

重庆大学本科学生毕业设计（论文）

# 平板光子晶体中的泄露模式和有效介质理论 描述



学    生：陈卓

学    号：20175938

指导教师：向红

专    业：物理学

重庆大学物理学院

2021 年 6 月

**Graduation Design(Thesis) of Chongqing University**

**Research on Resonance Modes in Photonic  
Crystal Slabs Based on Effective Medium  
Approach**



**Undergraduate: Chen Zhuo**

**Supervisor: Ass. Prof. Hong Xiang**

**Major: Physics**

**College of Physics  
Chongqing University**

**June 2021**

## 摘 要

平板光子晶体是一种一维周期介电结构，在  $x$ - $y$  方向无限大，在  $z$  方向为有限宽度，可以用于调控光的传播，也是连续谱中的束缚态（BIC）的重要实现平台，通过求解光子晶体的能带，对研究能带上的共振模式，进而寻找 BIC，理解其产生机制有重要意义。有效介质理论的近似下，光子晶体可以看作均匀的单轴各向异性介质，周期结构则被看作微扰，求解有效介质近似下的能带可以加深我们对能带相互作用的理解。

各向同性介质中，由于平移对称性而导致了平面电磁波的模式解耦为横电（TE）和横磁（TM）波，其色散可分别由  $2 \times 2$  矩阵法求得。单轴各向异性介质中，由于模式存在耦合， $2 \times 2$  矩阵法不再适用，色散难以求得。

为求解色散，需构建各向同性介质中间夹单轴各向异性介质平板的结构，光从各向同性介质中入射。本文通过求解电磁场特征值方程，给出了单轴各向异性介质平板中电磁场的精确解，结合 Yeh 提出的  $4 \times 4$  矩阵方法，求得了各向同性和单轴各向异性介质的动力学矩阵，并由此得到了整个结构的传递矩阵。随后，推导出了满足无穷远边界条件的矩阵方程，此即色散关系。经过证明，在各向同性的情况下， $4 \times 4$  矩阵法得到的传递矩阵是分块对角化的，得到的色散与文献中的各向同性结果相同。

色散关系是一个极复杂的三变量超越方程，方程值的波动幅度大，对数值求解造成困难。通过精心设计的数值程序，成功绘出了各向同性介质平板波导模和法布里-泊罗（F-P）共振模式的色散，以及单轴各向异性介质平板波导模的色散曲面，对比了不同折射率下的色散的形状。此外，为了尝试求解各向异性介质中的 F-P 模式，考察了色散方程在角频率的复空间中的性质。

关键词：平板光子晶体，有效介质近似，单轴各向异性介质平板，色散

## ABSTRACT

Photonic crystal slab is a one-dimensional periodic dielectric structure, which is infinite in the  $x$ - $y$  direction and finite in the  $z$  direction. It can be used to control the propagation of light, and to experimentally realize the bound state in the continuum (BIC). It is of great significance to study the resonance mode to find and understand the generation mechanism of BIC. In the approximation of effective medium theory, photonic crystal slab can be regarded as homogeneous uniaxial anisotropic medium slab, while periodicity is added as perturbation. Analyzing the band structure under effective medium approximation can deepen our understanding of the interaction between different energy bands.

In an isotropic medium, due to the translational symmetry, the modes of the plane electromagnetic wave are decoupled into s (TE) and p (TM) waves, and their dispersion can be obtained by the  $2 \times 2$  matrix algebra. In uniaxial anisotropic media, due to the mode coupling, the  $2 \times 2$  matrix algebra is no longer applicable, and the dispersion is difficult to obtain.

In order to obtain the dispersion relation, a structure of isotropic medium sandwiched with uniaxial anisotropic medium slab is constructed with light incident from isotropic medium. By solving the eigenvalue equation of electromagnetic field in different medium, the exact solution is obtained. The dynamical matrix of isotropic and uniaxial anisotropic media is obtained by using the  $4 \times 4$  matrix algebra, and the transfer matrix of the whole structure is obtained. Then, the matrix equation satisfying the infinite boundary condition is derived, which gives the dispersion relation. It is proved that in the case of isotropy, the transfer matrix obtained by  $4 \times 4$  matrix algebra is block diagonal, and the dispersion is the same as the isotropic result in literature.

The general expression of the dispersion relation is a very complex transcendental equation. The value of the equation fluctuates greatly, which makes it difficult to solve numerically. Through a carefully designed program, the dispersion of waveguide modes and Fabry-Pérot (F-P) modes in isotropic medium are plotted, and the dispersion of the waveguide mode in uniaxial anisotropic medium are also given. The dispersion under different refractive indexes are compared. The attempting to solve the F-P modes in anisotropic medium is also made by looking into the properties of the dispersion equation in the complex space of angular frequency.

**Key words:** photonic crystal slabs, effective medium approach, uniaxial anisotropic media, dispersion

# 目 录

中文摘要 .....	I
ABSTRACT .....	II
1 绪论 .....	1
1.1 研究背景及意义 .....	1
1.2 平板光子晶体与 BIC .....	1
1.3 有效介质理论 .....	4
1.4 各向异性介质中的平面电磁波 .....	5
1.5 $2 \times 2$ 传递矩阵方法 .....	7
2 理论分析 .....	11
2.1 各向同性介质中电磁场的精确解 .....	11
2.2 单轴各向异性介质中电磁场的精确解 .....	12
2.3 $4 \times 4$ 矩阵法求解单轴各向异性介质平板的色散 .....	13
2.3.1 $4 \times 4$ 传播矩阵 .....	13
2.3.2 动力学矩阵与传递矩阵 .....	14
2.3.3 无穷远边界条件与色散方程 .....	16
3 数值结果 .....	18
3.1 色散方程的数值求解方法 .....	18
3.2 各向同性介质平板的色散 .....	18
3.3 单轴各向异性介质平板的色散 .....	20
4 结论 .....	23
致谢 .....	25
参考文献 .....	27
附录 .....	28
A: 动力学矩阵的一般形式 .....	28

## 1 绪论

### 1.1 研究背景及意义

平板光子晶体属于一种在两个方向上无限大，在一个方向有限厚的一维光子晶体。平板光子晶体中存在着波导模和泄露模，从有效介质理论的观点出发，加入周期扰动作为微扰，波导模会折叠进光锥之内成为泄露模，因此泄露模式都来源于波导模。此外，平板光子晶体中还存在着法布里-泊罗（F-P）共振模式，而这些模式会快速泄露。

光子晶体能带的求解一般依赖于有限元软件，如 COMSOL Multiphysics，单从结果来看，这些数值软件的精度较高且方法成熟可靠。但有限元计算得到的结果是包含能带相互作用的结果，这其中会有被隐藏的物理信息。例如，由于周期结构的存在，能带会彼此排斥，产生带隙。因此，我们希望求解能带间无相互作用下的结果，与有限元结果对比，以加深对光子晶体能带间相互作用过程的理解。

光子晶体也是 BIC 的重要实现平台，通过求解光子晶体的能带，对研究能带上的共振模式，进而寻找和理解 BIC 的产生有重要意义<sup>[1-3]</sup>。

求解无相互作用的光子晶体能带，可以求助于有效介质理论。在有效介质的一阶近似下，光子晶体平板可以近似为均匀的单轴各向异性介质平板，周期结构则被视为微扰。目前尚没有文献可以给出单轴各向异性介质平板波导的色散。Yeh 本人曾求解过单轴各向异性介质周期结构的色散<sup>[4]</sup>，但是该文章中没有考虑模式耦合，仍分为 TE 和 TM 模式，作为一阶近似，在光子晶体的周期  $\Lambda$  远小于波长  $\lambda$  的极限情况下该方法有效。且该文章中只考虑了一个传播常数，即二维情况，不能得到色散曲面。

本文得到了单轴各向异性介质平板中电磁场的精确解，基于 Yeh 提出的  $4 \times 4$  矩阵方法，求得了单轴各向异性介质平板的传递矩阵。随后，推导出了满足无穷远边界条件的矩阵方程，并基于此得到了色散关系，整个理论过程是严格的而无需依赖近似。

### 1.2 平板光子晶体与 BIC

电子晶体中，原子（分子）的周期排布使势场具有周期性，哈密顿量  $\hat{H}$  具有平移对称性。与电子晶体类似，光子晶体中，不同介电常数的低耗散电介质构成

周期结构，电场与磁场强度矢量具有平移对称性。光子晶体根据周期结构的维数可分为三种，即图1.1

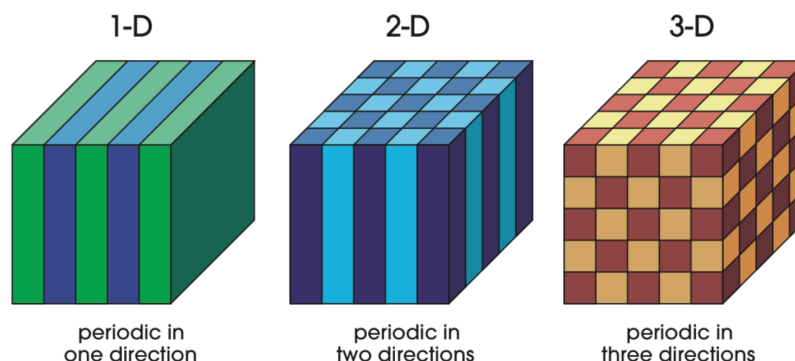


图 1.1 一维，二维和三维光子晶体示意图<sup>[5]</sup>

光子晶体的概念在 1987 年由 Yabnolovitch 在讨论抑制自发辐射<sup>[6]</sup>，以及同年 John 在讨论光子局域化的时候提出<sup>[7]</sup>，在近些年得到了迅猛的发展。集成的极限使得摩尔定律放缓乃至失效，说明半导体器件的尽头即将来临，因此发展下一代的器件十分必要，光子器件可以用来替代电子器件，例如高速通讯器件，集成光子芯片等，其应用前景广泛，不胜枚举。

用于调控光的传播的器件由很多，光子晶体则是目前最有潜力的候选者之一，金属波导和金属微腔可以较好地调控微波的传播，但更短波长的光，如可见光，在金属中会被很快耗散，这时光子晶体具有频域可扩展性的优势就显露无疑。

