

$k = 0$ 处的类狄拉克锥

黄学勤 陈子亭

Dirac-like cones at $k = 0$

Huang Xue-Qin Chan Che-Ting

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 184208 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.184208

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184208>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

等离子体填充金属光子晶体慢波结构色散特性研究

Dispersion properties of plasma-filled metallic photonic crystal slow-wave structure

物理学报.2015, 64(17): 174205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.174205>

非长波极限下二维光子晶体中横电模的等效介质理论

Effective medium theory of two-dimensional photonic crystal for transverse electric mode beyond the long-wavelength limit

物理学报.2015, 64(15): 154210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154210>

量子受限效应对称性效应对硅光子晶体禁带的影响

Effects of quantum confinement and symmetry on the silicon photonic crystal band gap

物理学报.2015, 64(6): 064208 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064208>

低对称性光子晶体超宽带全角自准直传输的机理研究

Physical mechanism of super-broadband and all-angle self-collimation transmission in photonic crystal with low rotational symmetry

物理学报.2015, 64(6): 064209 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064209>

单负材料组成一维光子晶体双量子阱结构的共振模

Resonant modes in photonic double quantum well structures with single-negative materials

物理学报.2015, 64(6): 064207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.064207>

专题: 计算物理的近期发展和应用

 $k = 0$ 处的类狄拉克锥*

黄学勤 陈子亭†

(香港科技大学物理系, 香港科技大学高等研究院, 香港)

(2015 年 5 月 6 日收到; 2015 年 6 月 15 日收到修改稿)

狄拉克锥在电子和经典波体系中分别被发现, 由于其线性能带关系, 伴随着很多独特的现象. 除了一般存在于布里渊区边界处的狄拉克锥, $k = 0$ 处也存在包含线性能带关系的类狄拉克锥. 这个类狄拉克锥可以由单极子和偶极子的偶然简并而形成. $k = 0$ 处的类狄拉克锥可以通过两维电介质光子晶体来实现, 利用等效媒质理论, 此时的光子晶体在类狄拉克点频率可以等效为介电常数和磁导率都为零的材料. 电介质二零折射率材料既可以避免阻抗的不匹配, 也可以避免体系推广到高频所引起的强烈损耗. 此外, $k = 0$ 处的类狄拉克锥与二零折射率的概念可以从两维体系拓展到三维体系, 而且还可以从电磁波体系推广到声波和弹性波体系. 利用具有类狄拉克点的两维光子晶体, 在材料参数都偏离类狄拉克点条件的两个半无限大光子晶体所构成的界面中, 一定存在界面态. 这些界面态的存在可以通过层状多重散射理论得到的表面阻抗以及体能带的几何相位来彻底解释.

关键词: 光子晶体, 类狄拉克锥, 零折射率, 界面态

PACS: 42.70.Qs, 42.25.-p

DOI: 10.7498/aps.64.184208

1 引言

狄拉克方程是描述自旋为 $1/2$ 的相对论粒子的运动方程^[1]. 当粒子的等效质量为零时, 方程给出能量 E 与动量 k 之间满足线性关系. 在石墨烯中, 由于晶格的对称性与时间反演不变性, 费米能级附近的电子能带可以用等效质量为零的狄拉克方程来描述^[2–15]. 在两维六角布里渊区的 K 和 K' 点, 电子能带由两个锥形的能带构成, 这两个锥形能带被称为狄拉克锥, 它们相交于费米能级中的一点, 这个相交点被称为狄拉克点. 这种线性能带关系具有一些非常奇特的传输特性, 例如: 量子霍尔效应^[4–6], Zitterbewegung^[7–11] 和 Klein tunneling^[12]. 狄拉克锥的概念不仅仅局限于电子体系中, 在三角或六角晶格的经典波体系中, 布里渊区的 K 和 K' 点同样存在狄拉克锥^[16–25], 而且, 也在经典波体系中发现了类似于石墨烯中的 Zitterbewegung^[20,21] 和 Klein tunneling.

超材料是由尺寸远小于波长的金属共振单元所构成, 由于其结构单元远小于波长, 因此人们可以通过等效媒质理论来获得该体系的等效参数. 在介电常数和磁导率的两维相图中, 日常的自然材料, 介电常数和磁导率一般都大于零, 而在金属或磁性材料中, 可以实现介电常数小于零、磁导率大于零, 或者介电常数大于零、磁导率小于零. 自然界中不存在介电常数和磁导率都小于零的材料, 而且, 对于自然材料, 一般难以调控其介电常数和磁导率的大小. 然而, 利用超材料, 人们可以实现介电常数和磁导率为任意数值的材料^[26–40]. 超材料可以实现自然界中不存在的很多有趣现象, 例如: 负折射^[27–31]、超透镜^[32,33]、隐身^[34–36] 等^[37–40]. 在介电常数与磁导率的相图中, 还存在着两类很特殊的材料, 它们对应于相图中的横轴或纵轴, 也就是折射率为零的材料. 在各向同性均匀的材料中, 折射率由介电常数和磁导率的乘积来决定, 因此零折射率材料既包含“单零”折射率材料(介电常

* 香港大学教育资助委员会卓越学科领域计划(批准号: Hong Kong Research Grant Council grant AoE/P-02/12)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: phchan@ust.hk

数或磁导率为零), 也包括“双零”折射率材料(介电常数和磁导率都为零)^[41–56]. 由于电磁波在零折射率材料中传播不存在相位的变化, 于是利用零折射率材料可以实现很多有趣的现象, 例如: 电磁波在任意横截面的波导中传播^[41–49], 调控电磁波传播的波前^[50–52], 以及隐身放在零折射率材料中的物体^[53–56]. 然而对于单零折射率材料, 由于其只包含介电常数或磁导率为零, 故它的阻抗要么等于零要么等于无穷大, 这就使得其与背景材料的阻抗非常不匹配, 从而当电磁波入射到单零折射率材料与背景材料的界面处时, 会引起强烈的反射. 同时电磁波在单零折射率材料中的群速度为零, 这不利于电磁波的传播. 这些弊端可以通过双零折射率材料来避免, 它可以避免阻抗与背景材料的强烈不匹配, 同时电磁波在里面传播的群速度是一个常数. 通常, 人们要么利用假想的双零折射率材料来研究电磁波的传播行为, 要么利用超材料来实现双零折射率材料^[47]. 但是金属共振单元在高频时的吸收非常厉害, 这就限制了它的应用.

