光子晶体导论

叶卫民　著

科学出版社
www.sciencep.com

光子晶体导论

叶卫民　著

科 学 出 版 社
北 京

内 容 简 介

本书在介绍光子晶体基本概念、内涵和发展历程的基础上, 首先, 引入有限群及其表示理论, 讨论光子晶体结构及其本征电磁场的分类; 利用基于周期 Green 函数和散射矩阵的电磁散射理论, 建立无限和有限周期系统本征模式和传输特性的频域计算方法; 并应用它们研究光子晶体不同类型模式禁带的物理性质和光子晶体材料不同于均匀介质的奇异光传输特性. 其次, 重点分析光子晶体线缺陷光波导、点缺陷光学谐振腔和线缺陷与点缺陷耦合系统的基本物理性质及其在纳米光子器件中的应用. 最后, 将光子晶体结构拓展到金属, 介绍金属纳米结构的光学性质.

作为光子晶体研究的入门书籍, 本书可供高等院校物理和光学工程专业的本科生和相关专业的研究生阅读, 也可供从事光子晶体理论和应用研究的科技人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

光子晶体导论/叶卫民著. —北京：科学出版社, 2010
ISBN 978-7-03-029383-1
Ⅰ. ①光… Ⅱ. ①叶… Ⅲ. ①光子晶体-研究 Ⅳ. ① O7
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010) 第 211554 号

责任编辑: 刘凤娟 / 责任校对: 刘亚琦
责任印制: 钱玉芬 / 封面设计: 王 浩

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com

印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2010 年 11 月第 一 版 开本: B5 (720 × 1000)
2010 年 11 月第一次印刷 印张: 16 1/2
印数: 1—2 000 字数: 323 000

定价: 48.00 元
(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　　言

光子晶体是一个备受瞩目的新兴光学理论、材料和器件研究方向. 在短短二十余年的发展历史中, 光子晶体理论研究揭示了一系列突破传统认识的新光学现象和原理, 开辟了亚波长结构光学 (纳米光子学) 这一新的研究领域. 光子晶体材料研究发现的奇异光传输特性, 则为性能优越的人工超常介质的构建和发展提供了一个可行方向; 尤其是光子晶体器件的研究, 为小型化、低能耗、可高密度集成的新型光器件设计提供了一个有效的平台和思路, 让大规模集成光路和光电混合单片集成成为可能. 光子晶体的出现对光学、光信息技术和光电子产业的发展意义重大.

光子晶体目前还是一个活跃的研究方向, 新的研究成果不断见诸报道. 因此, 本书定位为基础性入门书籍. 全书围绕光子晶体利用亚波长结构控制介质宏观电磁特性和空间局域光的核心思想展开, 重点分析光子晶体的基本现象、研究方法和材料、器件原理. 其中, 第 1 章介绍光子晶体的基本概念、内涵和发展历程. 第 2 章是光子晶体的物理基础, 主要包括利用有限群及其表示理论, 分析光子晶体结构及其本征电磁场的分类; 利用模式耦合理论, 分析光子晶体禁带的形成机制. 第 3 章介绍基于点源与周期 Green 函数的电磁散射理论和处理分层均匀系统的散射矩阵理论, 给出无限和有限周期系统本征模式和传输特性的频域计算方法. 第 4 章研究光子晶体不同类型模式禁带的物理性质和光子晶体材料不同于均匀介质的奇异光传输特性, 并利用第 3 章介绍的频域算法对光子晶体模式禁带和光传输谱进行数值研究. 第 5 章主要讨论光子晶体线缺陷光波导、点缺陷光学谐振腔和线缺陷与点缺陷耦合系统的基本物理性质及其在纳米光子器件中的应用. 在这章中, 为分析光子晶体环形腔的转动效应, 将详细介绍非惯性下的 Maxwell 方程组. 最后, 第 6 章将光子晶体结构由半导体拓展到金属, 在介绍金属光学性质的基础上, 从均匀金属平板、平板一维金属光子晶体和二维金属光子晶体结构的模式、传输谱等方面介绍金属纳米结构的光学性质.

在本书撰写过程中, 课题组温熙森教授、曾淳教授、袁晓东教授和曾明教授等给予作者热情的鼓励和帮助; 课题组已毕业和在读的研究生朱志宏、徐威、罗章、张检发、郭楚才和刘肯为本书做了大量的数值计算工作, 在此一并向他们表示感谢!

特别感谢 “国防科学与技术大学光电科学与工程学院课程建设岗位” 项目支持

作者开展本书的撰写工作.

由于作者水平有限, 书中难免出现疏漏及不妥之处, 诚恳希望读者批评指正.

叶卫民

2010 年 5 月于长沙

目　　录

第 1 章　绪　　论

以电子为信息载体, 半导体物理、材料、器件和集成电路为基础的电子信息技术及产业的发展和繁荣, 在当今社会发展和科技进步中占据重要地位, 各类电子产品出现在我们生活的方方面面. 其中作为电子信息技术核心的半导体集成电路的发展最为引人注目, 这不仅体现在用于不同新型功能器件专用电路的不断涌现, 更突出地反映在以微处理器和存储器为代表的通用电路性能的提高. 尤其是随着作为现代电子信息技术基础的微电子技术和数字化信息技术的进步和广泛应用, 小型化、模块化、芯片化成为半导体电子器件发展的主要方向. 芯片的集成度不断提高, 使得通用电路处理和存储电子信息的性能极大增强. 然而, 伴随着半导体集成电路技术日益逼近它的极限, 金属互联和电子信息的带宽限制已成为制约计算机和电子信息处理系统整体性能提升的 “瓶颈”.

鉴于单纯微电子技术在信息领域显示的不足, 将光信息延伸到电子领域已成为当前信息技术发展的一个主要方向, 因为光信号具有宽带、高传输率和抗干扰强等优势. 如果能像集成电路一样集成光路, 那么以光为信息载体, 用光互联取代金属互联, 用集成的光子器件 (部分) 取代电子器件, 实现大规模光集成或光电混合集成, 将使微处理器、存储器和计算机系统的信息处理、存储和传输性能大幅度提高. 光子晶体物理、材料及器件的研究与应用为大规模集成光路的实现提供了一条可能的途径, 对信息技术和产业的发展意义重大.

1.1　光子晶体的基本概念和内涵

光子晶体 (photonic crystals) 是一类介电常数 (或张量) 周期分布的非均匀人工电磁介质 [1,2], 其中介质周期分布的独立方向个数定义为光子晶体的维数. 根据光子晶体维数 d 和其结构空间维数 N 的不同, 可将光子晶体分为两类：N 等于 d 的无限周期结构和 N 小于 d 的有限周期结构. d 维光子晶体对应 N 等于 d 的无限周期结构; 而 $(N-d)$ 等于 1 的有限周期结构光子晶体, 因等效于介电常数 d 维周期分布的非均匀介质板, 被称为 d 维光子晶体板. 特别是在平板介质波导上制备周期结构得到的 d 维光子晶体板, 由于介质分布沿平板的法向分层均匀, 被称为平板 d 维光子晶体 (d dimension photonic crystal slabs).

与处于晶体周期势场中的电子类似, 在光子晶体中, 真空波长与介质分布周期同量级的电磁波 (如果介质对它不吸收) 受到周期排列非均匀介质相对较强的散射

(称为 Bragg 散射), 这使得光子晶体对该波长范围的电磁波呈现类似半导体电子能带的电磁波能带结构和不同于均匀介质的电磁特性. 因此, 作为人工电磁材料及器件工作的频率范围是光子晶体设计的主要依据. 具体到结构几何参数, 光子晶体介电常数分布的周期通常与工作频段中心的真空波长同一量级, 而周期排列单元则是几何尺度小于该中心真空波长的亚波长结构. 至于物理参数, 在保证介质对工作频段光的吸收相对较小 (低损) 和设计结构可制备的基础上, 应尽可能选择介电常数差异较大的不同介质构成光子晶体. 因为介质介电常数相差较大时, 单个周期单元内非均匀介质对电磁波的强散射可能与 Bragg 散射相互耦合, 使得光子晶体出现类似于半导体禁带的电磁波带隙 (bandgap, 也称禁带). 禁带是光子晶体的基本物理特性和应用基础. 在频域, 电磁场态密度 (即单位频率间隔中的本征模式数) 为零的频率区间定义为光子晶体的完全禁带, 具有完全禁带且由禁带频率范围内无损介质构成的光子晶体通常称为人工带隙材料; 仅特定模式电磁场态密度为零的频率区间定义为光子晶体的模式禁带; 禁带以外的频率范围则称为光子晶体的通带. 由于频率处于完全或模式禁带的电磁波不能在光子晶体中传播, 而频率处于通带的电磁波在光子晶体中的传播受到非均匀介质 Bragg 散射的控制, 因此, 通过选择亚波长周期结构的几何和物理参数, 设计完全禁带或模式禁带, 光子晶体能够简单而有效地调控介质的宏观电磁特性, 包括选择其中传播电磁波的频带、模式和传输路径, 控制其中介质的吸收或辐射等特性.

在通带频率范围内, 与均匀介质的宏观电磁特性完全由其介电张量和磁导率张量描述不同, 无限周期结构光子晶体的宏观电磁特性主要通过频域态密度分布、波矢空间等频线或面的结构、群速度 (等于能量速度) 和群速度色散 (包括群速度随频率与传播方向的变化) 等来描述; 有限周期结构光子晶体板的宏观电磁特性与均匀介质板类似, 对限制在结构周期方向传播的电磁波, 表现为相应无限周期结构光子晶体的电磁特性; 对垂直于结构周期方向传播的电磁波, 则表现为介质板结构的电磁散射特性. 类比均匀介质, 由宏观电磁特性反演得到的光子晶体群速度折射率或等效介电张量与磁导率张量, 在真空波长与介质分布周期同量级的波段, 可以达到现有均匀介质无法达到的数值和随频率或方向的变化率. 因此, 工作在通带的光子晶体为新电磁现象的发现和新型人工电磁材料、介质波导以及薄膜光学器件的研究和发展开辟了一条有效途径.