在固体物理中，电子在完美晶格中的运动没有散射，这是因为电子在晶体中以布洛赫波的形式传播，同样地，光子以电磁波的形式在完美的光子晶体中传播无损耗，相似地遵从布洛赫定理，即电场与磁场强度矢量为由周期函数调幅的平面波。光子晶体也有能带，光子的能带图描述了光子的波矢与频率的关系，光在真空中满足  $\omega = ck$ ，其中  $c$  是真空中光速， $k$  是波矢， $\omega$  是光子角频率。故真空中的光子能带为线性，无带隙，自由电子气的能带是二次型的，也无带隙。要注意的是，光子波是矢量波，服从麦克斯韦方程，而电子波则是标量波，服从薛定谔方程，此外电子之间存在相互作用，而光子间则没有。

图1.2是光子在光子晶体中的能带图，可看到在光子晶体中，能带在布里渊区边界发生了弯曲并形成了带隙，这是光子晶体的基本特性之一，频率在带隙之中的电磁波在光子晶体中无法传播，因而带隙中没有态存在。

我们研究的光子晶体平板是一个在  $z$  方向有限厚度，在  $x$  和  $y$  方向无限延伸的一维周期结构，如图1.3。这是一种一维光子晶体，具有简单的结构，但却具有



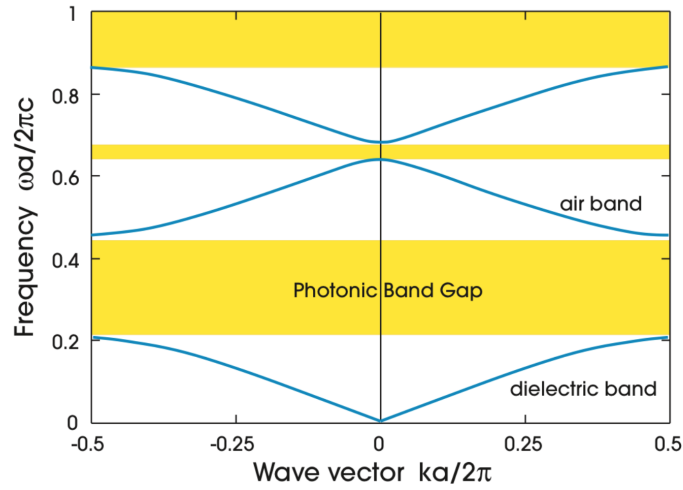


图 1.2 一维光子晶体能带图，晶格常数为  $a$ 。第一种电介质为 GaAs,  $\varepsilon = 13$ , 厚度为  $0.2a$ ; 第二种电介质为空气,  $\varepsilon = 1$ , 厚度为  $0.8a$ <sup>[5]</sup>

丰富的性质，例如全向能隙，光子局域化等，但一个最新的进展是光子晶体平板连续谱中的束缚态（Bound state in the continuum, BIC）。光子晶体能带中可能存在

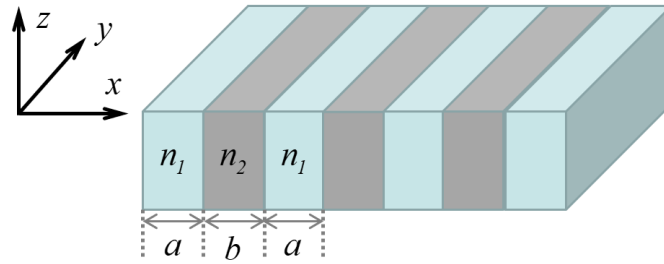


图 1.3 光子晶体平板

连续谱中的束缚态（Bound state in the continuum, BIC），BIC 是保持局部化的波，可与辐射波的连续谱共存，与物理常识相悖<sup>[3]</sup>。一般来说，束缚态对应的本征值应该是分立的，不属于连续谱的一部分，例如在固体物理中，缺陷的存在对应着束缚态，但缺陷不能形成扩展的能带。光的局域化是一个重要课题，但一般的局域结构会限制光的辐射，例如金属谐振腔，光子带隙材料，高度无序的材料（安德森局域）等<sup>[1]</sup>。值得注意的是，BIC 在电磁波、声波、水波、弹性波等波动现象中普遍存在<sup>[3]</sup>，这使得其拥有较大的科学研究和应用价值。

小尺寸结构中不存在 BIC，在支持 BIC 的扩展结构中，许多在一个或多个方向（例如  $x$  和  $y$ ）上是均匀的或具有周期性的，并且 BIC 仅在其他方向（例如  $z$  方向）存在<sup>[3]</sup>。BIC 的产生机制多样，可以是几组波的干涉相消，也可以是对称性保护等。图1.4展示了平板光子晶体中波干涉相消产生而的 BIC。可以看到 BIC 对

应的特征频率在光线之上，辐射品质因子  $Q_r$  为无限大，光场仍在表面保持局域化，由于光线之上垂直结构表面方向的波矢都为实数，属于辐射谱，因此这些局域化的波就是 BIC。

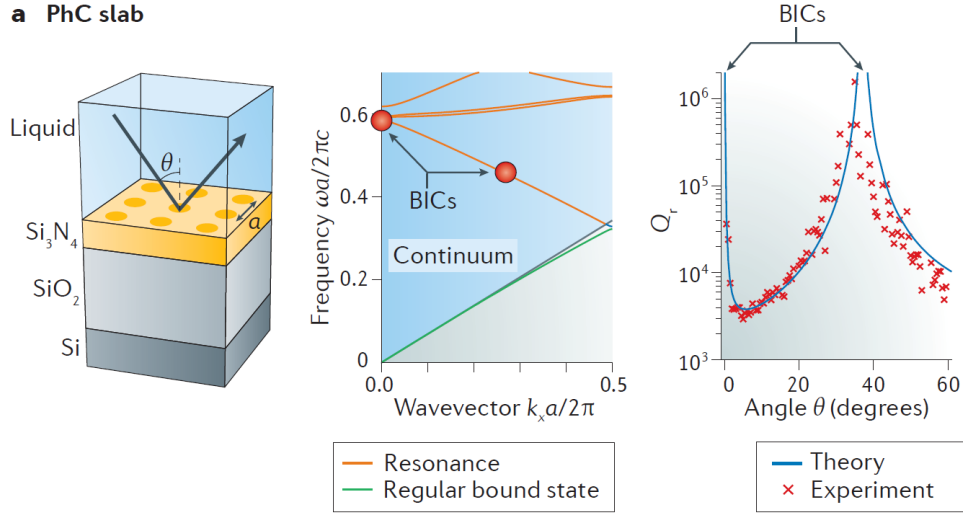


图 1.4 光子晶体平板中单个共振产生的 BIC，左边的图是系统的搭建方式，中间的图是光子晶体的能带，泄露的共振模式在波矢  $k_x = 0$ （基于对称性）以及  $k_x a/2\pi \approx 2.07$ （基于参数调谐）时变为 BIC，用红色圈标记。辐射品质因子  $Q_r$  在变为无穷时对应 BIC，蓝色线是理论值，红色线是实验值<sup>[3]</sup>。

### 1.3 有效介质理论

有效介质理论是对分散介质或者周期结构等非均匀结构的平均化处理。在有效介质理论的一阶近似下，光子晶体平板可以近似为均匀的单轴各向异性介质平板， $x$  方向介电常数是两种介电常数的算数平均， $y$  和  $z$  方向则是调和平均<sup>[8,9]</sup>。两个有效介电常数为

$$\begin{aligned}\varepsilon_x^{eff} &= \frac{n_1^2 n_2^2}{(1-f)n_1^2 + n_2^2 f} \\ \varepsilon_y^{eff} = \varepsilon_z^{eff} &= \varepsilon_0 [n_1^2 f + n_2^2 (1-f)]\end{aligned}\quad (1.1)$$

其中， $f$  是占空比， $f = a/(a+b)$ ，见图1.3。公式 (1.1) 可以方便地从边界条件角度理解。在  $x$  方向，两种不同介电常数的电介质周期排列，电场和磁场强度矢量在边界的法向和切向方向均连续。由于在光子晶体以及其中的每个介质中都有本构关系

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (1.2)$$

且电介质 1 和电介质 2 中的法向电位移矢量相等，即  $\mathbf{D}_1 = \mathbf{D}_2 = \mathbf{D}$ ，整个光子晶体中  $x$  方向的电场强度

$$\mathbf{E} = f\mathbf{E}_1 + (1-f)\mathbf{E}_2 = f\frac{\mathbf{D}}{\varepsilon_1} + (1-f)\frac{\mathbf{D}}{\varepsilon_2} = \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon_x^{eff}} \quad (1.3)$$

所有介质不考虑磁性， $\mu = \mu_0$ ，有  $\varepsilon = \varepsilon_0 n^2$ ，

$$\varepsilon_x^{eff} = \frac{\varepsilon_1^2 \varepsilon_2^2}{(1-f)\varepsilon_2^2 + \varepsilon_1^2 f} = \frac{n_1^2 n_2^2}{(1-f)n_2^2 + n_1^2 f} \quad (1.4)$$

对于光子晶体的  $y$  方向和  $z$  方向，平行于电介质分界面，电介质 1 和电介质 2 中的切向电场强度矢量相等，即  $\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}$ ，故整个光子晶体中  $y$  和  $z$  方向的电位移矢量为

$$\mathbf{D} = f\mathbf{D}_1 + (1-f)\mathbf{D}_2 = f\varepsilon_1\mathbf{E} + (1-f)\varepsilon_2\mathbf{E} = \varepsilon_{y,z}^{eff}\mathbf{E} \quad (1.5)$$

因此

$$\varepsilon_y^{eff} = \varepsilon_z^{eff} = \varepsilon_1^2 f + \varepsilon_2^2 (1-f) = \varepsilon_0 [n_1^2 f + n_2^2 (1-f)] \quad (1.6)$$

既然光子晶体平板可以近似为均匀的单轴各向异性介质平板，对光子晶体能带的求解就转化为对求解单轴各向异性介质平板的色散。单轴各向异性介质（或晶体）的法曲面只有两个交点，因此只有一个光轴，常见的单轴各向异性材料有方解石、石英、铌酸锂等。有效介质近似下的光子晶体平板是均匀结构，而周期性被视为微扰，其能带间无相互作用，在布里渊区边界不再存在能隙。

## 1.4 各向异性介质中的平面电磁波

各向同性的介质中传播的平面电磁波有两种本征模式，即横电（TE）波和横磁（TM）波，这是因为导波介质具有平移对称性，正是由于对称性导致了电磁波模式的解耦。在各向同性的介质中这两种波具有相同的群速度，而在各向异性介质中这一点不再成立。平面电磁波在各向异性介质中的传播取决于介质的介电张量  $\varepsilon_{ijk}$ ，且有下列关系

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_{ijk}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (1.7)$$

