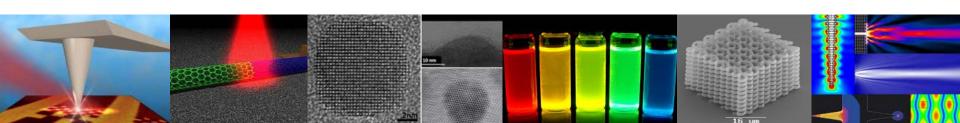




纳米光子学及其应用

第15讲: 光子晶体——周期 性电介质的物理性质

光电科学与信息学院



回顾

- ▶ FEM建模过程
- ▶ 傅里叶模态法简略介绍
- 平面波展开法简单介绍
- ▶ 传输矩阵法
 - ▶ 传输矩阵的获得
 - ▶ 传输矩阵应用于一维光子晶体结合布洛赫定理
 - ▶ ——色散关系
 - ▶ ——能隙
 - 长波近似下介电常数对应的物理解释
 - > 双曲型超材料

课程内容

课程知识点

1. 研究内容

纳米光子学基础

电子与光子异同 纳米尺度下光与物质相互作用

2. 研究方法

计算方法: 电磁场数值模拟

特性描述: 近场光学

制备方法: 纳米加工

量子材料: 电子的限域引起光学效应

表面等离子体光学

光子晶体:周期性介质光学

亚波长共振: 在远场影响光传播和

偏振的周期性光学结构

超材料:人工设计电磁材料

- 周期性电介质的物理性质
- 光子晶体光学特性与制备
- 光子晶体缺陷与波导
- 光子晶体光纤

本讲内容

1. 光子晶体概念介绍

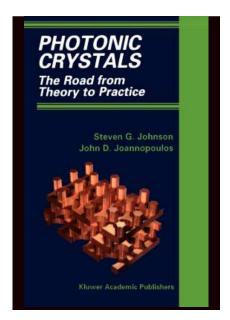
- -起源与历史
- -光子晶体材料
- -光子晶体基本特性
- -光子晶体新现象与应用

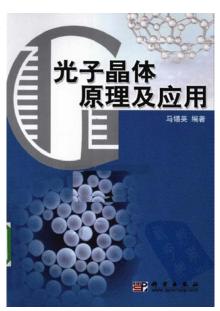
2. 光子晶体电磁波理论

-平面波展开法

Outline

- -一维、二维、三维光子晶体
- -光子晶体物理根源

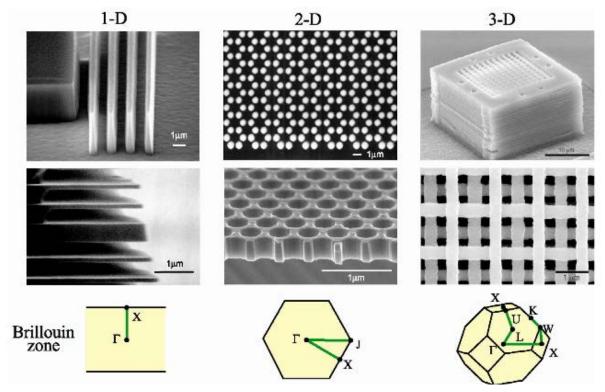




1. 光子晶体概念简介

光子晶体材料

光子晶体(photonic crystal)是介电常数在空间按波长的数量级呈周期性变化的微结构,光子晶体中的各种光学现象是由其光子能带的特殊衍射效应引起的,根据周期性分为一维、二维、三维光子晶体。



周期性变化的介电常数,相对折射率(n₁/n₂)表现出一种周期势场

从布拉格光栅到光子晶体

1785: The first man-made diffraction grating was made by David Rittenhouse, who strung hairs between two finely threaded screws.

1913: Bragg formulation of X-ray diffraction by cristalline solids

1928: Bloch's Theorem describe the conduction of electrons in crystalline solids. (Math developed by Floquet in 1D case in 1883)

1976: A.Yariv and P. Yeh, study of dielectric multilayer stacks, waveguides and bragg fibers.

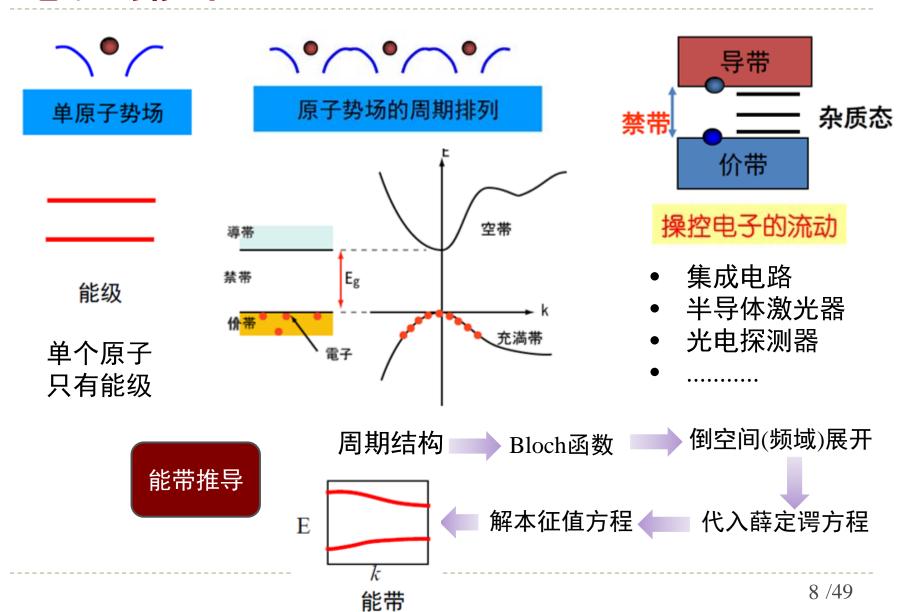
1987: Prediction of photonic crystals

S. John, Phys. Rev. Lett. 58,2486 (1987), "Strong localization of photons in certain dielectric superlattices"

E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58 2059 (1987), "Inhibited spontaneous emission in solid state physics" and electronics"

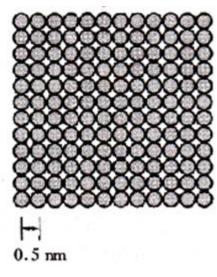
目标:对光进行操控

电子的能带

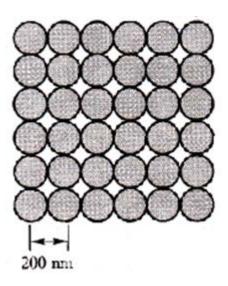




能否像电子一样控制光子?