在完全禁带或模式禁带频率范围内, 破坏介质分布周期性的缺陷结构是光子晶体研究和应用的一个核心内容. 因为如果类比半导体缺陷结构和电子缺陷能级的概念, 定义光子晶体的缺陷模 (频率处于完全禁带或模式禁带范围内的缺陷结构本征电磁模式) 和缺陷带 (所有缺陷模覆盖的禁带频率范围), 那么频率处于缺陷带的电磁波能够被长时间 (低损) 地强局域在光子晶体的缺陷结构中. 因此, 光子晶体的点缺陷 (孤立、不连通的缺陷结构) 能够构建固有频率为点缺陷本征频率的高品质

因子 (高 Q) 谐振腔, 被称为光子晶体微腔; 光子晶体的线缺陷 (一维连通的缺陷结构) 在缺陷带能够实现低损波导的功能, 被称为光子晶体波导. 它们的出现发展了频域禁带约束电磁波的物理机制, 突破了单纯依靠介质差异约束波的诸多限制, 为控制波长相对较短的光波提供了不同的思路. 与采用折射率差约束或导引光的光纤和介质光波导相比, 光子晶体波导不仅能将光约束在相对低折射率的介质或空气中传输, 而且能够导引光高传输率地拐 90° 弯 [3]. 这为像集成电路中铜互联控制电流一样, 控制光的传输提供了强大支持. 同时, 类似集成光波导、谐振腔和它们组合构成光器件的方式, 光子晶体点缺陷、线缺陷和它们组合形成的光子晶体缺陷结构能够实现一定的光子器件功能, 被称为光子晶体器件. 由于通过禁带和亚波长结构的设计, 光子晶体缺陷结构能够有效控制其空间局域光的频域和空域性质 (如模式、频率与带宽选择、传输控制和模场设计等), 因此, 与已有的集成光子器件比较, 光子晶体器件具有尺度小、设计灵活、功能强、功耗低等诸多结构和性能优势. 尤其是被强局域的缺陷模光场具有小的有效模体积或面积和低的损耗, 即使低功率的输入光也可能在缺陷附近形成相对较强的电场. 如此, 将光子晶体缺陷结构和介质的物理性质相结合, 含增益介质或利用介质非线性效应工作的光子晶体器件 (如发光器件、光接收器件、光开关、光调制器、波长变换器等) 可在低输入光或电功率下工作, 拥有易调控、低功率、低功耗和响应快速等内在性能优势. 这些固有的结构和性能优势, 使得光子晶体有源和无源光器件有望在同一个光子晶体结构框架下, 通过低损光子晶体波导的互联集成为功能强大的新型光器件或模块, 这为大规模集成光路的研发提供了一个可能的理论和技术平台.

针对信息技术和光电子产业发展的需要, 光子晶体理论和应用研究的重点聚焦于工作在光通信波段 (以真空波长 1.3μm 和 1.5μm 带为主的近红外波段) 的材料和器件. 由于在这个高频波段, 介质的磁导率均近似为真空磁导率, 而光子晶体及其缺陷结构的特征尺度为 100nm 量级, 远大于常温下电子的德布罗意波长 (de Broglie wavelength, 1nm 量级). 因此, 在理论方面, 宏观的 Maxwell 方程组是研究光子晶体及其缺陷结构的出发点, 其中分块均匀介质的介电常数 (或张量) 与各自的体材料相同, 相对磁导率通常取为 1. 成熟的固体能带理论及其研究方法和求解非均匀介质电磁场问题的电磁散射理论以及时域有限差分 (FDTD) 和频域有限元 (FEM) 等数值计算方法, 为光子晶体材料及器件的结构设计和性能优化提供了有效工具. 在应用研究方面, 光子晶体作为一类人工介质, 利用现有的介质和加工工艺, 制备出符合材料和器件设计要求的亚波长结构是一个最基本的问题. 考虑到宽禁带要求介质相对大的介电常数差异和在红外段低损, 硅 (Si) 和III-V 化合物半导体 (如磷化铟 InP、砷化镓 GaAs) 成为制备光子晶体主要选择的介质. 加之, 由标准的微电子工艺中电子束直写、薄膜生长和选择性干法与湿法刻蚀构成的半导体纳米制备技术, 不仅能够满足光子晶体材料和器件制备的要求, 解决半导体基光子

晶体器件的可行性问题, 而且与现有的微电子器件制造工艺相容, 为光子器件与微电子器件的光–电单片集成和全光器件的单片集成提供了强大的支撑. 目前, 三维光子晶体及其缺陷结构的制备技术不够成熟, 光子晶体器件研究主要考虑平板二维光子晶体结构. 由于没有完全禁带和制备误差的存在, 垂直平板方向的辐射损耗是限制平板二维光子晶体器件应用的一个主要因素.

从以上有关光子晶体的结构、禁带、通带与缺陷带物理性质和光子晶体理论及实验研究方法等方面的介绍可知, 光子晶体不是简单地研究一类材料或器件, 而是研究亚波长周期及其缺陷结构 (统称为亚波长结构或纳米结构) 光学及其应用, 主要包括纳米结构对介质宏观电磁性质和光的辐射、传输、空间分布等空域与频域性质的控制机制, 新型功能材料、低能耗纳米光子器件和纳米集成光路的结构设计, 以及纳米光子器件的制备、测试和光电与全光器件的单片集成技术等内容, 为光电器件的模块化和大规模集成提供可靠的理论和技术基础. 它的出现为电磁场理论、半导体物理、集成光学、微电子技术、光电子学和光信息技术 (光传感、光存储、光处理和光计算等) 等诸多学科和技术的研究与应用开辟了新的领域, 提供了新的发展方向和机遇, 具有重大的理论和应用价值.

1.2 光子晶体研究的进展

光子晶体的提出源于 1987 年, E. Yablonovitch 利用光子晶体完全禁带抑制其中介质的自发辐射 [4] 和 S. John 通过在存在禁带的光子晶体中引入随机介电常数变化, 实现光场强空间局域 [5] 的思想. 这两项开创性工作揭示了亚波长光子晶体结构的两个基本性质：周期结构控制介质的宏观性质; 缺陷结构局域光 (或禁带导光). 1990 年, K. M. Ho 等 [6] 提出了第一个具有完全禁带的三维光子晶体结构, 并通过数值计算证明这种由空气中介质球或介质中空气球构成的金刚石结构光子晶体存在完全禁带. 由于金刚石结构不易人工制备, 1991 年, E. Yablonovitch 等 [7] 采用一种特殊的面心立方结构 (被称为 Yablonovitch 结构), 第一次制备并实验验证了具有微波频段完全禁带的三维光子晶体的存在. 根据 Maxwell 方程组的标度不变性, 在不考虑介质色散效应的情况下, 将微波段 (设中心波长 1cm) 光子晶体结构的尺度缩小 10000 倍得到的光子晶体结构在近红外段 (中心波长 1μm) 的光学性质与原结构在微波段的电磁特性相同. 因此, 放大结构尺寸制备微波段光子晶体 (通常是二维), 再通过微波测试与表征, 分析和验证光子晶体的禁带、光局域和光传输等频域和空域特性, 是早期光子晶体实验研究的一个主要方法. 这期间光子晶体的理论研究主要围绕宽禁带光子晶体结构的设计、光子晶体禁带及缺陷结构的基本性质和相应的数值研究方法展开.

1996 年, T. F. Krauss 等 [8] 采用微电子工艺中用于纳米图形产生的电子束直

写技术和图形转移的半导体干法刻蚀技术, 成功制备了第一个工作在近红外波段的半导体平板二维光子晶体. 这是光子晶体发展中的一个里程碑, 它开创了与微电子制造工艺相容的光子晶体结构及器件的半导体纳米制备技术, 奠定了平板光子晶体结构半导体光子器件研究及应用的基础. 此后, 微电子技术中的薄膜生长 (如溅射沉积、MBE、LPCVD、MOCVD 等)、半导体刻蚀 (RIE、ICP、ECR、CAIBE、FIB 等) 以及晶片键合 (fusion) 等技术被逐渐应用于光子晶体的制备.

在具有完全禁带的三维光子晶体研究方面, 1998 年 S. Y. Lin 等 [9] 利用标准的微电子工艺, 制备了禁带真空波长为 10~14.5μm 的木堆结构 (woodpile) 硅基三维光子晶体; 2000 年, S. Noda 等 [10] 在将晶片键合技术引入半导体木堆结构的纳米制备技术中, 成功制备了完全禁带处在光通信波段的 GaAs 基三维光子晶体; 同年, A. Blanco 等 [11] 采用化学自组装与反填充技术, 制备了完全禁带中心波长为 1.46μm 的反蛋白石 (inverse opal) 结构硅基三维光子晶体. 2002 年 J. G. Fleming 等 [12] 在制备硅基三维光子晶体 [9] 的模板中去除硅, 反填充钨, 制备了禁带真空波长为 8~20μm 的木堆结构全金属三维光子晶体. 2004 年, P. Lodahl 等 [13] 将 CdSe 量子点植入反蛋白石结构的 TiO_2 基三维光子晶体中, 并通过测量量子点荧光在光子晶体中随时间的衰减曲线, 证明了光子晶体禁带对量子点自发辐射的抑制作用 [4]. 同年, S. Ogawa 等 [14] 将 GaInAsP 量子阱引入木堆结构的三维光子晶体中, 并在 GaInAsP 量子阱层制作点缺陷, 同样通过荧光谱测试, 证明了光子晶体禁带和微腔对量子阱自发辐射的控制作用. 尽管木堆和反蛋白石结构三维光子晶体的制备和其对介质自发辐射控制的研究取得了可喜的进展, 但在三维光子晶体缺陷结构制备中, 半导体纳米制备技术存在由结构层数增多带来的制备效率和定位精度等问题, 化学自组装技术则有缺陷控制与准确定位等问题, 这极大限制了三维光子晶体器件的研究和应用.