狄拉克点与零折射率材料这两个课题看起来毫不相关, 通过研究我们揭示了这两个毫不相干课题之间的微妙联系^[57–59]. 由于时间反演不变性, 电子体系和经典波体系中的狄拉克点都位于布里渊区的边界处(K 或 K' 点), 在布里渊区的中心处($\mathbf{k} = 0$), 一般不存在线性能带关系, 然而狄拉克点又要求线性的能带关系. 这能否说明我们不能实现 $\mathbf{k} = 0$ 处的狄拉克点? 在各向同性均匀的色散材料中, 在介电常数和磁导率都为零的频率下, $\mathbf{k} = 0$ 处存在着线性的能带关系^[60]. 但是麦克斯韦方程除了支持横波模式, 还可以支持纵波模式, 当介电常数或磁导率等于零时, 该频率处还存在着一个纵波模式, 只是在各向同性均匀的材料中, 这个纵波模式没有任何色散, 很难与外界电磁波耦合, 所以常常被忽略. 然而这个纵波模式有其存在的物理意义. 假如不存在纵波模式, $\mathbf{k} = 0$ 处的狄拉克点是一个两重简并态, 它的Berry相位为 π , 而如果考虑纵波模式的存在, 此时的Berry相位就为0^[58,61]. Berry相位是 π 或0所对应的物理含义是完全不同的, 因此纵波模式的存在有其必然性, 我们不能因为它没有色散, 而随意忽略它. $\mathbf{k} = 0$ 处的狄拉克点是一个三重简并态, 而传统在布里渊区边界处的狄拉克点是一个两重简并态, 它们分别对应不同的Berry相位, 因此我们称 $\mathbf{k} = 0$ 处的狄拉克点为类狄拉克点. 通过偶然简并, 我们发现 $\mathbf{k} = 0$ 处的类

狄拉克点与零折射率材料有着微妙的关系^[57–59]. 在两维介质光子晶体中, 如果类狄拉克点是由单极子和偶极子所形成, 体系在类狄拉克点频率处可以等效为双零折射率材料. 而且, $\mathbf{k} = 0$ 处类狄拉克点与零折射率材料的概念可以从电磁波推广到声波^[62]和弹性波^[63]. 除了单极子和偶极子的偶然简并可以实现 $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点, 偶极子和四极子的偶然简并在 $\mathbf{k} = 0$ 处同样可以实现类狄拉克点. 此外, $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点可以拓展到正方晶格中的 M 点, 由于此时体系不能通过等效媒质来描述, 所以类狄拉克点与双零折射率材料就没有必然关系^[58].

狄拉克点/类狄拉克点是两维的概念, Sakoda教授提出利用 O_h 对称性, 在简立方晶格中实现 $\mathbf{k} = 0$ 处的三维类狄拉克点^[64]. 这个三维类狄拉克点是由一个单态 A_{1g} 和一个三重简并态 T_{1u} 的偶然简并来实现, 然而在三维电磁体系中, A_{1g} 单态难以利用实际结构来实现. 于是我们提出在三维简立方光子晶体中, 通过两个三重简并态 T_{1u} 和 T_{1g} 的偶然简并来实现三维类狄拉克点^[59]. 这个三维类狄拉克点由电偶极子和磁偶极子所构成. 通过等效媒质理论, 我们发现此时的三维光子晶体在类狄拉克点频率处可以等效为双零折射率材料. 在两维体系中, 双零折射率的实现依赖于电磁波的极化, 而在三维体系中, 双零折射率的实现并不依赖于电磁波的极化. 在三维电磁体系中, A_{1g} 的单态难以利用实际结构来实现, 然而在三维声学体系中, 该单态很容易实现, 因此Sakoda教授提出的三维类狄拉克点很容易在三维声学系统中实现^[59].

类狄拉克点除了在某些特定的情况下可以用等效媒质理论来描述, 它的存在也会带来其他的有趣现象. 两维光子晶体中的界面态存在与否并不是一个简单的问题, 只有在等效媒质理论成立的条件下, 我们才能得到严格的解析表达式. 一般情况下, 人们都是通过数值模拟来计算系统是否存在界面态. 然而我们发现, 在两个半无限大的两维光子晶体构成的界面中, 如果两个光子晶体的系统参数都偏离各自的类狄拉克点, 此时界面处一定会存在界面态^[65]. 通过层状多重散射理论, 我们解释了界面态的存在. 同时我们发现界面态的存在与两个光子晶体体能带的几何相位是直接相关的.

本文的第二部分和第三部分分别介绍两维和三维光子晶体中的类狄拉克点, 第四部分介绍两维光子晶体中的界面态, 最后是总结.

2 二维光子晶体中的类狄拉克点

首先, 我们来研究二维光子晶体中的类狄拉克点^[57-59]. 相对介电常数为 ϵ , 半径为 R 的柱子以正方晶格周期性排列, 正方晶格的晶格常数是 a , 如图1(a)中的插图所示. 对于横磁波极化(电场沿着柱子的轴向方向), 光子晶体的体能带如图1(a)中所示. 其中, $\epsilon = 12.5$, $R = 0.2a$. $\mathbf{k} = 0$ 处, 能带具有一个三重简并态. 它由两个线性能带和一个二次型能带所构成. 由于这个三重简并态是偶然简并而形成的, 如果固定柱子的 ϵ 不变, 改变半径 R , 使得它偏离 $0.2a$, 三重简并态就会分裂成一个两重简并态和一个单态. 当 $R = 0.19a$, $\mathbf{k} = 0$ 处, 两重简并态的频率要高于单态的频率, 如图2(a)所示; 反之, 当 $R = 0.21a$, $\mathbf{k} = 0$ 处, 两重简并态的频率要低于单态的频率, 如图2(c)所示. 两重简并态与单态在 $\mathbf{k} = 0$ 处的频率高低对应不同的 R , 具有能带反转的现象. 因此在能带反转的两个不同 R 之间必然存在一个 R 使得 $\mathbf{k} = 0$ 处形成一个三重简并态, 如图2(b)所示. 为了更形象地观察三重简并态, 图1(b)中给出了三维的能带关系. 从

图中很明显看到两个锥形的能带接触在同一个频率, 同时还有一个很平的能带穿过该频率. 除了正方晶格的 $\mathbf{k} = 0$ 处存在类狄拉克点, 在三角晶格中, 同样存在 $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点, 此时柱子的半径 $R' = 0.184a$, 如图1(c)所示. 同时 $\mathbf{k} = 0$ 附近的三维能带关系如图1(d)所示. 为了进一步分析这个三重简并态, 我们计算类狄拉克点附近沿 ΓX 方向具有很小波矢 $\mathbf{k}$ 的三个本征模式, 如图3(c)–(e)所示. 图中的颜色表示电场的分布, 箭头表示磁场的分布. 图3(c)和图3(d)是两条线性能带所对应的本征模式, 它们是电单极子(图3(c))和横向磁偶极子(图3(d))的线性叠加. 图3(e)是平带所对应的本征模式, 其磁场沿着波矢的方向, 故对应于准纵向磁偶极子. 关于类狄拉克点是由两条线性能带和一条二次型能带所构成, 我们可以通过多重散射理论^[57], 紧束缚近似^[64,66,67]或者 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法^[61]来证明, 这里我们就不再详细介绍. 目前为止, 我们通过偶然简并实现 $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点, 同时通过本征模式分析得知类狄拉克点是由单极子和偶极子所构成, 因此可以通过等效媒质理论^[68], 来计算体系在类狄拉克点频率附近的等效参数, 如图3(a), (b)中的绿色虚线所示, 在类狄拉克点频率

