCC 结构的晶胞内引入两个球形粒子构成金刚石结构，能产生很宽的完全带隙[10]。通过引入非球形的晶胞颗粒也能消除能级简并，从而产生完全的光子带隙[11-14]。利用材料介电常数的各向异性，在 FCC、BCC、SC 等各种简单晶格中也将产生部分能隙[15-16]。此外，在介电材料中引入彼此分离的金属颗粒构成的复合光子晶体，将具有很宽的完全能隙[17]，然而由于在可见光和红外波段金属材料的强烈耗散，这种光子晶体的效率很低。

## § 1.2.2 光子局域

光子晶体的另一个主要特征是光子局域，它是与光子晶体中的缺陷能级紧密相连的。与高纯度半导体晶体中掺杂而显著改变半导体材料的电学、光学特性类似，可以在光子晶体中引入杂质和缺陷，在光子带隙中产生相应的缺陷能级（如图 1-5 所示）。John 于 1987 年提出，在一种经过精心设计的无序介电材料组成的超晶格（相当于现在所成的光子晶体）中，光子呈现出很强的 Anderson 局域。如果在光子晶体中引入某种程度的缺陷，和缺陷态频率吻合的光子有可能被局域在缺陷位置。一旦其偏离缺陷处，光就将迅速衰减。当光子晶体理想无缺陷时，根据其边界条件的周期性要求，不存在光的衰减模式。但是，一旦晶体原有的对称性被破坏，在光子晶体的禁带中央及可能出现频宽极窄的缺陷态。

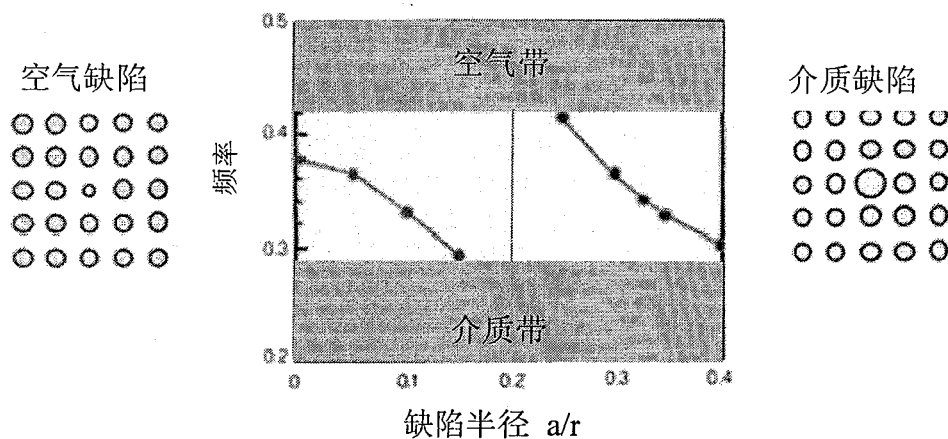


图 1-5 光子晶体的缺陷能级图

光子晶体有点缺陷和线缺陷。在垂直于线缺陷的平面上，光被局域在线缺陷位置，只能沿线缺陷方向传播。点缺陷仿佛是被全反射墙完全包裹起来。利用点缺陷可以将光“俘获”在某一个特定的位置，光就无法从任何一个方向向外传播，这相当于微腔。

当缺陷是由引入的高介电材料所致（图 1-5 右），其特性类似于半导体掺杂中的施主原子，相应的缺陷能级起始于空气带底，并随缺陷尺寸的变化而移向介电带。当缺陷是由移去部分高介电材料所致（图 1-5 左），其特性类似于半导体掺

杂中的受主原子，相应的缺陷能级起始于介电带顶，并随缺陷尺寸的变化而移向空气带。因此，可以通过调节缺陷的结构、大小来控制缺陷能级在光子带隙中的位置由介电带顶到空气带底，限制相应于此能级频率的光向空间传播。

### § 1.3 光子晶体的制备与应用

光子晶体基本上是一种人工微结构，自然界里很少见，例如，自然界里在蛋白石和澳大利亚南部海滨的海老鼠的毛中，观察到带隙结构。但是，这些都不具有完全带隙结构。自然界中没有天然的完全带隙。在实验室和实际应用中，光子晶体都是人为加工而成的。

光子晶体的优良性质，得益于它具有带隙结构。光子带隙的产生所需要的条件是比较苛刻的。不仅折射率反差要大，还要求“原子”构型能够消除对称性所引起的能带简并。因此，设计有宽的带隙，而且实验上比较容易制作的光子晶体结构，成为一个非常重要的课题。

#### § 1.3.1 光子晶体的制备

一般地说，光子晶体的能带结构由很多参数决定，它们包括晶格类型、晶体中的“原子”与晶胞的尺寸之比，即占空比、以及“原子”的形态等等。因此，设计具有完全带隙的光子晶体，必须综合地考虑所有的因素。在光电子学领域里最具有应用潜力的是可见光和红外波段的三维完全带隙的光子晶体。由于光子晶体的晶格单胞和介质“原子”的尺寸大小要与光波的波长可以相比拟，因此，要获得可见光和红外波段的光子带隙，光子晶体的晶格常数必须为微米量级。比人类的头发还要细小 100 倍。这么微细的结构，需要诸如激光刻蚀术等半导体电子工业尖端的精密加工技术。十多年来，人们一直朝着这个目标前进，发展了一些制备方法。目前，制备光子晶体的方法主要有以下几种：

##### 1、精密加工法

精密加工方法是最为稳定可靠的一种方法，因为它以半导体工业成熟的技术

作为基础。在微波波段，由于晶格常数在厘米至毫米数量级，光子晶体的制作比较容易，用机械加工的方法就可以实现。最初的二维和三维的光子晶体就是用机械法制作出来的[18-19]。

1991年，E. Yablonovitch 及其合作者制作了第一块三维结构的光子晶体（如图 1-6 所示），方法是在折射率为 3.6 的材料上用机械方法开钻直径为 1mm 的孔，经测量发现确实在微波范围内存在一个宽的光子带隙。

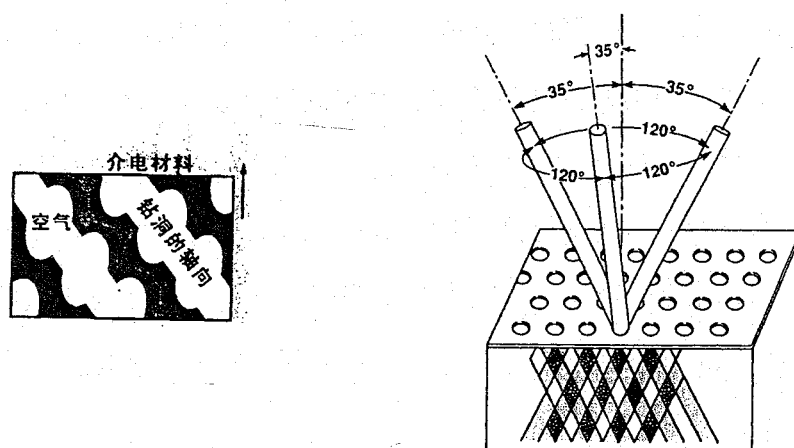


图 1-6 E. Yablonovitch 制作的三维光子晶体。

在更短的亚毫米和远红外波段，则利用微刻蚀的技术，包括光刻蚀术、电子束刻蚀术、反应离子束刻蚀术等精密加工技术手段。利用这些技术，可以比较容易地大量制作二维的光子晶体，直至红光和可见光波段。然而，受目前刻蚀技术和工艺的限制，制造红外和可见光波段的三维光子晶体，仍然十分困难。为此，人们提出了一些新的光子晶体的构造方案，如逐层刻蚀、外延生长法[20-21]直到最近，才成功地制造出远红外的三维光子晶体。但是这种方法的工艺流程比较复杂，造价昂贵。

## 2、自组装法

在构造光子晶体方面，还有一种工艺上很简单的技术，它是利用单分散的胶体颗粒悬浮液的自组装特性制备胶体晶体，由于胶体晶体的晶格尺寸在亚微米数量级，所以，可以生长可见光近红外波段的三维光子晶体。在 60 年代，人们就已经发现，单分散的聚苯乙烯乳胶球在水中能自发排列成面心立方、体心立方等

有序结构。目前已经制备的胶体晶粒多为聚苯乙烯乳胶体系和二氧化硅胶体颗粒体系。遗憾的是它们不具备高的介电比和合适的网络拓扑结构,为了提高介电比,制备出合适的网络拓扑结构,人们发展了模板法[17-21],即以颗粒小球所构成紧密堆积结构为模板,向小球间隙填充高介电常数的 Si、Ge、TiO<sub>2</sub> 等材料,然后通过煅烧、化学腐蚀等方法将模板小球除去,得到三维空间的周期结构,这种结构成为反蛋白石结构。

从上面可以看出,反蛋白石结构是指低介电系数的小球(通常是空气小球)以面心立方密堆积结构分布于高介电系数的连续介质中,此种结构有望产生完全带隙。此外,美国匹兹堡大学的 J. Holtz 和 S. Asber 制成“可调谐”光子晶体,方法是使聚合物小球在水凝胶膜层中悬浮,水凝胶由一种吸水性合成聚合物制成。这时,可以通过水凝胶的缩胀来调节带隙的波长。虽然胶体型结构很容易制作,且用极聪明的办法解决了尺寸的调整问题,但很难将其引入发光二极管激活异质结构中。

### 3、 激光全息光刻法

用先进的半导体技术来构造二维光子晶体已经取得了相当大的进展,但在构造可见光波段的三维光子晶体中依然有很大的困难。最近出现的激光全息光刻技术非常适合于制造具有亚微米尺度上周期性重复的三维结构,此技术是利用激光束的干涉和波长,可以改变三维形状的结构和尺寸。运用这项技术,不仅能够制备出具有微周期的聚合物结构,而且用它们作为模板,还可以制造出具有高折射指数的完全带隙结构[27-28]。

另外,还有其它方法,可以形成有序的晶体结构。例如利用多光束相干形成周期分布的干涉图案,改变光束的数目及空间方位,相干图案也随之改变。因此,如果处于悬浮液中的小颗粒能被光场束缚在极亮点中,这些颗粒就按照一定的周期结构排列成光子晶体,其周期常数为光波长量级。实验上已有多次报道,将聚苯乙烯颗粒、二氧化钛颗粒在水中排列成二维不同形状的周期结构[29]。还有双光子聚合方法[30]、溅射外延法[31]等等多种方法可以实现三维光子晶体结构。

### § 1.3.2 光子晶体的应用

用光子作为信息载体,最有希望的光学材料是光子晶体。由于光子晶体具有独特的调节光子传播状态的功能,大大丰富了光电子学本身的物理内涵。光子带隙的存在,并且缺陷态的引入能影响带隙的性质,从而起到控制自发辐射的作用,这大大拓宽了光子晶体的应用领域。光子晶体的应用范围是十分广泛的。当前,光子晶体应用方面的研究工作主要集中在以下几个方面:

#### 1、 高效率低损耗反射镜

在光子晶体中不允许光子频率带隙范围内的光子存在,所以当此范围内的一束光入射到光子晶体上时,就会被全反射。利用光子晶体光子禁带的特性可以制造高品质的反射镜。在短波区域,金属对光波的吸收损耗很大,而介质则对光波的吸收损耗非常小,因此利用这些特点可以用介质材料制成高效率的光子晶体反射镜[32],如一维光子晶体全方位反射镜[33]。另外,由于金属的趋肤效应,金属吸收的光集中在极薄的表层内,表层温度变得很高,容易造成金属反射镜的表层变形,使其质量严重下降。而由光子晶体制成的反射镜,由于它对光波的吸收分布在几个波长的范围内,所以因吸收而产生的热量分布在较大的体积内,光子晶体反射面的温度升高值也就比金属反射镜的小很多,这样光子晶体反射镜的表面就不会被烧坏。实际应用中,可以用光子晶体做小型平面微波天线的基底材料,制成高发射率的小型微波天线。也可以将其用于制作移动电话的天线,它会把辐射偏离使用者头部。

#### 2、 高发射率小型微波天线[34-35]

对于频率位于光子带隙范围内的光波,光子晶体的表面是一个理想的反射镜面,用它来做小型平面微波天线的基底材料,原来进入基底而损耗的能量将全部被光子晶体反射回空间,从而大大提高了天线的发射效率。以通常的 GaAs 作为基底的小型偶极平面微波发射天线来说,只有 2% 的能量被发射出去,其余 98% 的能量完全被耗散掉,并且使基底变热。Yabonobitch 等用精密加工的方法做成了在 13-16GHz 范围内的微波波段有光子能隙的面心立方光子晶体。用它来做基

底，研究了 13.2GHz 的微波的发射情况。实验表明，几乎所有的能量都射向空中，13.2GHz 的微波完全不能通过光子能隙。

### 3、光子晶体激光二极管和低阈值激光器[36]

一般的发光二极管发光中心发出的光经过周围介质的无数次的反射，大部分光不能有效地耦合出去，二极管的光辐射效率很低。如果将发光二极管的发光中心置入一块特制的光子晶体中，并使得该发光中心的自发辐射频率与该光子晶体的光子禁带重合，则发光中心发出的光不会进入包围它的光子晶体中，而只能沿着特定设计的方向辐射并传导出去。实验表明，采用光子晶体后，发光二极管的效率会从目前的 10%左右提高到 90%以上。

另外，当采用只允许单一频率的光波穿透过的光子晶体作为发光二极管的谐振腔时，该发光二极管将只能发出单一频率和良好相干性的类似激光特性的光，并且发光效率也会得到大大提高。

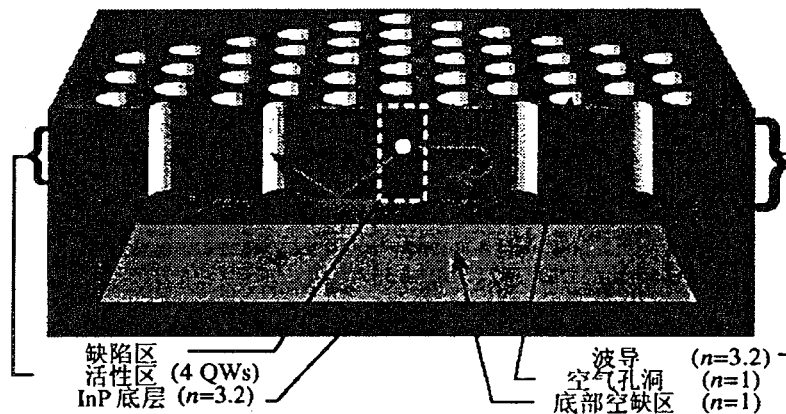


图 1-7 光子晶体激光器

在激光器中引入光子晶体还可以实现低阈值激光振荡。在一块三维光子晶体的光子禁带中引入缺陷，然后在其中放置工作物质，缺陷态将构成一个波导，激光发出的方向将沿此方向，同样自发辐射也只能沿此方向，即自发辐射与激光出射方向角几乎为 0。这样几乎所有的自发辐射都用来激发已实现反转分布的激活介质而无其他的损失。泵浦的能量几乎全部用来产生激光，这使激光器的阈值降低，并且提高了能量转换效率。1999 年，Painter[37] 等在二维光子晶体中引入

——点缺陷——就像一个光学微腔，形成了一个光能量阱（类似于量子阱），从而实现了光子晶体激光器（如图 1-7 所示）。这种光子晶体激光器是受光线来驱动的。2000 年，Zhou 等[38]制成了以电流驱动的光子晶体激光器。虽然这种光子晶体激光器的阈值为  $300 \mu A$ ，却为后来的研究[39-40]提供了借鉴。