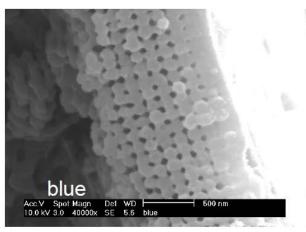


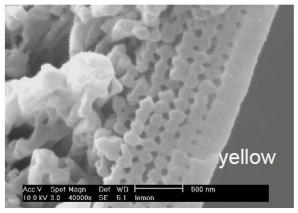
电子晶体 原子的周期性排列 (原子尺度)

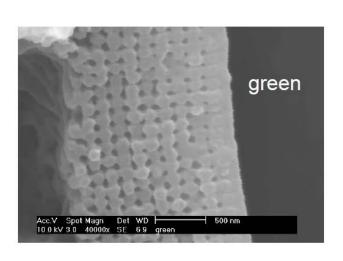


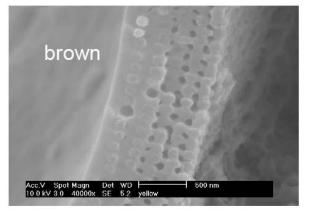
光子晶体 介质的周期性排列 (波长尺度)





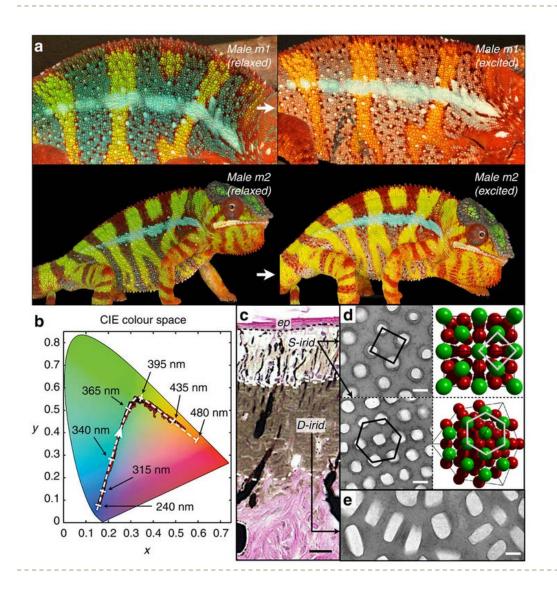






固体、周期性、空气/介质交错结构

反射光颜色:与周期、结构层数、材质相关——结构色



活性光子晶体:通过改变 细胞纳米晶体间距控制光 的反射

间距变小——反射蓝光 间距变大——反射红光



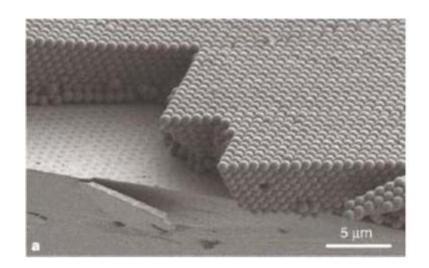
自"凉爽"

Nature Communication 2015, March



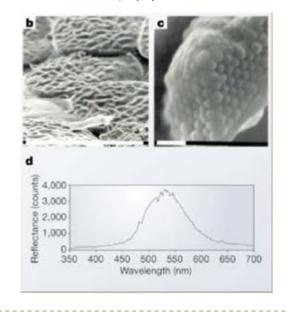


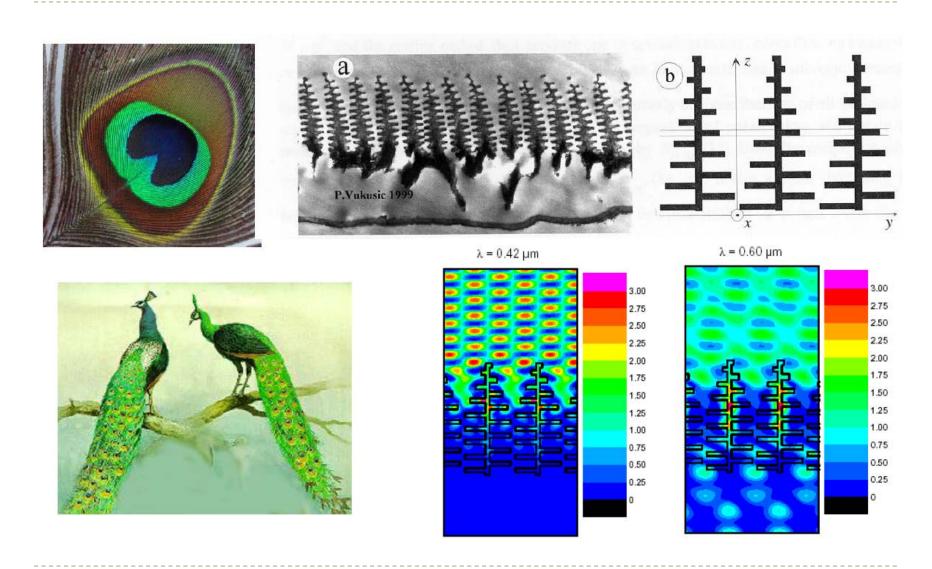
蛋白石: 氧化硅胶体





象鼻虫





概念提出



Eli Yablonovitch UC Berkeley



Sajeev John University of Toronto

- 1989年, Eli Yablonovitch与Sajeev John几乎同时提出上述概念 (Phys. Rev. Lett. 20, 2059 (1987) 与Phys. Rev. Lett. 23, 2486 (1987)). 他们将这种人工制造的介电质周期结构称为"光子晶体" (Photonic Crystals).
- Eli Yablonovitch: 凭借光子晶体的禁带抑制自发辐射,提高激光工作效率。
 Sajeev John: 先由周期介质产生禁带,再适度打乱此结构,以实现光波的"局域化"。