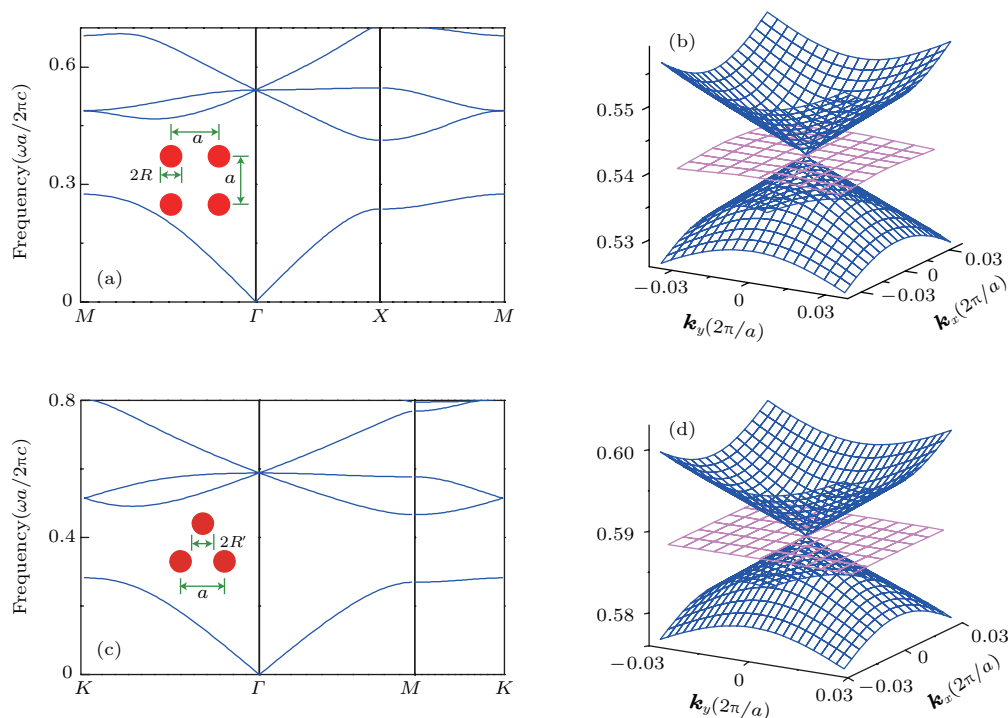


图1 (a), (b) 和 (c), (d) 分别表示正方晶格和三角晶格二维光子晶体的体能带与 $\mathbf{k} = 0$ 处类狄拉克点附近的三维能带图, 正方晶格的柱子半径 $R = 0.2a$, 三角晶格的柱子半径 $R' = 0.184a$, 其中 a 是晶格常数

Fig. 1. (a) and (c) are the bulk band structures of two-dimensional (2D) photonic crystals (PCs) in square and triangular lattices, respectively; (b) and (d) are the three-dimensional band structures near the Dirac-like point at $\mathbf{k} = 0$ for (a) and (c), respectively. The radii of the cylinders in square and triangular lattices are $R = 0.2a$ and $R' = 0.184a$, respectively. a is the lattice constant.

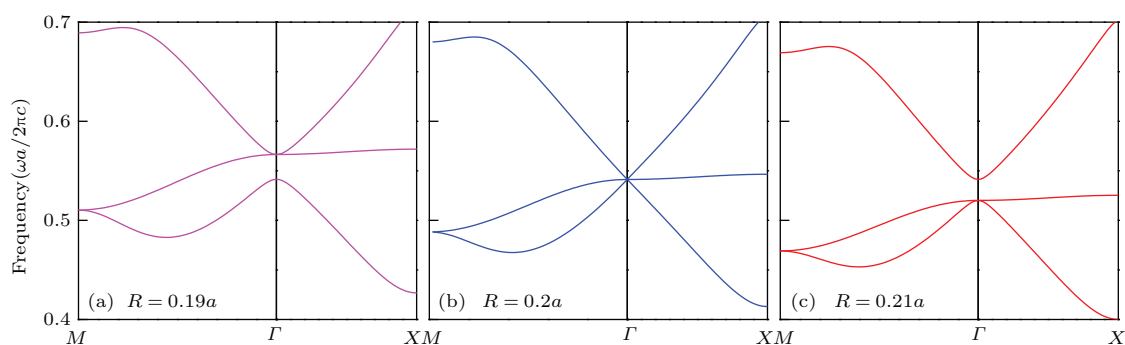


图2 不同柱子半径的两维正方晶格光子晶体的能带, (a), (b), (c) 分别对应于 $R = 0.19a$, $R = 0.2a$, $R = 0.21a$; 其中柱子的相对介电常数都是 $\epsilon = 12.5$

Fig. 2. The band structures of two-dimensional photonic crystals in a square lattice with different radii of the cylinders at a fixed relative permittivity $\epsilon = 12.5$. (a), (b) and (c) are for $R = 0.19a$, $R = 0.2a$, $R = 0.21a$, respectively.

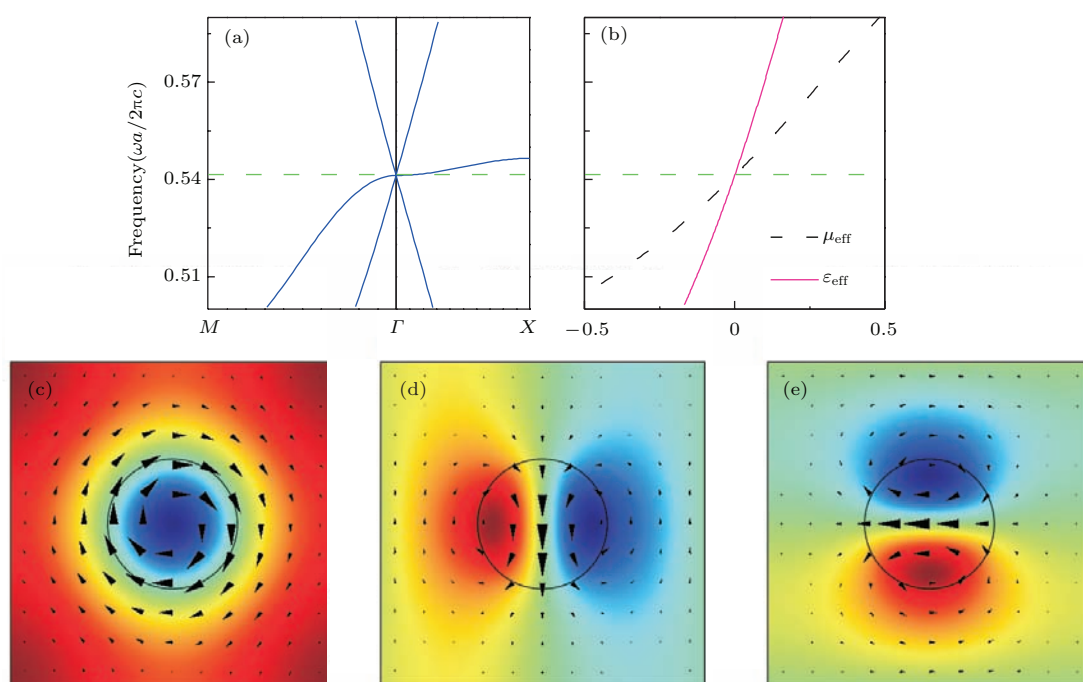


图3 (a) 两维正方晶格光子晶体的能带, 其中, $\epsilon = 12.5$, $R = 0.2a$; (b) 两维光子晶体在类狄拉克点频率附近的等效介电常数和磁导率; (c)–(e) 类狄拉克点附近的本征模式, 颜色代表电场的分布, 箭头代表磁场的分布

Fig. 3. (a) The band structure of a two-dimensional photonic crystal in a square lattice with $\epsilon = 12.5$, $R = 0.2a$; (b) the effective permittivity and effective permeability of the 2D PC as a function of frequency near the Dirac-like point; (c)–(e) the eigen modes near the Dirac-like point with a small k along ΓX direction. The color denotes the distribution of the electric field. The arrow denotes the magnetic field.