#### 4、光子晶体光纤

传统的光纤在光通信中发挥了重要的作用,它目前存在的主要问题是光的损耗与色散。传统的光线是利用光全反射途径来实现的,但纤芯和薄层之间折射比小以及纤芯固体物质对传输光波波场的要求限制了它的应用。随着信息量的日益增大,要求光纤传输更多的信息,这就需要通过提高输入功率,但太大的功率又会引起光线中的非线性效应。如果能使纤芯的面积增大,又能保证单模传输,这样既可提高输入功率,又不会带来模式色散。光子晶体光纤就是基于传统光纤存在的上述问题而发展起来的。1996 年, Knight [41] 等制作了一个固体纤芯的光子晶体光纤,它应用的原理类似于全反射,但 Suzuki [42] 等证明它可以使传输损失明显降低。1999 年, Cregar [43] 等又制得了空气纤芯的光子晶体光纤。由于不存在比空气折射率更低的固体物质,一般的空气纤芯光纤不能用来传输光波,而在空气纤芯周围引入周期性排列的包层(二维光子晶体),使传输光的波长和光子带隙的频率相吻合,光波将只能沿着空气纤芯传播。光子晶体光纤的出现,大大减低了传输光能量的损失。

#### 5、光子晶体微波谐振腔

微波谐振腔的制作对光的集成有着重要的意义,近年来受到了广泛的关注。但由于其尺寸特别小,用传统的谐振腔制作方法来制造微波谐振腔是相当困难的。而且在光波波段,传统的金属谐振腔的损耗相当大,品质因数值很小。而光子晶体微波谐振腔的品质因数可以做得很高,是采用其他材料制作的谐振腔所无法达到的。在光子晶体中设计制作一个点缺陷,这个点缺陷所对应的角频率处就会出现很大的模密度,随着模密度的不断增加,自发辐射将显著增加,这样就能实现品质因数很高的谐振腔,而这是采用其他材料制作的谐振腔所无法达到的。

例如，对于采用具有光线质量的介质材料所制作的光子晶体谐振腔，光子的衰减吸收长度达数公里，这对应衰减时间为 $\tau \geq 10^{-5}$ 秒，设光波的频率为 $\omega = 10^{15}$ 秒<sup>-1</sup>，则该谐振腔的品质因数为 $Q = \omega\tau = 10^{10}$ 。图 1-8 是两种微腔结构的扫描电子显微图像。上图是用电子束刻制加工的单轨状结构，所用材料 Si 和 SiO<sub>2</sub>，下图是用光刻技术加工的悬浮“空气桥”结构，所用材料为 GaAs 和 AlGaAs，两种情况下，电磁场都被局域在半个波长之内，并且在边界处迅速衰减，即使是比较保守的估计，其 Q 值也达到 10<sup>4</sup> 左右。

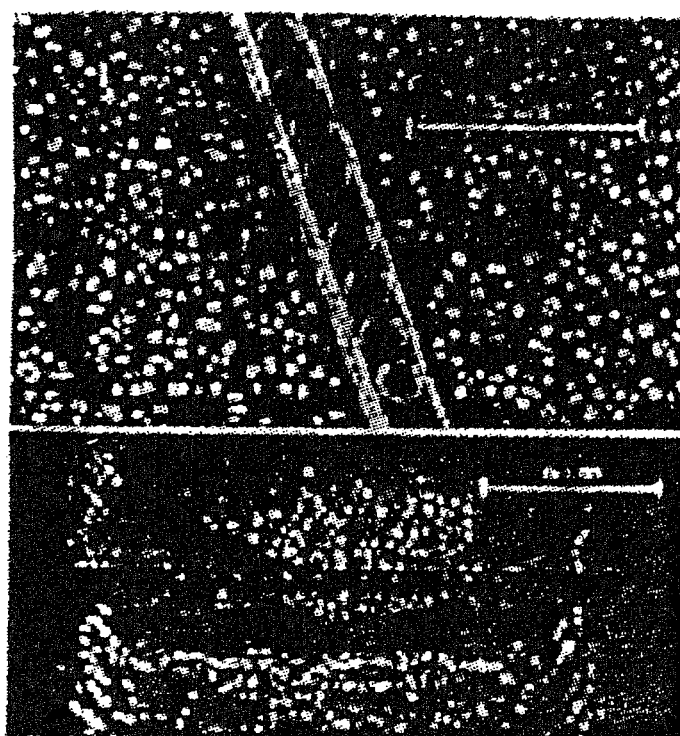


图 1-8 两种光子晶体的扫描电子显微图像

## 6、非线性光子晶体器件

非线性光子晶体是采用非线性介电常数材料在空间周期性排列而成的。目前在非线性光子晶体器件方面已开展可一些研究工作。T. Trull 小组已在实验上观察到了非线性光子晶体的二次谐波产生现象[45]。另外，在非线性光子晶体限幅器、光子开关以及光波束分裂与合成方面也开展了一些工作[46]。这方面的工作目前还处于初始阶段，但其研究前景是十分广阔的。对光子晶体其他性质的应用

还很多, 比如利用二维光子晶体对入射的 TE、TM 两种偏振模式的光具有不同的带隙结构而设计的二维光子晶体偏振片, 可以获得单一模式的出射光, 而且这种偏振光具有很高的偏振度和透射率。又如, 现在日本 NTT 的科学家用光子晶体已经实现了对 1550nm 波长光波速度的减慢, 在实现光子晶体集成线路的研究中迈出了具有决定意义的一步。事实上, 非线性光子晶体的应用远不止于上述几项, 它涉及到光子技术和光子产业的各个方面。

人们预言, 今后五年内, 高效光子晶体激光器的高功率发光二极管等将开始在市场上出现; 同时也能在此期间证实光子晶体波导使光在微米尺寸的台面上弯曲的可行性, 验证光子晶体的高分辨率光谱滤波的特性等, 在未来的 10 年内, 上述验证将推动有商业前途的“芯片光谱仪”的生产; 类似的复合器件包括“Add-drop 滤波器”、“Mach-Zehnder 干涉仪”和常用光学元件也将成为商品。在 10 到 15 年内将制成第一个光子晶体逻辑线路, 用光子晶体驱动的原型计算机会在 25 年内出现。可以相信, 随着光子晶体研究的不断深入和新突破的不断产生, 人们将会找到更多的应用前途, 光子时代正在加速向我们走来。

#### § 1.4 光子晶体的研究现状

经过十几年的发展, 光子晶体的研究在各个方面都取得了长足的进步。实验方面, 人们已经设计出了具有完全带隙的光子晶体结构, 包括二维和三维的晶体结构, A. Blanco 等人采用单晶硅反 Opal 的方法, 在可见光及近红外区域做出了完全带隙的光子晶体 [47], S. Y. Lin 等采用硅晶片制作了三维的红外区域的光子晶体 [48], 同时一些新的制作光子晶体的方法也被提了出来, R. C. Hayward 等提出了一种采用电泳沉积的方法来制作可见光波段的光子晶体[49], 其他像采用液晶[50-51]、采用流体[52]等的方法也被提了出来。另外, 一种更优化的在可见光的范围内建造光子晶体的全息平版印刷术方法[53]也被提出。2003 年, Maldovan [54]等人利用水平集合的方法发现了一种先前人们所不知道的光子晶体结构, 水平集合的方法允许利用空间群来发现具有完全带隙的光子晶体结构,

利用这种方法它们已经发现了 216 种结构具有完全带隙。

另外在光子晶体波导[55-60]、光子晶体微腔滤波器[61]、光子晶体光纤[62-64]、光子晶体激光器[65-66] 及光子晶体二极管[67]等方面都有了很大的发展。

在理论研究方面,许多其他领域的计算方法更多地被移植到光子晶体的研究领域,如平面波法(PW) [68-71]、差分或有限差分法[72-76]、转移矩阵方法[77-79]、N阶法和超元胞法[80-81]、多重散射法[82-83]和格林函数法[84-85]等等。

在具体的实际理论分析中,还有很多其他的计算方法已经被建立。这些方法各有优缺点,在应用时要根据实际情况合理运用。在光子晶体的研究中这些分析方法十分重要,由于光子晶体的制备非常困难,因此通常事先应用这些方法分析得出光子晶体的一些特性,再由实验来验证这些结论。

到目前为止,对于光子晶体的研究主要集中在以下几个方面:光子晶体的结构、缺陷和能带方面的研究、光子晶体的制备和应用以及自发辐射方面对光的控制的研究。同时,一些新的思想和方法也不断被提出来,现在研究光子晶体的方法变得更加丰富多彩,多种多样,从各个方面探索人类这个尚未完全掌握的领域。应该说,这个领域还有许多问题亟待解决,有待于人们更深入的探索和研究。

前面我们简要介绍了光子晶体、光子能带、光子带隙以及光子局域的基本概念,讨论了制作可见光及红外波段内具有完全带隙的三维光子晶体的一些方法和技术,简要回顾了过去十几年来光子晶体领域的一些进展,分析了光子晶体可能的应用前景。总之,光子晶体应用前景广阔,研究意义重大。

### § 1.5 本文的研究内容

通过前面的介绍,我们知道光子晶体是一种新型的控制和定域光子态的人工微结构,它是电介质材料周期排列而成的人工材料。光子晶体影响光子的性质就像半导体影响电子的性质一样。因此,光子在光子晶体中有能带结构、局域缺陷模式、表面模式等。这种塑造和指引光的能力导致了許多与光有关的在传统材料

中不存在的新奇现象的产生。我们知道,电磁波在金属中是耗散的,因此对于金属光子晶体来说控制和操作光子变得更加困难。

本文利用金属-电介质体系中的金属的表面等离子激元模式和金属中电介质腔体模式之间的相互作用,通过对金属中的电介质球及球壳的光学吸收和透射性质的研究,设计了具有高的透射率和吸收率的光学复合材料。我们的研究为进一步设计应用光子晶体材料、处理更加复杂和困难的电磁波在一般介质中的传播问题,以及微细结构中光与物质的相互作用等问题提供了现实可行的方案和理论依据,具有一定的实用价值。本论文的内容安排如下:

1. 首先介绍了金属的表面等离子激元模式和金属中电介质腔体的激发模式。详细的理论推导表明,金属-电介质表面上的表面等离子激元所出现的频率是由表面的周期结构来控制的,而金属中的电介质腔体的本征模式所出现的频率是由腔体的几何尺寸和形状来控制的。我们给出了计算这些频率的详细的解析公式。

2. 详细地介绍了我们所使用的多重散射方法的程序所能应用的计算体系,它特别适用于由球对称的散射中心所组成的层状晶格体系。然后介绍了针对我们所研究体系的具体情况,我们对多重散射方法的原程序所做的补充及对其进一步的推广和改进。详细考察和分析多重散射方法在这样体系中的计算结果的收敛性,给出了多重散射法的适用范围及所需要的参数。

3. 当周期性排列的电介质小球及球壳被嵌入到金属基底中时,电介质腔体中可以激发出非常强的电磁模式,同时激发金属的表面等离子激元模式。我们详细考察了表面等离子激元模式和腔体本征模式,以及它们之间的耦合。当二者之间的频率非常接近时,它们之间相互作用,在耦合频率附近可以产生非常强烈的吸收。通过调节体系中的某些参数,我们可以控制腔体本征模式和表面等离子激元出现的频率,从而使强吸收出现在我们所希望的频率上。

4. 当金属板的上下表面附近各放置一层周期性排列的电介质小球时,体系的光学性质会发生很大的改变。金属板上侧的周期性排列的电介质小球可以诱发金属的表面等离子激元模式,在吸收谱上表现为尖锐的吸收峰。对于无限厚的金属

板,吸收峰的位置主要与电介质小球的空间排列周期有关,吸收峰的峰值随着电介质球心与金属板上表面的距离呈振荡性的变化。在有限厚度的金属板中,金属板两侧的对称和反对称的表面等离子激元在金属板的两侧都有相当强的电磁场,可以导致非常强的电磁波穿透。金属板下层电介质球层的作用是将表面等离子激元的电磁场引导出金属,产生透射波。我们可以调节体系中的一些参数来控制表面等离子激元的出现频率,控制强吸收和强透射的发生频率。

5. 在金属板的两个表面附近都嵌入周期性的电介质小球时,体系的透射性能也大有改善。我们发现,金属板两边的电介质腔体本征模式之间的耦合是造成强透射的主要因素。表面等离子激元与腔体模式之间的共振耦合可以使腔体模式有所增强,间接地增强了透射强度。我们详细考察了体系的透射强度与电介质小球嵌入金属板的深度,电介质小球的空间排列周期以及两层介质球之间的距离的关系。

## 参 考 文 献

- [1] E. Yablonovitch. Inhabited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 1987 (58): 2059-2062
- [2] S. John. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 1987 (58): 2486-2489
- [3] E. M. Purcell. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies. *Phys. Rev.*, 1946 (69): 681-689
- [4] P.W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 1958, 109(5): 1492-1505
- [5] V. P. Bykov. Spontaneous emission from a medium with a band spectrum. *Sov. J. Quant. Electron*, 1975 (4): 861-865
- [6] R. G. Hulet, E. S. Hilfer, and D. Kleppner. Inhibited Spontaneous Emission by a Rydberg Atom. *Phys. Rev. Lett.*, 1985 (55): 2137 -2140
- [7] A. Mekis, S. H. Fan and J. D. Joannopoulos. Absorbing boundary conditions for FDTD simulations of photonic crystals waveguides. *IEEE Microwave and Wave Letters*, 1999(9): 502-504
- [8] 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 (41): 2646-2649
- [9] S. Zhang, S. Satpathy. Electromagnetic wave propagation in periodic structures: Bloch wave solution of Maxwell's equations. *Phys. Rev. Lett.*, 1990 (65): 2650-2653
- [10] K. M. Ho, C. T. Chan and C. M. Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys. Rev. Lett.*, 1990(65): 3152-3155

- [11] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter and K. M. Leung. Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 1991 (67): 2295-2298
- [12] S. Fan, P. R. Villeneuve, R. D. Meade, et al. Design of three-dimensional photonic crystals at submicron length scales. *Appl. Rev. Lett.*, 1994 (65):1466-1468
- [13] K. M. Ho, C. T. Chan, C.M. Soukoulis, et al. Photonic band gaps in three dimensions: New layer-by-layer periodic structures. *Solid State Commun.*, 1994, 89(5): 413-416
- [14] H. S. Sozuer and J. W. Haus. Photonic bands: simple-cubic lattice. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1993, 10(2): 296-302
- [15] Z. Y. Li, J. Wang and B. Y. Gu. Creation of partial band gaps in anisotropic photonic-band-gap structures. *Phys. Rev. B.*, 1998, 58(7): 3721-3729
- [16] I. H. H. Zabel and D. Stoud. Photonic band structures of optically anisotropic periodic arrays. *Phys. Rev. B.*, 1993, 48(8): 5004-5012
- [17] D. F. Sievenpiper, E. Yablonovitch, J. N. Winn, et al. 3D Metallo-Dielectric Photonic Crystals with Strong Capacitive Coupling between Metallic Islands. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, 80(13): 2829-2832
- [18] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter and K. M. Leung. The Face-centered-cubic Case Employing Nonspherical Atoms. *Appl. Phys. Lett.*, 1991, 67(17): 2295-2298
- [19] J. B. Pendry. Calculation of Photon Dispersion Relations. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 69 (19): 2772-2775.
- [20] E. Ozbay, E. Michel and G. Tuttle et al. Micromachined Millimeter-wave Photonic Band-gap Crystals. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, 64(16): 2059-2061
- [21] S. Y. Lin, J. G. Fleming and D. L. Hetherington et al. A Three-dimensional Photonic Crystal Operating at Infrared Wavelengths. *Nature*, 1998 (394):