与三维光子晶体相比, 直接利用半导体纳米制备技术, 刻蚀高介电常数介质平板波导制备的平板二维光子晶体 [8], 不仅具有结构制作和缺陷控制难度低的优势, 而且是平面 (二维) 集成光路的有效平台. 因为不需要三维光子晶体的完全禁带, 仅依靠垂直平板方向介质介电常数差的约束和平板面内二维周期结构导模 (限制在平板内传播的模式) 禁带的约束, 平板二维光子晶体缺陷结构能将频率处于其缺陷带的导模光场三维局域在其中. 这种光局域特性使得平板二维光子晶体波导能够将导模光场约束在平板内无损传输; 而平板二维光子晶体微腔通过缺陷结构的设计, 降低垂直平板方向的泄漏损耗, 可以同时实现高品质因子 (Q 值) 和小的模体积, 两者均能满足集成光器件的要求. 随着基于标准微电子工艺的半导体纳米结构制备技术和工艺的逐渐成熟, 工作在通信波段的 Si 和Ⅲ-Ⅴ化合物半导体 (如 InP、GaAs) 基平板二维光子晶体成为光子晶体理论和器件研究的重点.

Si 基平板二维光子晶体是最被关注的光子晶体结构, 因为价格相对低廉的硅

是当今微电子产业的基石, 电子信息领域应用的微处理芯片、存储芯片和专用的微电子芯片主要采用硅基集成电路, 而且硅基二维光子晶体器件的纳米制备工艺与制备硅基集成电路的标准 CMOS 工艺相容. 因此, 硅基平板二维光子晶体器件具有能与现有的微电子器件实现硅基单片光电混合集成的天然优势, 是将光信息技术引入电子信息系统的一个有效途径. 由衬底硅、顶层硅和二氧化硅中间层组成的 SOI (silicon on insulator) 是制备硅基平板二维光子晶体器件和硅光子器件的主要材料. 在顶层硅中引入的横向二维亚波长周期结构, 使得硅基平板二维光子晶体具有不同于 SOI 平板介质波导的宏观电磁性质. 具体表现在：对频率处于导模通带、在平板内传播的导模, Si 基平板二维光子晶体与二维光子晶体类似, 能够呈现出均匀介质波导无法实现的超透镜 (负折射)[15,16]、超棱镜 [17,18](超色散) 和超准直 [19,20] 等光传输现象; 而对垂直于平板传播的光, 平板二维光子晶体可以通过设计泄漏模, 有效地控制光的传输 (频率选择、偏振选择、传输率等), 拓展了薄膜光学的研究领域.

在集成光器件方面, Si 基平板二维光子晶体微腔、波导及其组合结构不仅设计灵活、易于制备和集成, 而且具有很强的控制光能力和卓越的光学性能. 在被动光器件方面, 2000 年, S. Noda 等 [21] 采用宽带平板二维光子晶体波导与窄带微腔组合和垂直面提取微腔中光的方式, 制作了平面集成的通道上下载滤波器. 此后, 频率选择性好和局域光能力强的高 Q 值、小模体积微腔成为一个重点研究内容. 2005 年 B. S. Song 等 [22] 制备出 Q 值约为 6×10^5(实测结果)、有效模体积为 $1.2(\lambda_0/n)^3$ (数值计算结果) 的双异质结构微腔; 2006 年 E. Kuramochi 等 [23] 提出的线缺陷宽度定域调整型微腔, Q 值达到 8×10^5(实测结果, 数值计算结果：Q 值 7×10^7、有效模体积 $2.5(\lambda_0/n)^3$). 2008 年 M. Notomi 等 [24] 采用 N (>100) 个硅基平板二维光子晶体高 Q 微腔耦合形成的耦合腔波导, 成功地将在其中的光脉冲传输速度降到 0.01 c (c 为真空光速) 以下. 在波导研究方面, 由于室温下工作的慢光波导在减小集成光路尺寸、全光缓存器和非线性光学等方面具有广阔的应用前景, 2000 年以后低群速度色散的宽带慢光波导一直是平板二维光子晶体波导研究的一个主要内容. 目前已能将波导中光速降到真空光速的几十至几百分之一 [25]. 近年来, 可调控的光器件逐步成为硅基平板二维光子晶体的一个重点研究方向. 其中, 以光为驱动源、利用硅的非线性光学效应工作的器件研究和应用得最多. 因为即使在弱光驱动下, 强局域在平板二维光子晶体小模体积的高 Q 微腔和慢光波导中的光场也可能达到较大的光强, 这弥补了硅非线性光学系数相对较小的不足. 从 2005 年起, 许多研究小组利用硅双光子吸收引起的自由载流子效应, 改变硅基平板二维光子晶体微腔谐振频率的方法, 在不同的光子晶体波导和微腔耦合结构中, 成功实现了光学双稳态和快速的全光开关 [26]; 2007 年 Y. Tanaka 等 [27] 同样利用硅的自由载流子效应, 改变微腔与侧面波导的耦合, 实现对光子晶体微腔 Q 值的动态控制; 2008 年 J. F. McMillan 等 [28]

在慢光波导中观察到硅的自发 Raman 散射被增强. 除光驱动外, 热源、微机电、近场探针和微流等也被用于调控硅基平板二维光子晶体波导和微腔. 2005 年, Y. A. Vlasov 等 [29] 采用微小电流对波导进行加热, 从而改变硅折射率的方法, 实现了对光子晶体波导中光速的主动控制, 并成功地将波导中光速降低到 $c/300$ 以下. 2006 年, S. Iwamoto 等 [30] 将平板二维光子晶体与 MEMS 集成, 通过电驱动位于平板光子晶体上方的介质板, 实现了对光子晶体波导传输率的控制. 2007 年 L. Lalouat 等 [31] 使用亚波长近场探针, 实现了对硅条波导上一维光子晶体微腔的频率微调.

由于硅是间接带隙的半导体, 直接通过导带电子–价带空穴复合发光的效率非常低, 光子晶体的发光器件, 尤其是激光器, 主要采用Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体基平板二维光子晶体器件. 其中 GaAs 基平板二维光子晶体主要用于 0.8μm 左右短波带的光源; InP 基平板二维光子晶体主要用于 1.55μm 的光通信波段光源. 根据增益层结构的不同, 垂直面发射的平板二维光子晶体激光器, 可以简单地分为三类. 第一类是增益层均匀、仅用平板二维光子晶体代替 Bragg 反射镜 (多层薄膜) 的垂直面发射激光器. 利用亚波长周期结构可以有效地控制平板二维光子晶体透射或反射光的特性, 这类激光器不仅能够得到高的激光提取效率 [32], 单波长输出, 而且可以设计输出的激光光束. 2001 年和 2005 年 S. Noda 小组 [33] 分别通过椭圆孔周期结构和分块、平移的周期结构实现对输出激光极化和束斑的选择. 第二类是基于增益介质平板二维光子晶体的带边激光器 [34], 其物理基础是周期结构对平板二维光子晶体态密度或其中增益介质自发辐射的控制. 与三维光子晶体禁带内自发辐射被完全抑制 [4] 不同, 在增益介质平板二维光子晶体中, 频率处于导模禁带内的自发辐射, 因不能在平板内传播, 具有相对较长的荧光寿命和增强的垂直面方向辐射; 频率处于带边 (导模禁带的频率上、下限) 的自发辐射则因光场具有相对高的态密度被增强, 而且辐射场在平板内为驻波, 这使得带边激光器成为不需要谐振腔的低阈值激光器. 第三类是基于增益介质平板二维光子晶体的微腔激光器. 由于平板二维光子晶体微腔同时具备的高 Q 值和小模体积, 增强了腔中增益介质的自发辐射率, 光子晶体微腔激光器具有低阈值、小体积、可平面集成等诸多优势, 是光子晶体激光器研究的重点. 在 InP 衬底上, 以 InGaAsP 量子阱为增益介质, 1999 年, O. Painter 等 [35] 制备了第一个光泵浦的光子晶体微腔激光器; 2004 年, H. G. Park 等 [36] 巧妙地解决了载流子电注入问题, 做出了第一个电激励光子晶体微腔激光器. 考虑到平板二维光子晶体的空气孔增大了量子阱中载流子表面非辐射复合的概率, 不利于激光器阈值的降低, 用量子点层取代量子阱做增益介质成为低阈值光子晶体激光器发展的一个方向. 尤其是含单个量子点的平板二维光子晶体微腔, 因为在高 Q 值且小模体积微腔中, 强耦合的单个量子点激子与腔中长寿命的光子可能发生量子关联. 2004 年, T. Yoshie 等 [37] 测量含单层量子点的平板二维光子晶体微腔荧光谱随温度的变化, 得到呈现真空 Rabi 分裂的谱线; 2007 年, K. Hennessy

等 [38] 成功地将一个量子点植入平板二维光子晶体微腔中电场最强处, 测量该微腔随腔与量子点激子频率失谐变化的荧光谱, 同样观察到真空 Rabi 分裂的现象. 这一结果初步证明了植入单个量子点的高 Q 平板光子晶体微腔中光子与量子点激子间量子关联的存在, 光子晶体微腔为全固态宏观量子系统和腔量子电动力学 (CQED) 系统的构建提供了一个可能平台.