处, 体系的等效介电常数和磁导率都等于零. 通过两维介质光子晶体, 我们实现等效介电常数和磁导率都等于零的材料. 各向同性的零折射率材料具有很多有趣的现象^[41–56], 通过光子晶体等效而成的零折射率材料, 是否具有与各向同性均匀零折射率材料同样的性质, 通过微波实验以及进一步的数值模拟我们证明此时的两维光子晶体的确可以等效成双零折射率材料^[57]. 后来人们把利用电介质材料来实现双零折射率这个想法从微波频段推广到

光学频段^[69].

接下来, 我们要讨论零折射率材料中的群速度、相速度与阻抗. 在各向同性均匀的色散材料中, 相速度很容易通过 $v_p = c/n = c/\sqrt{\epsilon(\omega)\mu(\omega)}$ 得到, 当频率 ω_0 使得 $\epsilon(\omega_0) = 0$ 或者 $\mu(\omega_0) = 0$, 于是 $v_p \rightarrow \infty$. 群速度

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \left[\frac{1}{c} \sqrt{\epsilon(\omega)\mu(\omega)} \right]$$

$$+ \frac{\omega}{2c} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)}{\mu(\omega)}} \frac{\partial \mu(\omega)}{\partial \omega} + \sqrt{\frac{\mu(\omega)}{\varepsilon(\omega)}} \frac{\partial \varepsilon(\omega)}{\partial \omega} \right) \Bigg]^{-1}.$$

对于零折射率材料, 群速度表达式可以简化为

$$v_g = \left[\frac{\omega}{2c} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)}{\mu(\omega)}} \frac{\partial \mu(\omega)}{\partial \omega} + \sqrt{\frac{\mu(\omega)}{\varepsilon(\omega)}} \frac{\partial \varepsilon(\omega)}{\partial \omega} \right) \right]^{-1}.$$

由于零折射率材料既包含单零折射率材料 ($\varepsilon = 0$ 或者 $\mu = 0$), 也包含双零折射率材料 ($\varepsilon = \mu = 0$), 因此对于这两种不同的材料, 我们可以看到它们的群速度是不同的. 对于单零折射率材料, $v_g = 0$, 然而对于双零折射率材料, v_g 是一个不等于零的常数, 由类狄拉克锥的斜率决定. 此外, 我们还可以从阻抗 $Z = \sqrt{\mu}/\sqrt{\varepsilon}$ 看到单零折射率材料与双零折射率材料的不同, 对于单零折射率材料, $Z = 0$ 或 ∞ , 而对于双零折射率材料, Z 在类狄拉克点附近是一个常数, $Z = \frac{\sqrt{\partial \mu_{\text{eff}}/\partial \omega}}{\sqrt{\partial \varepsilon_{\text{eff}}/\partial \omega}}$. 因此可以看出, 单

零折射率材料与背景材料的阻抗非常不匹配, 这就造成电磁波在界面处的强烈反射.

该部分的最后, 我们还想指出, $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点, 除了可以由单极子和偶极子形成, 也可以由偶极子和四极子形成^[58], 同时 $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点可以拓展到正方晶格中的 M 点, 不过此时的体系就不能用等效参数来描述^[58]. 因此, $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点的概念比双零折射率材料更加普适. 而且, $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点可以从电磁体系推广到声波^[62] 和弹性波^[63] 体系.

3 三维光子晶体中的类狄拉克点

在第二部分中, 我们在两维类狄拉克点频率处实现等效介电常数和磁导率都等于零, 然而此时的等效参数依赖于电磁波的极化, 而且狄拉克点的概念是一个两维概念. 接着, 我们将两维光子晶体中的类狄拉克点概念拓展到三维情况, 并且实现不依赖于极化的等效参数^[59]. 由于时间反演不变性, 在简立方晶格中, $\mathbf{k} = 0$ 处的能带一般都是二次型, 最低能带是电偶极子或磁偶极子, 它们分别都是三重简并态. 一般情况下, 这两个三重简并态在 $\mathbf{k} = 0$ 处分别位于不同的频率, 如图 4 的插图所示, 相对介电常数 $\varepsilon = 12$, 半径 $R = 0.3a$ 的介质球按简立方排列, 其中简立方的晶格常数为 a . 体系的能带如图 4 所示, 三重简并态 T_{1u} , T_{1g} 分别位于不同的频率. 为了使得这两个三重简并态处于同一频率, 我们引入壳层结构. 每个结构单元由一个球核和包围

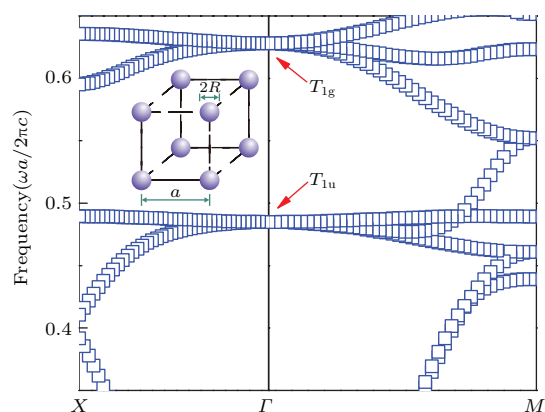


图 4 简立方电介质球光子晶体的能带, 球的相对介电常数和半径是 $\varepsilon = 12$, $R = 0.3a$, a 是晶格常数

Fig. 4. The band structure of 3 D dielectric sphere photonic crystal in a simple cubic lattice. The relative permittivity and the radius of the sphere are $\varepsilon = 12$, $R = 0.3a$. The lattice constant is a .