14 /49

光子晶体材料

- 1. 以光子为载体的光子晶体,通常考虑使用正介电常数的材料,如玻璃、半导体材料(Si, Ge, GaAs等)、绝缘体等。
- 2. 光子晶体:不同电介质材料在一维、二维或三维上形成周期性排列,光在此周期性介质中传播时发生布拉格散射,布拉格定律,

 $2d\sin\theta = n\lambda$

发生干涉相消,光不能在晶体中传播,其中,d为晶格常数; θ 为入射角, λ 为入射波长。

通常要求光子晶体的周期或晶格常数与传播电磁波的波长相当,光子带隙的大小受介质折射率比、填充比、晶格结构的影响。一般全向完全带隙要求折射率比>2。

光子晶体的基本特性

1. 光子禁带

2. 抑制自发辐射

自发辐射是物质与场相互作用的结果,如果自发辐射原子 的自发辐射频率恰好落在光子晶体带隙中,则因带隙中该频率 的态密度为零、自发辐射几率也为零、这就抑制了自发辐射。

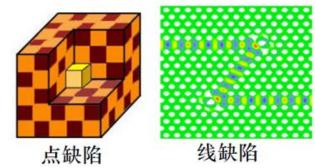
0.7

0.4

(wa/2πc) 0. 0.5

Frequency 0.3 0.2 0.1

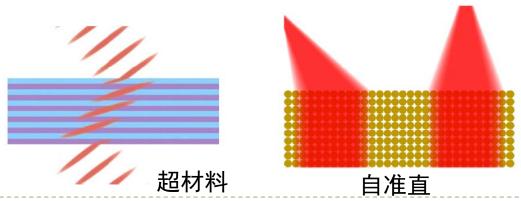
3. 光子局域化

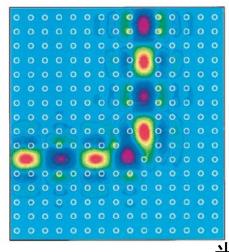


与缺陷态频率相吻合的光子有可能被局域在缺陷位置, 旦其偏离缺陷处, 光就迅速衰减。

光子晶体新现象与应用

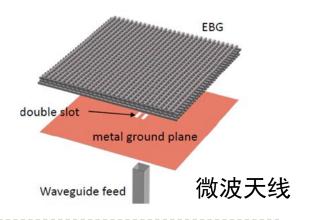
- 光子晶体对自发辐射的控制
- 单模发光二极管和激光器
- ▶ 高效率、低损耗反射镜
- 光子晶体光纤
- ▶ 光子晶体超棱镜
- 光子晶体微波天线
- ▶ 超材料、准直、、、





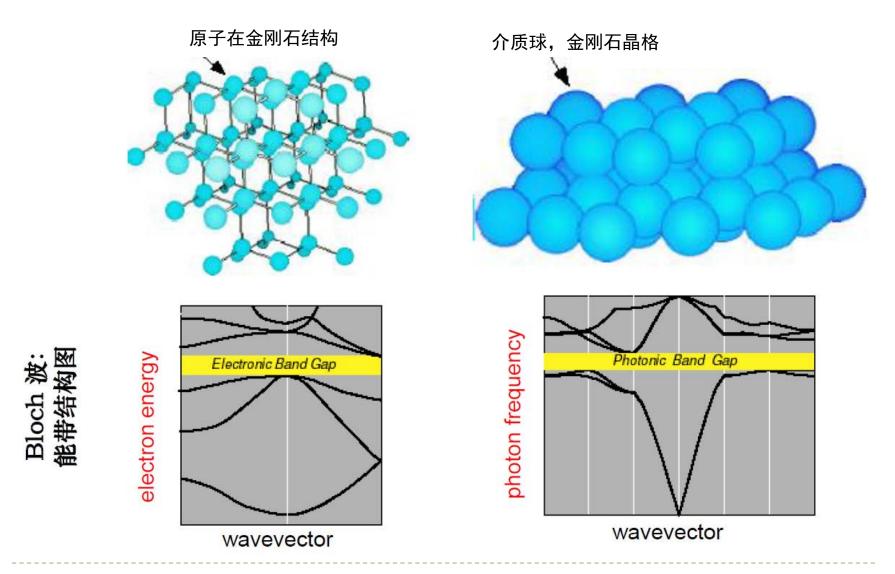
光波导

A. Mekis *et al*, "High Transmission through Sharp Bends in Photonic Crystal Waveguides," Phys. Rev. Lett. **77**(18), 3787-3790 (1996).



2. 光子晶体的电磁波理论

光子晶体的电磁波理论



电子半导体与光子晶体

电子	光子
$\left\{-\frac{\nabla^2}{2} + V(\vec{r})\right\}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$	$\left\{ \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \right\} \vec{H}(\vec{r}) = \omega^2 \vec{H}(\vec{r})$
Scalar $\psi(\vec{r})$	Vector \vec{E}, \vec{H}
Fermion, $s = 1/2$	Boson, s =1
e-e: strong	p-p: absent
$\ell \sim 0.1\text{nm}$	ℓ ≥ 100 nm

光子晶体最根本的特征是具有光子带隙。由于光子和电子在本质上有许多不同之处,所以在研究方法上完全借助固体能带理论是不合适的,目前光子晶体的能带结构主要有三种计算方法:平面波展开法、传输矩阵法和FDTD。其中平面波展开法提出最早、应用最广。

Electron vs Photon 20 /49

布洛赫定理

电子晶体的回顾

定理内容: 晶格具有平移对称性的单电子哈密顿算符

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

的本征函数 $\psi(\vec{r})$ 可以表示为 $\psi(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r})$ 调制的平面波

