目次

第 1 章

序論

1.1　背景

1.1.1　フォトニック結晶

フォトニック結晶は、1987 年に、E.Yablonovitch が提案した概念であり、屈折率の異なる材質を周期的に配置した誘電体である。特に、フォトニックバンドギャップと呼ばれる、波数ベクトルに関わらず結晶中にどのモードも存在できないような周波数ギャップを持つように設計されたフォトニック結晶は、特定の方向への光の伝播を制御することが可能となる。完全なフォトニックバンドギャップを有する構造には、一次元では多層膜、二次元では三角格子、三次元ではダイヤモンド構造などが知られている。

1.1.2　MIT Photonic Bands

MIT Photonic Bands (MPB) は、マサチューセッツ工科大学の Steven G. Johnson によって開発された、ソフトウェアパッケージである。周期的誘電体構造における固有状態やバンド構造などの計算の機能を持っており、フォトニック結晶の研究に適している。また、フォトニック結晶に限らず、導波路や共振器システムなどの光学分野において活用することができる。

MPB は、誘電体構造の計算には時間領域法ではなく周波数領域法を用いている。これによって周波数と電磁モードを同時に取得を可能としている。従来の周波数領域固有ソルバーでは、目的の固有状態まで多数のバンドを計算する必要があったが、ターゲット固有ソルバーという手法を用いることでバンドギャップを直接解決し計算量と記憶容量のコストの削減を図っている。

技術的には、Python や Scheme といった汎用のプログラミング言語から制御できるほか、HDF5 形式での電場状態の出力に対応しているなど、他のプログラムと入出力において互換性を持たせるように設計された。libctl(Steven G. Johnson による開発) によって柔軟なインターフェースが提供され、手軽に条件を指定して計算することができる。またフーリエ変換には FFTW (こちらも Steven G. Johnson らによる開発) を用いている。現在も MIT ライセンスの元でオープンソースでメンテナンスされている。

1.2　目的

本研究では、フォトニック結晶の基礎的な構造である 3 次元フォトニック結晶に着目し、フォトニックバンドギャップが生じる構造の条件を MPB を用いて検証を行う。プログラムによって結晶構造の条件をを連続的に変化させ、パラメータとバンドギャップの関連性を調べる。本研究では、フォトニック結晶の構造の 1 つである Inverse Opals 構造に着目して様々な条件下におけるバンドギャップの検証を行う。検証は、MPB を用いて行う。

第 2 章

原理

2.1 Maxwell 方程式

フォトニック結晶における電磁波の振る舞いは、Maxwell 方程式によって記述される。Maxwell 方程式は以下のように表される。

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{2.1}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} + \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} \tag{2.2}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho \tag{2.3}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \tag{2.4}$$

今回は、自由電荷や電流のない均一な誘電物質の混合誘電媒体を考えるため、$\rho = 0$、$\boldsymbol{j} = 0$ となる。また、低損失の誘電体において、$\boldsymbol{D} = \epsilon(r)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$、透過率 $\mu = 1$ とみなすことで $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \mu\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ となる。

一般に、$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{H}$ は時間空間における複雑な関数であるが、Maxwell 方程式は線形であることから、$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{H}$ を時間と空間の関数に分離することができる。すなわち、$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t}$、$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t}$ とすることができ、Maxwell 方程式は以下のように表される。

$$\nabla \cdot \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2.5}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2.6}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\frac{i\omega}{c}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) \tag{2.7}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = \frac{i\omega}{c}\epsilon(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) \tag{2.8}$$

式 (2.7) と式 (2.8) より $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ を消去して、$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ についての式に整理すると以下のマスター方程式を得ることができる。

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{e})} \nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) \tag{2.9}$$

式 (2.9) を固有値問題とするために、左辺の $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ に作用する演算子 $\hat{\Theta}$ を定義する。演算子 $\hat{\Theta}$ は回転を取り、$\epsilon(\boldsymbol{r})$ で割って再度回転を取る微分演算子である。

次に、2 つのベクトル場 $\boldsymbol{F}$ と $\boldsymbol{G}$ について内積を以下のように定義する。

$$(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{G}) = \int d\boldsymbol{r} \boldsymbol{F}^*(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}) \tag{2.10}$$

このとき、演算子 $\hat{\Theta}$ は、任意のベクトル場 $\boldsymbol{F}, \boldsymbol{G}$ に対して次の内積関係が成立する。

$$(\boldsymbol{F}, \hat{\Theta}\boldsymbol{G}) = (\hat{\Theta}\boldsymbol{F}, \boldsymbol{G}) \tag{2.11}$$

式 (2.11) は、演算子 $\hat{\Theta}$ がエルミート演算子であることを示しており、これはマスター方程式 (2.9) を解くときに得られる固有値が実数になりうことや固有値が異なる固有関数は互いに直行することなど、量子力学のシュレディンガー方程式と類似している。

マスター方程式 (2.9) に Bloch の定理を適用すると、マスター方程式の解は次のように表される。

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}) \tag{2.12}$$

ここで、$\boldsymbol{k}$ はブロッホ波ベクトル、$\boldsymbol{R}$ は格子ベクトルである。

2.2 平面波展開法

第 3 章

本論

3.1　手法

3.2　結果

3.3　考察

第 4 章

結論

参考文献

[1] E.Yablonovitch, Phys.Rev.Lett.58, 2059(1987)

[2] John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, and Robert D. Meade, Photonic Crystals Molding the Flow of Light, PRINCETON, (1995).

[3] Massachusetts Institute of Technology, MPB Documentation, https://mpb.readthedocs.io/en/latest/, (参照 2022-01-28)

[4] Steven G.Johnson and J.D.Joannopoulos, Block-iterative frequency-domain methods for Maxwellś equation in a planewave basis, OPTICS EXPRESS, Vol.8 No.3,173(2000)

[5] David J.Griffiths, Introduction to Electrodynamics