在非磁性且透明的材料中，介电张量是实的对称矩阵，因此总是可以找到一个正交坐标系使得介电张量取对角化的形式，即

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} n_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & n_z^2 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

将含时电场强度矢量和磁场强度矢量表示为时谐平面波的形式：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E} \exp[i(-\omega t + \alpha x + \beta y + \gamma z)] \quad (1.9)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H} \exp[i(-\omega t + \alpha x + \beta y + \gamma z)] \quad (1.10)$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}, \mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix}$$

$\alpha, \beta, \gamma$  分别为波矢的  $x, y, z$  分量，即  $k_x, k_y, k_z$ 。代入无源麦克斯韦方程组

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.11)$$

可以导出空间电场强度矢量  $\mathbf{E}$  在动量空间的波动方程

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) + \omega^2 \mu \varepsilon \mathbf{E} = 0 \quad (1.12)$$

将介电张量代入方程，可得到本征值方程

$$\begin{pmatrix} \omega^2 \mu \varepsilon_x - \beta^2 - \gamma^2 & \alpha\beta & \alpha\gamma \\ \alpha\beta & \omega^2 \mu \varepsilon_y - \alpha^2 - \gamma^2 & \beta\gamma \\ \omega^2 \alpha\gamma & \beta\gamma & \omega^2 \mu \varepsilon_z - \alpha^2 - \beta^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0. \quad (1.13)$$

为使特征值方程 (1.13) 有非平凡解，方程的系数行列式必须等于 0，即

$$\det \begin{vmatrix} (\omega n_x/c)^2 - \beta^2 - \gamma^2 & \alpha\beta & \alpha\gamma \\ \alpha\beta & (\omega n_y/c)^2 - \alpha^2 - \gamma^2 & \beta\gamma \\ \alpha\gamma & \beta\gamma & (\omega n_z/c)^2 - \alpha^2 - \beta^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (1.14)$$

这给出了一个  $z$  方向波矢  $\gamma$  的四次方程，它有四个根  $\gamma_\sigma$ ， $\sigma = 1, 2, 3, 4$ ，这些根可以是实数或者是复数。由于这个四次方程的所有系数都是实的，所以复根总是成对共轭的，如果所有根都是实数，这些根可以从图1.5中得到。这个方程同样可以用  $\mathbf{k}$  空间（动量空间）中的两个曲面表示，这就是法曲面（normal surface），这两个曲面通常有四个交点，两条通过原点和这四个点的线称作光轴。给定一个传播方向  $\mathbf{s}$ （不平行于光轴），则  $\mathbf{k}$  有两个值，具有不同的群速度<sup>[10]</sup>，它们是  $\mathbf{s}$  与法曲面的交点，分别对应  $o$  光和  $e$  光，由于它们的传播速度不同，会出现两个不同折射率的光的像，此即双折射现象。

图1.5中展示的平面称为入射平面，它是由  $\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}$  和  $\mathbf{z}$  组成的平面。这个平面与法曲面相交产生两条闭合曲线，这两条曲线关于原点对称。从向量  $\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}$

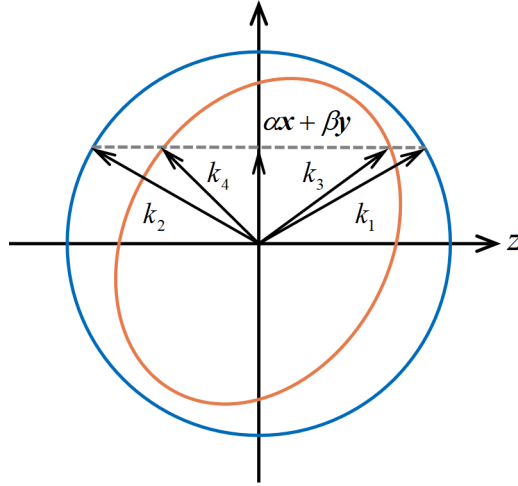


图 1.5 给定传播常数，图解法确定波矢的  $z$  方向分量  $\gamma$ 。图中的蓝色和红色的线是入射平面与法曲面的交线，其中入射平面是由  $\alpha x + \beta y$  和  $z$  组成的平面。

的顶端画一条平行于  $z$  方向的线，通常会产生四个交点。这四个波矢  $\mathbf{k}_\sigma$  都位于入射面内，由于波矢的  $x$  和  $y$  方向在整个层状介质中保持不变， $\alpha$  和  $\beta$  是常数，即两个传播常数。然而，与这些分波有关的四个群速度一般不在入射面上。

如果四个波矢  $\mathbf{k}_\sigma$  都是实的，则其中两个波矢具有正  $z$  分量的群速度，另外两个波矢具有负的  $z$  分量的群速度。对于各向同性介质而言，法曲面的两个曲面相同，得到  $k_1 = k_3$ ,  $k_4 = k_2$ ，波矢的  $z$  方向分量  $\gamma$  只有两个值，分别对应  $o$  光的透射和反射分波。对于各向异性介质而言， $\gamma$  有四个值，分别对应  $o$  光和  $e$  光的透射和反射分波。

## 1.5 $2 \times 2$ 传递矩阵方法

Yeh<sup>[11,12]</sup> 提出的  $4 \times 4$  矩阵方法是本文的核心理论方法，而  $2 \times 2$  矩阵方法<sup>[13]</sup> 可看做是  $4 \times 4$  矩阵方法的各向同性简化，两者的区别在于，由于各向同性介质中模式解耦，因而可以分开讨论，只涉及  $2 \times 2$  矩阵的操作。在各向异性介质中，由于模式耦合，TE 与 TM 模式不再存在，这就涉及到了  $4 \times 4$  矩阵的操作。考虑一个包含有限厚度的层状各向同性介质的平板波导结构，如图1.6。将最下方介质中的电场强度矢量写为透射和反射分波的线性叠加

$$E(y, z) = (a_1 e^{i\gamma z} + a_2 e^{-i\gamma z}) e^{i\beta y} \quad (1.15)$$

其它介质中的电场强度矢量可以用同样的方法写出。通过合理地选取坐标系，总可以使波矢的  $x$  方向分量  $\alpha$  为 0，只需研究  $y$  和  $z$  两个方向，这将简化公式。由于平板在  $y$  方向均匀，故  $\beta$  在传播过程中不变，取  $\beta$  为传播常数，传递矩阵  $\mathcal{T}$  定义

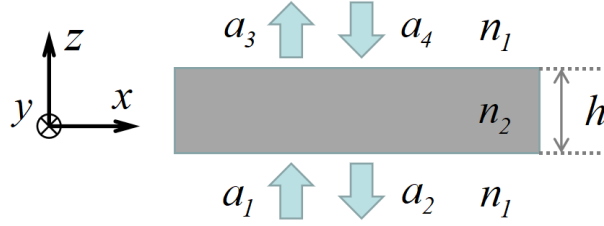


图 1.6 各向同性介质平板， $x$  和  $y$  方向无限大， $z$  方向厚度为  $h$ ，折射率由下到上分别为  $n_1, n_2, n_1$ 。  $a_1$  和  $a_2$  分别是最下发介质中的透射和反射分波的复振幅， $a_3$  和  $a_4$  则是最上方介质的透射和反射分波的复振幅。

为

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{T} \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

这说明了传递矩阵的物理意义，即传递矩阵表达了电磁波分波在结构前后的透射和反射分量复振幅的线性关系。而从数学上讲，结构的传递矩阵就是结构前后电磁波分波的复振幅满足的矩阵方程的系数矩阵。该结论同样适用于后面的  $4 \times 4$  矩阵方法。

首先考虑 TE 波，由于电场的振动方向垂直于传播方向，此时电场强度矢量写为  $(E_x, 0, 0)^T$ 。对于无源场，由边界条件可知  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{H}$  在界面处切向和方向分量都连续，通过下界面处的连续性可以得到

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 &= a_3 + a_4 \\ \gamma_2 (a_3 - a_4) &= \gamma_1 (a_1 - a_2) \end{aligned} \quad (1.17)$$

写为矩阵方程形式，TE 波在下界面处的传递矩阵

$$\mathcal{T}_{12} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \gamma_2/\gamma_1 & 1 - \gamma_2/\gamma_1 \\ 1 - \gamma_2/\gamma_1 & 1 + \gamma_2/\gamma_1 \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

其中， $\gamma_1, \gamma_2$  分别是折射率为  $n_1$  和  $n_2$  的介质中的  $z$  方向波矢。使用同样的方法，将此时磁场强度矢量写为  $(H_x, 0, 0)^T$ ，可以得到 TM 波在下界面处的传递矩阵为

$$\mathcal{T}'_{12} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + n_1^2 \gamma_2 / (n_2^2 \gamma_1) & 1 - n_1^2 \gamma_2 / (n_2^2 \gamma_1) \\ 1 - n_1^2 \gamma_2 / (n_2^2 \gamma_1) & 1 + n_1^2 \gamma_2 / (n_2^2 \gamma_1) \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

TE 和 TM 波在上界面的传递矩阵  $\mathcal{T}_{21}$  和  $\mathcal{T}'_{21}$  也很容易得到。

$$\mathcal{T}_{21} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \gamma_1/\gamma_2 & 1 - \gamma_1/\gamma_2 \\ 1 - \gamma_1/\gamma_2 & 1 + \gamma_1/\gamma_2 \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

$$\mathcal{T}'_{21} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + n_2^2 \gamma_1 / (n_1^2 \gamma_2) & 1 - n_2^2 \gamma_1 / (n_1^2 \gamma_2) \\ 1 - n_2^2 \gamma_1 / (n_1^2 \gamma_2) & 1 + n_2^2 \gamma_1 / (n_1^2 \gamma_2) \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

考虑平面电磁波在均匀介质中的传播，由于

$$E(y, z + h) = (ae^{i\gamma(z+h)} + be^{-i\gamma(z+h)}) e^{i\beta y}. \quad (1.22)$$

故传播矩阵  $\mathcal{P}$  为

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma h} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma h} \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

由于矩阵的传递性质，整个介质平板的传递矩阵可以表示为各部分的矩阵的顺序相乘，对于 TE 模，传递矩阵为

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_{12} \mathcal{P} \mathcal{T}_{21} \quad (1.24)$$

传递矩阵的求解过程实际上是求解层状电介质结构麦克斯韦方程组。对于周期结构，例如光子晶体，只需将每个周期结构的传递矩阵相乘，即可得到整个结构的传递矩阵，这是该方法的强大之处。传递矩阵求得后，整个系统的光谱，即透射、