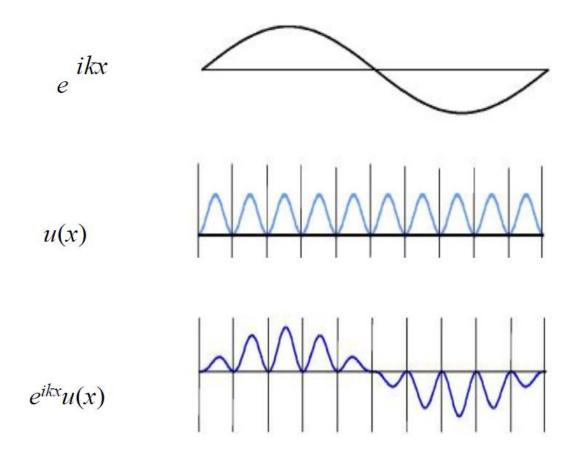
其中 $\mathbf{u}(\vec{r})$ 是一个具有晶格周期性的函数: $\mathbf{u}(\vec{r})=\mathbf{u}(\vec{r}+\vec{R})$

R为简约波矢(布洛赫波矢)。

方程的解具有以下性质 $\psi(\vec{r} + \overrightarrow{R_n}) = e^{i\vec{k}\cdot \overrightarrow{R_n}}\psi(\vec{r})$

Bloch Theorem 21 /49

布洛赫函数



可以把布洛赫函数看为振幅做周期性变化的平面波

布洛赫函数

- 布洛赫定理说明了一个在周期场中运动的电子波函数为:
- 一个自由电子波函数 e^{ikx} 与一个具有晶体结构周期性的函数 u(x) 的乘积。
 - · 它是按照晶格的周期 *a* 调幅的行波。
- · 这在物理上反映了晶体中的电子既有共有化的倾向,又有 受到周期排列的原子束缚的特点。
- · 只有在 $u_{k}(r)$ 等于常数时,在周期场中运动的电子波函数才完全变为自由电子的波函数。
- · 因此, 布洛赫函数是比自由电子波函数更接近实际情况的 波函数。

光子晶体

- ▶ 将电磁场在倒格矢空间以平面波叠加的形式展开,将麦克斯韦方程组化 为一个本征方程,求解本征值便得到传播光子的本征频率。
- ▶ 电磁波在光子晶体中传播服从Maxwell方程组, 高斯单位制下表示为

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial B}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{1}{c} 4\pi \mathbf{J} \\ \nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \end{cases}$$

E为电场强度矢量,

H为磁场强度矢量,

B为磁感应强度矢量,

D为电位移矢量,

P为自由电荷密度,

J为自由电荷电流密度

设电磁波在均匀,无源的周期性电介质 $\rho = J = 0 \implies D(r) = \varepsilon(r)E(r)$ 对多数电介质材料,磁导率~1 $\implies B = H$

假定介质是低损耗, 忽略介电常数对频率的依赖特性

将
$$\begin{cases} \mathbf{E}(r,t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{i\omega t} \\ \mathbf{H}(r,t) = \mathbf{H}(r)e^{iwt} \end{cases}$$
 代入Maxwell方程组,化简得到两个相互独立的方程。

$$\begin{cases} \frac{1}{\varepsilon(r)} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \frac{\omega^2}{c^2} E(\mathbf{r}) = 0 \\ \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = (\frac{\omega}{c})^2 \mathbf{\underline{H}}(\mathbf{r}) \\ \hline$$
本征运算符 本征值 本征态

如果本征运算符为周期性的,可以运用布洛赫定理

可选择:
$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}(\mathbf{r})$$
平面波

 k 为布洛赫波波矢

讨论k的取值

- \triangleright 以一维光子晶体为例,考虑晶体具有 N 个周期,a为晶格常数。
- 利用周期性边界条件:

$$H(x) = H(x + Na)$$

即:
$$u(x)e^{ikx} = u(x+Na)e^{ik(x+Na)} = u(x)e^{ikx}e^{ikNa}$$

因此:

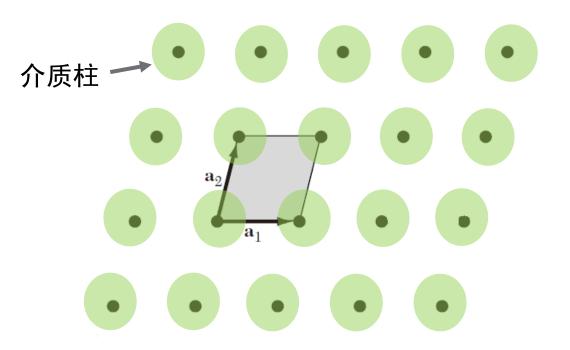
$$e^{\mathrm{i}kNa}=1$$
, $\exists \exists kNa=2n\pi$

$$k = \frac{2\pi}{Na}n = \frac{2\pi}{L}n, \ n = 0, \ \pm 1, \ \pm 2, \dots$$

k 的取值不是任意的,是一系列等间距的离散值,当 N 很大时,准连续

ト 三维:
$$k_i = \frac{2\pi}{L_i} n, \; n = 0 \,, \; \pm 1 \,, \; \pm 2 \,, ..., \; i = x,y,z$$

对周期性函数展开之前,讨论一下正格子和倒格子



- 黑点代表介质柱所 处位置,称为格点
- 选择基矢a₁, a₂, 称 为正格矢,二维情 况下,构成的平行 四边形能够遍历整 个空间的最小重复 单元

• 光子晶体的平移矢量R,可以表示为 $R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$,这里 a_1 , a_2 , a_3 是点阵基矢, n_1 , n_2 , n_3 为任意整数,可以遍历所有格点。

倒格基矢:
$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$
; $\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$; $\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$.

- 点阵的倒格矢为 $G = h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3$, 其中 h_1 , h_2 , h_3 为任意整数, 倒空间中的点构成倒格子。
- 构建了对偶空间:正空间、倒空间
- 与点阵矢量的关系: $a_i \cdot b_i = 2\pi\delta_{ii}$
- $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ • 由于
 - $oldsymbol{u}(oldsymbol{r}+oldsymbol{R})\!=\!u(oldsymbol{r})$ 其中:

$$\varepsilon(r) = \varepsilon(r+R)$$
 \longrightarrow $1/\varepsilon(r) = 1/\varepsilon(r+R)$