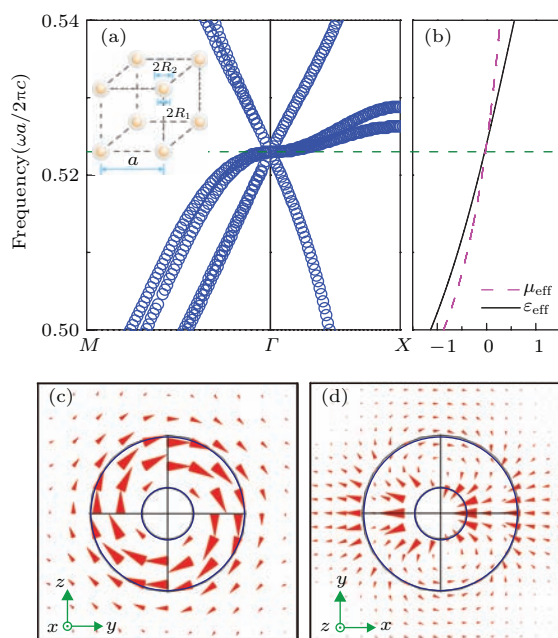


图 5 (a) 三维简立方晶格光子晶体的能带, 光子晶体的结构单元是壳层结构, 球核是完美金属, 半径为 $R_1 = 0.102a$, 外球壳是电介质材料, 相对介电常数和半径分别为 $\varepsilon = 12$, $R_2 = 0.3a$, 简立方的晶格常数为 a ; (b) 三维光子晶体的等效介电常数和磁导率随频率的变化关系; (c), (d) 类狄拉克点处的本征模式的电场分布, (c) 表示沿 x 方向的磁偶极子, (d) 表示沿 x 方向的电偶极子

Fig. 5. (a) The band structure of spheres arranged in a simple cubic lattice, the unit cell consists of a core-shell structure, the core is made of perfect electric conductor with radius $R_1 = 0.102a$, the dielectric shell is $\varepsilon = 12$, $R_2 = 0.3a$, here, a is the lattice constant; (b) the effective permittivity and effective permeability of the 3 D PC as a function of frequency; (c), (d) the eigen modes at the Dirac-like point, the arrows denote the directions of the electric fields, (c) represents a magnetic dipole along the x -direction, (d) represents an electric dipole along the x -direction.

该球核的球壳构成, 球核是完美金属, 半径为 R_1 , 球壳是介电常数为 ε 的电介质材料, 厚度为 $(R_2 - R_1)$, 如图 5(a) 的插图所示. 简立方光子晶体的能带如图 5(a) 所示, 其中, $\varepsilon = 12$, $R_1 = 0.102a$, $R_2 = 0.3a$. $\mathbf{k} = 0$ 处存在一个六重简并的三维类狄拉克点. 这个六重简并态包含四个线性能带和两个二次型能带. 为了分析这个六重简并态, 我们计算类狄拉克点的本征模式, 其中两个本征模式如图 5(c) 和 5(d) 所示, 它们分别对应 x 方向的磁偶极子和 x 方向的电偶极子. 由此可见, 六重简并态是由电偶极子和磁偶极子所形成. 通过等效媒质理论, 我们计算此时体系的等效参数, 如图 5(b) 所示. 在类狄拉克点频率处, 等效介电常数和磁导率都等于零.

通过偶然简并, 我们在声学体系中, 也可以实现 $\mathbf{k} = 0$ 处的三维类狄拉克点. 此时的类狄拉克点是一个四重简并态, 它由单极子和三重简并的偶极子所构成. 同样利用等效媒质理论, 可以把体系等效为等效质量密度 ρ_{eff} 与等效体模量的倒数 $1/\kappa_{\text{eff}}$ 都等于零的材料 [59].

4 两维光子晶体中的界面态

在之前的讨论中, 我们研究了两维和三维类狄拉克点, 并揭示了类狄拉克点与零折射率材料之间的关系. 接下来我们要研究类狄拉克点所引起的有趣现象. 在两维光子晶体中, 界面态的存在条件并

没有一个简单的解析表达式可以描述 [70], 只有在等效媒质理论适用的条件下, 界面态的存在条件可以通过解析表达式给出. 人们可以通过数值模拟来研究光子晶体中是否存在界面态 [70]. 然而对于具有类狄拉克点的两个半无限大两维光子晶体, 如果调节其柱子的半径或者介电常数, 使得三重简并的类狄拉克点变成一个单态和一个两重简并态, 此时这两个光子晶体所构成的界面处一定存在界面态 [65]. 如图 6(a) 所示, 两个半无限大正方晶格光子晶体构成沿 y 方向的界面, 界面左边 (蓝色) 和右边 (粉红色) 光子晶体中柱子的相对介电常数和半径分别为: ε_1, R_1 和 ε_2, R_2 . 两个光子晶体的体能带如图 6(b) 所示, 蓝色表示 $\varepsilon_1 = 10, R_1 = 0.205a$ 的光子晶体, 红色表示 $\varepsilon_2 = 12.5, R_2 = 0.22a$ 的光子晶体, a 表示正方晶格的晶格常数. 为了研究这两个光子晶体的界面态, 我们算出两个光子晶体沿 $\mathbf{k}_y$ 方向的投影能带, 如图 6(c) 所示, 图中的蓝色和红色分别对应左边和右边两个光子晶体的投影能带, 其中白色表示共同能隙. 如图所示, 投影能带有四个共同能隙. 界面态存在的首要条件是两个光子晶体必须具有共同能隙, 但是这并不代表只要有共同能隙就肯定存在界面态. 现在两个光子晶体有四个共同能隙, 究竟哪些能隙中容许界面态的存在, 哪些又不容许? 通过数值计算我们可以得到界面态的色散关系, 如图 6(c) 中的绿线所示, 界面态存在于其中两个共同能隙中, 其余共同能隙则不支持界面态.

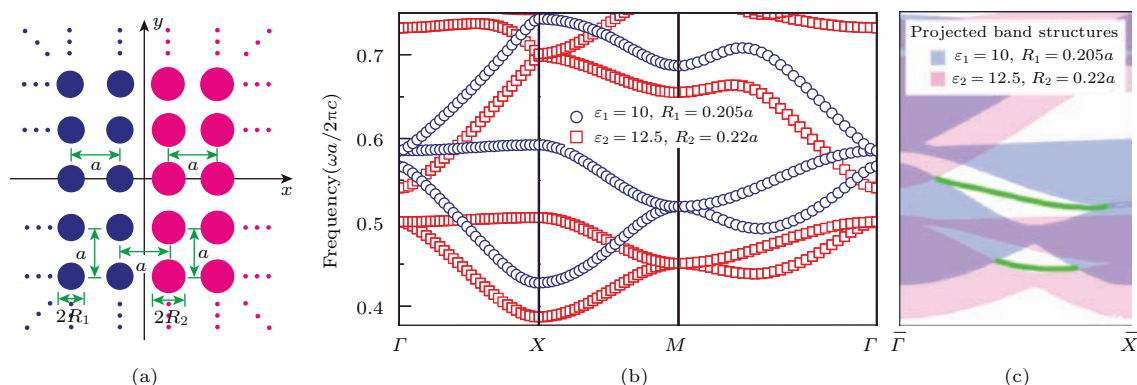


图 6 (a) 两个半无限大两维光子晶体构成沿 y 方向的界面, 左边和右边光子晶体中柱子的相对介电常数和半径分别为 ε_1, R_1 和 ε_2, R_2 ; (b) 两个光子晶体的体能带, 蓝色表示 $\varepsilon_1 = 10, R_1 = 0.205a$ 的光子晶体, 红色表示 $\varepsilon_2 = 12.5, R_2 = 0.22a$ 的光子晶体, a 表示正方晶格的晶格常数; (c) 两个光子晶体沿 $\mathbf{k}_y$ 方向的投影能带, 蓝色和红色分别表示左边和右边光子晶体, 绿线表示界面态的色散关系

Fig. 6. (a) The schematic picture for the interface along the y -direction formed by two semi-infinite two-dimensional photonic crystals, the relative permittivities and radii of the cylinders in the left and right PCs are ε_1, R_1 and ε_2, R_2 , respectively; (b) the bulk band structures for two PCs with $\varepsilon_1 = 10, R_1 = 0.205a$ (blue color) and $\varepsilon_2 = 12.5, R_2 = 0.22a$ (red color); (c) the projected band structures of the two PCs, blue and red colors denote the left and right PCs, respectively. The two green lines represent bands of interface states.