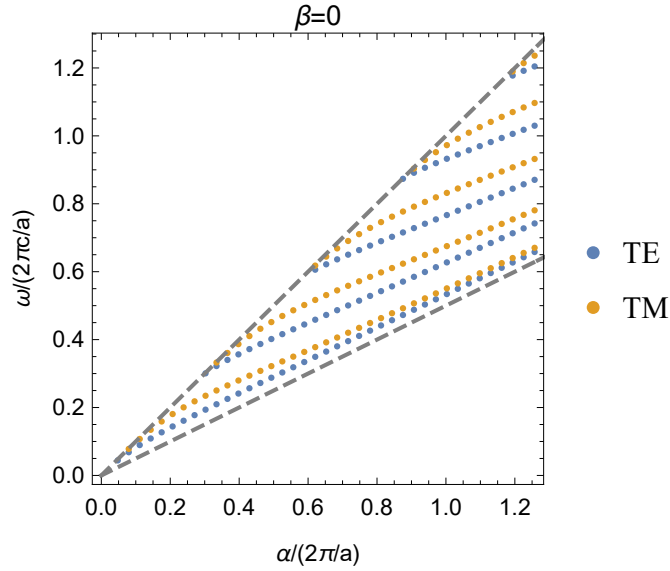


图 1.7 各向同性介质平板实数波导模的色散，晶体厚度  $h = a$ ，折射率  $n_1 = 1.0, n_2 = 2.0$

反射和吸收都可获得，用  $r$  和  $t$  分别代表反射率和透射率

$$r = \frac{T_{21}}{T_{11}}, \quad t = \frac{1}{T_{11}} \quad (1.25)$$

为求解色散，考虑无穷远处的边界条件，要求无穷远处所有入射场为 0，故

$$0 = T_{11} = \cos \left[ h \sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2} \right] + \sin \left[ h \sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2} \right] \frac{i [2\alpha^2 - \omega^2 (n_1^2 + n_2^2) / c^2]}{2 \sqrt{(n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2) (n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2)}} \quad (1.26)$$

该方程只与  $\alpha$  和  $\omega$  有关，故此即为 TE 模的色散关系，TM 模的色散关系可用同样方法求得，参数化绘图可以得到该介质平板中两个模式的色散，图1.7即为 TE 与 TM 波导模的色散。

可以看到当  $\omega$  为实数时，所有的色散曲线落在光锥之外，光线用灰色虚线绘出，它们的解析式分别为

$$\omega = c\beta/n_1, \omega = c\beta/n_2 \quad (1.27)$$

由于

$$\gamma^2 = \left( \frac{n\omega}{c} \right)^2 - \beta^2 \quad (1.28)$$

在光线之上， $\gamma$  为虚数，在  $z$  方向指数衰减，对应消逝波，称为波导模。在光线之上， $\gamma$  变为实数，即向外泄露，称为泄露模。



## 2 理论分析

### 2.1 各向同性介质中电磁场的精确解

有效介质理论近似下的光子晶体可以看作均匀的各向异性平板。为了求解平板中场的精确解和色散关系，我们考虑一个三层结构，类似于三明治，中间的介质为均匀各向异性平板，厚度为  $h$ ，两边的介质为各向同性，厚度无限大，记两个边界由下到上分别记为边界 12 和边界 23，如图2.1，光从两边的介质中入射。

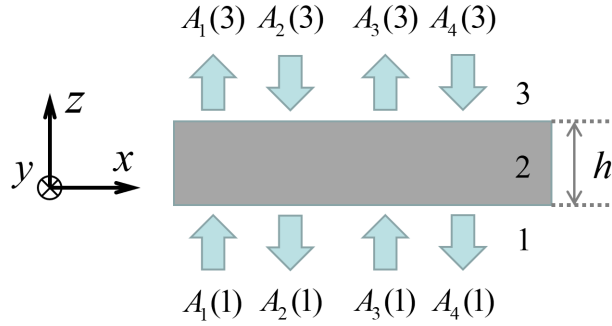


图 2.1 光子晶体平板， $x$  和  $y$  方向无限大， $z$  方向厚度为  $h$ ，最下方的各向同性介质为介质 1，其中的物理量带 (1) 标识，中间的介质为介质 2，其中的物理量带 (2) 标识，上方的介质为介质 3，物理量带 (3) 标识。 $A_1$  和  $A_2$  分别是同一个模式的透射和反射分波的复振幅， $A_3$  和  $A_4$  则分别是另一个模式的透射和反射分波的复振幅。

介质 1 和介质 3 的介电张量均为常数，所有介质均不考虑磁性， $\mu = \mu_0$ ，记  $\varepsilon(1) = \varepsilon_0 n_1^2$ ，对于介质 2

$$\varepsilon(2) = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} n_{2x}^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_{2y}^2 & 0 \\ 0 & 0 & n_{2z}^2 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

介质中平面电磁波的波动方程由在绪论中的式 (1.13) 给出，求解该方程将给出平面电磁波的精确解，而存在非平庸解则要求

$$\det \begin{vmatrix} (\omega n_{2x}/c)^2 - \beta^2 - \gamma^2 & \alpha\beta & \alpha\gamma \\ \alpha\beta & (\omega n_{2y}/c)^2 - \alpha^2 - \gamma^2 & \beta\gamma \\ \alpha\gamma & \beta\gamma & (\omega n_{2z}/c)^2 - \alpha^2 - \beta^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.2)$$

首先，我们讨论各向同性介质，对于介质 1， $n_x = n_y = n_z = n_1$ ，求解方程 (2.2)，解得

$$\begin{aligned}\gamma_1(1) &= \gamma_3(1) = \sqrt{\left(\frac{\omega n_1}{c}\right)^2 - \alpha^2 - \beta^2} \\ \gamma_2(1) &= \gamma_4(1) = -\sqrt{\left(\frac{\omega n_1}{c}\right)^2 - \alpha^2 - \beta^2}\end{aligned}\quad (2.3)$$

四个  $\gamma$  中有两个重根，实际只有两个不同的解，它们互为相反数，分别是  $o$  光的透射和反射的  $z$  方向波矢。将式 (2.3) 代入特征值方程 (1.13)，得到各向同性平板介质中的四个空间电场强度  $\mathbf{E}$

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_1(1) &= \begin{pmatrix} -\beta/\alpha \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{E}_3(1) = \begin{pmatrix} -\sqrt{-\alpha^2 - \beta^2 + n_1^2 \omega^2 / c^2} / \alpha \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{E}_2(1) &= \begin{pmatrix} -\beta/\alpha \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{E}_4(1) = \begin{pmatrix} \sqrt{-\alpha^2 - \beta^2 + n_1^2 \omega^2 / c^2} / \alpha \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.4)$$

介质 3 中的结果和介质 1 的结果形式相同，只需替换折射率就可得到。可以看出  $E_1(1)$  和  $E_2(1)$  在  $z$  方向没有分量，对应 TE 模，而  $E_3(1)$  和  $E_4(1)$  则对应 TM 模，在传播方向上分量不为 0。这就是波导的 TE 和 TM 模的来源，即由于在一个方向上的平移对称性而导致的模式解耦。

## 2.2 单轴各向异性介质中电磁场的精确解

对于介质 2，单轴各向异性的情况下，求解方程 (2.2)，四个  $\gamma$  分别为

$$\begin{aligned}\gamma_1(2) &= \sqrt{\left(\frac{\omega n_{2y}}{c}\right)^2 - \alpha^2 - \beta^2} \\ \gamma_2(2) &= -\sqrt{\left(\frac{\omega n_{2y}}{c}\right)^2 - \alpha^2 - \beta^2} \\ \gamma_3(2) &= \sqrt{\left(\frac{\omega n_{2x}}{c}\right)^2 - \left(\frac{n_{2x}\alpha}{n_{2y}}\right)^2 - \beta^2} \\ \gamma_4(2) &= -\sqrt{\left(\frac{\omega n_{2x}}{c}\right)^2 - \left(\frac{n_{2x}\alpha}{n_{2y}}\right)^2 - \beta^2}\end{aligned}\quad (2.5)$$

将式 (2.5) 代入特征值方程，即波动方程 (1.13)，得到各向异性平板介质中的四个空间电场强度  $\mathbf{E}$

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_1(2) &= \begin{pmatrix} 0 \\ -\gamma_1(2)/\beta \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{E}_3(2) = \begin{pmatrix} [\alpha^2 - (n_{2y}\omega/c)^2] / (\alpha\gamma_3(2)) \\ \beta/\gamma_3(2) \\ 1 \end{pmatrix} \\
\mathbf{E}_2(2) &= \begin{pmatrix} 0 \\ -\gamma_2(2)/\beta \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{E}_4(2) = \begin{pmatrix} [\alpha^2 - (n_{2y}\omega/c)^2] / (\alpha\gamma_4(2)) \\ \beta/\gamma_4(2) \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \quad (2.6)$$

可以看到 4 个电场强度矢量都有  $z$  方向的分量，TE 与 TM 模式不再存在，这就是模式耦合现象，在各向异性介质中普遍存在。由于 TE 和 TM 模不能分开，在绪论中介绍的  $2 \times 2$  矩阵方法就失去了适用性。一个自然的想法是，既然两个模式不能用分开的传递矩阵方程表示，可将  $2 \times 2$  矩阵推广到  $4 \times 4$  矩阵，将四个所有分波写到一个矩阵方程中，这就是 Yeh 提出的  $4 \times 4$  矩阵方法的核心思想。

为得到电磁波的精确解，首先考虑电场  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ，将各个分波的空间电场强度矢量叠加，乘以平面波因子

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma=1}^4 \mathbf{E}_{\sigma} \exp[i(-\omega t + \alpha x + \beta y + \gamma(z - z_0))] \quad (2.7)$$

根据麦克斯韦方程组，对于时谐电磁场，有

$$\mathbf{H} = \frac{1}{i\omega\mu} \nabla \times \mathbf{E} \quad (2.8)$$

类似地，将式 (2.6) 代入上式得到四个  $\mathbf{H}$ ，再将它们叠加，乘以平面波因子，就得到了  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ 。式 (2.6) 即为单轴各向异性介质平板中电场的精确解，可以在参考文献中找到用不同方法导出的类似结果<sup>[14]</sup>。结合 Yeh 提出的强大的  $4 \times 4$  矩阵代数方法<sup>[11,12]</sup>，可以方便地求解色散，透射系数及反射系数。

