

# 群论在光子带隙计算中的应用\*

张海涛<sup>1)</sup> 巩马理<sup>1)</sup> 王东生<sup>1)</sup> 李 伟<sup>1)</sup> 赵达尊<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 清华大学精密仪器与机械学系, 北京 100084)

<sup>2)</sup> 北京理工大学颜色科学与工程国家专业实验室, 北京 100081)

(2003 年 10 月 20 日收到, 2004 年 1 月 26 日收到修改稿)

介绍群论在光子晶体带隙平面波展开法计算中的应用, 推导了改进后的算法公式. 通过计算实例的比较, 显示了群论应用对算法内存需求空间及计算时间的减少.

关键词: 群论, 光子晶体, 光子带隙, 平面波展开

PACC: 0350, 4270Q

## 1. 引言

光子晶体是由不同介电常数的介质材料在空间按一定的周期排列组成的人造材料, 能够产生光子带隙, 频率落在带隙内的光在晶体内被禁止传播<sup>[1-5]</sup>. 光子晶体的许多应用都是基于光子带隙的存在和大小, 因此光子晶体带结构的理论研究具有重要意义. 平面波展开(PWE)法<sup>[6,7]</sup>是光子晶体理论研究中应用最早和最广的计算方法, 除了带结构, 亦可方便获得光子晶体的透射、反射谱, 其计算量与展开的平面波数目有很大关系. 本文在 Sakoda<sup>[8,9]</sup>光子晶体群论分析的基础上, 进一步将群论对称分类思想应用到光子带隙的计算中, 减少展开平面波数目, 实现 PWE 算法速度的提高. 并且, 文献 [10, 11] 利用光子晶体结构的平移、旋转对称性来减少转移矩阵等计算方法的内存空间需求, 与此处利用群论改善 PWE 法计算性能的思想有异曲同工之处.

## 2. PWE

考察介电常数在  $z$  方向均匀分布、 $x-y$  平面周期分布的二维光子晶体, 设波矢  $k$  位于  $x-y$  平面, 即  $k = (k_x, k_y, 0)$ , 由麦克斯韦方程导出的矢量波方程, 可简化为独立的  $H$  偏振 ( $H = (0, 0, H_z)$ ) 和  $E$  偏振 ( $E = (0, 0, E_z)$ ) 的两个标量本征方程式<sup>[12]</sup>即

$$L_H H_z(\mathbf{r}) \equiv - \left[ \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial y} \right] H_z(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} H_z(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$L_E E_z(\mathbf{r}) \equiv - \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] E_z(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} E_z(\mathbf{r}), \quad (2)$$

其中  $\mathbf{r}$  为位置矢量 ( $x, y$ ),  $\epsilon(\mathbf{r})$  为位置  $\mathbf{r}$  处的相对介电常数,  $c$  为真空中光速,  $\omega$  为本征角频率, 算符  $L_H, L_E$  的定义分别由方程(1)和(2)中的恒等式给出.

为了解方程(1)和(2), 将  $\epsilon^{-1}(\mathbf{r}), H_z(\mathbf{r})$  和  $E_z(\mathbf{r})$  分别按(3)(4)和(5)式展开:

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} \kappa(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3)$$

$$H_z(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} A(\mathbf{k} | \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (4)$$

$$E_z(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} B(\mathbf{k} | \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (5)$$

其中  $\mathbf{G}$  为倒格矢,  $\kappa(\mathbf{G})$  表示  $\epsilon^{-1}(\mathbf{r})$  的 PWE 系数,  $A(\mathbf{k} | \mathbf{G}), B(\mathbf{k} | \mathbf{G})$  为  $H_z(\mathbf{r})$  和  $E_z(\mathbf{r})$  在波矢  $\mathbf{k}$  条件下的 PWE 系数. 若元倒格矢为  $(b_1, b_2)$ , 则  $\epsilon(\mathbf{r})$  的布拉菲格子对应的二维倒格矢可表示为  $\mathbf{G} = \xi b_1 + \eta b_2$ ,  $\xi$  和  $\eta$  为整数. 取有限个平面波 ( $|\xi| \leq m, |\eta| \leq n$ ), 将(3)-(5)式代入方程(1)和(2), 得

$$\sum_{\xi' = -m}^m \sum_{\eta' = -n}^n C_G [ \mathbf{k} | (\xi', \eta') ] A [ \mathbf{k} | (\xi', \eta') ]$$

\* 国家重点基础研究发展规划项目(批准号 51307)资助的课题.

$$\begin{aligned} &\equiv \sum_{G'} \chi(G - G') \chi(k + G) \chi(k + G') A(k | G') \\ &= \frac{\omega^2}{c^2} A(k | G), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{\xi'=-m}^m \sum_{\eta'=-n}^n D_G[k | (\xi', \eta')] B[k | (\xi', \eta')] \\ &\equiv \sum_{G'} \chi(G - G') |k + G'|^2 B(k | G') \\ &= \frac{\omega^2}{c^2} B(k | G), \end{aligned} \quad (7)$$

其中  $G' = \xi' b_1 + \eta' b_2$ ,  $\xi'$  和  $\eta'$  为整数, 波矢  $k$  条件下的系数矩阵  $C_G[k | (\xi', \eta')]$  和  $D_G[k | (\xi', \eta')]$  的定义由方程 (6) 和 (7) 中的恒等式给出. 这样, 给定波矢  $k$ , 方程 (6) 和 (7) 分别变成含有  $(2m+1) \times (2n+1)$  维本征矢量的本征方程, 系数矩阵  $C_G, D_G$  大小则为  $(4mn + 2m + 2n + 1)^2$ , 采用数值计算方法可解得  $H, E$  偏振的本征值  $\omega$  和本征矢量  $A(k | G), B(k | G)$ , 然后求出带结构和场分布等.