- 251-253
- [22] O. D. Veleve, T. A. Jede R. R. Lobo et al. Porous Silica via Colloidal Crystallization. *Nature*, 1997 (389): 447-448
- [23] A. Imbof and D. J. Pine. Ordered Macroscopic Materials by Emulsion Templating. *Nature*, 1997 (389): 948-951
- [24] A. A. Zakhidov, R. H. Baughman, Z. Iqbal et al. Carbon Structures with Three-dimensional Periodicity at Optical Wavelengths. *Science*, 1998 (282): 897-901
- [25] J. E. Wijnhoven and W. L. Vos. Preparation of Photonic Crystals Made of Air Spheres in Titania. *Science*, 1998 (281):802-804
- [26] G. Subramania, K. Constant, R. Biswas et al. Optical Photonic crystals Fabricated from Colloidal System. *Appl. Phys. Lett.*, 1999 (74): 3933-3935
- [27] V. Mizeikis, H. B. Sun, A. Marcinkevicius, et al., Femtosecond Laser Micro-fabrication for Tailoring Photonic Crystals in Resin and Silica. *J. Photochem. Photobiol A: Chem.*, 2001 (145): 41-47
- [28] M. Campbell, D. N. Sharp, M. T. Harrison. Fabrication of Photonic Crystals for the visible Spectrum by Holographic Lithography. *Nature*, 2000 (404): 53-57
- [29] M. M. Burns, J. M. Fournier, J. A. Golovchenko. Optical Matter: Crystallization and Binding in Intense Optical Fields. *Science*, 1990(249): 749-754
- [30] X. M. Duan, H. B. Sun, K. Kaneko, S. Kawata. Two-photon polymerization of metal ions doped acrylate monomers and oligomers for three-dimensional structure fabrication. *Thin Solid Films*, 2004, 453(54): 518-521
- [31] S. Kawakami, T. Kawasjoma and T. Sato, Mechanism of shape formation of three-dimensional periodic nanostructures by bias sputtering. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, 74 (3): 463-465
- [32] T. A. Birks, J. C. Knight, P. St. J. Russell. Endlessly single-mode photonic

- crystal fiber. *Opt. Lett.*, 1997, 22(13): 961-963
- [33] Y. Fink, J.N. Fan, et al. A Dielectric Omnidirectional Reflector. *Science*, 1998 (282):1679-1682
- [34] J. Martorel and N. Lawandy. Observation of inhibited spontaneous emission in a periodic dielectric structure. *Phys. Rev. Lett.*, 1990(65): 1877-1880
- [35] J. Trull, J. Martorell, R. Vilaseca. Angular dependence of phase matched second harmonic generation in a photonic crystal. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1998, 15(10): 2581-2585.
- [36] T. A. Birks, J. C. Knight, P. St. Russell. Endlessly single-mode photonic crystal fiber. *Opt. Lett.*, 1997, 22(13): 961-963
- [37] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, et al. Two dimensional photonic band gap defect mode laser. *Science*, 1999 (284): 1819-1821
- [38] W. D. Zhou, S. Rennon, T. Baba, et al. Electrically injected single-defect photonic band gap surface-emitting laser at room temperature. *Elec. Lett.*, 2000 (36): 1541-1546
- [39] D. L. R. Richard, S. Chirs. On the threshold of success. *Nature*, 2000 (408): 653-655
- [40] S. Noda, M. Yokoyama, M. Imada, et al. Polarization mode control of two-dimensional photonic crystal laser by unit cell structure design. *Science*, 2001 (293): 1123-1125
- [41] J. C. Knight, T.A. Birks, P. S. J. Russell, et al. All-silica single-mode optical fiber with photonic crystal cladding. *Opt. Lett.*, 1996 (21): 1547-1549
- [42] K. Suzuki. Optical properties of a low-loss polarization maintaining photonic crystal fiber. *Opt. Express*, 2001 (9): 676-681
- [43] D. C. Cregan. Single mode photonic band gap guidance of light in air. *Science*, 1999 (285): 1537-1540

- [44] A. Mekis, S. H. Fan, J. D. Joannopoulos. Absorbing boundary conditions for FDTD simulations of photonic crystals waveguides. *IEEE Microwave and Wave Letters*, 1999 (12): 502-504
- [45] J. Trull, Jordi Martorell, R. Vilaseca, Angular dependence of phase-matched second-harmonic generation in a photonic crystal. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1998, 15(10): 2581-2585
- [46] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato and S. Kawakami. Photonic crystals for microlightwave circuits using wavelength-dependent angular beam steering. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, 74(10): 1370-1372.
- [47] A. Blanco, E. Chomski, S. Grabtchak, M. Ibisate, S. John, S. W. Leonard, C. Lopez, F. Meseguer, H. Miguez, J. P. Mondia, G. A. Ozin, O. Toader, H. M. vanDiel, *Nature*, 2000 (405): 6785-6789
- [48] S.Y. Lin, J.G. Fleming, D.L. Hetherington, B. K. Smith, R. Biswas, K.M. Ho, M.M. Sigalas, W. Zubrzycki, I. A. Aksay, A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths. *Nature*, 1998, 394(6690): 251-253
- [49] R. C. Hayward, D. A. Saville, I.A. Aksay, Electrophoretic assembly of colloidal crystals with optically tunable micropatterns. *Nature*, 2000, 404(6773): 56-59
- [50] K. Yoshino, Y. Shimoda, Y. Kawagishi, K. Nakayama, M. Ozaki, Temperature tuning of the stop band in transmission spectra of liquid-crystal infiltrated synthetic opal as tunable photonic crystal. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, 75 (7): 932-934
- [51] N. Susa, *Japanese Journal of Applied Physics Part 1—Regular Papers Short Notes & Review Papers*, 2000(39), 6A
- [52] D. Garcia-Pablos, M. Sigalas, F.R.M. de Espinosa, M. Torres, M. Kafesaki, N. Garcia, Theory and experiments on elastic band gaps. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84(19): 4349-4352

- [53] X. M. Duan, H. B. Sun, K. Kaneko, et al. Two-photon polymerization of metal ions doped acrylate monomers and oligomers for three-dimensional structure fabrication. *Thin Solid Films.*, 2004, 453 (54): 518-521
- [54] Martin Maldovan, Chaitanya K. Ullal, W. Craig Carter, Edwin L. Thomas. Exploring for 3D photonic bandgap structures in the 11 f.c.c. space groups, *Nature Materials*, 2003 (2): 664 - 667
- [55] S. I. Bozhevolnyi, V. S. Volkov, and T. Philos. Near-field characterization of planar photonic-crystal-waveguide structures. *Roy. Soc. A*, 1817 (362): 757-769.
- [56] F. S. S. Chien, Y. J. Hsu, W. F. Hsieh, et al. Dual wavelength demultiplexing by coupling and decoupling of photonic crystal waveguides. *Opt. Express.*, 2004, 12 (6): 1119-1125
- [57] S. Boscolo, M. Midrio. Superprism behaviour of an array of photonic crystal waveguides. *Opt. Quant. Electron*, 2004, 36 (5): 459-468
- [58] I. Jae-Soong, Y. Park, H. Jeon. Optimal design for one-dimensional photonic crystal waveguide. *J. Lightwave. Technol*, 2004, 22 (2): 509-513
- [59] P. E. Barclay, K. Srinivasan, M. Borselli, et al. Efficient input and output fiber coupling to a photonic crystal waveguide, *Opt. Lett.*, 2004, 29 (7): 697-699
- [60] W. Park, C. J. Summers , Optical properties of superlattice photonic crystal waveguides. *App. Phys. Lett.*, 2004, 84(12): 2013-2015
- [61] A. S. Jugessur, P. Pottier, De La Rue RM. Engineering the filter response of photonic crystal microcavity filters, *Opt. Express*, 2004, 12 (7):1304-1312
- [62] K. M. Hilligsoe, T. V. Andersen, H. N. Paulsen, et al. Supercontinuum generation in a photonic crystal fiber with two zero dispersion wavelengths. *Opt. Express*, 2004, 12(6): 1045-1054
- [63] R. Guobin, W. Zhi, L. Shuqin, et al. Full-vectorial analysis of complex

- refractive-index photonic crystal fibers. *Opt. Express*, 2004, 12(6): 1126-1135
- [64] Z. M. Zhu, T. G. Brown, Polarization properties of supercontinuum spectra generated in birefringent photonic crystal fibers. *J. Opt. Soc. Am. B*, 2004, 21(2): 249-257
- [65] U. Brinkmann. Planar optoelectronics-photonic-crystal laser has selectable wavelength. *Laser Focus World*. 2004, 40 (3): 42-45
- [66] M. Loncar, T. Yoshie, K. Okamoto, et al. Planar photonic crystal nanolasers: Porous cavity lasers. *IEICE T ELECTRON*, 2004, E87C (3): 291-299
- [67] S. Mahnkopf, M. Arlt, M. Kamp, et al. Two-channel tunable laser diode based on photonic crystals. *IEEE Photonic Tech. L.*, 2004, 16 (2):353-355
- [68] K.M. Leung and Y. F. Liu, Photon band structures: The plane-wave method. *Phys. Rev. B*, 1990, 41(14): 10 188-10 190
- [69] 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
- [70] M. M. Sigalas, E. N. Economou, M. Kafesaki. Spectral gaps for electromagnetic and scalar waves: Possible explanation for certain differences, *Phys. Rev. B*, 1994, 50(5): 3393-3396
- [71] M. S. Kushwaha, P. Halevi. Band-gap engineering in periodic elastic composites *Appl. Phys. Lett.* 1994, 64(9): 1085-1087
- [72] A. Taflove, and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics*. 2nd Ed. 1995 London: Artech House, 1995; K. S. Kunz and R. J. Luebbers, *The finite difference time domain method or electromagnetics*, CRC Press, 1993; D. S. Jones, *Methods in electromagnetic wave propagation*. Oxford University Press. 1994
- [73] C. T. Chan, Q. L. Yu, and K. M. Ho. Order-N spectral method for electromagnetic waves. *Phys. Rev. B*, 1995, 51(23): 16 635-16 642

- [74] S. Fan, P. R. Villeneuve, and J. D. Joannopoulos. Large omnidirectional band gaps in metallodielectric photonic crystals. *Phys. Rev. B*, 1996, 54 (16): 11 245-11 251
- [75] A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P. R. Villeneuve, and J. D. Joannopoulos. High Transmission through Sharp Bends in Photonic Crystal Waveguides. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77(18): 3787-3790
- [76] M. M. Sigalas, R. Biswas, K. M. Ho, C. M. Soukoulis and D. D. Crouch. Waveguides in three-dimensional metallic photonic band-gap materials. *Phys. Rev. B*, 1999, 60 (7): 4426-4429
- [77] J. B. Pendry, A. Mackinnon. Calculation of photon dispersion relations. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, 69(19): 2772-2775
- [78] M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C. T. Chan and K.M. Ho, Electromagnetic -wave propagation through dispersive and absorptive photonic-band-gap materials. *Phys. Rev. B*, 1994, 49(16): 11 080-11 087
- [79] M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, and C. T. Chan, Photonic band gaps and defects in two dimensions: Studies of the transmission coefficient, *Phys. Rev. B*, 1993, 48 (19): 14 121-14 126
- [80] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer, and J. D. Joannopoulos. Donor and acceptor modes in photonic band structure. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, 67 (24): 3380-3383
- [81] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. D. Joannopoulos, Photonic bound states in periodic dielectric materials. *Phys. Rev. B*, 1991, 44 (24): 13 772-13 774
- [82] N. Stefanou, V. Yannopoulos and A. Modinos. Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients. *Comput. Phys. Commun.* 1998, (113): 49-77

- [83] N. Stefanou, V. Yannopoulos and A. Modinos. MULTEM 2: A new version of the program for transmission and band-structure calculations of photonic crystals. *Comput. Phys. Commm.* 2000 (132): 189-196
- [84] M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. N. Economou et al. Photonic band gaps and defects in two dimensions: Studies of the transmission coefficient. *Phys. Rev. B*, 1993, 48 (19): 14 121-14 126
- [85] K. M. Leung. Defect modes in Photonic band structures: A Green's function approach using vector Wannier functions. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1993(10): 303-306

## 第二章 金属的表面等离子激元和金属中的电介质

### 腔体的激发模式

凝聚态物质中的极化激发与电磁波之间的相互作用一直以来是人们的研究重点。这是因为在极化介质中传播的电磁波可以通过它所引起的极化来得到调节,并且与之相耦合。关于表面极化的研究近年来更是引起了大家广泛的兴趣。在本章中,我们对金属的表面等离子激元以及金属中的电介质腔体的激发模式做一个简单的介绍,更详细的情况可以阅读文献[1-7]。

#### § 2.1 表面等离子激元

电子电荷在金属表面上的集体激发被称为表面等离子激元[8]。Powell 和 Swan [9] 在电子能量损耗实验中已经证实了表面等离子激元的存在。表面等离子激元是金属介质表面上最基本的电磁共振,它是束缚在金属表面区域的电子态,它表示沿着介质表面或沿着两种介质的分界面传播的电磁波,在介质表面或分界面上具有最大值,一旦离开分界面进入到介质中,电磁波的强度以指数形式迅速衰减,因此也被称为表面电磁波。如果两种介质都可以用介电常数和磁导率来描述,表面等离子激元是麦克斯韦方程关于这两种介质的解。

表面等离子激元最大的特点是它们能够通过粗糙的表面和光子相耦合。由于表面等离子激元是含有电磁场和表面耦合电荷的电磁波,表面等离子激元的传播包括电子密度的重新分布,所以在金属表面上传播的表面等离子激元的速度小于光速。正是因为这个原因,在平滑的金属表面上,入射的电磁波不能直接与表面等离子激元发生耦合,但是当光栅、棱镜、褶皱甚至杂质出现在金属表面上时,就能激发表面等离子激元与入射光线相耦合,反之亦然。因此表面等离子激元和许多光学现象有关。用光激发金属的表面等离子激元,表面附近的电磁场能够被强烈地加强。人们已经通过在粗糙的银金属表面上激发表面等离子激元,证实了

在共振时发出光的强度几乎是没发生共振时的 100 倍。另外，场的加强已经发现有许多应用，如表面等离子激元加强的光电效应 (enhanced photoeffect by SPs)，强场中二次谐振起关键作用的非线性效应、表面加强拉曼散射、瑞利波散射光的扩大、隧道结的光发射等等。另外，在非常薄的金属薄层中，强场的增加可以用来测量高频模式。

### § 2.1.1 两种介质分界面的表面等离子激元

表面等离子激元是在介质表面或两种介质的分界面传播的电磁波。它的存在是由分界面而形成的。下面我们考虑在两种半无限大的各向同性的两种介质的分界面上表面等离子激元存在的条件 (如图 2-1 所示)。两种介质的复介电函数分别用  $\varepsilon_1 = \varepsilon_1' + i\varepsilon_1''$  和  $\varepsilon_2 = \varepsilon_2' + i\varepsilon_2''$  来表示。为了简单起见，我们固定两种介质的磁导率  $\mu_1 = \mu_2 = 1$ ，忽略色散效应。

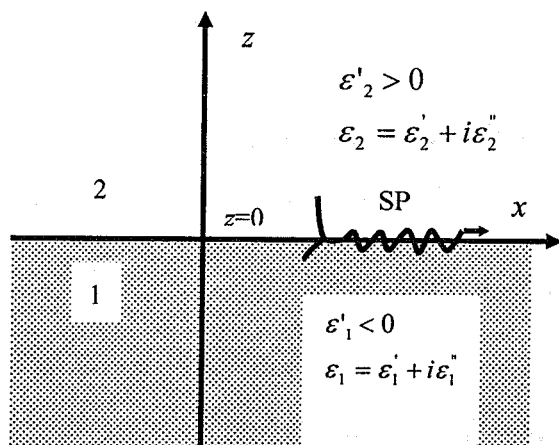


图 2-1 在复介电函数  $\varepsilon_1$  和  $\varepsilon_2$  分界面上的表面等离子激元

在两种介质的分界面上，坐标系  $z$  轴的方向垂直于介质分界面， $z = 0$  对应于两种介质的分界面， $x$  轴沿表面等离子激元的传播方向， $y$  轴在分界面内。表面等离子激元的电磁场强度在分界面上最大，在分界面两边的介质中以指数形式衰减。因此满足的麦克斯韦方程为：

$$\begin{aligned}
 \nabla \times \mathbf{H}_i &= \varepsilon_i \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}_i \\
 \nabla \times \mathbf{E}_i &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}_i}{\partial t} \\
 \nabla \cdot \varepsilon_i \mathbf{E}_i &= 0 \\
 \nabla \cdot \mathbf{H}_i &= 0
 \end{aligned} \tag{2-1}$$

其中,  $i=1, 2$ 。满足麦克斯韦方程组的表面等离子激元的解具有如下形式:

$$\begin{aligned}
 H &= H_1 = H_0 \exp(ik_p x + k_1 z) & (z < 0) \\
 H &= H_2 = H_0 \exp(ik_p x - k_2 z) & (z > 0)
 \end{aligned} \tag{2-2}$$