## 2.3 $4 \times 4$ 矩阵法求解单轴各向异性介质平板的色散

### 2.3.1 $4 \times 4$ 传播矩阵

首先我们给出电磁波在均匀各向异性介质中的  $4 \times 4$  传播矩阵  $\mathcal{P}$ ，将绪论式 (1.23) 的  $2 \times 2$  矩阵直接推广到  $4 \times 4$

$$\mathcal{P}(2) = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma_1 h} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma_2 h} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\gamma_3 h} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\gamma_4 h} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

其中  $h$  是传播方向介质的厚度，即介质平板的厚度。传播矩阵的物理含义是四个分波的相位移动。

### 2.3.2 动力学矩阵与传递矩阵

定义电场强度的单位偏振矢量

$$\mathbf{p}_\sigma = N_\sigma \mathbf{E} = N_\sigma \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

其中  $N_\sigma$  是偏振矢量  $\mathbf{p}_\sigma$  的归一化系数，即使得

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = 1 \quad (2.11)$$

各向异性介质平板中的电场强度矢量表示为

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma \mathbf{p}_\sigma \exp[i(-\omega t + \alpha x + \beta y + \gamma(z - z_0))] \quad (2.12)$$

相似地，磁场强度矢量可以表示为

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma \mathbf{q}_\sigma \exp[i(-\omega t + \alpha x + \beta y + \gamma(z - z_0))] \quad (2.13)$$

$$\mathbf{q}_\sigma(2) = \frac{c\mathbf{k}_\sigma(2)}{\omega\mu} \times \mathbf{p}_\sigma(2) \quad (2.14)$$

$$\mathbf{k}_\sigma(2) = \alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y} + \gamma_\sigma(2)\mathbf{z}$$

其中  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$  分别为  $x, y, z$  方向的单位矢量。这里注意到  $\mathbf{q}$  不是单位矢量。利用  $E_x, E_y, H_x, H_y$  在下边界处的连续性可得到

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(1) \mathbf{p}_\sigma(1) \cdot \mathbf{x} &= \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(2) \mathbf{p}_\sigma(2) \cdot \mathbf{x} \\ \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(1) \mathbf{p}_\sigma(1) \cdot \mathbf{y} &= \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(2) \mathbf{p}_\sigma(2) \cdot \mathbf{y} \\ \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(1) \mathbf{q}_\sigma(1) \cdot \mathbf{x} &= \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(2) \mathbf{q}_\sigma(2) \cdot \mathbf{x} \\ \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(1) \mathbf{q}_\sigma(1) \cdot \mathbf{y} &= \sum_{\sigma=1}^4 A_\sigma(2) \mathbf{q}_\sigma(2) \cdot \mathbf{y} \end{aligned} \quad (2.15)$$

上面的四个方程可以表示为一个矩阵方程

$$\mathcal{D}(1) \begin{pmatrix} A_1(1) \\ A_2(1) \\ A_3(1) \\ A_4(1) \end{pmatrix} = \mathcal{D}(2) \begin{pmatrix} A_1(2) \\ A_2(2) \\ A_3(2) \\ A_4(2) \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

故下边界的传递矩阵定义为

$$\mathcal{T}_{12} = \mathcal{D}^{-1}(1)\mathcal{D}(2) \quad (2.17)$$

其中，矩阵  $\mathcal{D}(n)$  称为动力学矩阵 (**Dynamical matrix**)，这说明界面 12 的传递矩阵由介质 1 的动力学矩阵的逆乘以介质 2 的动力学矩阵定义。在  $4 \times 4$  矩阵法中，不同的介质可以用不同的动力学矩阵表征，而动力学矩阵只与该介质中四个分波的偏振  $p_\sigma$  有关。介质  $n$  的动力学矩阵为

$$\mathcal{D}(n) = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_1(n) & \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_2(n) & \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_3(n) & \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_4(n) \\ \mathbf{y} \cdot \mathbf{q}_1(n) & \mathbf{y} \cdot \mathbf{q}_2(n) & \mathbf{y} \cdot \mathbf{q}_3(n) & \mathbf{y} \cdot \mathbf{q}_4(n) \\ \mathbf{y} \cdot \mathbf{p}_1(n) & \mathbf{y} \cdot \mathbf{p}_2(n) & \mathbf{y} \cdot \mathbf{p}_3(n) & \mathbf{y} \cdot \mathbf{p}_4(n) \\ \mathbf{x} \cdot \mathbf{q}_1(n) & \mathbf{x} \cdot \mathbf{q}_2(n) & \mathbf{x} \cdot \mathbf{q}_3(n) & \mathbf{x} \cdot \mathbf{q}_4(n) \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

在此，我们对  $4 \times 4$  矩阵方法进行总结： $4 \times 4$  矩阵代数方法中通过定义动力学矩阵，写出了各分波的复振幅所满足的边界条件矩阵方程，其系数矩阵就是传递矩阵，而该方程可以看作是对边界条件的表述。动力学矩阵依赖于各分波的偏振，而偏振是波动方程的解归一化后的矢量，所以  $4 \times 4$  矩阵方法实际上是在  $z$  方向分层的介质中通过边界条件求解麦克斯韦方程。

得到界面的传递矩阵后，由于矩阵的传递性质以及矩阵乘法的结合律，整个结构的传递矩阵  $\mathcal{T}_{123}$  等于两个界面的传递矩阵以及一个传播矩阵的顺序相乘，即

$$\mathcal{T}_{123} = \mathcal{D}^{-1}(1)\mathcal{D}(2)\mathcal{P}(2)\mathcal{D}^{-1}(2)\mathcal{D}(3) \quad (2.19)$$

这就是 Yeh 发展的  $4 \times 4$  矩阵法的框架，该方法是一个强大的，系统化的方法，但他也同时指出对于各向异性介质，动力学矩阵较为复杂而没有给出具体形式<sup>[11,12]</sup>。除此以外，Yeh 在文献中给出的本征偏振的解析形式在介电张量  $\varepsilon$  为对角化形式的情况下只能给出平庸解，显然不是我们需要的结果。

在章节 2.1 和 2.2 中，两种介质中电磁场的精确解已经求出，在这里派上用场。对于单轴各向异性介质，将式 (2.6) 代入式 (2.18)，可得到该介质动力学矩阵的一般形式；对于各向同性介质，则将式 (2.4) 代入式 (2.18)。各向同性介质与单轴各向异性介质动力学矩阵的形式不甚复杂，分别在附录 A.1 与 A.2 中给出。

为了检验  $4 \times 4$  矩阵方法的正确性，我们讨论二维各向同性的情况，考察此时  $4 \times 4$  矩阵法能否回到  $2 \times 2$  矩阵法得到的经典结果。首先，通过合理地选取坐标系，总可以使得  $y$  方向波矢  $\beta$  为 0，此时由式 (2.17)，(2.18) 与 (2.4) 可得下界面的传递矩阵为

$$\mathcal{T}_{12} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} & 1 - \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} & 0 & 0 \\ 1 - \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} & 1 + \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{n_1^2}{n_2^2} + \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} & \frac{n_1^2}{n_2^2} - \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} \\ 0 & 0 & \frac{n_1^2}{n_2^2} - \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} & \frac{n_1^2}{n_2^2} + \frac{\sqrt{n_1^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}}{\sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - \alpha^2}} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

该矩阵是分块对角化的，对比在绪论中介绍的  $2 \times 2$  矩阵法，发现对角的两个  $2 \times 2$  矩阵分别是 **TE** 和 **TM** 模在对应界面的  $2 \times 2$  传递矩阵，即式 (1.18) 与式 (1.19)，这初步证明了  $4 \times 4$  矩阵方法的正确性，也提示了四个分波的复振幅  $A_\sigma, \sigma = 1, 2, 3, 4$  的物理含义。

因此，我们的结论是：当介质平板为各向同性时，模式耦合消失，界面的传递矩阵是分块对角化的，且  $A_1$  和  $A_2$  分别是 **TE** 模式的透射和反射分波的复振幅， $A_3$  和  $A_4$  分别是 **TM** 模式的透射和反射分波的复振幅。当介质平板为各向异性时， $A_1$  和  $A_2$  分别是同一个模式的透射和反射的复振幅， $A_3$  和  $A_4$  则分别是另一个模式的透射和反射的复振幅，见图2.1。

### 2.3.3 无穷远边界条件与色散方程

结构前后各分波满足的矩阵方程为

$$\begin{pmatrix} A_1(1) \\ A_2(1) \\ A_3(1) \\ A_4(1) \end{pmatrix} = \mathcal{T}_{123} \begin{pmatrix} A_1(3) \\ A_2(3) \\ A_3(3) \\ A_4(3) \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

其中传递矩阵  $\mathcal{T}_{123}$  是系数矩阵，故它是一个  $4 \times 4$  的方阵

$$\mathcal{T}_{123} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & T_{14} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} & T_{24} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & T_{34} \\ T_{41} & T_{42} & T_{43} & T_{44} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

考虑无穷远处边界条件，要求无穷远处所有入射场均为 0，即

$$A_1(1) = A_3(1) = A_2(3) = A_4(3) = 0 \quad (2.23)$$

代入方程 (2.21)，有

$$\begin{aligned} 0 &= A_1(3)T_{11} + A_3(3)T_{13} \\ 0 &= A_1(3)T_{31} + A_3(3)T_{33} \end{aligned} \quad (2.24)$$

表示为矩阵方程的形式

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{13} \\ T_{31} & T_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(3) \\ A_3(3) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.25)$$

此即无穷远边界条件确定的传递矩阵元所满足的方程。若存在非平庸解，则要求

$$\det \begin{vmatrix} T_{11} & T_{13} \\ T_{31} & T_{33} \end{vmatrix} = \det \mathcal{M} = 0. \quad (2.26)$$

这就是无穷远边界条件所确定的传递矩阵元满足的方程。由于传递矩阵  $\mathcal{T}$  的各矩阵元只与传播常数  $\alpha, \beta$  以及角频率  $\omega$  有关，故方程 (2.26) 即为色散关系。

各向同性与单轴各向异性介质中的动力学矩阵形式不甚复杂，但由于式 (2.19) 涉及求逆，以及多次矩阵乘法，使得整个结构的传递矩阵以及色散关系的形式非常冗长，因而色散方程的解析形式没有在这里给出，但使用计算机计算可以轻松得到。

### 3 数值结果

#### 3.1 色散方程的数值求解方法

我们令色散方程 (2.26) 中的传播常数  $\alpha, \beta$  始终为实数，而  $\omega$  可以为复数。当  $\omega$  为实数时，所有色散曲线均位于光线以下，即光锥之外，对应波导模。当  $\omega$  为复数时， $\omega$  的实部对应的色散出现在光线之上，对应 F-P 共振模式，由于光线之上的  $z$  方向波矢是实数，故介质平板内的 F-P 模式会快速泄露。