在 Si 和Ⅲ-Ⅴ化合物半导体平板之外, 金属平板微纳米结构和光子晶体光纤是光子晶体研究拓展的两个重要领域. 由于在光通信波段金属是负介电常数 (实部)、有损、强色散的介质, 不支持体波在其中传输, 因此, 金属平板微纳米结构可以将光三维约束在它的表面传播 [39]. 如果能降低或补偿金属的吸收损耗, 厚度几十纳米的金属平板及其微纳米结构将成为纳米光子器件和高密度平面集成光路的一个有效平台. 对垂直于平板传播的光, 厚度达到 200nm 的金属平板是完全不透明的, 但是, 1998 年 T. W. Ebbsen 等 [40] 研究发现, 刻蚀了亚波长周期阵列圆孔的不透明金属平板, 在 10 倍于孔径的长波段出现透射增强的奇异光传输现象. 此后, 金属平板一维和二维光子晶体的光传输特性被广泛关注. 进一步的研究显示, 与半导体平板光子晶体类似, 通过周期结构的设计和几何参数选择 (如纳米孔的形状、空间取向、尺度等), 金属平板光子晶体可以有效地控制传输光的频率、透射率和极化等, 在光子器件、化学和生物传感领域具有较大的应用价值 [41]. 此外在控制介质宏观电磁性质方面, 2008 年 J. Valentine 等 [42] 利用刻蚀周期矩形孔的多层金属–介质–金属渔网结构, 构建了第一个具有负折射率的三维光学材料. 至于光子晶体光纤, 按结构定义, 二维光子晶体光纤是二维二氧化硅光子晶体的点缺陷结构, 因而又被称为微结构光纤. 根据点缺陷中心 (纤芯) 介质的不同, 可将它分为两类：纤芯为 SiO_2 的实心光子晶体光纤和纤芯为空气的空心光子晶体光纤. 它们被关注源于 1997 年 T. A. Birks 等 [43] 发现实心光子晶体光纤具有无截止 (endlessly) 的单模特性; 1999 年 R. F. Cregan 等 [44] 成功做出第一条在空气中传光的空心光子晶体光纤. 此后, 利用亚波长点缺陷结构可以灵活、有效地控制光纤的横向场分布, 进而控制其中光传输特性的机制, 各类性能优越 (如超大模场、保偏、零色散、强非线性等) 的光子晶体光纤被研发出来, 并逐步应用到光通信和光传感等领域.

在光子晶体器件研究和发展的同时, 基于光子纳米线 (photonic nanowire, 横向尺度为亚微米)[45] 结构的光子器件作为平面集成光路的一个发展方向也被关注和深入研究, 尤其是制备在 SOI 上的硅光子纳米线. 因为硅与二氧化硅中间层和空气覆盖层之间存在较大的折射率差, 被强约束在顶层硅纳米线中传输的光场截面积通常能小到 $0.1\mu m^2$ 量级, 这使得硅光子纳米线作为波导具有较小的传输和弯曲损耗; 而由硅光子纳米线围成的环形腔则能够达到高的 Q 值和相对小的体积, 且易于利用非线性效应控制其光学特性. 因此, 利用标准的 CMOS 工艺, 在 SOI 上可以用硅光子纳米线波导、环形腔及其组合, 构建包括全光缓存器 [45]、滤波器和全光开

关 [46]、调制器等可单片集成的光电器件. 与平板二维光子晶体器件比较, 基于硅光子纳米线结构器件的主要优势是结构简单、损耗低, 离实际应用较近, 但明显不足是尺度较大, 集成度低. 由于这两类器件均采用 100nm 尺度的结构控制光, 而且制备工艺相同, 已将它们统称为纳米光子 (nanophotonics) 器件进行研究.

参 考 文 献

[1] Joannopoulos J D, Villeneuve P R, Fan S. Photonic crystals: putting a new twist on light. Nature, 1997, 386: 143–149.

[2] Joannopoulos J D, Meade R D, Winn J N. Photonic Crystal: Molding the Flow of Light. Princeton: Princeton University Press, 1995: 3–5.

[3] Mekis A, Chen J C, Kurland I, et al. Hight transmission through sharp bends in photonic crystal waveguide. Phys. Rev. Lett., 1996, 77: 3787–3790.

[4] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. Phys. Rev. Lett., 1987, 58(20): 2059–2062.

[5] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. Phys. Rev. Lett., 1987, 58(23): 2486–2489.

[6] Ho K M, Chan C T, Soukoulis C M. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. Phys. Rev. Lett., 1990, 65: 3152–3155.

[7] Yablonovitch E, Gmitter T J, Leung K M. Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing nonspherical atoms. Phys. Rev. Lett., 1991, 67: 2295–2298.

[8] Krauss T F, Rue D L R M, Brand S. Two dimension photonic-bandgap structure operating at near infrared wavelengths. Nature, 1996, 383: 699–702.

[9] Lin S Y, Fleming J G, Hetherington D L, et al. A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths. Nature, 1998, 394: 251–253.

[10] Noda S, Tomoda K, Yamamoto N, et al. Full three-dimensional photonic bandgap crystals at near-infrared wavelengths. Science, 2000, 289: 604–606.

[11] Blanco A, et al. Large-scale synthesis of a silicon photonic crystal with a complete three dimensional bandgap near 1.5 micrometres, Nature, 2000, 405: 437–440.

[12] Fleming J G, Lin S Y, Ei-kady I, et al. All-metallic three-dimensional photonic crystals with a large infrared bandgap. Nature, 2002, 417: 52–55.

[13] Lodahl P, et al. Controlling the dynamics of spontaneous emission from quantum dots by photonic crystal. Nature, 2004, 430: 654–657.

[14] Ogawa S, Imada M, Yoshimoto S, et al. Control of light emission by 3D photonic crystals. Science, 2004, 305: 227–229.

[15] Notomi M. Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals: refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap. Phys. Rev. B, 2000, 62: 10696–10705.

[16] Takashi Matsumoto, Kun-Sun Eom, Toshihiko Baba. Focusing of light by negative refraction in a photonic crystal slab superlens on silicon-on-insulator substrate. Opt. Lett., 2006, 31: 2786–2788.

[17] Wu L, Karle T, Steer M, et al. Superprism phenomena in planar photonic crystals. IEEE Journ. of Quantum Elec., 2002, 38: 915–918.

[18] Kosaka H, Kawashima T, Tomita A, et al. Superprim phenomena in photonic crystals. Phys. Rev. B, 1998, 58: R10 096–R10 099.

[19] Wu L, Mazilu M, Krauss T F. Beam steering in planar photonic crystals: from superprism to supercollimator. IEEE J of Lightwave Techn., 2003, 21: 561–566.

[20] Li Zhi-yuan, Lin Lan-lan. Evaluation of lensing in photonic crystal slabs exhibiting negative refraction. Phys. Rev. B, 2003, 68: 245110.

[21] Noda S, Chutinan A, Imada M. Trapping and emission of photons by a single defect in a photonic bandgap structure. Nature, 2000, 407: 608–610.

[22] Song B S, Noda S, Asano T, et al. Ultra-high-Q photonic doubleheterostructure nanocavity. Nature Materials, 2005, 4: 207–210.

[23] Kuramochi E, Notomi M, Mitsugi S, et al. Ultrahigh-Q photonic crystal nanocavities realized by the local width modulation of a line defect. Appl. Phys. Lett., 2006, 88: 041112.

[24] Notomi M, Kuramochi E, Tanabe T. Large-scale arrays of ultrahigh-Q coupled nanocavities. Nature Photonics, 2008, 2: 741–747.

[25] Baba T. Slow light in photonic crystals. Nature Photonics, 2008, 2: 465–473.

[26] Notomi M, Tanabe T, Shinya A, et al. Nonlinear and adiabatic control of high-Q photonic crystal nanocavities. Opt. Express, 2007, 15: 17458–17481.

[27] Tanaka Y, Upham J, Nagashima T, et al. Dynamic control of the Q factor in a photonic crystal nanocavity. Nature Materials, 2007, 6: 862–865.

[28] McMillan J F, Yu M, Kwong D, et al. Observation of spontaneous Raman scattering in silicon slow-light photonic crystal waveguides. Appl. Phys. Lett., 2008, 93: 251105.

[29] Vlasov Y A, O'Boyle M, Hamann H F, et al. Active control of slow light on a chip with phtonic crystal waveguides. Nature, 2005, 438: 65–69.

[30] Iwamoto S, et al. Observation of micromechanically controlled tuning of photonic crystal line defect waveguide. Appl. Phys. Lett, 2006, 88: 011104.

[31] Lalouat L, et al. Near-field interactions between a subwavelength tip and a small volume photonic crystal nanocavity. Phys. Rev. B, 2007, 76: 041102(R).

[32] Fan S, Villeneuve P R, Joannopoulos J D, et al. Hight extraction efficiency of spontaneous emission from slab of photonic crystals. Phy. Rev. Lett., 1997, 78: 3294–3297.

[33] Noda S, Yokoyama M, Imada M, et al. Polarization mode control of two-dimensional photonic crystal laser by unit cell structure design. Science, 2001, 293: 1123–1125.

Miyai E, Sakai K, Okano T, et al. Photonics: lasers producing tailored beams. Nature, 2006, 441: 946.

[34] Kwon S H, Ryu H Y, Kim G H, et al. Photonic bandedge lasers in twodimensional square-lattice photonic crystal slabs. Appl. Phys. Lett., 2003, 83: 3870–3872.

[35] Painter O, Lee R K, Ascherer A, et al. Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser. Science, 1999, 284: 1819–1821.

[36] Park H G, Kim S H, Kwon S H, et al. Electrically driven single-cell photonic crystal laser. Science, 2004, 305:1444–1447.

[37] Yoshie T, Scherer A, Hendrickson J, et al. Vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in a photonic crystal nanocavity. Nature, 2004, 432: 200–203.

[38] Hennessy K, Badolato A, Winger M, et al. Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot–cavity system. Nature, 2007, 445: 896–899.