- 因此, u(r) 和 $1/\varepsilon(r)$ 为 R 的周期性函数,均可做傅里叶级数展开
- 对应的空间频率就是倒格矢 *G*

$$\frac{1}{\varepsilon(r)} = \sum_{G} \eta_{G} e^{iG \cdot r}$$

其中 G 是光子晶体的倒格矢,相应的傅利叶展开系数 η_G 为

$$\eta_{G} = \frac{1}{\Omega} \int_{\mathrm{wsc}} \frac{1}{\varepsilon(r)} \times \mathrm{e}^{-iG \cdot r} \mathrm{d}r$$
元胞体积
$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \sum_{G} C_{G} e^{\mathrm{i}G \cdot r}$$

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{G}} e^{\mathrm{i} (\boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}) \cdot \boldsymbol{r}}$$

同理, 电场也可以做傅里叶级数展开, 表示为平面波的叠加

二维光子晶体

$$\begin{cases} \frac{1}{\varepsilon(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) E_z(r) = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}_z(\mathbf{r}) & \text{TE}ix \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\varepsilon(r)} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{H}_z(\mathbf{r}) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\varepsilon(r)} \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{H}_z(\mathbf{r}) \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_z(\mathbf{r}) & \text{TM}ix \end{cases}$$

根据Bloch定理, 电场和磁场分量可以表示成一系列平面波的迭加

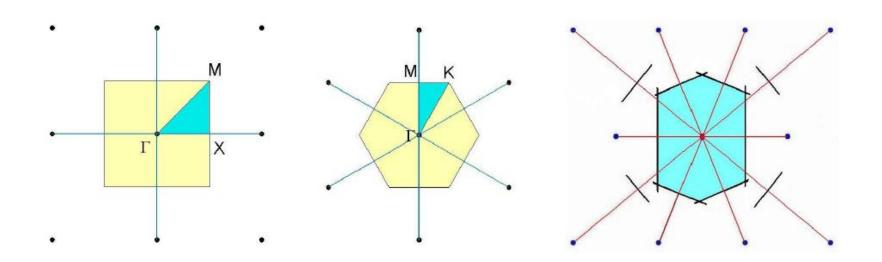
将
$$\begin{cases} \boldsymbol{E}_{z}(\boldsymbol{r}) = \sum_{G} \boldsymbol{E}_{z,G} e^{i(k+G)\cdot r} \\ \boldsymbol{H}_{z}(\boldsymbol{r}) = \sum_{G} \boldsymbol{H}_{z,G} e^{i(k+G)\cdot r} \end{cases}$$
 和级数形式的 ε^{-1} 代入

进行适当的空间积分和代换,得到矩阵形式的本征方程

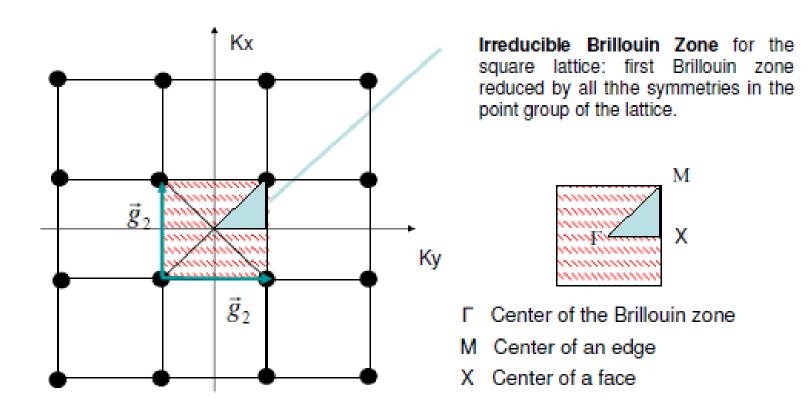
$$\begin{cases} \sum_{\mathbf{G}} \eta(\mathbf{G} + \mathbf{G}') | \mathbf{k} + \mathbf{G}' | | \mathbf{k} + \mathbf{G} | \times \mathbf{E}_{z,\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}_{z,\mathbf{G}} \\ \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \eta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{z,\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{z,\mathbf{G}} \end{cases}$$

第一布里渊区的定义

- 把波矢空间中取某一倒易点阵为原点,作所有倒易点阵的垂直平分面,这些面把波矢空间划分为一系列的区域,其中最靠近原点的一组面所围的闭合区称为第一布里渊区,第一布里渊区就是倒易点阵的维格纳-塞茨原胞。
- 布里渊区的形状取决于晶体所属的布拉菲点阵的类型



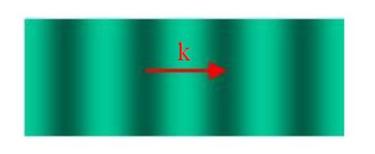
不可约约布里渊区



It is enough to calculate band diagrams in the irreducible Brillouin zone and then use the symmetry of the lattice to extend the diagrams to the first Brillouin zone.

真空中的能带结构(1D)

真空: $\varepsilon = 1$, $\mu = 1$, Maxwell方程组的平面波解有:



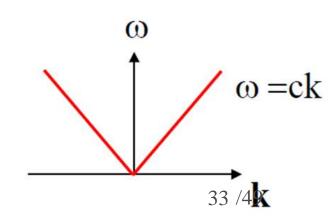
$$He^{i(k\cdot r - \omega t)}$$

满足横向限制条件: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{H} = 0$

能带结构,或者说定义频率和波矢间关系的色散关系

$$\omega = c|\boldsymbol{k}|$$

对一维系统,能带结构可以简单地描述为:



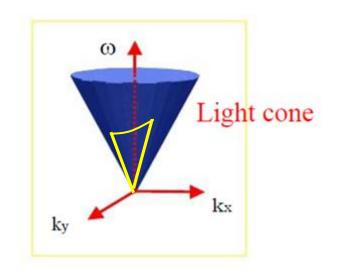
真空中的能带结构(2D)