其中,  $k_p$  是表面等离子激元的波矢,  $k_1$  和  $k_2$  是两种介质中电磁波的波矢。上式均满足麦克斯韦方程以及  $P$  极化 ( $TE$  模式) 的边界条件。边界条件要求磁场的切线分量在  $z=0$  是连续的  $H_1(x, z=0) = H_2(x, z=0)$ 。在  $\mu_1 = \mu_2 = 1$  的两种介质的分界面上  $s$  极化的表面等离子激元不能满足边界条件。因此, 表面等离子激元的磁场是垂直于  $xz$  平面的  $H = H_y$ , 电场矢量位于  $xz$  平面内。电场的切线分量的连续要求在  $z=0$  时满足:

$$E_1(y, z=0) = E_2(y, z=0) \tag{2-3}$$

由麦克斯韦方程可得:

$$\frac{\partial H_i}{\partial z} = -\varepsilon_i E_i \frac{\omega}{c}$$

或者

$$\begin{aligned}
 k_1 H_1 &= \frac{\omega}{c} \varepsilon_1 E_1 \\
 k_2 H_2 &= \frac{\omega}{c} \varepsilon_2 E_2
 \end{aligned} \tag{2-4}$$

因此有

$$\frac{k_1}{\varepsilon_1} H_1 + \frac{k_2}{\varepsilon_2} H_2 = 0 \tag{2-5}$$

为了得到一个非零解, 行列式必须为零:

$$D_0 = \frac{k_1}{\varepsilon_1} + \frac{k_2}{\varepsilon_2} = 0 \quad (2-6)$$

这就是体系的表面等离子激元的色散关系。它表明表面等离子激元只存在于介电函数符号相反的两种介质的分界面上,

由 (2-1, 4), 可得:

$$k_p^2 + k_i^2 = \varepsilon_i \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \quad i=1, 2 \quad (2-7)$$

因此表面等离子激元的色散方程 (2-6) 可写为:

$$k_p = \frac{\omega}{c} \left( \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right)^{1/2} \quad (2-8)$$

如果假定  $\omega$  和  $\varepsilon_2$  是实数, 并且  $\varepsilon_1'' < |\varepsilon_1'|$ , 可以得到表面等离子激元的波矢是复数的:  $k_p = k_p' + ik_p''$ ,

$$k_p' = \frac{\omega}{c} \left( \frac{\varepsilon_1' \varepsilon_2}{\varepsilon_1' + \varepsilon_2} \right)^{1/2} \quad (2-9)$$

$$k_p'' = \frac{\omega}{c} \left( \frac{\varepsilon_1' \varepsilon_2}{\varepsilon_1' + \varepsilon_2} \right)^{3/2} \frac{\varepsilon_1''}{2(\varepsilon_1')^2} \quad (2-10)$$

对于实  $k_p'$  来说, 要求  $\varepsilon_1' < 0$  和  $|\varepsilon_1'| > \varepsilon_2$ , 这在金属中或者含有杂质的半导体的本征频率附近能够被满足。虚部  $k_p''$  表示表面等离子激元沿着分界面传播过程中的衰减, 是由内部吸收所决定的。

对于金属来说, 它们的介电常数的色散和吸收是不能忽略的。因此可以用自由电子气 (Drude) 模型来很好地近似。

图 2-2 给出了金属的表面等离子激元与光的色散关系曲线。从图 2-2 中可以看出, 在小  $k_p$  时, 表面等离子激元的频率能够到达光线  $\sqrt{\varepsilon_2} \omega/c$ , 但是保持大于光线的频率  $\sqrt{\varepsilon_2} \omega/c$ , 因此表面等离子激元不能转变为光, 所以表面等离子激元是非辐射的。在大  $k_p$  或  $\varepsilon_1' \rightarrow -\varepsilon_2$  时,  $\omega$  的值趋近于自由电子气的频率

$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{(1 + \epsilon_2)^{1/2}}$ ，其中，等离子体频率为  $\omega_p = \sqrt{4\pi n e^2 / m}$ 。  $n$  是体电荷密度。随着  $\epsilon_2$  的增加， $\omega_p$  的值减小。在大  $k_p$  时，群速度和相速度都为零，表面等离子激元与自由电子的局域振动相似。

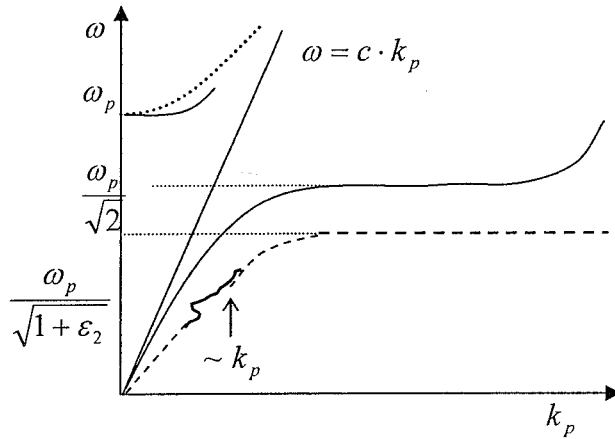


图 2-2 非辐射表面等离子激元的色散关系(—)，位于光线  $\omega = ck_p$  的右边。阻滞区域从  $k_p = 0$  延伸到  $k_p = 2\pi/\lambda_p$  ( $\lambda_p$  为等离子体波长)， $\omega = ck_p$  右边的点线，表示金属表面覆盖一层介质 ( $\epsilon_2$ ) 的表面等离子激元。光线左边辐射的表面等离子体激元  $\omega(k_x)$  起始于  $\omega_p$  (---)。(点线表示金属中光的发散关系： $\omega/k_x = c/|\epsilon_1|^{1/2}$  或者自由电子情况  $\omega^2 = \omega_p^2 + c^2 k_x^2$ )。点线色散曲线上的修正来自于沉积在薄层  $\epsilon_2$  上的单分子层的本征频率。后者从  $\omega_p/\sqrt{2}$  下降到  $\omega_p/\sqrt{1+\epsilon_2}$ 。

### § 2.1.2 表面等离子激元的空间延伸

由于  $\omega/c < k_p$  和  $\epsilon_1' < 0$ ，波矢  $k_1$  和  $k_2$  含有虚部，如式 (2-7) 所示，正如前面所说，表面等离子激元被局域在分界面附近，一旦离开分界面它的强度会随着离开分界面的距离以指数  $\exp(-|k_{zi}||z|)$  形式衰减。衰减常数是指表面等离子激元

的强度衰减为原来强度的  $1/e$  时所进入介质中的距离。

在两种介质中的衰减常数分别为：

$$\begin{aligned} \delta_1 &= 1/k_1' && \text{在介质 1 中} \\ \delta_2 &= 1/k_2' && \text{在介质 2 中} \end{aligned} \quad (2-11)$$

如果介质 2 为真空，当入射电磁波的波长为  $\lambda = 6000\text{\AA}$  时，对金属银来说， $\delta_2 = 3900\text{\AA}$ ， $\delta_1 = 240\text{\AA}$ 。对金属金来说， $\delta_2 = 2800\text{\AA}$ ， $\delta_1 = 310\text{\AA}$ 。在  $k_p$  比较大的情况下， $\delta$  约等于  $1/k_p$ ，这导致电磁场在两种介质的表面附近是高度集中的。

另外，波矢在这两种介质中的  $z$  分量可以用两种介质的介电常数来表示：

$$\begin{aligned} k_1' &= -2\pi \left[ \frac{(\varepsilon_2'^2 - \varepsilon_2''^2)(\varepsilon_1' + \varepsilon_2') + 2\varepsilon_2'\varepsilon_2''(\varepsilon_1'' + \varepsilon_2'') + (\varepsilon_2'^2 + \varepsilon_2''^2)\sqrt{D}}{2D} \right]^{1/2} \\ k_1'' &= 2\pi \left[ \frac{-(\varepsilon_2'^2 - \varepsilon_2''^2)(\varepsilon_1' + \varepsilon_2') - 2\varepsilon_2'\varepsilon_2''(\varepsilon_1'' + \varepsilon_2'') + (\varepsilon_2'^2 + \varepsilon_2''^2)\sqrt{D}}{2D} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (2-12)$$

其中

$$D = (\varepsilon_1' + \varepsilon_2')^2 + (\varepsilon_1'' + \varepsilon_2'')^2$$

同理可得介质 2 中波矢的  $z$  分量的形式。通过对上式的计算表明，表面等离子激元的绝大部分能量位于金属的表面上，在金属内部表面等离子激元迅速衰减。

### § 2.1.3 表面等离子激元在金属-介质分界面上的传播

表面等离子激元的折射率和体电磁波的折射率以同样的方式引入的：

$$k_p \equiv 2\pi\nu\kappa_p \quad (2-13)$$

$\kappa_p$  是与两种介质的介电常数有关的物理量， $\kappa_p = \left( \frac{\varepsilon_1\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right)^{1/2}$ ，而在传统的晶体

光学中，折射率被定义为  $n = \sqrt{\varepsilon}$ ，由于存在衰减，表面等离子激元的折射率是

复数： $\kappa_p = \kappa_p' + i\kappa_p''$ ，虚部决定分界面上的表面等离子激元的吸收系数：

$\alpha = 4\pi\nu k_p''$ , 吸收系数的倒数称作表面等离子激元的传播长度  $L = 1/\alpha$ 。(表面等离子激元衰减到它的初始值的  $1/e$  时的距离)。

在平滑的两种各向同性的介质的分界面上, 表面等离子激元的衰减来源于这两种介质的介质损耗, 表面等离子激元的传播长度能够表示为介质的介电常数的形式:

$$\frac{1}{L} = 2k_x'' = \frac{2\pi^2\nu^2}{k_x'} \frac{B}{D} \quad (2-14)$$

$$k_x' = 2\pi\nu \left\{ \frac{1}{2D} [A + (A^2 + B^2)^{1/2}] \right\} \quad (2-15)$$

其中,

$$\begin{aligned} A &= \varepsilon_2'(\varepsilon_1'^2 + \varepsilon_1''^2) + \varepsilon_1'(\varepsilon_2'^2 + \varepsilon_2''^2) \\ B &= \varepsilon_2''(\varepsilon_1'^2 + \varepsilon_1''^2) + \varepsilon_1''(\varepsilon_2'^2 + \varepsilon_2''^2) \\ D &= (\varepsilon_2' + \varepsilon_1')^2 + (\varepsilon_2'' + \varepsilon_1'')^2 \end{aligned} \quad (2-16)$$

如果在某个频率区间内, 介电函数拥有相反的符号 ( $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 < 0$ ), 可能是在两种金属或者介质的分界面上, 表面等离子激元的传播是可能的。当表面有源介质的介电函数 ( $\varepsilon_1' < 0$ ) 远远大于非有源介质的介电函数时, 它们有相反的符号  $-\varepsilon_1' \gg \varepsilon_2'$ , 这时表面等离子激元沿宏观距离 ( $L \geq 0.1\text{cm}$ ) 传播。在这种情况下, 表面等离子激元的传播长度为:

$$\frac{1}{2k_p'} = L \cong \frac{1}{2\pi(\varepsilon_2')^{3/2}} \frac{\varepsilon_1' + \varepsilon_1''^2}{\varepsilon_1'} \quad (2-17)$$

$$k_p' \cong 2\pi\nu(\varepsilon_2')^{1/2}$$

Ward [10]验证了这些公式在红外区间内精确度很高, 误差不超过 1%。

为了计算表面等离子激元的吸收系数或传播长度, 要求计算两种介质的介电函数。首先考虑在金属表面上的表面等离子激元, 沿着平滑的各向同性金属表面传播的表面等离子激元由具有复介电函数的麦克斯韦方程来描述:

$$\varepsilon = \varepsilon' - i \frac{4\pi\sigma}{\nu} \equiv \varepsilon' + i\varepsilon'' \equiv (n - ik)^2 \quad (2-18)$$

其中  $\sigma$  是金属的传导率,  $n$  是金属的折射率。  $k$  是介质的吸收系数。在通常的趋肤效应中, 金属中的电磁场以指数形式衰减。但是当传导电荷的平均自由程与电磁场在金属中的透入深度相比拟时, 电子将会穿透这些区域, 导致电场和电流之间的非局域的关系。这时, 金属中的电场不是指数形式的, 复介电函数的表示也是不合法, 这是反常趋肤效应。

对正常的趋肤效应来说, 金属的介电函数为:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon' + i\varepsilon'' \\ \varepsilon' &= 1 - \frac{\nu_p^2}{\nu^2 + \nu_r^2} \\ \varepsilon'' &= \frac{\nu_p^2 \nu_r}{\nu(\nu^2 + \nu_r^2)} \end{aligned} \quad (2-19)$$

其中,  $\nu_p^2 = Ne^2 / \pi m^*$  是等离子频率。  $N$  是电子数目,  $e$  是电荷,  $m^*$  是电子的有效质量。  $\nu_r$  是电子与光子, 电子以及杂质之间全部碰撞的有效频率。可以用电子数目  $N$  和电子质量  $m$  来近似地描述金属的介电函数, 通常称为 Drude 近似。对于正常趋肤效应的情况, Drude 近似使用的条件为:  $n\nu_F \ll c, l_e \ll \delta$ , 其中  $\nu_F$  是费米面上电子的速度。  $l_e$  是电子的平均自由程,  $\delta$  是趋肤深度。

在正常趋肤效应情况下, 红外波段的表面等离子激元 ( $\sim 10\mu\text{m}$ ) 在金属表面上的传播长度:

$$L \approx \nu_p^2 / 2\pi\nu_r \nu^2 \quad (2-20)$$

从上式可以看出, 表面等离子激元的传播长度平方依赖于其频率。但是, 在可见光的区域内, 上式不再有效。这时, 在表面等离子激元的频率 ( $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1$ ) 处, 存在表面极化的一个共振, 因此吸收系数在这个频率上有最大值。在可见光区域, 表面等离子激元的传播长度很小只有几个  $\mu\text{m}$ , 可以忽略不计。

## § 2.1.4 表面等离子激元的光学激发

前面简单介绍了表面等离子激元的基本性质, 如上面所说, 表面等离子激元是非辐射的电磁波, 它的色散曲线位于光线的右边, 不能直接被从两种介质中传播的电磁波激发。例如, 对一个给定频率  $\omega$ , 平行于表面的光波分量总小于表面等离子激元波矢的平行分量, 不能同时满足能量和波矢守恒, 因此不能直接被传播的光波所激发, 所以利用光子激发表面等离子激元有一定的困难。给定能量为  $\hbar\omega$  的光子的波矢  $\hbar\omega/c$  需要增加  $\Delta k_p$  才能把光子转变为表面等离子激元。

入射光能够在以下几种特殊的情况下在金属表面激发表面等离子激元:

1、过带内电子转变 (即同时激发表面等离子激元和电子空穴对) 使得横向和纵向电磁场发生线性耦合。但是通过这种方法, 系统吸收系数非常弱。

2、ATR 耦合: 为了能够在平滑的分界面上激发表面等离子激元, 在给定的频率下, 介质  $\varepsilon_1$  中的入射光应该和表面等离子激元具有相同的波矢, 并且还应该有一个小于  $c/(\varepsilon_1)^{1/2}$  的相速度。Otto 提出了用 ATR (attenuated total reflection) 的方法来制造“慢光子”。这种方法的基本思想是: 在金属表面放一个介电常数为  $\varepsilon_0$  的半圆柱形的石英介质。在入射光进入介质之前, 先要通过石英介质。根据菲涅耳定律, 入射光的切线分量在不连续介质的分界面上是一致的, 由于入射光的波矢  $k_x = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_0}$  在表面上的投影为  $k_x = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_0} \sin\theta_0$ , 因此在空气和金属分界面上的表面等离子激元的色散关系(2-8)在光线和  $c/\sqrt{\varepsilon_0}$  之间能够被满足。入射光激发表面等离子激元在反射曲线上表现为最小值。由于表面等离子激元的激发发生在石英-金属的分界面上, 相速度为  $v = \omega/k_x = c/(\sqrt{\varepsilon_0} \sin\theta_0)$  以速度  $v \leq c$  在分界面上传播。表面等离子激元的共振条件  $\omega/k_x^0 = c\sqrt{\frac{\varepsilon+1}{\varepsilon}} = c/(\sqrt{\varepsilon_0} \sin\theta_0)$  能够被满足, 特别是在两种电磁波具有相同特征时。