色散方程有三个变量： $\alpha, \beta$  和  $\omega$ ，求解该方程可得到色散曲面。对该方程的求解至少存在以下几个困难

1. 该方程是一个超越方程，其形式冗长且复杂。
2. 方程的解的性质不佳， $\det \mathcal{M}$  的值在零点附近波动大。
3. F-P 模式的求解要求  $\omega$  为复，相比其实空间增加了一个维度，故程序需扫描四维变量空间寻解，大大增加求解时间。

即使只求解  $\omega$  为实数的情况，即波导模，常见的数学软件如 Mathematica，其自带的数值求解命令会漏掉大部分解。本文针对该方程编写了数值程序，进行了合理的优化，实现了对方程在较高精度下的数值求解。程序的基本思路是在整个变量空间中扫描，寻找满足方程的点。程序的步长设定为可变，以加快解的收敛速度。

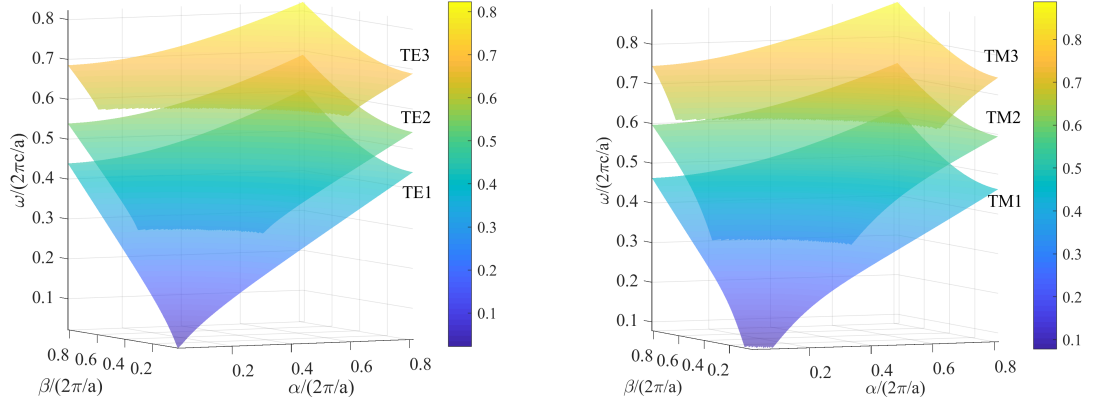
本章中取各向同性介质 1 与介质 3 都为空气，折射率  $n_1 = n_3 = 1$ 。传播常数  $\alpha$  和  $\beta$  均取约化值，即  $\alpha/(2\pi/a)$  和  $\beta/(2\pi/a)$ 。角频率  $\omega$  也取约化值，即  $\omega(2\pi c/a)$ 。其中， $c$  是真空中光速， $a$  是光子晶体的周期，由于有效介质近似下光子晶体是均匀的各向异性平板而没有周期结构，故该周期是一个假想的值，它的数值可以任取而色散的形状不变。

#### 3.2 各向同性介质平板的色散

当中间的介质平板为各向同性时，电磁波模式解耦为 TE 和 TM 模，两个模式在  $\beta = 0$  时的色散关系为式 (1.26)，在图 1.7 中绘出，这里不再重复给出。当考虑  $\beta$  时，绘出的色散是曲面，TE 和 TM 波导模的色散曲面在图 3.1 中给出。可以看到色散曲面是关于平面  $\alpha - \beta = 0$  对称的，这是因为介电常数也关于该平面对称。除此以外，看到从下到上能带面积变小，这是因为波导模位于光锥面之外，被光锥面所



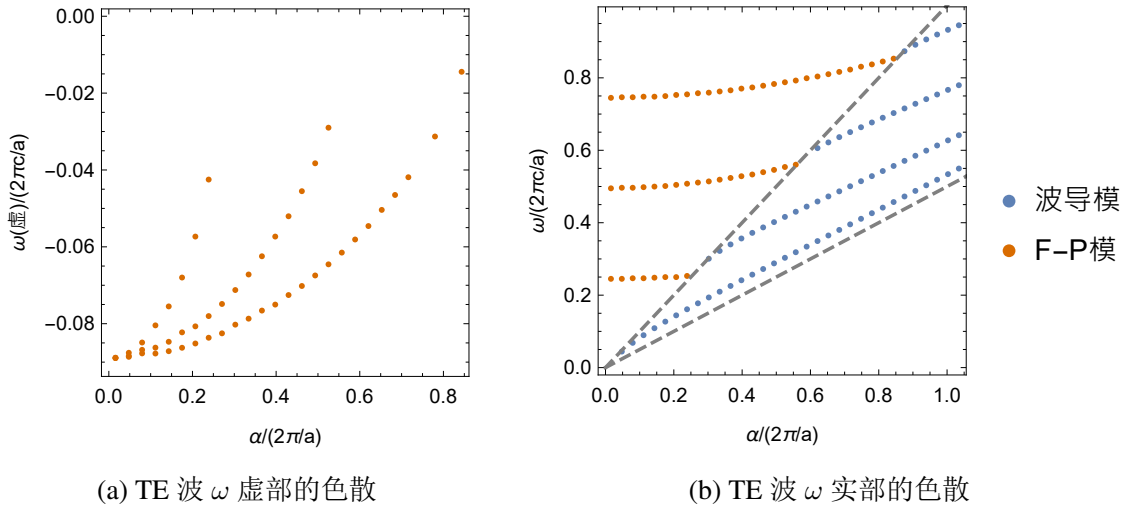
截。



(a) TE 波导模的色散，由下到上色散面依次为 TE1，TE2 和 TE3 (b) TM 波导模的色散，由下到上色散面依次为 TM1，TM2 和 TM3

图 3.1 各向同性介质平板光锥面之下的波导模的色散曲面，正面的弧形缺口是光锥面与波导模的交线。介质参数： $h = a, n_{2x} = n_{2y} = n_{2z} = 2.0$

由于 F-P 模式在求解上存在困难，这里只给出了在  $\beta = 0$  时 TE 波的色散曲线，同时包含了 F-P 模和波导模，见图3.2。两图中 F-P 模式统一用橙色标注， $\omega$  实部的色散关系在图3.2(b)中展示，虚部的色散在图3.2(a)中展示。图3.2(a)从左至右的三条曲线顺序对应着图3.2(b)从下到上的三条 F-P 模式。



(a) TE 波  $\omega$  虚部的色散

(b) TE 波  $\omega$  实部的色散

图 3.2  $\beta = 0$  时 TE 波的色散曲线，橙色为 F-P 模，蓝色为波导模。介质参数： $h = a, n_{2x} = n_{2y} = n_{2z} = 2.0$

TM 波的色散形状与图3.2其类似，位置在 TE 波的上方，不再展示。F-P 模式

在光线以上，在光线处与波导模相接，F-P 模的色散中， $\omega$  的实部一般比其虚部大一到两个数量级。

### 3.3 单轴各向异性介质平板的色散

首先讨论波导模的色散。当中间的介质平板为单轴各向异性时，电磁波模式存在耦合，根据  $4 \times 4$  矩阵法的结果，存在两个模式，分别对应  $o$  光和  $e$  光。此时电磁波的四个分波分别是  $o$  光和  $e$  光的透射和反射。根据场的特点可以确定这两个模式与 TE 模式更接近（TE-Like），还是与 TM 模式更接近（TM-Like）。图3.3给出了不同  $\beta$  下波导模的色散曲线。

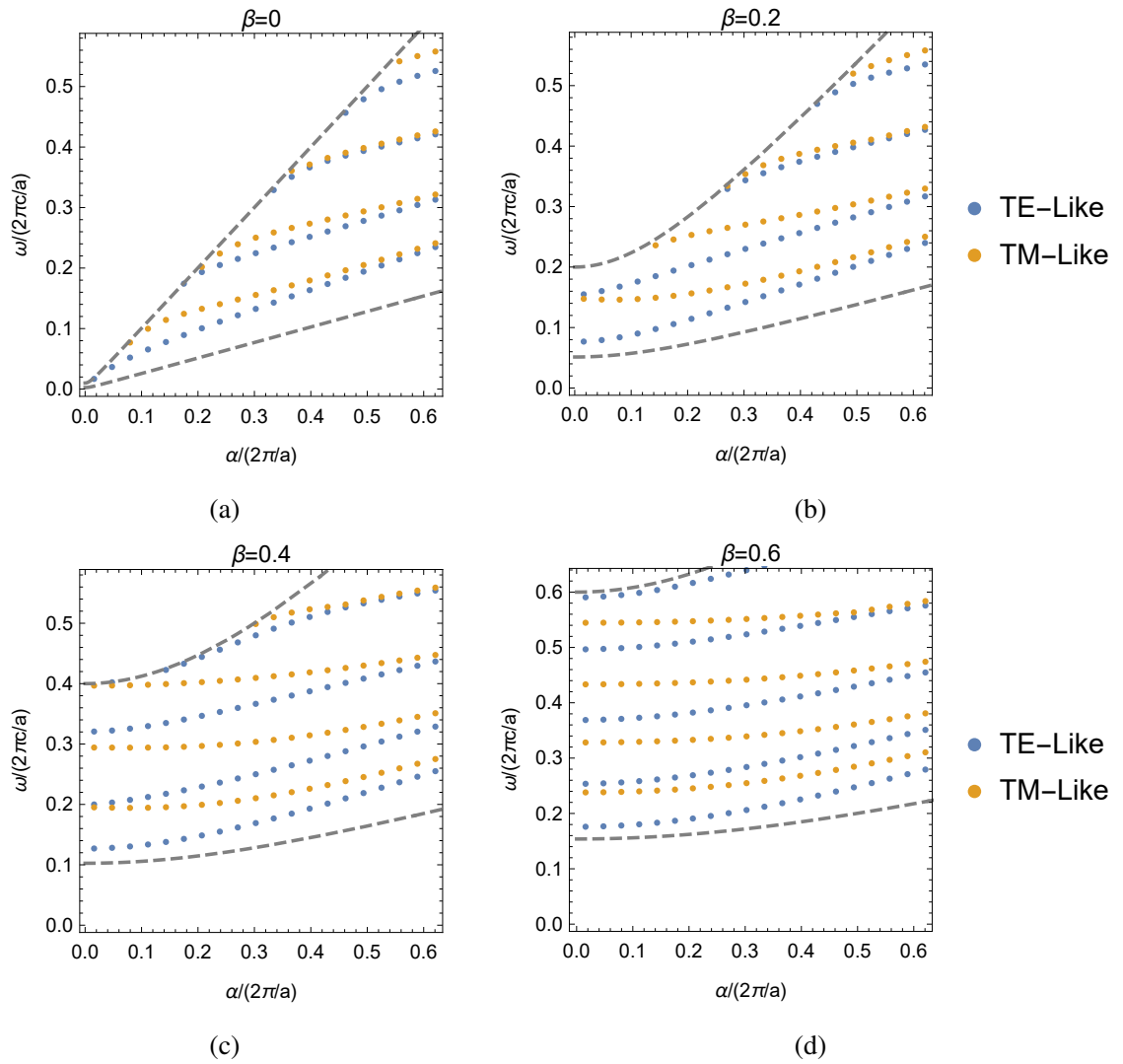
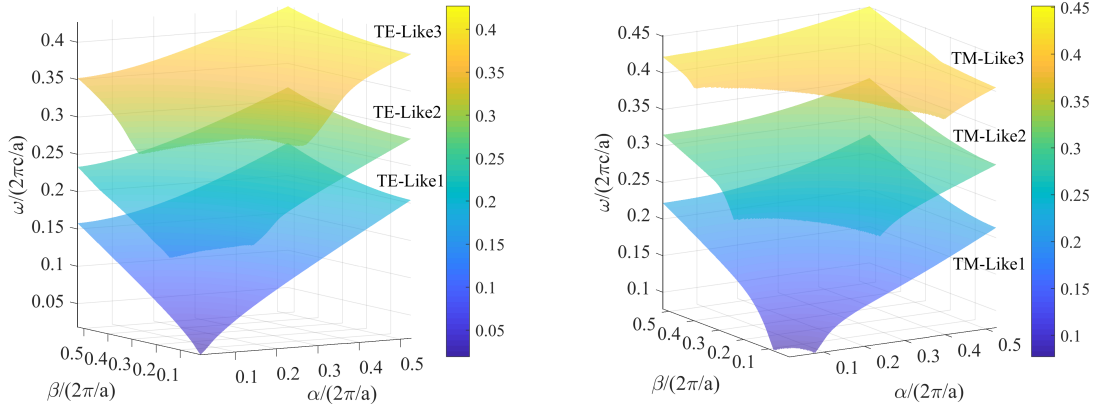