[39] Barnes W L, Dereux A, Ebbsen T W. Surface plasmon subwavelength optics. Nature, 2003, 424: 824–830.

[40] Ebbsen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, et al. Extraordinary optical transmission through sub-wavlength hole arrays. Nature, 1998, 391: 667–669.

[41] Genent C, Ebbsen T W. Light in tiny holes. Nature, 2007, 445: 39–46.

[42] Valentine J, Zhang S, Zentgraf T, et al. Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index. Nature, 2008, 455: 376–379.

[43] Birks T A, Knight J C, Russell P St J. Endlessly single-mode photonic crystal fiber. Optics Letters, 1997, 22: 961–963.

[44] Cregan R F, Mangan B J, Knight J C, et al. Single-mode photonic band gap guidance of light in air. Science, 1999, 285: 1537–1539.

[45] Foster M A, Turner A C, Lipson M, et al. Nonlinear optics in photonic nanowires. Opt. Express, 2008, 16: 1300–1320.

[46] Xia F N, Sekaric L, Vlasov Y. Ultracompact optical buffers on a silicon chip. Nature Photon, 2007, 1: 65–71.

第 2 章　光子晶体结构与本征场特性

作为一种介质折射率呈周期分布的人工材料, 结构的周期性是光子晶体与天然晶体的共同特征, 也是它被称为晶体的直接原因. 虽然在固体物理中晶体周期单元是原子尺度 (0.1nm 量级), 用量子理论研究周期势场中电子的德布罗意 (de Broglie) 波; 而光子晶体中周期单元尺度为 100nm 量级, 主要用 Maxwell 方程组研究周期分布散射体作用下的经典电磁波. 但是, 共有的周期结构使得这两种不同尺度和物理性质的波具有相似的空域和频域特性. 因此, 诸多固体物理中描述晶体结构和其中场的术语及研究方法被借鉴到光子晶体研究领域.

作为光子晶体研究的理论基础, 本章首先介绍晶体结构和其空间对称性; 其次讨论由晶体结构决定的晶体中场算子本征谱和本征场的普遍性质, 并将它们用于光子晶体中本征电磁场的频率和模式分类; 最后, 介绍模式耦合理论, 同时用它分析光子晶体禁带的形成机制. 为书写方便, 本章的公式均采用爱因斯坦求和规则：对重复下标求和, 省略求和号.

2.1　光子晶体结构和空间对称性

与天然晶体一样, 光子晶体的结构可分为原胞和布拉维格子 (Bravais lattice) 两部分, 其中原胞是光子晶体的最小周期单元, 它是包括一个周期中所有散射体的有限基体介质连通区域. 原胞中散射体数目、几何结构、相对位置和与基体介质电磁参数的差异决定了光子晶体中场的不同物理性质. 布拉维格子则是将晶体中相同的最小周期单元抽象为几何点得到的空间点阵, 它直接反映晶体结构的空间周期性. 因此, 它的维数被定义为晶体的维数. 布拉维格子及其空间对称性是研究光子晶体结构的基础, 因为它的空间对称性决定布拉维格子的分类和相同结构晶体中场的共同性质.

2.1.1　空间操作和对称群

空间操作和由空间对称操作构成的对称群是研究空间几何结构或物理系统对称性的基本工具.

1. 空间操作

在保持坐标系不变的情况下, 空间几何结构或物理系统作为一个整体相对坐标

系进行的纯空间变换, 称为空间操作. 由定义可知, 空间操作对坐标分量的作用是线性的, 而且保持空间任意两点间的距离不变. 因此, 在笛卡儿坐标系下, 经空间操作 $\Re$ 作用后, 坐标分量的变化可用一个线性变换描述, 其一般形式为

$$\Re \circ \boldsymbol{X} \equiv (\Re \circ \boldsymbol{X})_i \, \boldsymbol{e}_i = (\Re_{ij} x_j + t_i) \, \boldsymbol{e}_i \tag{2.1}$$

其中, 常数列 t 代表平移, 系数矩阵 $\Re$ 是实正交矩阵, 满足

$$\Re_{ij}\Re_{ik} = \delta_{jk} = \left\{ \begin{array}{ll} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{array} \right\}, \quad \det \Re = \pm 1 \tag{2.2}$$

对式 (2.1) 两边做坐标分量微分, 可得

$$\mathrm{d} \, (\Re \circ \boldsymbol{X})_i = \Re_{ij} \mathrm{d} x_j \tag{2.3}$$

式 (2.3) 表明, 系数矩阵 $\Re$ 实际是空间操作作用下坐标分量微分的变换关系. 根据矩阵 $\Re$ 行列式值的不同, 可将空间操作分为两类. 其中, 对应矩阵 $\Re$ 行列式值为 1 的空间操作称为第一类操作; 反之, 则称为第二类操作.

由于单位矢量 $\boldsymbol{e}_k$ 可用空间两个坐标矢量的差表示为

$$\boldsymbol{e}_k = (x_i + \delta_{ik}) \boldsymbol{e}_i - x_i \boldsymbol{e}_i$$

代入式 (2.1) 定义的空间操作的一般形式, 同时利用系数矩阵 $\Re$ 是实正交矩阵的性质, 可得矢量 $\boldsymbol{e}_k$ 在该空间操作下的变换关系为

$$\Re \circ \boldsymbol{e}_k = \Re_{ik} \boldsymbol{e}_i = \Re_{ki}^{-1} \boldsymbol{e}_i \tag{2.4}$$

式 (2.4) 表示在空间操作下, 单位矢量按坐标分量微分变换的逆矩阵变换.

值得注意的是空间操作与坐标变换的区别和联系. 坐标变换定义为保持几何结构或物理系统不变, 用不同坐标系进行的描述. n 维空间坐标变换的一般形式为

$$x'_i = f_i(x_1, x_2, \cdots, x_n) \tag{2.5}$$

相应坐标分量微分的变换关系为

$$\mathrm{d}x'_i = \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} \mathrm{d}x_j = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x_1, x_2, \cdots, x_n) \mathrm{d}x_j \equiv R_{ij} \mathrm{d}x_j \tag{2.6}$$

其中, 矩阵 R 是坐标变换矩阵. 按定义, 坐标变换后的基矢为

$$\boldsymbol{e}'_k \equiv \frac{\partial \boldsymbol{X}}{\partial x'_k} = \frac{\partial x_i}{\partial x'_k} \boldsymbol{e}_i = R_{ik}^{-1} \boldsymbol{e}_i \tag{2.7}$$

由坐标变换关系式 (2.6) 和 (2.7) 可得, 经空间操作 $\Re^{-1}$ ($\Re$ 的逆操作) 作用得到的新旧坐标系基矢和坐标分量微分的变换关系为

$$\boldsymbol{e}'_k \equiv \Re^{-1} \circ \boldsymbol{e}_k = \Re_{ki} \boldsymbol{e}_i, \quad \mathrm{d}x'_k = \Re_{kj} \mathrm{d}x_j \tag{2.8}$$

对比坐标分量微分的变换关系 (2.3) 式和 (2.8) 式可知空间操作与坐标变换的等效性. 具体表述为：空间操作 $\Re$ 作用前后, 几何结构或物理系统的坐标分量和场分量的变换关系, 与保持几何结构或物理系统不变, 空间操作 $\Re$ 的逆操作作用前后的坐标系中坐标分量或物理场分量的变换关系相同.

具体讨论线性变换关系的一般形式可知, 空间操作只有七种形式 [1].

(1) 旋转：用转轴 $\boldsymbol{n}$ 和转角 α 标记为 $C(\boldsymbol{n},\alpha)$. 若以转轴为第三坐标轴, 坐标矢量在 $C(\boldsymbol{n},\alpha)$ 操作下的变换关系为

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = C(\boldsymbol{n},\alpha)\circ\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

(2) 反演：常用的是以坐标原点为中心的反演, 用符号 i 标记. 坐标矢量在中心反演操作下的变换关系为

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = i\circ\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

(3) 反映：用反映平面的法线方向 $\boldsymbol{n}$ 标记为 $\sigma(\boldsymbol{n})$. 若以 $\boldsymbol{n}$ 的方向为第三坐标轴, 坐标矢量在 $\sigma(\boldsymbol{n})$ 操作下的变换关系为

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = \sigma(\boldsymbol{n})\circ\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{2.11}$$

(4) 旋转反演或旋转反映：绕一转轴转动一定角度后, 再做中心反演操作, 称为旋转反演, 用 $iC(\boldsymbol{n},\alpha)$ 表示. 旋转反映则是绕一转轴转动一定角度后, 再对以此转轴为法线的平面实施反映操作, 标记为 $S(\boldsymbol{n},\alpha)$. 由于坐标矢量在旋转反演和旋转反映操作下的变换关系满足

$$S(\boldsymbol{n},\alpha)\equiv\sigma(\boldsymbol{n})C(\boldsymbol{n},\alpha)=iC(\boldsymbol{n},\alpha+\pi) \tag{2.12}$$

因此, 旋转反演和旋转反映是同一种空间操作, 较常用的是旋转反映.

(5) 平移：对应 (2.1) 式中定义的变换系数矩阵 $\Re$ 为单位矩阵的空间操作.

(6) 滑移反映：对一平面做反映操作后, 再沿此面平移.

(7) 螺旋旋转：绕一转轴转动一定角度后, 再沿此转轴方向平移.

在这七种空间操作中, 含反演、反映的操作均为第二类操作. 由于前四种操作至少保持空间一点不变, 被称为点操作.