还有两种类似的装置可以激发表面等离子激元, 1) 用厚度约为波长  $\lambda$  空气

或者介质层来分离金属表面和介质  $\varepsilon_0$ 。瞬时场与表面等离子激元在金属-空气的分界面上发生耦合。2) 厚度为几百个埃的金属层  $\varepsilon_1$  被放在介质  $\varepsilon_0$  上, 金属层中的电磁场指数形式衰减能够激发金属的下表面与空气分界面上的表面等离子激元。

3、如果表面被周期性地调制, 周期为  $d$ , 如果调制的程度小于入射光的波长, 调制的作用是把平行于表面的波矢分量  $k_0 = (\frac{\omega}{c})\varepsilon_0^{1/2} \sin\theta$  ( $\theta$  是入射角) 修正为  $k_n = k_0 + 2\pi n/d$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , 总能找到一个  $n$  值, 能够激发表面等离子激元。例如, 金属光栅上的伍德近似。还可以通过改变入射光的角度在周期调制的金属表面上激发表面等离子激元, 人们可以观察到反射率的最小值。相反, 表面等离子激元也可以通过表面调制来改变其波矢, 使表面等离子激元变为辐射性的。

傅立叶分析表明任意粗糙的表面能够用一系列波矢  $k_a$  (幅值  $A_a$ ) 来表示。每个波矢能够引起类似于上式的关系:  $k_{na} = k_0 + nk_a$ , 因此总有可能激发表面等离子激元。

### § 2.1.5 表面等离子激元所引起的电磁场的增强

对于介质-金属体系来说, 如果体系的反射率最小, 则金属表面的电磁场强度达到最大值。如把介电常数为  $\varepsilon$ , 厚度为  $d$  的表面光滑的金属放在介质  $\varepsilon_0$  和  $\varepsilon_2$  中间, 电磁场增强的数值由介质一边  $\varepsilon_2$  的表面电磁场的强度  $|H_2(y)|^2$  与介质  $\varepsilon_0$  入射电磁场的强度  $|H_0(y)|^2$  的比值所决定。

$$\frac{|H_2(y)|^2}{|H_0(y)|^2} = |t_{012}^p|^2 = \frac{t_{01}^p t_{12}^p \exp(ik_1 d)}{1 + r_{01} r_{12} \exp(2ik_1 d)} \quad (2-21)$$

其中,  $|t_{012}^p|^2$  表示两体问题的菲涅耳透射系数。  $t_{ik}^p$  表示单体系统的透射系数。

并且  $t_{ik}^p = 1 + r_{ik}^p$ , 其中,

$$r_{ik}^p = \left( \frac{k_i}{\varepsilon_i} - \frac{k_k}{\varepsilon_k} \right) / \left( \frac{k_i}{\varepsilon_i} + \frac{k_k}{\varepsilon_k} \right) \quad (2-22)$$

当  $d$  为参数，入射角的函数  $|t_{012}^p|^2$  在  $d = d_{\min}$  时，具有最大值。

$$|t_{012}^p|_{\max}^2 = \frac{1}{\varepsilon} \frac{2|\varepsilon_1'|^2}{\varepsilon_1''} \frac{a}{1+|\varepsilon_1'|} \quad (2-23)$$

$$|t_{01}^p|_{\max}^2 = \frac{4a^2}{a^2 + \varepsilon_0'} \quad (2-24)$$

其中， $a^2 = |\varepsilon_1'|(\varepsilon_0 - 1) - \varepsilon_0$

通常，我们只对电场强度的最大值感兴趣。

$$\left( \frac{|H_2(y)|^2}{|H_0(y)|^2} \right)_{\max} = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \left( \frac{|E_2|^2}{|E_0|^2} \right)_{\max} = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} T_{\max}^{el} \quad (2-25)$$

$$T_{\max}^{el} = \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{2|\varepsilon_1'|^2}{\varepsilon_1''} \frac{a}{1+|\varepsilon_1'|} \quad (2-26)$$

如果  $\varepsilon_2 = 1$  (空气) 和  $\varepsilon_0 = 2.2$  (石英)， $d = 600\text{\AA}$ ，对银金属来说，当入射波波长为  $\lambda = 4500\text{\AA}$  时， $T_{\max}^{el} \approx 100$ ，在入射波长为  $\lambda = 6000\text{\AA}$  时， $T_{\max}^{el} \approx 200$ ，入射波波长为  $\lambda = 7000\text{\AA}$  时， $T_{\max}^{el} \approx 250$ 。在波长为  $\lambda = 6000\text{\AA}$  时，金金属约  $T_{\max}^{el}$  大约为 30，铝的为 40，铜的为 7 左右。由于介电函数  $\varepsilon_1(\omega)$  尤其是  $\varepsilon_1''(\omega)$  对实验条件很敏感，因此以上  $T_{\max}^{el}$  的数值是近似值。

电磁场的增强还可以用能量守恒的方式来表示。把表面等离子激元的波印廷矢量  $P(x)$  关于  $z$  从  $-\infty$  到  $+\infty$  积分含有表面等离子激元在金属表面上的场强  $|E_p(0^+)|^2$ 。我们在空气—金属表面的空气介质中计算  $|E_p(0^+)|^2$ 。在共振时或  $R = 0$  时，表面等离子激元的强度因为内部吸收而损耗，可以表示为：

$$-\frac{dP(x)}{dx} = 2k_p'' P(x) \quad (2-27)$$

$k_p^*$  见 (2-10)。损耗是由沿着表面传播的入射光的  $|E_0|^2$  来补偿的。在稳定态，二者之间可以得到平衡。因此人们经常把  $\frac{|E_p(0^+)|^2}{|E_0|^2}$  的商作为主要的考察参数。

公式 (2-21) 也适用于表面粗糙的金属表面。在线性近似时，金属表面上的平均场的加强和在光滑的金属表面上一样用  $|t_{012}^p|^2$  来表示。一般来说， $|t_{012}^p|^2$  的值与具体的粗糙程度有关。在这里，我们重点介绍一下金属表面上带有半径为 50nm 左右的电介质小球的粗糙表面。我们所关心的是局域的表面等离子激元模式与相应的传播模式。如此的局域模式是众所周知的，如电介质小球的本征模式等等。例如在 Chen [11] 等人的实验中，在银金属—空气分界面上由于表面的粗糙，局域的电磁场的强度增加了  $10^4$  倍。Fleischmann 等人利用同样的装置，使金属银表面的粗糙程度为直径 50nm 的间隔为 150-300nm 的电介质颗粒，和平滑的金属表面相比，在表面等离子激元的共振频率上，局域的电磁场的强度增加了  $10^4$  倍。对于金属金来说，电磁场的强度约加强为  $10^3$  倍。他们还估计金属银中的局域电磁场增强了 20-400 倍。

### § 2.1.6 表面等离子激元随金属薄层厚度的衰减

前面我们已经介绍了在半无限的金属表面上传播的表面等离子激元的性质，表面等离子激元也能存在于金属薄层上，它的性质依赖于金属薄层的厚度以及薄层两侧的电介质的介电常数。

我们考虑在  $z = 0$  平面上厚度为  $d$  的金属薄层，如图 2-3 所示。如果金属层的厚度很小时，更确切地说是  $k_1 d \ll 1$  时，对称使得金属层两个表面上的表面电磁波是相同的，因此金属层很薄时，金属两侧的电磁场相互作用，电磁场的频率分裂为  $\omega^\pm$ ，高频模式  $\omega^+$  (电场关于  $z = 0$  平面反对称)，低频模式 (电场关于  $z = 0$  平面对称)。 $\omega^\pm$  的值与  $k_p$  以及金属薄层的厚度  $d$  有关 [12]，则对称的色散关系为：

$$\omega^+ : L^+ = \varepsilon_1 k_2 + \varepsilon_2 k_1 \tanh \frac{1}{2i} k_1 d = 0 \quad (2-28)$$

$$\omega^- : L^- = \varepsilon_1 k_2 + \varepsilon_2 k_1 \operatorname{ctgh} \frac{1}{2i} k_1 d = 0 \quad (2-29)$$

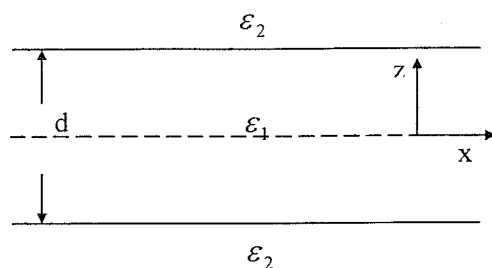


图 2-3 对称的层体系  $\varepsilon_2/\varepsilon_1/\varepsilon_2$ 。  $\varepsilon_1$  金属薄层的介电函数，  $z=0$  是对称面。

式 (2-28) 和 (2-29) 只对  $p$  极化的电磁波有效，  $s$  极化的电磁波不存在。对大  $k_p$

( $k_1 = k_2 = ik_p$ ) 而言，上式变为：

$$\frac{\varepsilon_2 + \varepsilon_1}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} = \mp e^{-k_p d} \quad (2-30)$$

对于 Drude 模型来说，在  $\varepsilon_2 = 1$  时：

$$\omega^\pm = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} (1 \pm e^{-k_p d})^{1/2} \quad (2-31)$$

如果金属层上面覆盖一层厚度为  $d$ ，介电常数为  $\varepsilon_2$  的介质，则有：

$$\omega^\pm = \frac{\omega_p}{(1 + \varepsilon_2)^{1/2}} \frac{1 \pm \exp(-k_p d)}{1 \mp \gamma \exp(-k_p d)}$$

$$\gamma = \frac{\varepsilon_2 - 1}{\varepsilon_2 + 1} \quad (2-32)$$

以上这些方程说明了非延迟区的分裂。对有限厚度的  $d$  来说，  $\omega^+ > \omega^-$ 。当  $k_p d > 1$

时，

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{(1 + \varepsilon_2)^{1/2}} \quad (2-33)$$

波矢  $\omega^\pm$  分别对应着表面等离子激元的两种形式。此外，由于两种表面等离子激元

均表示金属层的本征模式, 金属层上下两个表面上的电场强度和磁场强度是相同的。由于两种模式的速度都是小于光速的, 因此不能被从真空中入射的外部电磁波所激发。

### § 2.1.7 局域的等离子激元及其加强

表面等离子激元也能存在于弯曲的表面, 如球面或圆柱面上, 对于一个半径为  $R$ , 介电函数为  $\varepsilon(\omega)$  的球埋在一个介电常数为  $\varepsilon_M$  的电介质的情况, 相应的表面模式的条件为[13]:

$$\varepsilon(\omega_l) = -\varepsilon_M \left( \frac{l+1}{l} \right), l = 1, 2, 3, \dots \quad (2-34)$$

对第  $l$  阶表面模式随着离开球面的距离, 极化以  $r^{l-1}$  衰减。  $l=1$  的频率为  $\varepsilon(\omega_F) = -2\varepsilon_M$  总是低于其他表面模式  $l=2, 3, \dots$  的频率。对于其他模式的频率, 随着  $l$  的增加, 越来越局域在球面附近, 它们的频率收敛于有限的频率  $\omega_s$ ,  $\varepsilon(\omega_s) = -\varepsilon_M$  [14]。

球的所有极化都是辐射性的一个原因是它们能与周围介质中的电磁波发生耦合。在均匀外电场  $E_0$  中, 半径为  $\alpha$  的小球的极化强度为:

$$P(\omega) = \frac{3}{4\pi} \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_0}{\varepsilon_1(\omega) + 2\varepsilon_0} E_0 \quad (2-35)$$

只要  $\alpha \ll \lambda$ ,  $\lambda$  是外场的波长, 上式便有效。球 ( $\varepsilon_0 = 1$ ) 外表面上的电场为:

$$E(\alpha) = 2 \frac{\varepsilon_1 - 1}{\varepsilon_1 + 2} E_0 + E_0 = \frac{3\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + 2} E_0 \quad (2-36)$$

上式在  $\varepsilon_1' = -2$  时有最大值, 此时场的加强为:

$$T_{el} = \left| \frac{E(\alpha)}{E_0} \right|^2 = \left| \frac{3\varepsilon_1'}{\varepsilon_1''} \right|^2 \quad (2-37)$$

在给定入射波长  $\lambda = 3500 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon_1' = -2$  和  $\varepsilon_1'' = 0.28$  时,  $T \approx 480$  远远高于相同波长

时平面上的情况。这个共振是传导电荷的集体激发，由于局限在球面上，经常被称为“局域的等离子体激元”。这已经在很多的电子损耗实验中被观察到，详细情况请看参考文献[15]。

前面我们系统地回顾了表面等离子体激元的一些基本性质，如色散关系、传播长度、场的加强等等，为以后我们的计算提供了理论背景和依据。

## § 2.2 金属中的电介质腔体的电磁模式

当一个电介质腔体被嵌入无限大的金属中时，它可存在一系列的本征模式。当外界入射的电磁波的频率与这些本征模式的频率非常接近时，电介质腔体中很容易被激发出非常强的电磁波。当电介质腔体是球形对称的情况时，通过球面波展开技术可以严格地求出对应球谐函数的散射系数，而电介质小球的腔体本征频率对应于散射系数的在光谱上的峰值位置。

### § 2.2.1 介质球的电磁模式

假定一个半径为  $S$  的电介质小球位于坐标原点，介质球内的材料有一个与频率有关的复介电常数  $\varepsilon_M(\omega)$ ，周围环境材料的介电常数为  $\varepsilon(\omega)$ 。当如下的平面电磁波：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2-38a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\omega\mu_0} \mathbf{k} \times \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2-38b)$$

其中  $k \equiv \sqrt{\mu_0\varepsilon\omega} = \sqrt{\chi}\omega/c$ ， $c$  是真空中光速。

入射到电介质小球上时，介质球内的电磁场为：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ \frac{i}{\omega\varepsilon_S} a_{lm}^{IE} \nabla \times j_l(k_S r) \mathbf{X}_{lm}(\mathbf{r}) + a_{lm}^{IH} j_l(k_S r) \mathbf{X}_{lm}(\mathbf{r}) \right\} \quad (2-39a)$$

$$H(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ a_{lm}^{lE} j_l(k_S r) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{\omega \mu_0} a_{lm}^{lH} \nabla \times j_l(k_S r) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right\} \quad (2-39b)$$

其中,  $k_S \equiv \sqrt{\mu_0 \varepsilon_S} \omega$ 。  $j_l(qr)$  是球贝塞尔函数。并且,  $\hat{\mathbf{r}} \equiv (\theta, \phi)$  是球坐标中的角变量,  $X_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$  是一个矢量球谐函数, 其定义为:

$$\sqrt{l(l+1)} X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = L Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = -i \mathbf{r} \times \nabla Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2-40)$$

电介质球外所有的电磁场的叠加可以表示为:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = & \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ \frac{i}{\omega \varepsilon} a_{lm}^{0E} \nabla \times j_l(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{lm}^{0H} j_l(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right. \\ & \left. + \frac{i}{\omega \varepsilon} T_l^E a_{lm}^{0E} \nabla \times h_l^+(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + T_l^H a_{lm}^{0H} h_l^+(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right\} \end{aligned} \quad (2-41a)$$

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}) = & \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ a_{lm}^{0E} j_l(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{lm}^{0H} \nabla \times j_l(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right. \\ & \left. + T_l^E a_{lm}^{0E} h_l^+(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} T_l^H a_{lm}^{0H} \nabla \times h_l^+(kr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right\} \end{aligned} \quad (2-41b)$$