由于界面态具有比较大的波矢, 此时等效媒质理论已经不再适用. 前人发现光子晶体之间界面态存在的条件是两光子晶体的表面阻抗之和为零^[71]. 利用层状多重散射理论, 我们可以得到两光子晶体的表面阻抗^[72]. 在层状多重散射理论的计算中, 我们只保留层间的0阶衍射, 忽略高阶衍射, 得到有限厚度光子晶体的透射系数和反射系数, 通过透射和反射系数从而得到该光子晶体的表面阻抗. 由于光子晶体没有损耗, 因此在投影能带的能隙中, 表面阻抗是一个纯虚数, 而在投影能带的通带中则是纯实数. 如图7(a)和7(b)中所示, 我们利用表面阻抗的虚部来标记投影能带的不同区域, 绿色表示表面阻抗的虚部为零, 对应着投影能带的通带, 蓝色和红色分别表示表面阻抗的虚部大于零和小于零, 它们对应着能隙. 而黑色区域表示高阶衍射起

作用的区域, 这并不是我们感兴趣的区域, 所以在这里的讨论中就不再考虑. 从图7(a)和7(b)中可以明显看到, 在某些频率处, 两个光子晶体表面阻抗的符号正好相反. 对于固定的 k_y , 每个能隙中的表面阻抗随着频率的变化都是单调的, 而且在表面阻抗小于0的区域, 随着频率的增加, 表面阻抗从0变化到 $-\infty$, 而在表面阻抗大于0的区域, 随着频率的增加, 表面阻抗从 $+\infty$ 变化到0^[65,73]. 因此在表面阻抗符号相反的频率区域, 界面态存在的条件一定得以满足, 也就是说此时一定存在界面态. 这就解析了为什么图6(c)中存在两条界面态色散曲线. 界面态的存在经常与体能带的拓扑特性相关^[74-85]. 为了研究体能带的拓扑特性, 我们固定 $k_y = 0.6\pi/a$, 如图7(a)和7(b)中的黄色虚线所示, 此时体能带就变成沿 k_x 方向的约化一维

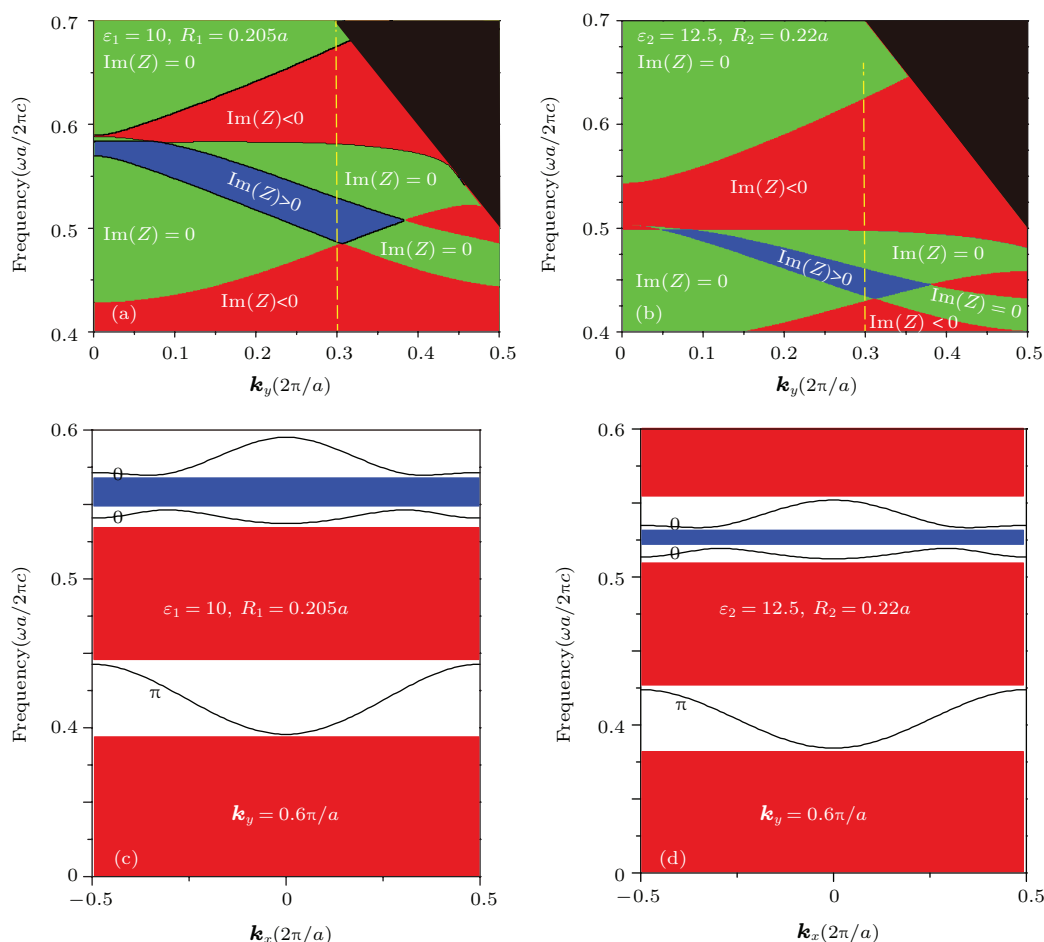


图7 (a), (b) 通过层状多重散射理论得到的光子晶体投影能带中表面阻抗 $\text{Im}[Z(\omega, \mathbf{k}_y)]$ 的符号, 两光子晶体的参数与图6中一致, 红色和蓝色分别表示表面阻抗小于0和大于0, 绿色表示投影能带的通带; (c), (d) 固定 $k_y = 0.6\pi/a$ 时, 两光子晶体的约化一维体能带, 每条能带的几何相位如图中所示

Fig. 7. (a), (b) The effective surface impedances $\text{Im}[Z(\omega, \mathbf{k}_y)]$ in the projected band structures of two PCs calculated by the layer-by-layer multiple scattering theory, the parameters of two PCs are the same as shown in Fig. 6, the red and blue colors denote $\text{Im}[Z(\omega, \mathbf{k}_y)] < 0$ and $\text{Im}[Z(\omega, \mathbf{k}_y)] > 0$, respectively, the green color marks the propagating band region; (c), (d) the reduced 1D band structures for two PCs at a fixed $k_y = 0.6\pi/a$, the Zak phases of the bands are labeled with green colored numbers.