2. 对称群 [1~3]

群定义为一组元素的集合 $G=\{E,\cdots,g,\cdots\}$, 其中元素之间存在一种确定的

二元运算关系, 不妨称为 “乘法”, 并用通常的乘法来标记, 即 a 和 b 的二元运算记为 ab. 如果集合 G 满足下面四条性质:

(1) G 对 “乘法” 封闭: 任意两个元素 $f, g \in G$, 则 $fg = h \in G$,

(2) G 中 “乘法” 满足结合律: 任意三个元素 $f, g, h \in G$, 有 $(fg)\,h = f\,(gh)$,

(3) G 中有单位元素 E: 任意元素 $g \in G$, 有 $gE = Eg = g$,

(4) G 中存在逆元素: 任意元素 $g \in G$, 有唯一的元素 $g^{-1} \in G$, 使得 $gg^{-1} = g^{-1}g = E$,

则称集合 G 按该 “乘法” 成群.

将群中的元素按一定方式分割成无相同元素的若干子集, 再分别研究各个子集元素和子集之间的关系是研究群的一个基本方法. 按陪集和类分解是分割群的两种重要方式. 如果集合 G 的一个子集 M 也按 G 中的 “乘法” 成群, 则称其为 G 的一个子群. 群 G 中任何一个不属于 M 的元素左 (右) 乘子群 M 得到的集合, 称为 M 的一个左 (右) 陪集. 由于 M 的任意两个左 (右) 陪集之间, 左 (右) 陪集与 M 之间没有相同元素, 所以, 群可按它的一个子群和该子群的左 (右) 陪集进行分割. 如果群 G 中两个元素 f, h 满足 $f = ghg^{-1}$, $g \in G$, 则称 f, h 相互共轭. 群中相互共轭元素构成的集合称为群的一个类. 任意两个类不含相同的元素, 使得群可以按类进行分割.

群是描述空间对称性的有效数学工具. 对一个空间几何结构或物理系统, 保持其不变的空间操作, 称为它的对称操作. 由于连续的两个对称操作、对称操作的逆操作和恒等操作都是它的对称操作, 如果将 “乘法” 定义为连续操作, 则几何结构或物理系统所有对称操作的集合可以构成一个群, 称为它的空间对称群. 利用它可以对几何结构或物理系统进行分类. 具体分析七种空间操作可知, 所有的点对称操作成群, 称为点群; 第二类对称操作则不能单独成群. 点群可进一步分为两类, 只含旋转操作的称为第一类点群; 含第二类操作的点群称为第二类点群, 第一类点群是它的一个子群, 其一般形式为

$$G = G_1 \cup g_2 G_1, \quad g_2 \in G \tag{2.13}$$

其中, g_2 是第二类点群操作, G_1 是第一类点群. 考虑平移操作时, 所有平移操作成群, 称为平移群; 而由一个平移群和一个点群的全部对称操作组合而成的群, 称为简单空间群; 包括螺旋旋转和滑移反映操作的对称群, 则称为复杂空间群.

以下主要讨论相对简单的空间点群, 其中点操作具有如下运算关系:

$$i\sigma(\boldsymbol{m}) = C(\boldsymbol{m}, \pi); \sigma(\boldsymbol{m}_2)\sigma(\boldsymbol{m}_1) = \boldsymbol{C}(\boldsymbol{m}_1 \times \boldsymbol{m}_2, 2\phi(\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2))$$

ϕ 为 $\boldsymbol{m}_1$ 和 $\boldsymbol{m}_2$ 的夹角

$$ig = gi, \quad g\sigma(\boldsymbol{n})g^{-1} = \sigma(g\boldsymbol{n}), \quad gC(\boldsymbol{n}, \alpha)g^{-1} = C(\pm g\boldsymbol{n}, \alpha) \tag{2.14}$$

其中, g 是群中的任一共点的点操作. 对旋转操作, 当 g 是第一类点群操作时取正; 反之, 取负. 利用式 (2.14) 不难证明, 点操作的共轭或类有以下性质：

(1) 恒等操作 (对应单位元) 只与自己共轭, 自成一类;

(2) 反演只与自己共轭, 自成一类;

(3) 反映只与反映共轭, 两个反映共轭的充要条件是群中存在使两个反映面重合的操作;

(4) 旋转只与旋转共轭, 两个旋转共轭的充要条件是转角相等, 且群中存在使这两个旋转操作转轴重合的第一类操作或反向重合的第二类操作;

(5) 旋转反演或旋转反映的共轭关系与旋转类似.

群的性质和点操作的运算关系决定, 一个点群中旋转轴的选取不是任意的, 第一类点群只有以下五种形式：

(1) 只有一个 n 次转轴 (转角为 $2\pi/n$ 的整数倍的旋转) 的点群 C_n, 相应的群元素 $C_n = \left\{E, C_n, C_n^2, \cdots, C_n^{n-1}\right\}$.

(2) 由一个 $n(>2)$ 次轴和 n 个与之垂直、相互夹角为 π/n 的 2 次轴构成的点群 D_n, 相应的群元素 $D_{2n} = \left\{E, 2C_{2n}, 2C_{2n}^2, \cdots, 2C_{2n}^{n-1}, C_{2n}^n, nC_2', nC_2''\right\}$; $D_{2n+1} = \left\{E, 2C_{2n+1}, 2C_{2n+1}^2, \cdots, 2C_{2n+1}^n, (2n+1)C_2\right\}$.

(3) 由四个 3 次轴和三个互相垂直的 2 次轴构成的正四面体群 T, 相应的群元素 $T = \left\{E, 4C_3, 4C_3^2, 3C_2\right\}$.

(4) 由三个 4 次轴、四个 3 次轴和六个 2 次轴构成的正六 (八) 面体群 O, 相应的群元素 $O = \left\{E, 6C_4, 3C_4^2, 8C_3, 6C_2\right\}$.

(5) 由六个 5 次轴、十个 3 次轴和十五个 2 次轴构成的正十二 (二十) 面体群 I, 相应的群元素 $I = \left\{E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2\right\}$.

其中, 正多面体群中转轴的空间相对分布是：以正多面体的中心为共点, 最高次轴过正多面体的面心 (顶点), 次高次轴过顶点 (面心), 2 次轴过对棱的中心. 各个群元素前面的系数是该元素所属类中群元素个数.

第二类点群可以通过第一类点群, 按 (2.13) 式定义的形式扩充得到. 由群的性质和点操作的运算关系式 (2.14) 可知, 用于扩充的第二类点群操作 g_2 必须满足

$$g_2 g_2 \in G_1, \quad g_2 C(\boldsymbol{n}, \alpha) g_2^{-1} = C(-g_2 \boldsymbol{n}, \alpha) \in G_1 \tag{2.15}$$

即 g_2 不改变 G_1 中旋转轴的轴次和各次轴的空间相对分布; 如果另一个第二类点群操作 g_2' 满足 $g_2 g_2' \in G_1$, 则由这两个第二类点操作按 (2.13) 式扩充得到的群相同. 通过具体讨论可知, 第二类点群只有以下 10 种形式：

(1) 由一个 n 次转轴和垂直于该 n 次轴的反映面 σ_h 组成的群 $C_{nh} \equiv C_n \cup \sigma_h C_n$.

(2) 由一个 n 次转轴和 n 个通过该 n 次轴且相互夹角为 π/n 的反映面 σ_v 组成的群 $C_{nv} \equiv C_n \cup \sigma_v C_n$, 相应的群元素：$C_{(2n)v} = \{E, \left(2C_{2n}, 2C_{2n}^2, \cdots, 2C_{2n}^{n-1}\right),$

$C_{2n}^n, n\sigma_v, n\sigma_d\}$; $C_{(2n+1)v} = \left\{E, \left(2C_{2n+1}, 2C_{2n+1}^2, \cdots, 2C_{2n+1}^n\right), (2n+1)\sigma_v\right\}$.

(3) 由一个 n 次转轴和中心反演 i 组成的群 $C_{ni} \equiv C_n \cup iC_n$. 其中, 轴次为 $2n+1$ 的群 $C_{(2n+1)i} = S_{4n+2}$, 相应群元素：$S_{4n+2} = \left\{E, S_{4n+2}, S_{4n+2}^2, \cdots, S_{4n+2}^{4n+1}\right\}$; 轴次为 $4n+2$ 的群 $C_{(4n+2)i} = S_{2n+1}$, 相应群元素：$S_{2n+1} = \left\{E, S_{2n+1}, S_{2n+1}^2, \cdots, S_{2n+1}^{4n+1}\right\}$.

(4) 由一个 $2n$ 次转轴和以该轴为转轴的旋转反映 S_{4n} 组成的群 $S_{4n} \equiv C_{2n} \cup S_{4n}C_{2n}$, 在它的群元素中不含中心反演 i.

(5) 由点群 D_n 和垂直于其 n 次轴的反映面 σ_h 组成的群 $D_{nh} \equiv D_n \cup \sigma_h D_n$, 相应的群元素 $D_{(2n)h} = \{E, \left(2C_{2n}, 2C_{2n}^2, \cdots, 2C_{2n}^{n-1}\right), C_{2n}^n, nC_2', nC_2'', \sigma_h, i, n\sigma_v, n\sigma_d, \left(2\sigma_h C_{2n}, 2\sigma_h C_{2n}^2, \cdots, 2\sigma_h C_{2n}^{n-1}\right)\}$; $D_{(2n+1)h} = \{E, \left(2C_{2n+1}, 2C_{2n+1}^2, \cdots, 2C_{2n+1}^n\right), (2n+1)C_2, \sigma_h, (2n+1)\sigma_v, \left(2\sigma_h C_{2n+1}, 2\sigma_h C_{2n+1}^2, \cdots, 2\sigma_h C_{2n+1}^n\right)\}$, 显然, S_n, C_{nh}, C_{nv}, D_n 是 D_{nh} 的子群, D_{nh} 是 $D_{(2n)h}$ 的子群. 由于 S_{2n+1} 是 $D_{(2n+1)h}$ 的子群, 所以, $D_{(2n+1)h}$ 中含一个 $(4n+2)$ 次的旋转反演轴.