上式中的前两项表示入射的电磁波, 其中

$$\begin{aligned} a_{lm}^{0E} = & \frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{\omega \mu_0 \sqrt{l(l+1)}} \left\{ a_l^m Y_{l-(m+1)}(\mathbf{r}_k) [(k \times \mathbf{E}_0)_x + i(k \times \mathbf{E}_0)_y] \right. \\ & \left. + \beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\mathbf{r}_k) [(k \times \mathbf{E}_0)_x - i(k \times \mathbf{E}_0)_y] \right. \\ & \left. - m Y_{l-m}(\mathbf{r}_k) (k \times \mathbf{E}_0)_z \right\} \end{aligned} \quad (2-42a)$$

$$\begin{aligned} a_{lm}^{0H} = & \frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{\sqrt{l(l+1)}} \left\{ a_l^m Y_{l-(m+1)}(\mathbf{r}_k) [E_{0x} + iE_{0y}] \right. \\ & \left. + \beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\mathbf{r}_k) [E_{0x} - iE_{0y}] - m Y_{l-m}(\mathbf{r}_k) E_{0z} \right\} \end{aligned} \quad (2-42b)$$

其中  $\mathbf{r}_k \equiv (\theta_k, \phi_k)$ 。式(2-41)中的后两项表示散射波。描写散射波与入射平面波的关系的系数  $T_l^E$  和  $T_l^H$  由下式计算:

$$T_l^E(\omega) \equiv \frac{j_l(k_S r) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \right]_{r=S} \varepsilon_M - j_l(kr) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(k_S r)) \right]_{r=S} \varepsilon}{h_l^+(kr) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(q_S r)) \right]_{r=S} \varepsilon - j_l(k_S r) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r h_l^+(kr)) \right]_{r=S} \varepsilon_M} \quad (2-43a)$$

$$T_l^H(\omega) = \frac{j_l(k_S r) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(kr)) \right]_{r=S} \mu_S - j_l(kr) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(k_S r)) \right]_{r=S} \mu}{h_l^+(kr) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(k_S r)) \right]_{r=S} \mu - j_l(k_S a) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r h_l^+(kr)) \right]_{r=S} \mu_S} \quad (2-43b)$$

可以看出在  $TE$  和  $TH$  极化的频率上,  $T_l^E$  和  $T_l^H$  的分母消失, 因此在这些频率上光学横截面 (optical cross section) 会发生共振。对于实数频率来说,  $T_l^E$  和  $T_l^H$  的分母从来不会为零, 因为  $T_l^E$  和  $T_l^H$  的极化方程的根为复数。通过简单的数学分析可知, 电介质球的每一个辐射的极化模式 (通常被称为腔体模式) 都对横截面贡献一个峰[16]。在以上所有的电磁模式中,  $l=1$  的本征模式具有最强的响应和最低的本征频率。随着  $l$  的增加, 本征模式的响应逐渐减弱, 并向高频方向漂移。

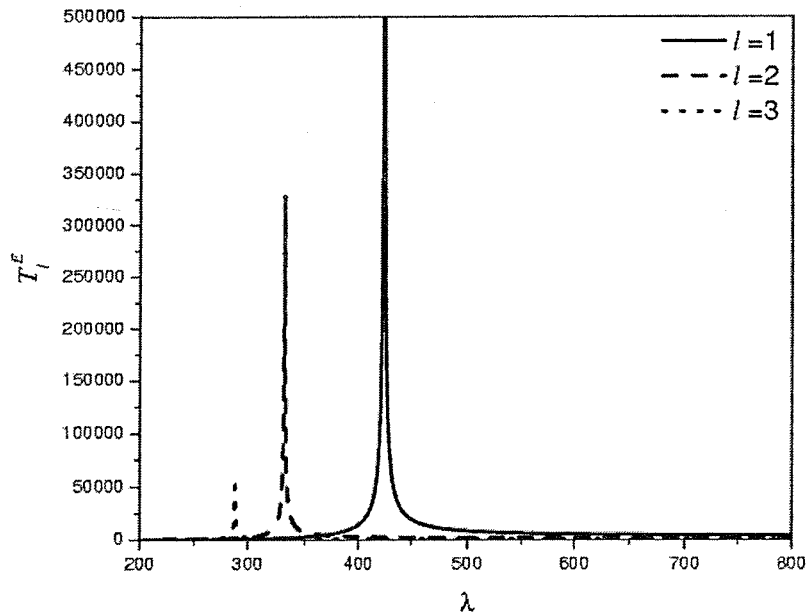


图 2-4 金属银中单个电介质玻璃小球的散射系数  $T_l^E(\omega)$ 。

当周围环境材料为金属时, 平面电磁波垂直入射时, 仅存在  $TE$  极化模式, 因此(2-43) 简化为 (2-43a)式。从上式中可以看出,  $T_l^E(\omega)$  和  $T_l^H(\omega)$  与电介质球的几何尺寸(半径的大小)以及介质球中的电介质和其外部材料的介电常数有关, 而与介质球的空间排列无关。调节这些参数可以控制电介质球腔体的本征频率的

大小。更详细的推导请看参考文献[17]。

无限大银金属(其介电常数用前面的 Drude 模型来表示)中半径为  $S = 100nm$  单个电介质玻璃小球 ( $\varepsilon = 1.96$ ) 的本征模式的强度如图 2-4 所示。从图中可以看出, 电介质球腔体的每一个本征模式都对应一个明显的峰, 对应于不同的  $l$ , 图中都有共振峰出现。在以上所有的电磁本征模式中,  $l=1$  的本征模式具有最强的响应和最低的本征频率。随着  $l$  的增加, 本征模式的响应逐渐减弱, 并且从低频向高频方向漂移。可以通过调节 (2-43) 式中的参数来控制介质球腔体的本征频率的大小。

### § 2.2.2 电介质球壳的电磁模式

把带有相同厚度的均匀电介质涂层的金属小球嵌入到无限大的金属中, 这时嵌入的腔体相当于电介质球壳。通过球面波展开技术可以严格地求出对应球谐函数的散射系数  $T_l^E(\omega)$ 。而电介质球壳的腔体本征频率对应于散射系数  $T_l^E(\omega)$  的峰值位置。对于一个内半径为  $S_1$  和外半径为  $S_2$ , 球心位于坐标原点的介质球壳来说,  $T_l^E(\omega)$  的具体计算公式如下[18]:

$$T_l^E(\omega) = \frac{-iC_l^E(\omega)}{1+iC_l^E(\omega)} \quad (2-44)$$

而系数  $C_l^E(\omega)$  可由下式计算可得:

$$C_l^E(\omega) = \frac{\phi_1\phi_2 - \phi_3\phi_4}{\phi_1\Psi_2 - \phi_3\Psi_4} \quad (2-45)$$

其中,

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \psi_l(k_{Ag} S_1) \phi_l'(k_{sph} S_1) - \sqrt{\varepsilon_{sph}} \psi_l'(k_{Ag} S_1) \phi_l(k_{sph} S_1) \\ \phi_2 &= \sqrt{\varepsilon_{sph}} \psi_l(k_{sph} S_2) \phi_l'(k_{Ag} S_2) - \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \psi_l'(k_{sph} S_2) \phi_l(k_{Ag} S_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\phi_3 &= \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \psi_l(k_{Ag} S_1) \psi_l'(k_{sph} S_1) - \sqrt{\varepsilon_{sph}} \psi_l'(k_{Ag} S_1) \psi_l(k_{sph} S_1) \\ \phi_4 &= \sqrt{\varepsilon_{sph}} \phi_l(k_{sph} S_2) \psi_l'(k_{Ag} S_2) - \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \phi_l'(k_{sph} S_2) \psi_l(k_{Ag} S_2)\end{aligned}\quad (2-46a)$$

$$\begin{aligned}\Psi_2 &= \sqrt{\varepsilon_{sph}} \psi_l(k_{sph} S_2) \phi_l'(k_{Ag} S_2) - \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \psi_l'(k_{sph} S_2) \phi_l(k_{Ag} S_2) \\ \phi_4 &= \sqrt{\varepsilon_{sph}} \phi_l(k_{sph} S_2) \psi_l'(k_{Ag} S_2) - \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \phi_l'(k_{sph} S_2) \psi_l(k_{Ag} S_2)\end{aligned}\quad (2-46b)$$

这里,  $\psi_l(x) = x j_l(x)$ ,  $\phi_l(x) = x \eta_l(x)$ , 其中  $j_l(x)$  和  $\eta_l(x)$  分别为第一和第二类贝塞尔函数。而  $k_{sph} = \sqrt{\varepsilon_{sph}} \omega / c$ ,  $k_{Ag} = \sqrt{\varepsilon_{Ag}} \omega / c$ 。其中  $c$  是真空中光速。在所有的本征模式中,  $l=1$  的本征模式具有最强的响应和最低的本征频率。随着  $l$  的增加, 本征模式的频率逐渐减弱, 并且从低频向高频方向漂移。从公式中可以看出  $T_l^E(\omega)$  与球壳的几何尺寸 (内半径  $S_1$  和外半径  $S_2$ ) 以及球壳中电介质和其外部的金属的介电常数有关, 而与它们的空间排列无关。调节这些参数可以控制腔体的本征频率。

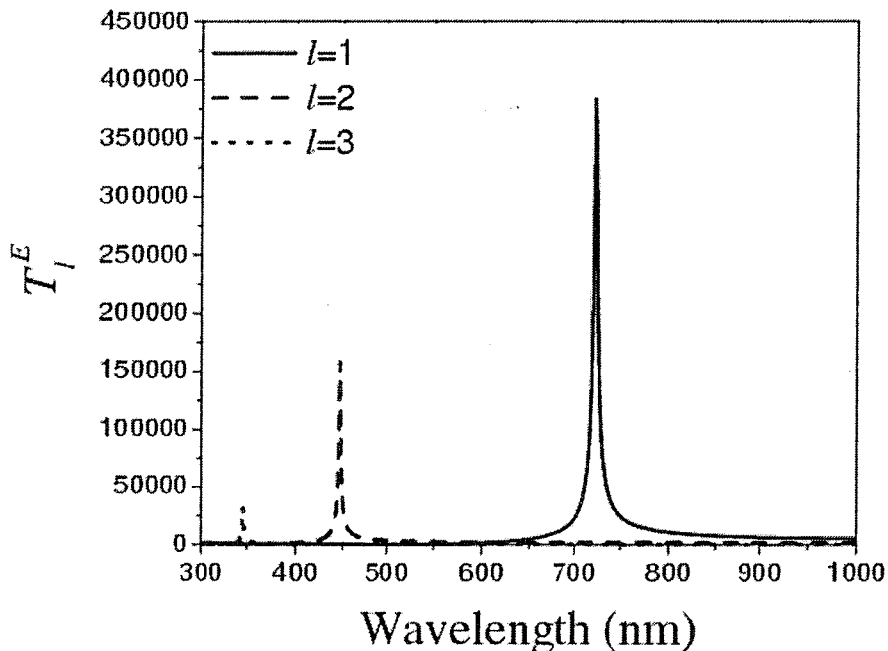


图 2-5 金属中单个电介质玻璃球壳的散射系数  $T_l^E(\omega)$ 。

图 2-5 给出了无限大银金属（其介电常数用前面的 Drude 模型来表示）中外半径为  $S_2 = 100\text{nm}$ ，内半径  $S_1 = 60\text{nm}$  的单个电介质玻璃球壳（ $\epsilon = 1.96$ ）的本征模式的强度。从图中可以看出，电介质玻璃球壳腔体的每一个本征电磁模式都对应一个非常明显的峰，对应于不同的  $l$ ，图中都有不同的共振峰出现。并且在所有的电磁本征模式中， $l=1$  的本征模式的强度最强，本征频率最低。随着  $l$  的增加，本征模式的强度逐渐减弱，并且逐渐从低频向高频方向移动。

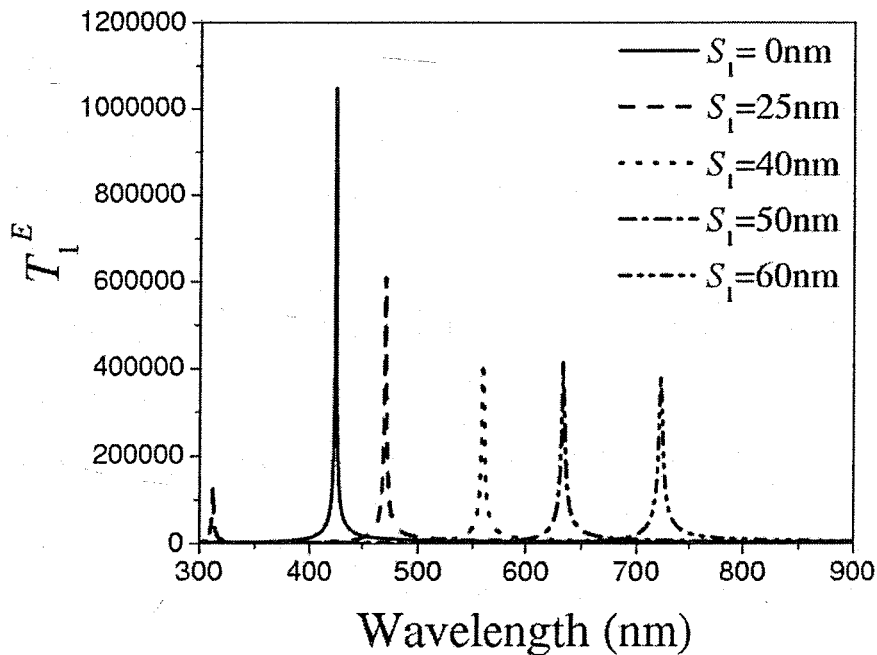


图 2-6 金属中单个电介质玻璃球壳的散射系数  $T_l^E(\omega)$  随内半径  $S_1$  的变化。

无限大的 Drude 金属中，外半径为  $S_2 = 100\text{nm}$  的单个电介质玻璃球壳的  $l=1$  本征模式的强度随内半径  $S_1$  的变化关系如图 2-6 所示。从图中可以看出，保持电介质玻璃球壳的外半径不变， $l=1$  本征模式的频率随着球壳内半径的变大逐渐从低频向高频方向移动，并且其强度逐渐减弱。内半径  $S_1 = 0$  相当于上一节中半径为  $100\text{nm}$  的介质球的情况。我们可以通过通过调节 (2-46) 式中的参数来控制介质球壳腔体的本征频率的大小。

在本章中，我们简单介绍了表面等离子体激元的基本性质和金属中的电介质腔体的激发模式。给出了详细的解析公式，利用这些公式可以控制电介质腔体的本征频率的大小以及表面等离子激元出现的频率。在随后的几章里，我们将通过多重散射方法，仔细研究金属中的电介质球体及其球壳的表面模式和腔体模式之间的相互作用而产生的特殊的光学现象。

### 参 考 文 献

- [1] H. Raether. Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on grating, Berlin: Springer-Verlag, 1998.
- [2] L. D. Landau, E.M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii. Electrodynamics of continuous media. 2nd Ed. Oxford: Pergamon, 1993.
- [3] V. M. Agranovich and D. L. Mills, Surface polaritons. Amsterdam: North-Holland, 1982.
- [4] Electromagnetic surface modes, edited by A.D. Boardman. New York: Wiley, 1982.
- [5] Near-field optics and surface plasmon polaritons. edited by S. Kawata. New York: Springer, 2001.
- [6] J. D. Jackson. Classical electrodynamics, 3rd Ed. Berkeley: Univ. California, 1998.
- [7] C. F. Bohren, and D. R. Huffman. Absorption and scattering of light by small particles. New York: Wiley, 1983.
- [8] R. H. Ritchie. Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films. Phys. Rev. 1957, 106(5): 874-881
- [9] C. J. Powell, J. B. Swan. Effect of Oxidation on the Characteristic Loss Spectra of Aluminum and Magnesium. Phys. Rev. 1960, 118(3): 640-648
- [10] C. A. Ward, R. J. Bell, R. W. Alexander, G. S. Kovener, and I. Tyler. Surface electromagnetic waves on metals and polar insulators some comments. Appl. Opt., 1974(13): 2378-2381
- [11] C. K. Chen, A. R. B. De Castro, and Y. R. Shen. Surface enhanced second harmonic generation. Phys. Rev. Lett., 1981(46): 145-148