能带, 如图 7(c) 和 7(d) 所示. 在一维光子晶体中, 两个相邻能隙的表面阻抗 $\text{Im}[Z(\omega, \mathbf{k}_y)]$ 的符号与这两个能隙之间的体能带的几何相位 (Zak 相位) ϕ 之间满足如下体与界面的对应关系^[65,73]:

$$\frac{\text{Sgn}[\text{Im}[Z_n(\omega, \mathbf{k}_y)]]}{\text{Sgn}[\text{Im}[Z_{n-1}(\omega, \mathbf{k}_y)]]} = e^{i(\phi_{n-1} + \pi)}. \quad (1)$$

能带的几何相位 ϕ 可以根据能带的本征模式通过具体的表达式由数值计算得到^[86], 同时也可以通过约化一维能带的高对称性点处的本征模式的对称性来得到^[65]. 对于横磁极化下, 我们很容易知道最低能隙的表面阻抗总是小于 0, 通过约化一维能带的几何相位 ϕ , 就可以依次得到所有能隙的表面阻抗符号. 基于表面阻抗的符号再加上能隙中表面阻抗变化的单调性, 从图 7(c) 和 7(d) 中, 可以很容易看到有两个共同能隙具有符号相反的表面阻抗, 因此在这两个能隙中存在界面态. 这与图 6(c) 中数值模拟得到的界面态色散关系完全符合. 由此, 通过体能带的几何相位以及体与界面的对应关系, 我们解释了界面态的存在.

5 总 结

本文通过偶然简并实现 $\mathbf{k} = 0$ 处的二维和三维类狄拉克点. 如果二维(三维)类狄拉克点是由单极子和偶极子(电偶极子和磁偶极子)形成, 此时二维(三维)光子晶体在类狄拉克点频率就可以等效为双零折射率材料. 这就是类狄拉克点与零折射率材料之间的微妙关系. 此外, 类狄拉克点还可以由其他模式偶然简并而成, 不过此时体系就不能用等效参数来描述. 利用 $\mathbf{k} = 0$ 处的类狄拉克点, 我们发现在两个半无限大的二维光子晶体所形成的界面处一定存在界面态. 通过层状多重散射理论和体能带的几何相位, 我们解释了界面态的存在.

参考文献

- [1] Dirac P A M 1928 *Proc. R. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci.* **117** 610
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [4] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201

- [5] Gusynin V P, Sharapov S G 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146801
- [6] Novoselov K S, Jiang Z, Zhang Y, Morozov S V, Stormer H L, Zeitler U, Maan J C, Boebinger G S, Kim P, Geim A K 2007 *Science* **315** 1379
- [7] Katsnelson M I 2006 *Eur. Phys. J. B* **51** 157
- [8] Cserti J, David G 2006 *Phys. Rev. B* **74** 172305
- [9] Rusin T M, Zawadzki W 2007 *Phys. Rev. B* **76** 195439
- [10] David G, Cserti J 2010 *Phys. Rev. B* **81** 121417
- [11] Neto A H C, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [12] Katsnelson M I, Novoselov K S, Geim A K 2006 *Nat. Phys.* **2** 620
- [13] Morozov S V, Novoselov K S, Katsnelson M I, Schedin F, Ponomarenko L A, Jiang D, Geim A K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 016801
- [14] Geim A K, MacDonald A H 2007 *Phys. Today* **60** 35
- [15] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [16] Plihal M, Maradudin A A 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8565
- [17] Sepkhanov R A, Bazaliy Ya B, Beenakker C W J 2007 *Phys. Rev. A* **75** 063813
- [18] Diem M, Koschny T, Soukoulis C M 2010 *Physica B* **405** 2990
- [19] Sepkhanov R A, Nilsson J, Beenakker C W J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 045122
- [20] Zhang X 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 113903
- [21] Zhang X, Liu Z 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 264303
- [22] Raghu S, Haldane F D M 2008 *Phys. Rev. A* **78** 033834
- [23] Haldane F D M, Raghu S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013904
- [24] Ochiai T, Onoda M 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155103
- [25] Ochiai T 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 225502
- [26] Veselago V G 1968 *Sov. Phys. Usp.* **10** 509
- [27] Shelby R A, Smith D R, Schultz S 2001 *Science* **292** 77
- [28] Smith D R, Padilla W J, Vier D C, Nemat-Nasser S C, Schultz S 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4184
- [29] Zhang S, Fan W, Panoiu N C, Malloy K J, Osgood R M, Brueck S R J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 137404
- [30] Shalaev V M, Cai W, Chettiar U K, Yuan H K, Sarychev A K, Drachev V P, Kildishev A V 2005 *Opt. Lett.* **30** 3356
- [31] Dolling G, Wegener M, Soukoulis C M, Linden S 2007 *Opt. Lett.* **32** 53
- [32] Pendry J B 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3966
- [33] Fang N, Lee H, Sun C, Zhang X 2005 *Science* **308** 534
- [34] Pendry J B, Schurig D, Smith D R 2006 *Science* **312** 1780
- [35] Leonhardt U 2006 *Science* **312** 1777
- [36] Schurig D, Mock J J, Justice B J, Cummer S A, Pendry J B, Starr A F, Smith D R 2006 *Science* **314** 977
- [37] Rahm M, Schurig D, Roberts D A, Cummer S A, Smith D R, Pendry J B 2008 *Photon. Nanostruct. Fundam. Appl.* **6** 87
- [38] Yang T, Chen H Y, Luo X D, Ma H R 2008 *Opt. Express* **16** 18545
- [39] Chen H Y, Chan C T 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 241105