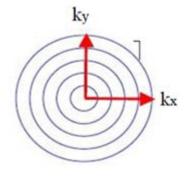
对二维系统

$$\omega = c\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$$

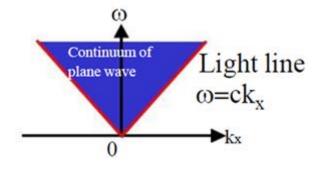
这个函数可以描述为一个锥:光锥

几种观看能带结构的方法

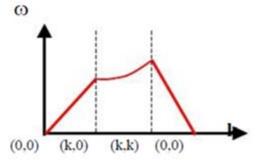




等频线

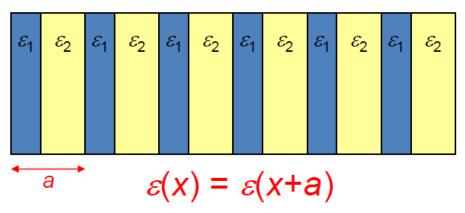


能带投影图

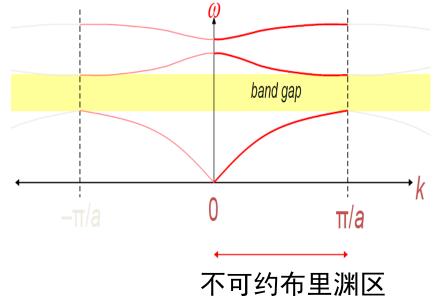


几个特殊方向的能带图

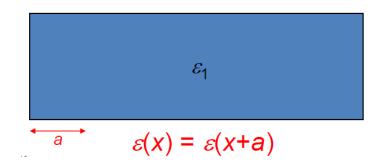
一维光子晶体



- 最简单的一维光子晶体:具有不同折射率的两种材料交替堆叠构成的多层膜结构
- 正格子基矢大小 a
- 倒格子基矢大小 2π/a

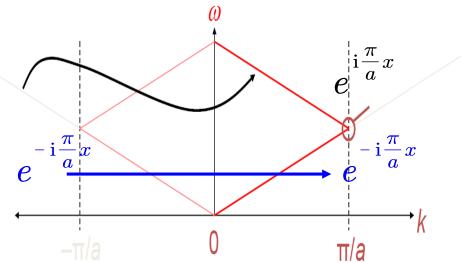


一维光子晶体

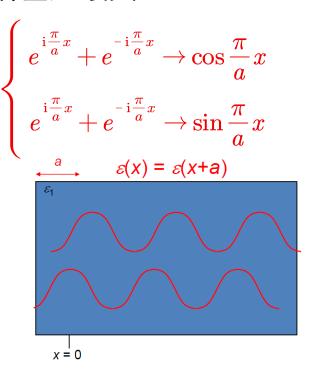


均匀媒质可以想象成周期为*a*的一维 光子晶体

- 在布里渊区边界处两种波函数
- 两种叠加可能性

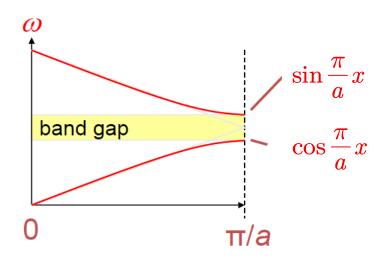


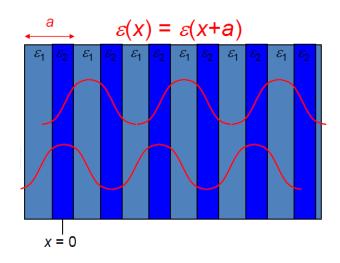
把均匀介质中的色散关系按周期结构做折叠



一维光子晶体

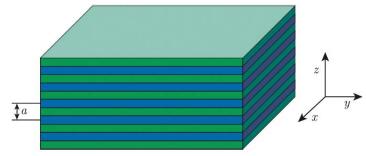
变成真正的光子晶体后: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \Delta \varepsilon$, $\Delta \varepsilon > 0$

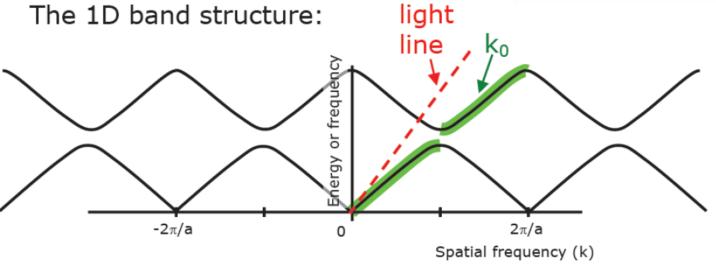


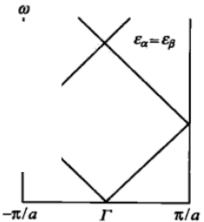


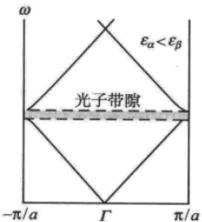
- 在布里渊区边界处,波长相同(同一个波数),频率不同的两种波
- 高频模式: 能量集中在低介电常数材料区
- 低频模式:能量集中在高介电常数材料区
- 频率差 $\Delta \omega$,随 $\Delta \varepsilon$ 增大而增大
- 两个频率之间不存在允许的模式:光子带隙