- [12] H. Raether. Excitation of plasmons and interband transitions by electrons, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 88, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1980.
- [13] F. Fujimoto, K. Komaki. Plasma oscillations excited by a fast electron in a metallic particle, J. Phys. Soc. Japan, 1968, 25(5): 1679-1684
- [14] R. H. Ritchie, J. Crowell. Radiative decay of coulomb-stimulated plasmons in spheres. Phys. Rev., 1968, 172(2): 436-440
- [15] U. Kreibig, P. Zacharias. Surface plasma resonances in small spherical silver and gold particles. Z. Phys., 1970 (231): 128-143
- [16] R. Fuchs and K. L. Kliewer. Optical modes of vibration in an ionic crystal sphere. J. Opt. Soc. Amer. 1968(58): 319-330
- [17] A. Modinos. Scattering of electromagnetic waves by a plane of spheres-formalism. Phys. A, 1987(141A): 575-588
- [18] J. J. Zheng, G. Sun. Surface plasmon polaritons and its coupling with cavity mode in the system of dielectric spherical shells periodically mounted in a metal substrate. ACTA PHYS SIN-CH ED, 2005(54): 292-298

### 第三章 多重散射理论及其改进

由于光子晶体与普通晶体的相类似,普通晶体的许多概念可以被移植到光子晶体的研究里,如能带、带隙、能态密度等。电子能带的许多处理方法也被延伸用于处理光子能带。继 Yablonovith 和 John 的开创性工作不久,有些人就尝试按照电子能带计算的各种方法,如平面波法(PW)和缀加平面波法(APW)等等,将光子当作标量波,利用薛定谔方程来计算光子能带,计算结果显示,包括 FCC 在内的许多结构的光子晶体都将出现光子带隙,但是这与实验结果不符,然而随后的研究表明,这种标量波近似法不仅在定量上,甚至在定性上都与实验结果不符。这是因为电子是自旋为  $1/2$  的费米子,是标量波,而光子是自旋为  $1$  的玻色子,是矢量的电磁波,二者之间存在着本质的区别。因此,必须从麦克斯韦方程组出发,在矢量波理论的框架里计算光子晶体的能带结构。

在众多计算能带结构的理论中,多重散射理论是非常有效的,且能用来计算光子晶体层的透射和反射系数[1-10]。在本文的研究中主要利用的是多重散射方法,它对于我们所研究的问题是非常有效并且是实用的。在本章第一节中我们先简单介绍了 Stefanou 的原程序的应用范围,在第二节中说明了我们对其所作的改进。

#### § 3.1 多重散射理论

多重散射理论其最基本的思想和最初被用来描述晶体中的电子的多重散射[11, 12]的 LKKR (Layer Korringa-Kohn-Rostoker)方法相同,它特别适用于由球对称的散射中心所组成的层状晶格体系。这种方法不仅能够计算给定晶面的确定光子晶体的能带结构,还能计算以任何角度入射到平行于晶面的有限厚度晶体层上的电磁波的透射、反射和吸收系数。此外,还能计算含有不同球体的平面的不同种类的晶体层,但是要求这些平面具有相同的二维周期性。

## § 3.1.1 单个球对平面波散射

在介电常数为  $\varepsilon(\omega)\varepsilon_0$  和磁导率为  $\mu(\omega)\mu_0$  (其中,  $\varepsilon_0, \mu_0$  为真空中的介电常数和磁导率) 均匀的介质中传播的频率为  $\omega$ , 波矢为  $q$  的平面电磁波为

$$E(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[E(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)] \quad (3-1)$$

$$H(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[H(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)] \quad (3-2)$$

其中

$$E(\mathbf{r}) = E_0(q) \exp(-iq \cdot \mathbf{r}) \quad (3-3)$$

$$H(\mathbf{r}) = -\left(\frac{i}{\omega\mu\mu_0}\right) \nabla \times E(\mathbf{r}) \quad (3-4)$$

波矢的大小为  $q = \sqrt{\mu\varepsilon}\omega/c$ ,  $c = 1/\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}$  为真空中的光速。  $E_0(q) \equiv E_0(q)\hat{p}$ ,  $E_0$  表示幅值,  $\hat{p}$  是单位矢量, 表示电场的极化。

上面的电磁波能被展开为球面波的形式:

$$E(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left( \frac{i}{q} a_{lm}^{0E} \nabla \times j_l(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{lm}^{0H} j_l(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \quad (3-5)$$

$$H(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left( a_{lm}^{0E} j_l(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{lm}^{0H} \nabla \times j_l(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \quad (3-6)$$

其中,  $j_l(qr)$  是球贝塞尔函数,  $X_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$  是矢量球函数,  $\hat{\mathbf{r}}$  是球坐标中的角变量, 被定义为:

$$\sqrt{l(l+1)} X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = L Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3-7)$$

其中,  $L \equiv -i \times \nabla$ ,  $Y_{lm}$  通常也被定义为球函数, 对于给定的  $l (=1, 2, 3, \dots)$ ,  $m$  取  $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ .

定义  $X_{00}(\hat{\mathbf{r}}) = 0$ , 当  $l \geq 1$  时, 有

$$\begin{aligned} \sqrt{l(l+1)}X_{lm}(\hat{r}) = & [\alpha_l^m Y_{l+1}(\hat{r}) + \beta_l^m Y_{l-1}(\hat{r})]\hat{u}_1 \\ & - i[\alpha_l^m Y_{l+1}(\hat{r}) + \beta_l^m Y_{l-1}(\hat{r})]\hat{u}_2 + mY_{lm}(\hat{r})\hat{u}_3 \end{aligned} \quad (3-8)$$

其中,

$$\begin{aligned} \alpha_l^m & \equiv \frac{1}{2}[(l-m)(l+m+1)]^{1/2} \\ \beta_l^m & \equiv \frac{1}{2}[(l-m)(l-m+1)]^{1/2} \end{aligned} \quad (3-9)$$

$\hat{u}_1, \hat{u}_2, \hat{u}_3$  分别是  $x, y, z$  坐标轴上的单位矢量。由 (3-3) 和 (3-4) 的平面波的球面波的展开 (3-5) 和 (3-6) 中的系数  $\alpha_{lm}^{0P}$  ( $P = E, H$ ) 可以写为如下的形式:

$$\alpha_{lm}^{0P} = A_{lm}^{0P} \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \quad (3-10)$$

其中

$$\begin{aligned} A_{lm,x}^{0E}(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{q\sqrt{l(l+1)}} \{iq_z[\alpha_l^m Y_{l-(m+1)}(\hat{\mathbf{q}}) - \beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\hat{\mathbf{q}})] + mq_y Y_{l-m}(\hat{\mathbf{q}})\} \\ A_{lm,y}^{0E}(\hat{\mathbf{q}}) &= -\frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{q\sqrt{l(l+1)}} \{q_z[\alpha_l^m Y_{l-(m+1)}(\hat{\mathbf{q}}) + \beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\hat{\mathbf{q}})] + mq_x Y_{l-m}(\hat{\mathbf{q}})\} \\ A_{lm,z}^{0E}(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{q\sqrt{l(l+1)}} \{(q_y - iq_x)\alpha_l^m Y_{l-(m+1)}(\hat{\mathbf{q}}) + (q_y + iq_x)\beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\hat{\mathbf{q}})\} \end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned} A_{lm,x}^{0H}(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{\sqrt{l(l+1)}} \{\alpha_l^m Y_{l-(m+1)}(\hat{\mathbf{q}}) + \beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\hat{\mathbf{q}})\} \\ A_{lm,y}^{0H}(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{\sqrt{l(l+1)}} \{\alpha_l^m Y_{l-(m+1)}(\hat{\mathbf{q}}) - \beta_l^m Y_{l-(m-1)}(\hat{\mathbf{q}})\} \\ A_{lm,z}^{0H}(\hat{\mathbf{q}}) &= -\frac{4\pi i^l (-1)^{m+1}}{\sqrt{l(l+1)}} mY_{l-m}(\hat{\mathbf{q}}) \end{aligned} \quad (3-11)$$

现在考虑一个半径为  $S$  小球, 球心位于坐标原点。假定小球有一个与频率有关的复介电函数  $\varepsilon_s(\omega)$  和磁导率  $\mu_s(\omega)$ , 它周围的介质的介电常数和磁导率为

$\varepsilon(\omega)$  和  $\mu(\omega)$ 。当 (3-5) 和 (3-6) 所描述的平面电磁波入射到小球上时, 被它所散射, 因此球外的波场含有入射波 (3-5) 和相应的散射波。散射波的球面波展开形式为:

$$E_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{i}{q} a_{lm}^{+E} \nabla \times h_l^+(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{lm}^{+H} h_l^+(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3-12)$$

其中,  $h_l^+(qr)$  是球汉克尔函数, 对于辐射波它具有渐近的形式: 当  $r \rightarrow \infty$  时,  $h_l^+(qr) \approx (-i)^l \exp(iqr) / iqr$ 。

由于散射体是球形对称的, 因此 (3-5) 式中散射体的每一项球面波都是相互独立的。要求电场和磁场在小球表面的切线分量是连续的, 决定了各项系数之间的关系。

$$\begin{aligned} a_E^+(lm) &= T_l^E(\omega) a_E^0(lm) \\ a_H^+(lm) &= T_l^H(\omega) a_H^0(lm) \end{aligned} \quad (3-13)$$

其中

$$\begin{aligned} T_l^E(\omega) &= \left[ \frac{j_l(q_s r) \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \varepsilon_s - j_l(qr) \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \varepsilon}{h_l^+(qr) \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \varepsilon - j_l(q_s r) \frac{\partial}{\partial r} (r h_l^+(qr)) \varepsilon_s} \right]_{r=s} \\ T_l^H(\omega) &= \left[ \frac{j_l(q_s r) \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \mu_s - j_l(qr) \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \mu}{h_l^+(qr) \frac{\partial}{\partial r} (r j_l(qr)) \mu - j_l(q_s r) \frac{\partial}{\partial r} (r h_l^+(qr)) \mu_s} \right]_{r=s} \end{aligned} \quad (3-14)$$

我们注意到小球内的电磁场是由系数  $a_{lm}^{l,P}$  代替方程 (3-5) 中的系数  $a_{lm}^{0,P}$ 。给定入射波以后, 球表面电场和磁场切线分量的连续性决定小球外部的散射波和小球内部的电磁场, 因此小球外部的全部的波场是由方程式 (3-5) 所描写的入射波和由 (3-12) 所描写的散射波的叠加。

如果  $qS$  不远远大于 1, 对应于  $l \leq l_{\max}$  有限数量的部分波足够用来描述散射

场。因此下面，我们假定当  $l > l_{\max}$  时， $a_{lm}^{+P} = 0$ 。但是当考虑多个球的多重散射时，就面散射而言， $l_{\max}$  是由收敛性的要求而决定的。因此多个球的散射要求的  $l_{\max}$  一定大于单个小球的情况。其中，方程 (3-11) 式中的球谐函数对于给定  $m$  来说， $Y_{lm}$  的值是用如下的递推关系来计算的

$$Y_{l+1m}(\theta, \phi) = -\left\{ \left[ \frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{1/2} Y_{l-1m}(\theta, \phi) - \cos\theta Y_{lm}(\theta, \phi) \right\} \times \left[ \frac{(2l+1)(2l+3)}{(l-m+1)(l+m+1)} \right]^{1/2} \quad (3-15)$$

### § 3.1.2 多层周期性排列的小球的散射

我们要处理的结构包含多个不相互重叠的小球的平面，它们具有平行于  $xy$  平面的相同的周期性。首先，我们只考虑一个位于  $z = 0$  的平面，小球位于二维点阵的格点上，二维格点为

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (3-16)$$

其中  $\mathbf{a}_1$  和  $\mathbf{a}_2$  是  $xy$  平面上的晶格基矢， $n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

定义相应的二维倒格子为：

$$\mathbf{g} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 \quad (3-17)$$

其中， $m_1, m_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ， $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$  满足

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (3-18)$$

现在构造对应 (3-17) 的第一布里渊区。例如，对一个正方格点来说，我们让

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a \hat{u}_1 & \mathbf{a}_2 &= a \hat{u}_2 \\ \mathbf{b}_1 &= (2\pi/a) \hat{u}_1 & \mathbf{b}_2 &= (2\pi/a) \hat{u}_2 \end{aligned} \quad (3-19)$$

因此，第一布里渊区在倒空间也是方的。

让(3-3)和(3-4)所描述的平面波入射到小球所在的平面上, 平行于小球所在平面的波矢的分量为:

$$\mathbf{q}_{//} = \mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}' \quad (3-20)$$

其中, 波矢  $\mathbf{k}_{//}$  在第一布里渊区上,  $\mathbf{g}'$  是倒格矢。

由(3-16) (3-17)和(3-20)可得,  $\exp(i\mathbf{q}_{//} \cdot \mathbf{R}_n) = \exp(i\mathbf{k}_{//} \cdot \mathbf{R}_n)$ , 因此给定  $q = \sqrt{\mu\varepsilon\omega/c}$  和  $\mathbf{q}_{//} = \mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}'$  的平面波的波矢为

$$\mathbf{k}_g^{\pm} = (\mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}', \pm[q^2 - (\mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}')^2]^{1/2}) \quad (3-21)$$

其中, 波矢  $z$  分量的符号用+, -表示。可以看出, 当  $q^2 < (\mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}')^2$  时, 式(3-21)定义了一个衰减波。因此正号表示波向右方传播或者衰减的, 负号表示波向左方传播或衰减。

入射到小球所在平面上的电磁波为:

$$\mathbf{E}_m^s(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 [\mathbf{E}_m]_{g',i}^s \exp(i\mathbf{K}_g^s \cdot \mathbf{r}) \hat{u}_i \quad (3-22)$$

其中  $s = +(-)$  对应着来自球所在平面左边(右边)的传播或衰减的波。

由于所考虑结构的二维周期性, 对应着(3-21)的散射波为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) = & \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left( \frac{i}{q} b_{lm}^{+E} \nabla \times \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{//} \cdot \mathbf{R}_n) h_l^+(qr_n) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right. \\ & \left. + b_{lm}^{+H} \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{//} \cdot \mathbf{R}_n) h_l^+(qr_n) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right) \end{aligned} \quad (3-23)$$

其中,  $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$ 。从方程(3-23)可以看出, 散射波是中心在球上的向外的球面波的总和, 并且来自位于  $\mathbf{R}_n$  点的球的散射波与来自位于原点  $\mathbf{R}_n = 0$  的散射波只相差一个相因子  $\exp(i\mathbf{k}_{//} \cdot \mathbf{R}_n)$ 。

位于原点的球的散射波的系数  $b_{lm}^{+P}$  是由球上的全部入射波所决定的, 其中包括入射波和对应于  $\mathbf{R}_n \neq 0$  的其他球上的散射波。后者能展开为关于原点的球面

波:

$$E'_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{i}{q} b_{lm}^{E'} \nabla \times j_l(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + b_{lm}^{H'} j_l(qr) X_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3-24)$$

其中,  $E'_{sc}(\mathbf{r})$  是  $E_{sc}(\mathbf{r})$  消去对应于  $R_n = 0$  的项而得来的。系数  $b_{lm}^{P'}$  由下面的方程所确定。

$$b_{lm}^{P'} = \sum_{P''=E,H} \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \Omega_{lm;l'm'}^{PP''} b_{l'm'}^{+P''} \quad (3-25)$$

其中

$$\begin{aligned} \Omega_{lm;l'm'}^{EE} &= [l(l+1)l'(l'+1)]^{-1/2} (2\beta_l^m \beta_{l'}^{m'} Z_{lm-1;l'm'-1} + 2\alpha_l^m \alpha_{l'}^{m'} Z_{lm+1;l'm'+1} + mm' Z_{lm;l'm'}) \\ \Omega_{lm;l'm'}^{EH} &= [l(l+1)l'(l'+1)]^{-1/2} (2l+1) \{ (8\pi/3)^{1/2} (-1)^m \\ &\quad \times \alpha_{l'}^{m'} Z_{lm+1;l'-1,m'+1} B_{l-1,m+1}(1,-1;lm) - (8\pi/3)^{1/2} (-1)^m \\ &\quad \times \beta_{l'}^{m'} Z_{lm-1;l'-1,m'-1} B_{l-1,m-1}(1,1;lm) + m' Z_{lm;l'-1m'} \\ &\quad \times [(l+m)(l-m)/(2l-1)(2l+1)]^{1/2} \} \\ \Omega_{lm;l'm'}^{HH} &= \Omega_{lm;l'm'}^{EE} \\ \Omega_{lm;l'm'}^{HE} &= -\Omega_{lm;l'm'}^{EH} \end{aligned} \quad (3-26)$$