图 3.3 不同  $\beta$  下单轴各向异性介质平板波导模的色散曲线，介质参数： $h = a, n_{2x} = 3.9, n_{2y} = n_{2z} = 3.0$

可以看到随着  $\beta$  越大，光线变形越大，光线之下要保证  $z$  方向的波矢为虚数，这样才不会泄露，故光锥面的解析式为

$$\omega = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}/n_1 \quad (3.1)$$

是一个关于  $z$  轴对称的 1/4 圆锥面。除此以外，从图3.3还可以看出随着  $\beta$  增大，从较低的能带开始，TE-Like 和 TM-Like 模式的色散逐渐分离。TE-Like 和 TM-Like 波导模的色散曲面在图3.4中给出。色散曲面不再关于平面  $\alpha - \beta = 0$  对称。



(a) TE-Like 的色散，由下到上色散面依次为 TE-Like1, TE-Like2 和 TE-Like3

(b) TM-Like 的色散，由下到上色散面依次为 TM-Like1, TM-Like2 和 TM-Like3

图 3.4 单轴各向异性介质平板光锥面之下的波导模的色散曲面，正面的弧形缺口是光锥面与波导模的交线。介质参数： $h = a, n_{2x} = 3.9, n_{2y} = n_{2z} = 3.0$

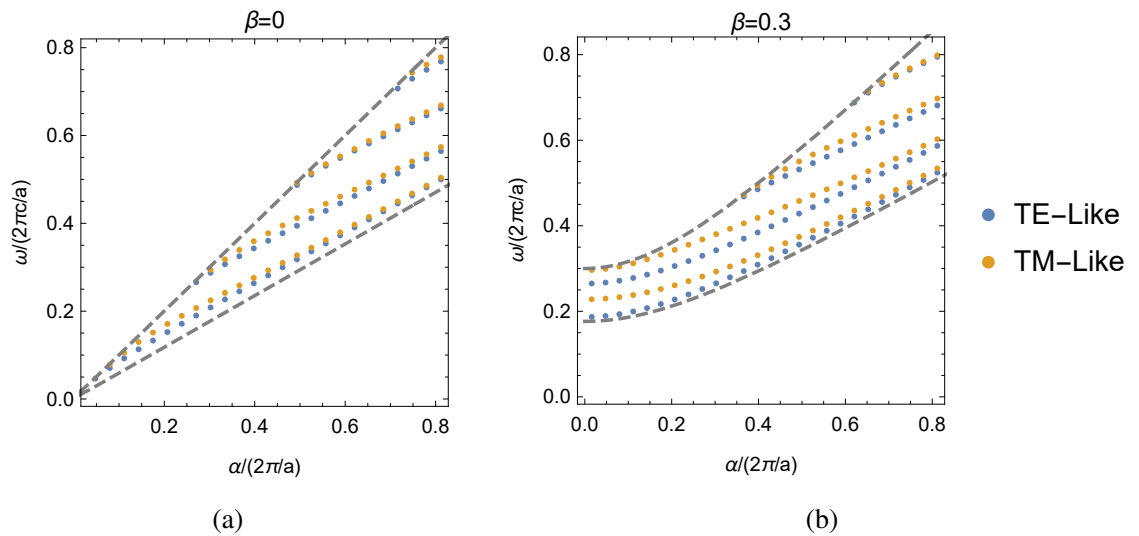


图 3.5 (a): TE 波的色散, (b): TM 波的色散, 介质参数:  $h = a, n_{2x} = 1.9, n_{2y} = n_{2z} = 1.7$

由于光学透明介质的折射率一般在 1.0 到 2.0 之间，计算在该折射率范围的单轴各向异性介质更有意义。然而不幸的是，折射率较小时，TE-Like 与 TM-Like 的色散相隔非常近，导致数值求解遇到困难，极易求出多余解，故没有画出色散曲面，但通过仔细调节参数，给定  $\beta$  下的波导模式色散曲线可以给出，见图3.5。由于单轴各向异性情况下的色散关系复杂，F-P 模式色散的求解变得极为困难。因此，不妨考察一下  $\det \mathcal{M}$  在变量空间的性质，见图3.6。

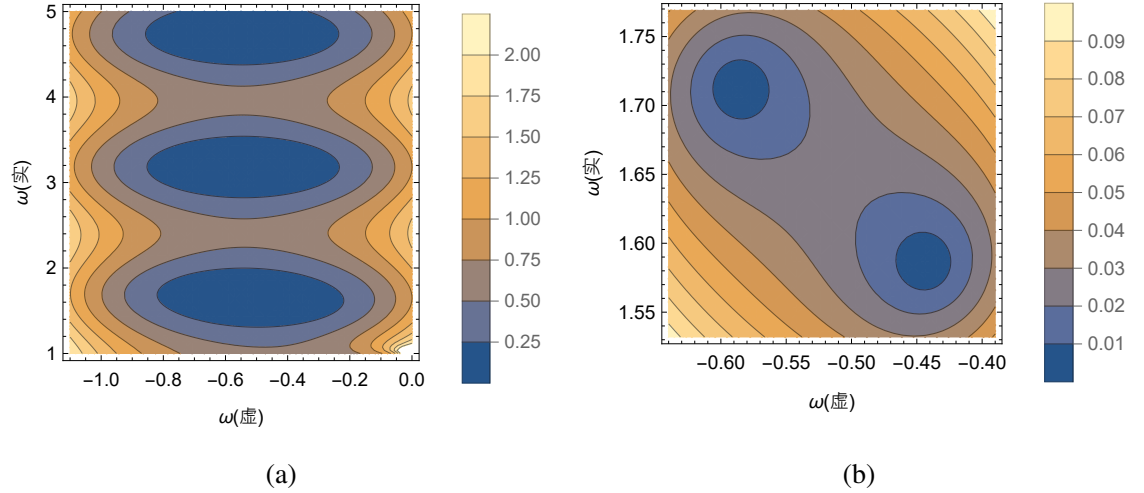


图 3.6  $\det \mathcal{M}$  在  $\omega$  的复空间中的图像，右边图像是左边图像最下方蓝色椭圆区域的局部放大。晶体平板参数： $\alpha = 1, \beta = 0.1, h = 1.5a, n_{2x} = n_{2y} = n_{2z} = 2.0$ ，介质为各向同性，在各向异性的情况下，图像形状会有一定变化，且性质更差

图3.6(a)有几个值较小的区域，即零点所在的区域，这些区域在实  $\omega$  方向几乎等间距分布，对应着图3.2(b)中的 F-P 模。为了看出零点，将图3.6(a)在最下方蓝色椭圆区域放大得到图3.6(b)。可以发现图3.6(a)的每个蓝色椭圆区域中包含两个零点，它们是色散方程的解，分别对应两个模式，各向同性情况下是 TE 和 TM 模式，两个模式的  $\omega$  实部差距较小，在色散中体现为相近的曲线。 $\det \mathcal{M}$  在  $\omega$  复空间的零点处下降非常快速，这是求解困难的主要原因。

这是单轴各向异性介质平板的色散方程首次被严格给出，充分展现了  $4 \times 4$  矩阵方法的强大。单轴各向异性晶体无周期结构，能带间无相互作用，可以与加入周期结构的有限元结果进行对比，以研究光子晶体的能带间相互作用，该结果同样可以推进对各向异性介质光学认识，促进各向异性介质器件的应用。

## 4 结论

平板光子晶体是一种一维周期介电结构，在  $x$  和  $y$  方向无限大，在  $z$  方向为有限厚度，可以用于调控光的传播，也是连续谱中的束缚态（BIC）的重要实现平台，通过求解光子晶体的能带，对研究能带上的共振模式，进而寻找 BIC，理解其产生机制有重要意义。有效介质理论的近似下，光子晶体可以看作均匀的单轴各向异性介质，周期结构则被看作微扰， $x$  方向折射率是两种折射率的算数平均， $y$  和  $z$  方向则是调和平均。求解有效介质近似下的能带可以加深我们对光子晶体能带间相互作用的理解。

各向同性介质中，由于平移对称性而导致了平面电磁波的模式解耦为 TE 和 TM 波，其色散可分别由  $2 \times 2$  矩阵法求得。单轴各向异性介质中，由于模式存在耦合，色散难以求得。