(6) 由点群 D_n 和 n 个过其 n 次轴与相邻 2 次轴角平分线反映面 σ_d 组成的群 $D_{nd} \equiv D_n \cup \sigma_d D_n$, 相应的群元素：$D_{(2n)d} = \{E, \left(2C_{2n}, 2C_{2n}^2, \cdots, 2C_{2n}^{n-1}\right), C_{2n}^n, 2nC_2, 2n\sigma_d, \left(2S_{4n}, 2S_{4n}^3, \cdots, 2S_{4n}^{2n-1}\right)\}$; $D_{(2n+1)d} = \{E, \left(2C_{2n+1}, 2C_{2n+1}^2, \cdots, 2C_{2n+1}^n\right), (2n+1)C_2, (2n+1)\sigma_d, i, \left(2S_{4n+2}, 2S_{4n+2}^3, \cdots, 2S_{4n+2}^{2n-1}\right)\}$, 显然, C_n, S_{2n}, C_{nv}, D_n 是 D_{nd} 的子群; D_{nd} 是 D_{2nh} 的子群, $D_{(2n)d}$ 不含中心反演 i.

(7) 由正四面体群 T 和过其两个 2 次轴与另一个 2 次轴垂直的反映面 σ_h 组成的群 $T_h \equiv T \cup \sigma_h T$, 相应的群元素：$T_h = \{E, 8C_3, 3C_2, 3\sigma_h, i, 8S_6\}$.

(8) 由正四面体群 T 和过其一个 2 次轴与另外两个 2 次轴角平分线的反映面 σ_d 组成的群 $T_d \equiv T \cup \sigma_d T$, 相应的群元素：$T_d = \{E, 8C_3, 3C_2, 6\sigma_d, 6S_4\}$.

(9) 由正六 (八) 面体群 O 和垂直于其一个 4 次轴的反映面 σ_h 组成的群 $O_h = O \cup \sigma_h O$, 相应的群元素：$O_h = \left\{E, 6C_4, 3C_4^2, 8C_3, 6C_2, 6S_4, i, 3\sigma_h, 8S_6, 6\sigma_d\right\}$. 显然, T, T_h, T_d 和 O 均是 O_h 的子群.

(10) 由正十二 (二十) 面体群 I 和过其一个 2 次轴和两个相邻 3 次轴角平分线的反映面 σ_d 组成的群 $I_d \equiv I \cup \sigma_d I$.

其中, 群元素 σ_h 代表过原点并垂直于最高 (次) 转轴的反映面; σ_v 代表过最高 (次) 转轴的反映面; σ_d 代表过最高 (次) 转轴且平分与该轴垂直的两个 2 次轴间夹角的反映面; S_n 对应转角为 $2\pi/n$.

以上就是简单空间点群的所有类型. 由于结构的周期性, 晶体中能够存在的对称点群只是上述空间点群的一部分.

2.1.2　布拉维格子的对称性

根据适用范围的不同, 可将布拉维格子的对称操作分为两类：含平移的对称操作 (只适用于无限的格子) 和不含平移的点对称操作 (对有限和无限格子均适用).

利用布拉维格子可能具有的不同对称点群和简单空间群, 一共可以定义 14 种三维布拉维格子. 相对简单的二维布拉维格子可由三维格子简化得到.

1. 布拉维格子的平移对称性和倒格子空间 [2]

在三维坐标空间, 通常将布拉维格子所对应空间无限点阵中的每个点称为一个格点, 连接任意两个格点的矢量称为格矢, 其中三个不共面的最短格矢称为布拉维格子的基矢. 晶体和布拉维格子的周期性直接表现为任一格矢 $\boldsymbol{R}_n$ 可用格子的基矢表示为

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3 \tag{2.16}$$

n_1, n_2, n_3 为一组整数; 矢量 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ 为格子的基矢. 由于晶体和布拉维格子在所有按格矢进行的平移操作下保持不变, 而所有按格矢进行的平移操作成群 (称为格群), 所以具有不同平移对称性的布拉维格子或晶体可用格群来描述和分类. 其实质是格子基矢的不同选择.

布拉维格子的特点是所有格点具有相同的空间性质, 即一个格点在按格矢进行的平移操作下能变为任一格点. 如此, 利用格矢或格群, 对晶体的描述可以缩小到一个原胞, 因为晶体可由放在任一格点的原胞平移所有格矢生成. 对同一个晶体, 原胞的选取不是唯一的. 反映晶体的平移不变性, 可以选择从任一格点出发, 以格子三个基矢为棱构造的平行六面体作为晶体的原胞, 晶体可由此平行六面体沿它的三条棱不断平移得到. 反映格子点群对称性, 则需选较常用的维格纳–塞茨 (Wigner-Seitz) 原胞 [2,3], 简称 WS 原胞. 以任一格点为中心, 作其与近邻格点连线的垂直平分面, 这些面所围成的以该点为中心的最小区域即为晶体的一个 WS 原胞. 根据原胞包含散射体数目的不同, 可将光子晶体结构分为两类：原胞只含一个散射体的简单晶格; 原胞含多个散射体的复式晶格. 后者通常由两套或多套布拉维格子相互穿套而成. 典型的三维复式晶格有金刚石、闪锌矿结构和六角密堆结构; 蜂窝结构则是典型的二维复式晶格.

由于格子的基矢不一定正交, 为研究晶体结构方便, 常引入一组与之正交的矢量, 称为倒格子基矢, 一般用 $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ 表示. 按定义, 同一格子的倒格子基矢和正格子基矢的关系为

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{i,j} \tag{2.17}$$

由倒格子基矢张成的空间称为倒格子空间. 类比格矢, 可以引入倒格矢 $\boldsymbol{G}_n$

$$\boldsymbol{G}_n = n_1\boldsymbol{b}_1 + n_2\boldsymbol{b}_2 + n_3\boldsymbol{b}_3 \tag{2.18}$$

并定义倒格矢的端点为倒格点, 所有倒格点在倒格子空间形成的点阵为倒格子. 显然, 倒格子具有对任意倒格矢的平移不变性, 因而也可引入倒格子的原胞来描述它. 常用的是称为第一布里渊区 (1BZ) 的倒格子 WS 原胞, 它具有与正格子 WS 原胞

相同的对称点操作. 由倒格子基矢长度倒数的量纲可知, 倒格子空间实际是一波矢空间. 它的引入简化了坐标空间周期函数的数学描述, 因为在倒格子空间, 坐标空间周期函数的傅里叶系数只在倒格点处不为零. 具体的数学表述为

$$u(\boldsymbol{X}) = u(\boldsymbol{X} + \boldsymbol{R}_n) = \sum\nolimits_{\boldsymbol{G}_n} B(\boldsymbol{G}_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{G}_n\cdot\boldsymbol{X}} \tag{2.19}$$

同时, 任一函数 $f(\boldsymbol{X})$ 可用傅里叶级数形式表示为

$$f(\boldsymbol{X}) = \sum\nolimits_{g} F(\boldsymbol{g})\mathrm{e}^{\mathrm{i}g\cdot X} = \sum\nolimits_{K\in 1\mathrm{BZ},G_n} D(\boldsymbol{K}, \boldsymbol{G}_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{K}+\boldsymbol{G}_n)\cdot\boldsymbol{X}} \tag{2.20}$$

其中, $\boldsymbol{K}$ 的取值范围为倒格子空间的第一布里渊区.

结构的周期性使得晶体中晶向和晶面的定义与均匀空间有所不同. 在具有任意平移不变性的均匀空间, 各个点的空间性质完全相同, 因此其中方向可由连接任意两点的矢量定义, 平面则由任意不共线的三点定义. 而在晶体中, 只有布拉维格子的所有格点空间性质相同, 所以定义晶体中的方向和平面需用格点代替均匀空间的点. 其中, 晶向定义为连接任意两个格点的格矢, 用晶向指数 $[l_1, l_2, l_3]$ 来标记, 沿该方向最短的格矢为 $l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3$. 显然, 给定一个晶向, 所有格点分布在平行于该晶向的一系列等间距平行直线族上. 晶面是任意不共线的三个格点张成的平面, 所有格点分布在平行于该晶面的一系列等间距平面族上. 如果此平面族分别把基矢 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ 分成 h_1, h_2, h_3 等分, 则用米勒指数 (Miller indices)(h_1, h_2, h_3) 标记该晶面 (一般要将 h_1, h_2, h_3 化为互质数), 其法线方向可用倒格矢表示为 $h_1\boldsymbol{b}_1 + h_2\boldsymbol{b}_2 + h_3\boldsymbol{b}_3$.

2. 布拉维格子的点操作对称性和晶系

由格矢和格点的定义可知, 布拉维格子在中心反演操作下不变. 因此, 布拉维格子的对称点群一定包含子群 C_{1i}(注: S_2 与之等价). 对旋转操作, 布拉维格子的平移对称性使得其允许的转轴轴次只能取有限个值. 因为在旋转对称操作作用下, 基矢必须变为格矢, 数学表示为

$$C(\boldsymbol{n}, \alpha) \circ \boldsymbol{a}_i = \Re_{ij}\boldsymbol{a}_j = \boldsymbol{R}_{n^{(i)}} = n_j^{(i)}\boldsymbol{a}_j \tag{2.21}$$

由基矢线性无关可知, 矩阵 $\Re$ 的所有元素必为整数, 而且矩阵 $\Re$ 可通过相似变换化为旋转操作矩阵一般形式 (2.9) 式. 根据相似变换不改变矩阵迹的性质可得, (2.9) 式中的转角 α 必须满足

$$2\cos\alpha + 1 = \mathrm{tr}\Re = m \tag{2.22}$$

其中, m 为整数. 显然, $\cos\alpha$ 只能取 0, $\pm1/2$, ±1; 相应转角为 0, $\pm\pi/2$, $\pm\pi/3$, $\pm2\pi/3$, π. 所以, 布拉维格子对称点群所含旋转轴的轴次只能是 1, 2, 3, 4 和 6.