其中  $\alpha_l^m$  和  $\beta_l^m$  见 (3-9),

$$Z_{lm;l'm'} \equiv \sum_{R_n \neq 0} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) G_{lm;l'm'}(-R_n) \quad (3-27)$$

$$G_{lm;l'm'}(-R_n) \equiv \sum_{l''=0}^{\infty} \sum_{m''=-l''}^{l''} E_{l''m''}(l''m'';lm) h_{l''}^+(qR_n) Y_{l''-m''}(-\hat{\mathbf{R}}_n) \quad (3-28)$$

$$E_{l''m''}(l''m'';lm) \equiv 4\pi(-1)^{(l''-l-l'')/2} (-1)^{m+m''} B_{l''m''}(l''m'';lm) \quad (3-29)$$

$$B_{l''m''}(l''m'';lm) \equiv \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{l''-m''}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l''m''}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3-30)$$

我们可以看出矩阵  $\Omega^{PP'}$  的求和包含有对矩阵  $Z$  的求和。而矩阵  $Z$  在低能电子衍射理论中是一个已知的量, 关于它的计算程序见参考文献[15]。进一步的计算只是关于  $Z_{lm;l'm'}$  下面的性质:

$$Z_{lm;l'm'} = 0 \begin{cases} \text{当 } l+m \text{ 和 } l'+m' \text{ 为偶数时} \\ \text{当 } l+m \text{ 和 } l'+m' \text{ 为奇数时} \end{cases} \quad (3-31)$$

从方程 (3-34) 可得:

$$\begin{aligned} \Omega_{lm;l'm'}^{EE} &= 0 \begin{cases} \text{当 } l+m \text{ 和 } l'+m' \text{ 为偶数时} \\ \text{当 } l+m \text{ 和 } l'+m' \text{ 为奇数时} \end{cases} \\ \Omega_{lm;l'm'}^{EH} &= 0 \begin{cases} \text{当 } l+m \text{ 和 } l'+m' \text{ 为偶数时} \\ \text{当 } l+m \text{ 和 } l'+m' \text{ 为奇数时} \end{cases} \end{aligned} \quad (3-32)$$

我们可以把 (3-25) 写成更简洁的形式。在实际计算中, 只有有限数目的部分波对电磁场有贡献, 对应于  $l_{\max}(l_{\max}+2)$  按照特定顺序取值的  $(l, m)$  分别为:

$(1, -1), (1, 0), (1, 1), (2, -2), (2, -1), \dots$ , 可以把方程 (3-25) 写为矩阵的形式:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}^E \\ \mathbf{b}^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega^{EE} & \Omega^{EH} \\ \Omega^{HE} & \Omega^{HH} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{+E} \\ \mathbf{b}^{+H} \end{pmatrix} \quad (3-33)$$

其中,  $\mathbf{b}^P \equiv \{b_{lm}^P\}$  是含有  $l_{\max}(l_{\max}+2)$  元素的列矩阵,  $\Omega^{PP'}$  是  $l_{\max}(l_{\max}+2) \times l_{\max}(l_{\max}+2)$  的矩阵。 $\Omega^{PP'}$  通过  $q$  依赖于平面的形状、频率以及球面周围介质的介电函数, 它们也与入射光的简化波矢  $\mathbf{k}_{||}$  有关, 与单个小球的散射性质无关。

$\mathbf{b}^{+P} \equiv \{b_{lm}^{+P}\}$  描写在坐标原点的小球的散射波:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}^{+E} \\ \mathbf{b}^{+H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}^E & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}^H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{0E} + \mathbf{b}^E \\ \mathbf{a}^{0H} + \mathbf{b}^H \end{pmatrix} \quad (3-34)$$

其中,  $\mathbf{0}$  是  $l_{\max}(l_{\max}+2) \times l_{\max}(l_{\max}+2)$  的零矩阵,  $\mathbf{T}^P, P=E, H$  是  $l_{\max}(l_{\max}+2) \times l_{\max}(l_{\max}+2)$  的对角矩阵,

$$T_{lm;l'm'}^P = T_l^P \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3-35)$$

描述如 (3-14) 式所示的被单个球散射的电磁波。方程 (3-34) 右面的列矩阵表

示入射到球心位于坐标原点的小球上的全部入射波。  $\mathbf{a}^{0P} \equiv \{a_{lm}^{0P}\}$  来自 (3-10)

和 (3-11) 所描写的入射波 (3-22)。  $\mathbf{b}^P$  是由 (3-24) 所定义的场。

结合 (3-33) 和 (3-34), 可得:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} - \mathbf{T}^E \boldsymbol{\Omega}^{EE} & \mathbf{T}^E \boldsymbol{\Omega}^{EH} \\ \mathbf{T}^H \boldsymbol{\Omega}^{HE} & \mathbf{I} - \mathbf{T}^H \boldsymbol{\Omega}^{HH} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{+E} \\ \mathbf{b}^{+H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}^E \mathbf{a}^{0E} \\ \mathbf{T}^H \mathbf{a}^{0H} \end{pmatrix} \quad (3-36)$$

其中,  $\mathbf{I}$  是  $l_{\max}(l_{\max} + 2) \times l_{\max}(l_{\max} + 2)$  的单位矩阵。式 (3-36) 给出了 (3-23)

式中的从小球所在平面的散射波的系数  $b_{lm}^{+P}$  以入射波中的系数  $a_{lm}^{0P}$  的表达形式。

最终, 散射波 (3-23) 能被表示为下面形式的平面波的求和:

$$\sum_{R_n} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) h_l^+(qr_n) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \sum_g \frac{2\pi(i)^{-l}}{qA_0 K_{gz}^+} Y_{lm}(\hat{\mathbf{K}}_g^{\pm}) \exp(i\mathbf{K}_g^{\pm} \cdot \mathbf{r}) \quad (3-37)$$

其中,  $A_0$  为 (3-16) 所表示格点的元胞和 (3-24) 所给  $\mathbf{K}_g^{\pm}$  的面积。  $\mathbf{K}_g$  上的 + 表

示  $z > 0$ , - 表示  $z < 0$ 。  $\mathbf{K}_g^{\pm}$  的  $z$  分量  $K_{gz}^{\pm}$  可以是实数也可以是虚数。如它是

虚数, 公式  $Y_{lm}(\hat{\mathbf{K}}_g^{\pm})$  中的  $\cos \theta_{K_g^{\pm}}$  用  $K_{gz}^{\pm}/q$  来代替。

利用 (3-37), (3-23) 中的散射波可以写为:

$$\mathbf{E}_{sc}^s(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 \sum_g [E_{sc}]_{g_i}^s \exp(i\mathbf{K}_g^s \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{u}}_i \quad (3-38)$$

其中, 上标  $s = + (-)$  分别表示  $z > 0$  ( $z < 0$ ) 时的情况。  $\mathbf{K}_g^{\pm}$  如 (3-21) 所示。它

们和入射波有相同大小的波矢  $q$  和相同的简约波矢  $\mathbf{k}_{\parallel}$ 。可以把散射波看作是由许

多对应于不同的  $\mathbf{g}$  矢量的衍射光束组成的。但是, 只有  $\mathbf{K}_{gz}^{\pm}$  是实数的光束才是

向前传播的波。方程 (3-38) 中的系数当然是系数  $b_{lm}^{+P}$  的函数, 并且通过这些函

数依赖于入射的平面波。下面用  $b_{lm}^{+P}(s', g', i')$  而不是  $b_{lm}^{+P}$  来表示带有平行矢量

$\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}'$  的入射平面波, 从左边 (或右边) 入射的对应于  $s' = (-)$  沿着  $i'$  带有单位电

场的平面波。

由 (3-23) 所描写的平面波入射到图 3-1 所示的球所在的平面上, 球面右边的透射波 (入射波和反射波) 可以写为:

$$E_{tr}^+(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 \sum_g [E_{tr}]_{gi}^+ \exp(i\mathbf{K}_g^+ \cdot \mathbf{r}) \hat{u}_i, \quad z > 0 \quad (3-39)$$

其中,

$$[E_{tr}]_{gi}^+ = [E_m]_{gi}^+ \delta_{gg'} + [E_{sc}]_{gi}^+ = \sum_{i'} M_{gi;g'i'}^{++} [E_m]_{g'i'}^+ \quad (3-40)$$

反射波为:

$$E_{rf}^-(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 \sum_g [E_{rf}]_{gi}^- \exp(i\mathbf{K}_g^- \cdot \mathbf{r}) \hat{u}_i, \quad z < 0 \quad (3-41)$$

其中

$$[E_{rf}]_{gi}^- = [E_{sc}]_{gi}^- = \sum_{i'} M_{gi;g'i'}^{--} [E_m]_{g'i'}^+ \quad (3-42)$$

同样可以定义透射矩阵元  $M_{gi;g'i'}^{--}$  和反射矩阵元  $M_{gi;g'i'}^{+-}$ 。

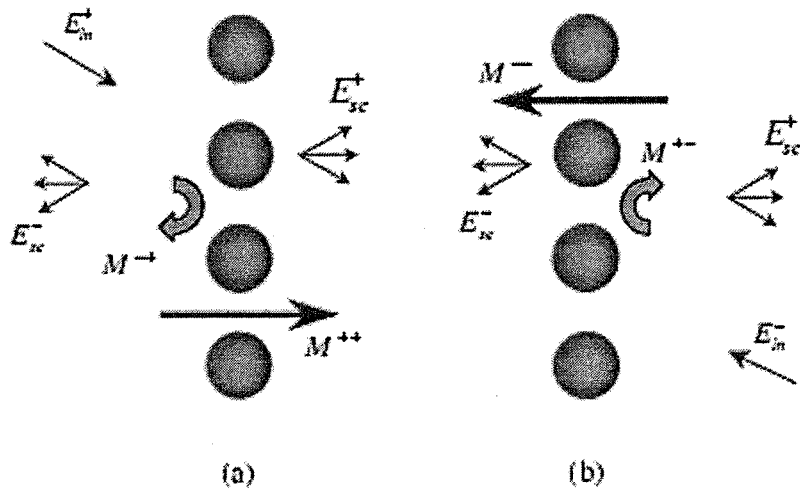


图 3-1 平面电磁波入射到电介质小球所在的平面上的散射。

(a) 平面波从左边入射, (b) 平面波从右边入射。

如果平面波从右方入射到球面上, 如图 3-1 中 (b) 所示, 则  $M$  矩阵元为:

$$M_{gi;g'i'}^{ss'} = \delta_{ss'} \delta_{gg'} \delta_{ii'} + \sum_{P=E,H} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \Delta_{lm,i}^P(\mathbf{K}_g^s) b_{lm}^{+P}(s', g', i') \quad (3-43)$$

其中,

$$\begin{aligned} \Delta_{lm}^H(\mathbf{K}_g^s) &= \frac{2\pi(-i)^l}{qA_0 \mathbf{K}_g^+} X_{lm}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \\ \Delta_{lm}^E(\mathbf{K}_g^s) &= -\frac{\mathbf{K}_g^s}{q} \times \Delta_{lm}^H(\mathbf{K}_g^s) \end{aligned} \quad (3-44)$$

其中,  $X_{lm}$  是 (2-8) 的球谐函数的矢量。可以看出  $M$  矩阵元满足下列对称关系:

$$\begin{aligned} M_{gi;g'i'}^{-s-s'} &= M_{gi;g'i'}^{ss'} \quad \text{当}(i, i') = (x, x), (y, y), (z, z), (x, y), (y, x), \\ M_{gi;g'i'}^{-s-s'} &= -M_{gi;g'i'}^{ss'} \quad \text{当}(i, i') = (x, z), (z, x), (y, z), (z, y)。 \end{aligned} \quad (3-45)$$

多重散射法主要是处理含有小球的平面或者是均匀的厚板的结构。有时我们需要处理含有几个组成部分的薄片(或者是球面或者是均匀的板)的散射性质, 因此, 表示在给定球面左边的波从小球的中心距平面左边起点  $A_l$  的距离为  $-d_l$ , 给定球面右边的波从小球的中心距离平面右边原点  $A_r$  的距离为  $-d_r$ 。例如平面左边的平面波可写为  $E_g^s \exp(i\mathbf{K}_g^s \cdot (\mathbf{r} - A_l))$ , 平面右边的平面波写为  $E_g^s \exp(i\mathbf{K}_g^s \cdot (\mathbf{r} - A_r))$ , 照上面的方法选择起点, 含有小球的平面的透射(或反射)矩阵元变为:

$$\begin{aligned} Q_{gi;g'i'}^I &= M_{gi;g'i'}^{++} \exp(i(\mathbf{K}_g^+ \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}_{g'}^+ \cdot \mathbf{d}_l)) \\ Q_{gi;g'i'}^{II} &= M_{gi;g'i'}^{+-} \exp(i(\mathbf{K}_g^+ \cdot \mathbf{d}_r - \mathbf{K}_{g'}^- \cdot \mathbf{d}_r)) \\ Q_{gi;g'i'}^{III} &= M_{gi;g'i'}^{-+} \exp(-i(\mathbf{K}_g^- \cdot \mathbf{d}_l - \mathbf{K}_{g'}^+ \cdot \mathbf{d}_l)) \\ Q_{gi;g'i'}^{IV} &= M_{gi;g'i'}^{--} \exp(i(\mathbf{K}_g^- \cdot \mathbf{d}_l + \mathbf{K}_{g'}^- \cdot \mathbf{d}_r)) \end{aligned} \quad (3-46)$$

为了简洁, 以后把上面的矩阵元记为:  $Q^I, Q^{II}, Q^{III}$  和  $Q^{IV}$ , 表示一个按照指标的

顺序  $g_{1x}, g_{2y}, g_{1z}, g_{2x}, g_{2y}, g_{2z}, \dots$  而指定的序列。

### § 3.1.3 均匀板的散射

一个厚度为  $d$  的均匀板，介电常数和磁化率分别为  $\varepsilon_2(\omega)\varepsilon_0$  和  $\mu_2(\omega)\mu_0$  被夹在左边介电常数和磁化率为  $\varepsilon_1(\omega)$ 、 $\mu_1(\omega)$  和右边介电常数和磁化率为  $\varepsilon_3(\omega)$ 、 $\mu_3(\omega)$  的均匀介质中，左分界面位于  $z=0$ ，右分界面在  $z=d$  处。板左边的波起点为  $A_0 = (0, 0, 0)$ ，右边的波的起点为  $A_d = (0, 0, d)$ 。

从板左边入射的平面波为：

$$\mathbf{E}_{in}^+(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 [E_{in}]_i^+ \exp(iq_1^+ \cdot (\mathbf{r} - A_0)) \hat{u}_i \quad (3-47)$$

相应的透射波和反射波为：

$$\mathbf{E}_{tr}^+(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 [E_{tr}]_i^+ \exp(iq_3^+ \cdot (\mathbf{r} - A_d)) \hat{u}_i \quad (3-48)$$

$$\mathbf{E}_{rf}^-(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 [E_{rf}]_i^- \exp(iq_1^- \cdot (\mathbf{r} - A_0)) \hat{u}_i \quad (3-49)$$

其中， $q_j^\pm = (q_{j\parallel}, \pm q_{jz})$ ， $q_{jz} = (\mu_j \varepsilon_j \omega^2 / c^2 - \bar{q}_{j\parallel}^2)^{1/2}$

式 (3-48) 和 (3-49) 中的系数与式 (3-47) 的系数之间满足：

$$[E_{tr}]_i^s = \sum_{i'=1}^3 N_{ii'}^{ss} [E_{in}]_{i'}^s \quad (3-50)$$

$$[E_{rf}]_i^{-s} = \sum_{i'=1}^3 N_{ii'}^{-ss} [E_{in}]_{i'}^s \quad (3-51)$$

其中， $s = + (-)$  表示向右（左）方传播的波。

给定  $\omega$  和  $\bar{q}_{j\parallel}$ ，矩阵  $N^{ss'}$  的形式为：