为求解色散，需构建各向同性介质中间夹单轴各向异性介质平板的结构，光从各向同性介质中入射。通过求解电磁场特征值方程，可得到单轴各向异性介质平板中电磁场的精确解，基于 Yeh 提出的  $4 \times 4$  矩阵方法，求得了整个结构的传递矩阵，随后导出了满足无穷远边界条件的传递矩阵元方程，此即色散关系，整个理论过程严格且无需依赖近似。经过证明，在各向同性的情况下， $4 \times 4$  矩阵法得到的传递矩阵是分块对角化的，且此时求得的色散与文献中的各向同性结果相同。

具体而言，在  $4 \times 4$  矩阵方法中，电磁波可以写为四个分波的叠加，其中两个分波是同一个模式的透射和反射的复振幅，其余两个分波则是另一个模式的透射和反射复振幅。

$4 \times 4$  矩阵方法定义了动力学矩阵、传播矩阵和传递矩阵。动力学矩阵用来表征不同介质，与该介质中各分波的偏振有关，传播矩阵则描述了均匀介质中电磁波的传播，即四个分波的相位移动，而传递矩阵表达了电磁波分波在结构前后的透射和反射分量复振幅的线性关系。根据动力学矩阵和传播矩阵可以写出各分波的复振幅所满足的矩阵方程，其系数矩阵是传递矩阵，而该矩阵方程可以看作是对边界条件的表述。由于动力学矩阵依赖于各分波的偏振，而偏振是电磁场本征值方程的解归一化后的矢量，所以  $4 \times 4$  矩阵方法实际上是在  $z$  方向分层的介质中通过边界条件求解麦克斯韦方程。

色散关系是一个极为复杂的多变量超越方程，其解的性质不佳，对数值求解造成困难。本文通过设计程序实现了色散的数值求解，绘出了光锥之下的波导模

式的色散曲面，对不同折射率下的能带进行了对比。此外，为尝试求解 F-P 模式，考察了色散方程在角频率的复空间中的性质。

## 致 谢

首先感谢向红和韩德专老师的悉心指导，两位老师学风非常严谨，学术水平过硬，对待我们则非常有耐心，尤其是本科同学，使我们有如沐春风的感觉。除了必要的指导外，老师们还给予了我们相当的自由，使我们能够自己把握控制研究的进展。

感谢宋前举师兄，即使在博士即将毕业的半年也能给予我悉心的指导，即使是一些基础的问题，一些"stupid question"也能耐心帮我解答，师兄为我提供了大量的文献和指导意见，使得我能够在课题上快速上手。课题最终能够较满意地完成，师兄功不可没。

感谢我的父母，父母给予我经济上的巨大支持，使我能够无后顾之忧地完成我的学业，享受我的大学生活。父母的关心也让我能够在课题受阻，心灰意冷，觉得自己毫无是处的时候意识到自己的潜力，看清当前的处境，以一种更为阳光的态度对待学习和生活。

感谢我的母校重庆大学，重庆大学在本科阶段为我提供了一个足够大的舞台，让我结交了许多良师益友，我想我应该也没有辜负我的老师和同学对我的信任。值得一提的是，在我的这一届，我们学院承办了西南地区物理学术竞赛，我也有幸作为队伍的一员到最后参加国赛。吴小志老师，王少明老师等指导老师在我们身上倾注了大量心血，在这里对您们的付出表示感谢。学院充足的资金，足够的重视，让我受益许多的良师，是我能够在竞赛中获得佳绩的重要前提。感谢一直指导我从小一大四的魏华老师，老师幽默风趣，对学生非常好，希望我以后在本科授课也可以做得和您一样出色。

到了毕业尤其容易认识到大学的短暂，时间真的很快。看着周围的同学，有的找到了下家深造，有的拿到企业 offer，有一点魔幻现实的感觉。回看大学四年，有后悔也有精彩，从总体上来说，我比较满意，我得到了许多想要的，也逐渐明白了追求它们所要付出的东西。大学四年没有让我改变我的目标，我喜欢物理，也大概率会一直走下去。大学的经历和成长让我的目标变得更加具体，变得更加触手可及。

我已经保研去中国科大的潘建伟院士的大组下深造，那是一个更大的舞台，那里有全国顶尖的，乃至世界顶尖的，前沿的科学研究。我不会忘记曾经帮助过我的良师益友，他们是我人生的宝贵财富，我将用研究生期间的努力回报它们。我

的朋友们，特别是舍友们，不乏一些有趣的灵魂、全才和怪才，我愿用一句诗与他们共勉。

弹指一挥间。  
可上九天揽月，  
可下五洋捉鳖，  
谈笑凯歌还。

——毛泽东《水调歌头·重上井冈山》

感谢文同学，是她陪我走过了大学最后一年的时光，让我见识到了更多人生的美好，让我在情感上得以成长。我们互相帮助，互相扶持，互相督促。毕业将我们从地理上分开，但感情若是久长时，又岂在朝朝暮暮，让我们共赴未来之约，共赴那个属于我们共同的美好未来。



## 参考文献

- [1] HSU C W, ZHEN B, LEE J, et al. Observation of trapped light within the radiation continuum [J]. Nature, 2013, 499: 188–191.
- [2] DAI S, LIU L, HAN D, et al. From topologically protected coherent perfect reflection to bound states in the continuum[J]. Physical Review B, 2018, 98: 081405.1–081405.5.
- [3] HSU C W, ZHEN B, STONE A, et al. Bound states in the continuum[J]. Nature Reviews Materials, 2016, 1: 16048.
- [4] GU C, YE P. Form birefringence dispersion in periodic layered media[J]. Opt. Lett., 1996, 21 (7): 504–506.
- [5] JOANNOPOULOS J D, JOHNSON S G, WINN J N. Photonic crystals:molding the flow of light [M]. [S.l.]: Princeton University Press, 2008.
- [6] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. Physical Review Letters, 1987, 58(20): 2059.
- [7] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric super lattices[J]. Physical Review Letters, 1987, 58(23): 2486–2489.
- [8] ZHANG X, YING W. Effective medium theory for anisotropic metamaterials[J]. Scientific Reports, 2014, 5: 7892.
- [9] GARNETT J. Colours in metal glasses, in metallic films and in metallic solutions.[J]. Proceedings of the Royal Society of London, 1905, 76(511): 370–373.
- [10] 桑芝芳, 陈鸿莉, 高雷. 各向异性介质中群速度的讨论[J]. 大学物理, 2012(11): 9–10.
- [11] YE P. Optics of anisotropic layered media: A new  $4 \times 4$  matrix algebra[J]. Surface Science, 1980, 96(1): 41–53.
- [12] YE P, HENDRY M. Optical waves in layered media[J]. Optica Acta International Journal of Optics, 1990, 43(1): 77–78.
- [13] 孟岩. 经典波系统中的拓扑界面态[D]. [出版地不详]: 重庆大学, 2018.
- [14] MEHRANY K, KHORASANI S. Analytical solution of non-homogeneous anisotropic wave equations based on differential transfer matrices[J]. J. Opt. A: Pure Appl. Opt, 2002, 4: 624–635.

## 附 录

### A. 动力学矩阵的一般形式

各向同性介质中的动力学矩阵的一般形式为<sup>①</sup>

$$\mathcal{D}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{N_1\beta}{\alpha} & -\frac{N_1\beta}{\alpha} & -\frac{N_2\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+N_1^2\omega^2}}{\alpha} & \frac{N_2\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+N_1^2\omega^2}}{\alpha} \\ -\frac{N_1\beta\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+N_1^2\omega^2}}{\alpha\omega} & \frac{N_1\beta\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+N_1^2\omega^2}}{\alpha\omega} & \frac{N_2(\beta^2-N_1^2\omega^2)}{\alpha\omega} & \frac{N_2(\beta^2-N_1^2\omega^2)}{\alpha\omega} \\ N_1 & N_1 & 0 & 0 \\ -\frac{N_1\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+N_1^2\omega^2}}{\omega} & \frac{N_1\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+N_1^2\omega^2}}{\omega} & \frac{N_2\beta}{\omega} & \frac{N_2\beta}{\omega} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

单轴各向异性介质中的动力学矩阵的一般形式为

$$\mathcal{D}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{N_4(\alpha^2-n_{2y}^2\omega^2)}{\alpha\sqrt{n_{2x}^2\left(\omega^2-\frac{\alpha^2}{n_{2y}^2}\right)-\beta^2}} & \frac{N_4(n_{2y}^2\omega^2-\alpha^2)}{\alpha\sqrt{n_{2x}^2\left(\omega^2-\frac{\alpha^2}{n_{2y}^2}\right)-\beta^2}} \\ -\frac{N_3\alpha}{\omega} & -\frac{N_3\alpha}{\omega} & -\frac{n_{2y}^2N_4\omega}{\alpha} & -\frac{n_{2y}^2N_4\omega}{\alpha} \\ -\frac{N_3\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+n_{2y}^2\omega^2}}{\beta} & \frac{N_3\sqrt{-\alpha^2-\beta^2+n_{2y}^2\omega^2}}{\beta} & \frac{N_4\beta}{\sqrt{n_{2x}^2\left(\omega^2-\frac{\alpha^2}{n_{2y}^2}\right)-\beta^2}} & -\frac{N_4\beta}{\sqrt{n_{2x}^2\left(\omega^2-\frac{\alpha^2}{n_{2y}^2}\right)-\beta^2}} \\ \frac{N_3(n_{2y}^2\omega^2-\alpha^2)}{\beta\omega} & \frac{N_3(n_{2y}^2\omega^2-\alpha^2)}{\beta\omega} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

其中，四个归一化系数分别为

$$\begin{aligned} N_1 &= \sqrt{\frac{\alpha^2}{\beta^2 + \alpha^2}}, \\ N_2 &= \sqrt{\frac{\alpha^2}{n_{1y}^2\omega^2 - \beta^2}}, \\ N_3 &= \sqrt{\frac{\beta^2}{n_{2y}^2\omega^2 - \alpha^2}}, \\ N_4 &= \sqrt{\frac{\alpha^2(n_{2x}^2(\alpha^2 - n_{2y}^2\omega^2) + \beta^2n_{2y}^2)}{(\alpha^2 - n_{2y}^2\omega^2)(\alpha^2n_{2x}^2 + n_{2y}^4\omega^2 - \alpha^2n_{2y}^2)}}. \end{aligned}$$

① 为了公式的形式简洁，令真空中光速  $c=1$ ，恢复到国际单位只需将所有式中的  $\omega$  替换为  $\omega/c$