满足布拉维格子对称转轴要求的空间点群, 称为晶体点群. 按最高次转轴 (主轴)、次高次转轴的数目、轴次和空间相对分布的不同, 可将晶体点群分为 7 个系

列, 32 个类型. 各个系列的名称和最高对称群 (标在名称后的括号内) 依次为三斜 (S_2)、单斜 (C_{2h})、正交 (D_{2h})、四方 (D_{4h})、三角 (D_{3d})、六角 (D_{6h})、立方 (O_h). 同一晶体点群系列包含的对称点群由其最高对称群的子群组成, 但不包含其他系列中已出现的点群.

与晶体点群的 7 个系列相对应, 可定义 7 类与之同名、具有不同对称点群的布拉维格子, 称为 7 个晶系.

3. 布拉维格子的分类 [2,3]

单纯考虑平移对称性, 以空间任意三个不共面矢量为基矢可以定义一个布拉维格子; 而点操作对称性的讨论显示, 转轴的不同选取决定布拉维格子只能分为 7 个不同的晶系. 因此, 布拉维格子的细致分类需由结合平移和点操作的简单空间对称群给出, 其核心是确定格子基矢和转轴的空间相对分布.

由于以基矢为棱的平行六面体原胞不能直观地反映布拉维格子的对称点群, 讨论格子的简单空间对称群需要定义称为单胞的更大平行六面体周期单元. 常用不共面的三个矢量 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 标记单胞的基矢, α, β, γ 分别标记 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{c}$、$\boldsymbol{b}$ 与 $\boldsymbol{c}$ 和 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 的夹角. 单胞基矢的特殊之处是：基矢 $\boldsymbol{c}$ 沿布拉维格子的主轴方向, 三个基矢为各自方向的最短格矢, 它们的长度则称为晶格常数. 布拉维格子单胞基矢长度和夹角间的关系可直接由 7 个晶系最高对称群各次转轴和反映面的空间分布得到.

具体由布拉维格子的单胞得到其原胞有两种方式. 一种方式是直接取单胞基矢为格子基矢, 即取单胞为原胞. 按这种方式 7 个晶系只能定义 6 种简单的布拉维格子, 因为三角晶系由此得到的单胞与六角晶系相同. 另一种方式是尝试在单胞上增加格点, 因为单胞不是最小周期单元, 如果增加格点后的单胞仍具有所属晶系的最高点群和平移对称性, 而且新基矢的空间特性不同于已定义的格子, 则视为一个新的布拉维格子. 受新增加的格点不改变布拉维格子的点群对称性和布拉维格子所有格点可由任一格点按格矢平移生成的限制, 在单胞中能够增加的格点只能是底心、面心和体心. 唯一一个改变晶系的是在六角格子的单胞中加上一对菱形点 $(1/3, 2/3, 1/3)$ 和 $(2/3, 1/3, 2/3)$ (注：这两个坐标对应的坐标系是六角格子的基矢) 得到的三角格子. 如此, 对应 7 个晶系共有 14 种布拉维格子, 73 个简单空间对称群 [3]. 这些布拉维格子的名称、单胞基矢间的关联和对称点群如表 2.1 所示.

二维布拉维格子相对简单, 只有 4 个晶系, 5 种布拉维格子, 具体如表 2.2 所示.

2.1.3　光子晶体的对称性

光子晶体的平移对称性与其布拉维格子完全相同, 但是点操作对称性比布拉维格子复杂. 因为不同于抽象的空间点阵, 光子晶体单胞由其布拉维格子单胞空间区

域的连通基体介质和分布在其顶点及内部的所有散射体共同组成. 所以, 光子晶体的对称点群是布拉维格子和单胞对称点群的最大共同子群, 它的简单空间对称群是其布拉维格子简单空间对称群的子群, 仅当布拉维格子的对称点群是光子晶体单胞对称点群时, 两者具有相同的简单空间操作对称性.

表 2.1 布拉维格子

晶系	单胞基矢的关联	布拉维格子	对称点群
三斜		简单三斜	C_1, S_2
单斜	$\alpha=\beta=\dfrac{\pi}{2}\neq\gamma$	简单单斜 底心单斜	C_2, C_{1h}, C_{2h}
正交	$a\neq b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=\dfrac{\pi}{2}$	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交	D_2, C_{2v}, D_{2h}
四方	$a=b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=\dfrac{\pi}{2}$	简单四方 体心四方	$C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{2d}, D_{4h}$
三角	$a=b=c,$ $\alpha=\beta=\gamma\neq\dfrac{\pi}{2}, \dfrac{\pi}{3}, 2\arccos(1/\sqrt{3})$	三角	$C_3, S_6, D_3, C_{3v}, D_{3d}$
六角	$a=b, \alpha=\beta=\dfrac{\pi}{2}, \gamma=\dfrac{2\pi}{3}$	六角	$C_6, C_{3h}, C_{6h}, D_6, C_{6v}, D_{3h}, D_{6h}$
立方	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=\dfrac{\pi}{2}$	简单立方 体心立方 面心立方	T, T_h, O, T_d, O_h

表 2.2 二维布拉维格子

晶系	单胞基矢的关联	布拉维格子	对称点群
斜方		简单斜方	C_1, C_2
长方	$a\neq b, \gamma=\dfrac{\pi}{2}$	简单长方 中心长方	C_{1v}, C_{2v}
正方	$a=b, \gamma=\dfrac{\pi}{2}$	简单正方	C_4, C_{4v}
六角	$a=b, \gamma=\dfrac{2\pi}{3}$	简单六角	C_3, C_{3v}, C_6, C_{6v}

细致分析光子晶体单胞的点操作对称性涉及物理和几何两方面因素. 物理因素主要是单胞中介质的介电张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$、磁导率张量 $\boldsymbol{\mu}$ 的空间对称性和数值差异; 几何因素则包括单胞中散射体的数目、空间相对位置和几何形状. 其中, 物理因素最简单的是各向同性介质; 几何因素最简单的是简单晶格. 在散射体几何形状方面, 最简单且最常采用的是具有最高对称群的球 (三维) 或圆柱 (二维), 因为对简单晶格结构的光子晶体, 这样的选择保证它具有与其布拉维格子相同的简单空间对称群. 对

复式晶格的光子晶体, 描述它们的对称性需用复杂空间群, 因为螺旋旋转或滑移反映可能是其对称操作, 如 NaCl 结构的滑移反映对称性, 金刚石结构中平行于立方晶系 c 轴的四重螺旋轴.

2.2 光子晶体的本征电磁场

由固体物理的电子能带理论已知, 结构的平移和点群对称性使得晶体中的电子波函数与单个原子的电子态存在显著差异, 晶体中电子本征能量不再是孤立量级, 而是一系列能带. 尽管电磁波与电子波函数物理性质不同, 但共同的晶体结构使得光子晶体的本征电磁场与晶体中电子态具有相似的谱特性和几何对称性. 由于场本征方程在空间操作下的变换性质是分析其本征谱和本征模对称性的基础, 本节从光子晶体本征电磁场方程出发, 讨论光子晶体的能带和能量速度与晶体结构对称性的关系.

2.2.1 空间操作和本征电磁场方程

坐标分量或基矢在空间操作下的变换关系是空间操作在坐标空间的定义, 只能直接用于描述几何结构的对称性. 而分析物理系统和其本征场的空间对称性, 需要定义空间操作对物理场和坐标微分算子的作用, 进而讨论本征场方程在空间操作下的变化.

1. 空间操作算子

由 2.1.1 小节空间操作与坐标变换的讨论已知, 点操作对空间几何结构或物理系统的作用, 等效于保持相应结构或系统不变, 用该空间操作的逆作用在坐标系上. 因此, 对每个点操作 $\Re$ 可以定义一个作用在矢量场空间的线性算子 $\hat{\Re}$, 它对任意矢量场的作用等价于坐标变换 $\boldsymbol{X} \to \Re \circ \boldsymbol{X}$ 后矢量场分量的变化. 根据矢量场分量在坐标变换的性质, 定义点操作算子 $\hat{\Re}$ 对任意矢量场 $\boldsymbol{A}$ 的作用为

$$\left(\hat{\Re} \circ \boldsymbol{A}\right)(\boldsymbol{X}) \equiv \boldsymbol{A'}_i(\boldsymbol{X})\boldsymbol{e}_i = \Re_{ij}\boldsymbol{A}_j(\Re^{-1} \circ \boldsymbol{X})\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{A}_j(\Re^{-1} \circ \boldsymbol{X})\boldsymbol{e'}_j \tag{2.23}$$

其中, 矩阵 $\Re$ 是空间操作一般定义式 (2.1) 中的系数矩阵, $\Re^{-1}$ 是 (2.1) 式定义坐标分量的逆变换. 将空间操作算子的定义推广到物理场 (即任意阶张量场) 空间, 可得线性算子 $\hat{\Re}$ 对 n 阶张量场 $\boldsymbol{B}$ 的作用为

$$\left(\hat{\Re} \circ \boldsymbol{B}\right)(\boldsymbol{X}) \equiv \prod_{m=1}^{n} \Re_{i_m j_m} \boldsymbol{B}_{j_1 j_2 \cdots j_n}(\Re^{-1} \circ \boldsymbol{X})\boldsymbol{e}_{i_1}\boldsymbol{e}_{i_2}\cdots\boldsymbol{e}_{i_n} \equiv \tilde{\Re}\boldsymbol{B}(\Re^{-1} \circ \boldsymbol{X}) \tag{2.24}$$

由空间操作算子的普遍形式 (2.24) 不难看到, 空间操作算子是张量场空间的线性算子. 而取 (2.24) 式中系数矩阵 $\Re$ 为单位矩阵, 即可得到平移操作算子的数学表达式