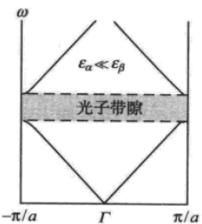
一维光子晶体能带图



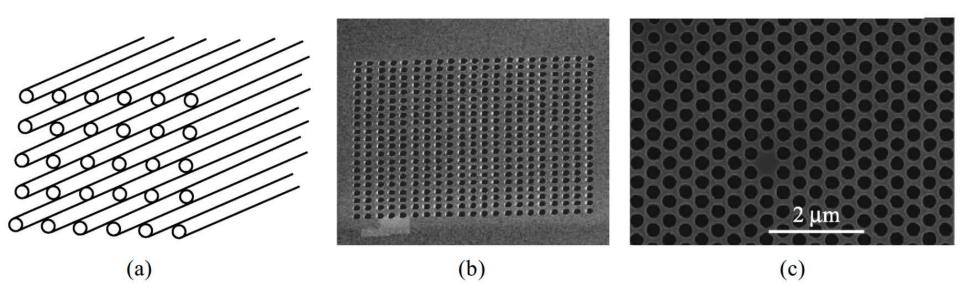








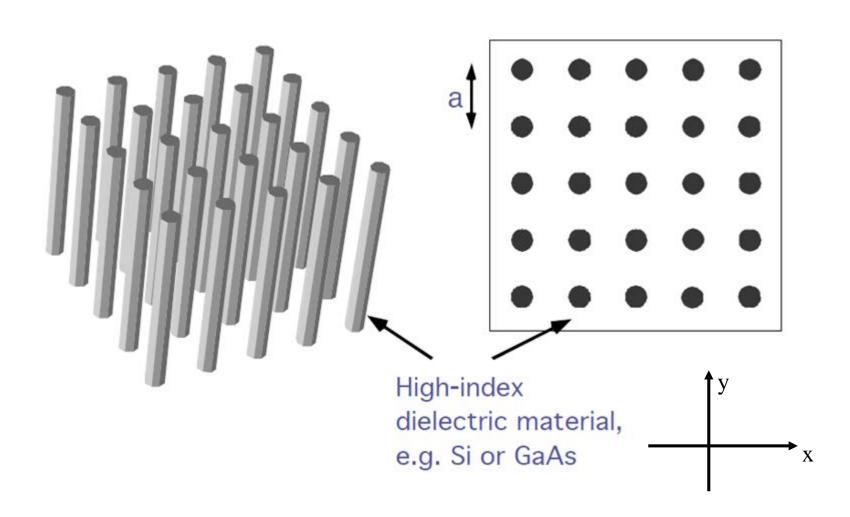
二维光子晶体



常见的二维光子晶体

(a)介质柱;(b)正方格子的空气柱;(c)三角格子的空气柱

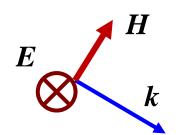
二维光子晶体



二维光子晶体

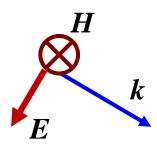
TM模式:

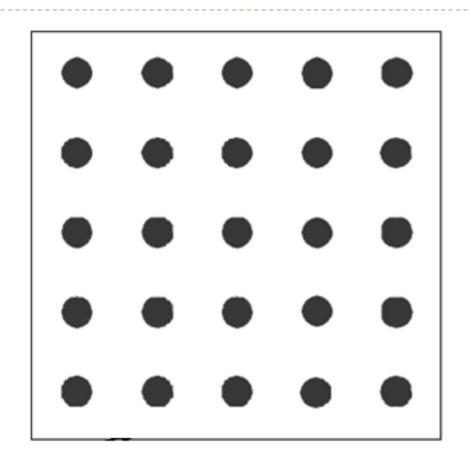
电场平行于介质柱



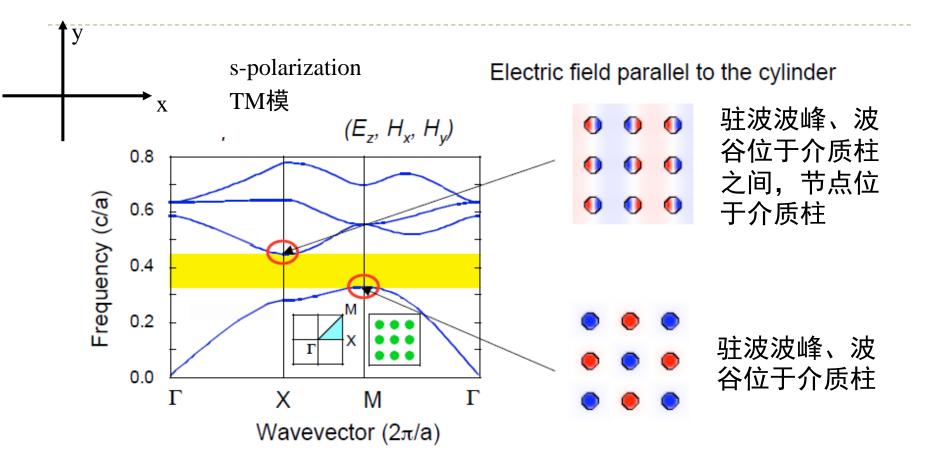
TE模式:

磁场平行于介质柱





- 二维光子晶体中定义横电模、横磁模中的横是相对与介质柱的!
- 和一般的定义相反
- 一般情况下定义的横电模、横磁模中的横是相对于入射面的。



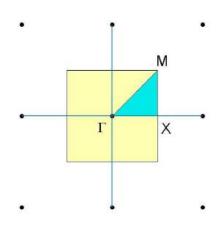
Axis of the cylinder along the z-direction

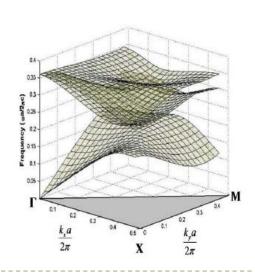
Gap region: where light can not propagate.

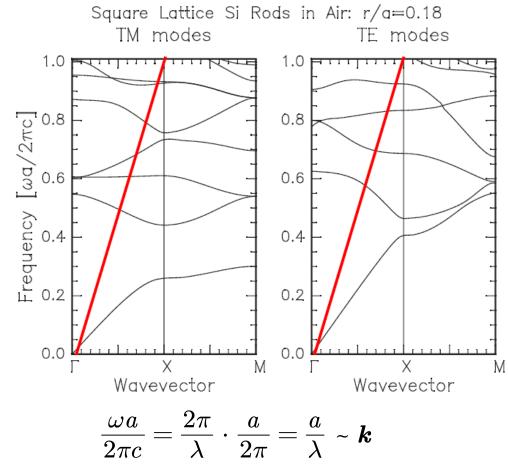
Band region: where light can propagate.