- [40] Lai Y, Ng J, Chen H Y, Han D, Xiao J, Zhang Z Q, Chan C T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 253902
- [41] Silveirinha M, Engheta N 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 157403
- [42] Silveirinha M, Engheta N 2007 *Phys. Rev. B* **75** 075119
- [43] Silveirinha M G, Engheta N 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245109
- [44] Alu A, Engheta N 2008 *Phys. Rev. B* **78** 045102
- [45] Alu A, Silveirinha M G, Engheta N 2008 *Phys. Rev. E* **78** 016604
- [46] Edwards B, Alu A, Silveirinha M G, Engheta N 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 044905
- [47] Liu R, Cheng Q, Hand T, Mock J J, Cui T J, Cummer S A, Smith D R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 023903
- [48] Edwards B, Alu A, Young M E, Silveirinha M, Engheta N 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 033903
- [49] Halterman K, Feng S 2008 *Phys. Rev. A* **78** 021805
- [50] Ziolkowski R W 2004 *Phys. Rev. E* **70** 046608
- [51] Enoch S, Tayeb G, Sabouroux P, Guerin N, Vincent P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 213902
- [52] Alu A, Silveirinha M G, Salandrino A, Engheta N 2007 *Phys. Rev. B* **75** 155410
- [53] Hao J, Yan W, Qiu M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 101109
- [54] Jin Y, He S 2010 *Opt. Express* **18** 16587
- [55] Nguyen V C, Chen L, Halterman K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 233908
- [56] Xu Y, Chen H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 113501
- [57] Huang X, Lai Y, Hang Z H, Zheng H, Chan C T 2011 *Nat. Mater.* **10** 582
- [58] Chan C T, Hang Z H, Huang X 2012 *Advances in Optoelectronics* **2012** 313984
- [59] Chan C T, Huang X, Liu F, Hang Z H 2012 *PIER B* **44** 163
- [60] Wang L G, Wang Z G, Zhang J X, Zhu S Y 2009 *Opt. Lett.* **34** 1510
- [61] Mei J, Wu Y, Chan C T, Zhang Z Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 035141
- [62] Liu F, Huang X, Chan C T 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 071911
- [63] Liu F, Lai Y, Huang X, Chan C T 2011 *Phys. Rev. B* **84** 224113
- [64] Sakoda K 2012 *Opt. Express* **20** 3898
- [65] Huang X, Xiao M, Zhang Z Q, Chan C T 2014 *Phys. Rev. B* **90** 075423
- [66] Sakoda K, Zhou H 2010 *Opt. Express* **18** 27371
- [67] Sakoda K, Zhou H 2011 *Opt. Express* **19** 13899
- [68] Wu Y, Li J, Zhang Z Q, Chan C T 2006 *Phys. Rev. B* **74** 085111
- [69] Moitra P, Yang Y, Anderson Z, Kravchenko I I, Briggs D P, Valentine J 2013 *Nat. Photon.* **7** 791
- [70] Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N, Meade R D 2008 *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (2nd Ed.) (Princeton: Princeton University Press)
- [71] Lawrence F J, Botten L C, Dossou K B, McPhedran R C, de Sterke C M 2010 *Phys. Rev. A* **82** 053840
- [72] Lawrence F J, Botten L C, Dossou K B, de Sterke C M, McPhedran R C 2009 *Phys. Rev. A* **80** 023826
- [73] Xiao M, Zhang Z Q, Chan C T 2014 *Phys. Rev. X* **4** 021017
- [74] Wang Z, Chong Y, Joannopoulos J D, Soljacic M 2009 *Nature* **461** 772
- [75] Rechtsman M C, Zeuner J M, Plotnik Y, Lumer Y, Podolsky D, Dreisow F, Nolte S, Segev M, Szameit A 2013 *Nature* **496** 196
- [76] Khanikaev A B, Mousavi S H, Tse W K, Kargarian M, MacDonald A H, Shvets G 2013 *Nat. Mater.* **12** 233
- [77] Lu L, Fu L, Joannopoulos J D, Soljacic M 2013 *Nat. Photon.* **7** 294
- [78] Fang K, Yu Z, Fan S 2012 *Nat. Photon.* **6** 782
- [79] Hafezi M, Demler E A, Lukin M D, Taylor J M 2011 *Nat. Phys.* **7** 907
- [80] Wang Z, Chong Y D, Joannopoulos J D, Soljacic M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013905
- [81] Yu Z, Veronis G, Wang Z, Fan S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 023902
- [82] Kraus Y E, Lahini Y, Ringel Z, Verbin M, Zilberberg O 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 106402
- [83] Poo Y, Wu R X, Lin Z, Yang Y, Chan C T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 093903
- [84] Plotnik Y, Rechtsman M C, Song D, Heinrich M, Zeuner J M, Nolte S, Lumer Y, Malkova N, Xu J, Szameit A, Chen Z, Segev M 2014 *Nat. Mater.* **13** 57
- [85] Rechtsman M C, Plotnik Y, Zeuner J M, Song D, Chen Z, Szameit A, Segev M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 103901
- [86] Zak J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 2747

SPECIAL ISSUE—Recent developments and applications of computational physics

Dirac-like cones at $k = 0$ *

Huang Xue-Qin Chan Che-Ting[†]

(Department of Physics and Institute for Advanced Study, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong, China)

(Received 6 May 2015; revised manuscript received 15 June 2015)

Abstract

Dirac cones and Dirac points are found at the K (K') points in the Brillouin zones of electronic and classical waves systems with hexagonal or triangular lattices. Accompanying the conical dispersions, there are many intriguing phenomena including quantum Hall effect, Zitterbewegung and Klein tunneling. Such Dirac cones at the Brillouin zone boundary are the consequences of the lattice symmetry and time reversal symmetry. Conical dispersions are difficult to form in the zone center because of time reversal symmetry, which generally requires the band dispersions to be quadratic at $k = 0$. However, the conical dispersions with a triply degenerate state at $k = 0$ can be realized in two dimensional (2D) photonic crystal (PC) using accidental degeneracy. The triply degenerate state consists of two linear bands that generate Dirac cones and an additional flat band intersecting at the Dirac point. If the triply degenerate state is derived from the monopolar and dipolar excitations, effective medium theory can relate this 2D PC to a double zero-refractive-index material with effective permittivity and permeability equal to zero simultaneously. There is hence a subtle relationship between two seemingly unrelated concepts: Dirac-like cone and zero-refractive index. The all-dielectric “double zero”-refractive-index material has advantage over metallic zero-index metamaterials which are usually poorly impedance matched to the background and are lossy in high frequencies. The Dirac-like cone zero-index materials have impedances that can tune to match the background material and the loss is small as the system has an all-dielectric construction, enabling the possibility of realizing zero refractive index in optical frequencies. The realization of Dirac-like cones at $k = 0$ can be extended from the electromagnetic wave system to acoustic and elastic wave systems and effective medium theory can also be applied to relate these systems to zero-index materials. The concept of Dirac/Dirac-like cone is intrinsically 2D. However, using accidental degeneracy and special symmetries, the concept of Dirac-like point can be extended from two to three dimensions in electromagnetic and acoustic waves. Effective medium theory is also applicable to these systems, and these systems can be related to isotropic media with effectively zero refractive indices. One interesting implication of Dirac-like cones in 2D PC is the existence of robust interface states. The existence of interface states is not a trivial problem and there is usually no assurance that localized state can be found at the boundary of photonic or phononic crystal. In order to create an interface state, one usually needs to decorate the interface with strong perturbations. Recently, it is found that interface state can always be found at the boundary separating two semi-infinite PCs which have their system parameters slightly perturbed from the Dirac-like cone formation condition. The assured existence of interface states in such a system can be explained by the sign of the surface impedance of the PCs on either side of the boundary which can be derived using a layer-by-layer multiple scattering theory. In a deeper level, the existence of the interface state can be accounted for by the geometric properties of the bulk band. It turns out that the geometric phases of the bulk band determine the surface impedance within the frequency range of the band gap. The geometric property of the momentum space can hence be used to explain the existence of interface states in real space through a bulk-interface correspondence.

Keywords: photonic crystal, Dirac-like cone, zero-refractive-index, interface state

PACS: 42.70.Qs, 42.25.-p

DOI: 10.7498/aps.64.184208

* Project supported by Hong Kong Research Grant Council (Grant No. AoE/P-02/12).

† Corresponding author. E-mail: phchan@ust.hk