"senkrecht", German for perpendicular

标度不变性



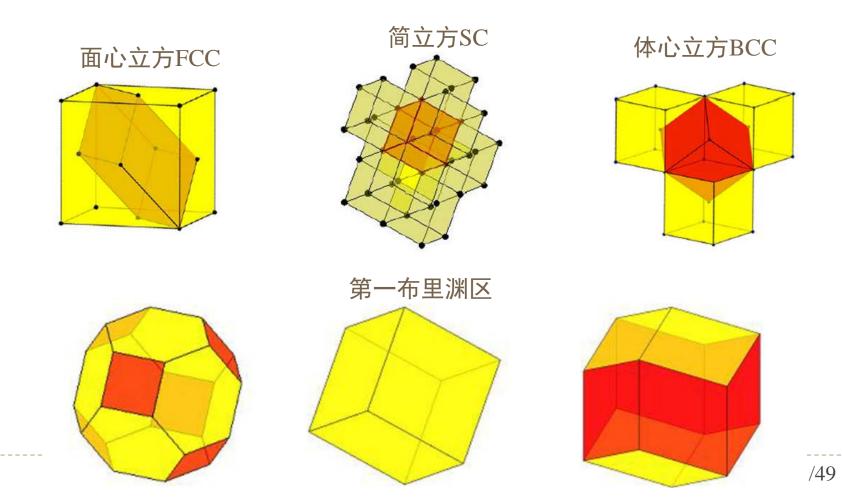




光子晶体具有的标度不变性的优点,即只需放大或缩小结构的尺寸,其工作波长也按比例随之放大或缩小而保持偏振态、传播方向和相位等性能指标不变。

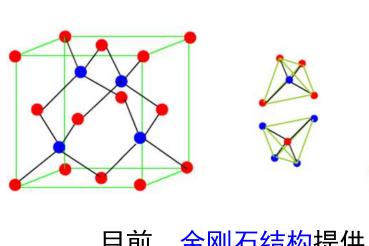
三维光子晶体

- 三维光子晶体:介质材料在三维空间呈周期性排列。
- 在三维空间都具有光子带隙是非常困难的
- 常见的结构为立方晶格,其中简立方、面心立方和体心立方最为常见。

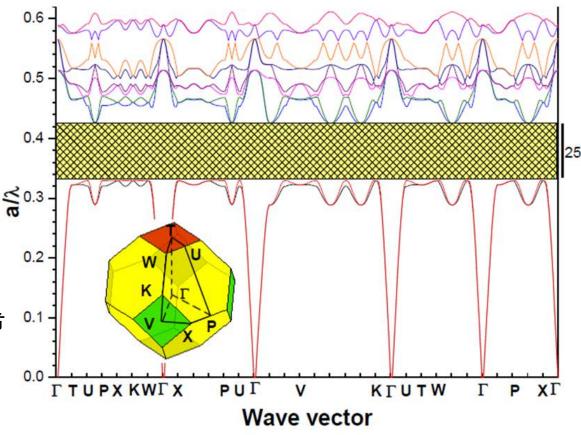


三维光子晶体

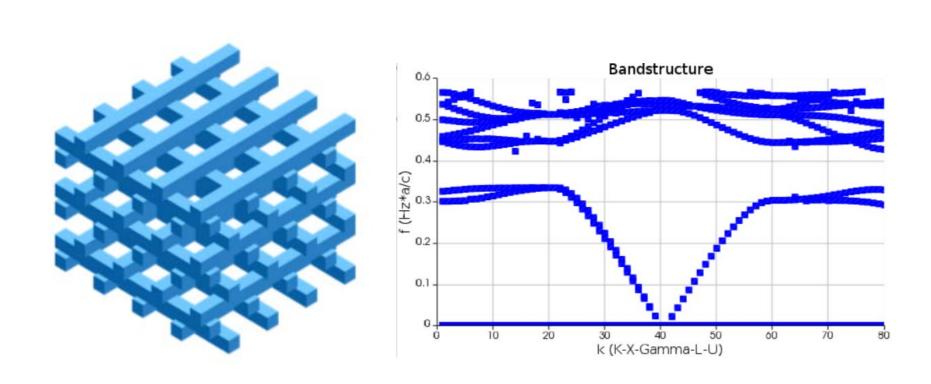
面心立方(fcc)结构是产生光子带隙最理想的结构,折射率差越大越容易得到光子带隙。半导体Si和GaAs(n=3.6)具有最大的实际折射率差(与空气)。



目前,金刚石结构提供 了最宽的光子带隙,最有希 望产生完全光子带隙的是 fcc,金刚石和木堆积结构。



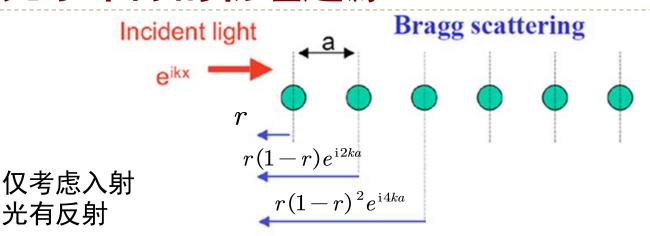
三维光子晶体



木堆积结构及其能带结构

不同的堆积方法可以得到不同的晶体结构和不同的带隙

光子带隙的物理起源



所有反射波叠加
$$R=rac{E_R}{E_0}=r+r(1-r)e^{\mathrm{i}\,2ka}+r(1-r)^{\,2}e^{\mathrm{i}\,4ka}+\cdots$$

$$=rac{r}{1-(1-r)e^{\mathrm{i}\,2ka}}$$

布拉格条件:
$$e^{i2ka}=1$$
, $k=\frac{\pi}{a}$ $R=1$ 全反射

当入射光频率满足布拉格条 件时, 光不能在晶体中传播。

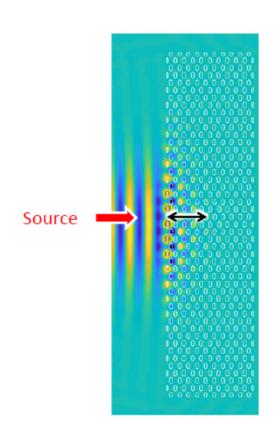


光子晶体带隙的起因

在带边,波长相等,频率不同,同时满足布拉格条件

当光波遇到光子禁带

What if photonic crystal is illuminated by a wave at a frequency within its band gap?



The Bloch wave actually penetrates into the lattice by some distance.

Bloch waves still exist within the band gap. They just cutoff and evanescent. This means they decay with distance into the lattice.

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) \exp^{-\vec{a}\cdot\vec{r}} \exp^{-j\vec{\beta}\cdot\vec{r}}$$

小结

- 1. 光子晶体的介绍
- -光子晶体的由来 -光子晶体的定义和分类
- -自然界中的光子晶体
- 2、光子晶体的电磁波理论
- -布洛赫定理
- -光子晶体的Maxwell方程组和平面波展开法
- -正格基矢和倒格基矢
- -第一布里渊区一能带
- -能带