在一些应用中, 需要在整个布里渊区求解带结构, 如态密度计算、第一布里渊区频率等高线等. 对于复杂的二维结构和几乎任意三维结构的光子晶体, 用 PWE 法求解完整的带结构, 其计算量相当大. 所幸的是, 大多数应用, 包括带隙查找、带隙优化, 以及缺陷模式的色散计算等, 只需考察位于不可约 (irreducible) 布里渊区内具有高度对称性的波矢子集即可. 由群论可知, 整个布里渊区带结构极点一定发生在这些高度对称波矢点上, 所以在对称波矢点上找到的带隙, 一定与在整个布里渊区中的计算结果相一致. 将群论对这些对称波矢点条件下的模式分类思想应用到 PWE 法中, 可进一步减少 PWE 数, 提高光子带隙计算速度.

### 3. 群论的应用

随位置变化的  $\epsilon(\mathbf{r})$  若在对称操作  $R$  的作用下保持不变,

$$R\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{k}), \quad (8)$$

$\mathbf{R}$  为对称操作  $R$  的  $2 \times 2$  正交矩阵表达式, 则可证得<sup>[8]</sup>

$$RL_H R^{-1} = L_H, \quad RL_E R^{-1} = L_E. \quad (9)$$

(9) 式表明  $L_H, L_E$  的本征函数  $E_z(\mathbf{r}), H_z(\mathbf{r})$  亦同时为对称操作  $R$  的本征函数, 即

$$RE_z(\mathbf{r}) = \chi(R)E_z(\mathbf{r}), \quad RH_z(\mathbf{r}) = \chi(R)H_z(\mathbf{r}), \quad (10)$$

其中  $\chi(R)$  为对称操作  $R$  的本征值. 若  $\epsilon(\mathbf{r})$  具有一个或多个镜对称平面, 即  $R = \sigma$  ( $\sigma$  表示镜对称操作) 则通常用于带结构计算的不可约布里渊区的对称波矢  $k$  至少属于  $C_{1h} = \{E, \sigma\}$  点群<sup>[13]</sup>.  $C_{1h}$  点群中的操作  $E$  是保持结构不变的恒等运算, 对应单位矩阵表达式, 所以在以下的讨论中若非特别说明, 均取  $R = \sigma$ . 镜对称  $\sigma$  在不同的对称面下, 对应不同的矩阵表达式, 如常见的对称操作  $\sigma_x$  (对称面垂直于  $x$  轴),  $\sigma_y$  (对称面垂直于  $y$  轴) 和  $\sigma_d$  (对称面为  $x = y$  平面), 矩阵表达式分别为

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\sigma_x} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{R}_{\sigma_y} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{R}_{\sigma_d} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

在  $C_{1h}$  点群中所有对称操作下保持不变的波矢  $k$  条件下场分布  $E_z(\mathbf{r}), H_z(\mathbf{r})$  有  $A, B$  两种模式:  $R$  的本征值  $\chi(R) = 1$  时定义为  $A$  模,  $\chi(R) = -1$  时定义为  $B$  模, 再由 (4) (5) 和 (10) 式, 可证得 (证明此处从略)

$$\begin{aligned} RA(k | G) &= A(k | \mathbf{R}^{-1}G) = \chi(R)A(k | G), \\ RB(k | G) &= B(k | \mathbf{R}^{-1}G) = \chi(R)B(k | G). \end{aligned} \quad (12)$$

由此可知, 对任一属于  $C_{1h}$  点群的波矢  $k$ , 自变量  $\mathbf{R}^{-1}G$  和  $G$  分别对应的倒格子空间的展开系数  $A(k | G), B(k | G)$  构成的本征矢量, 具有简单的奇、偶对称关系, 所以将 (12) 式代入 (6) (7) 式后, 由本征矢量  $A(k | G), B(k | G)$  构成的本征方程矩阵元能够减少 1/2, 即 PWE 数减少 1/2, 方程系数减少 3/4,

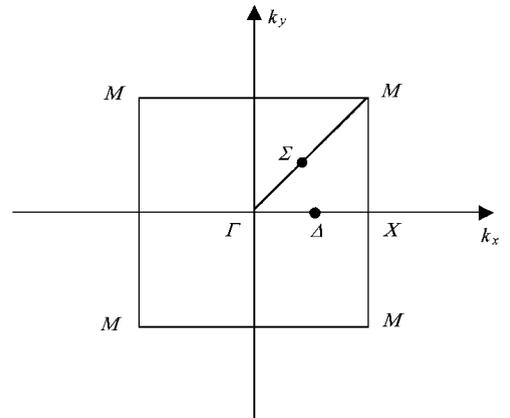


图 1 二维正方格子光子晶体的第一布里渊区

从而使计算量减小.

以正方格子光子晶体为例对应用群论对 PWE 法改进的原理进行具体说明. 图 1 为正方格子的第一布里渊区示意图. 图中波矢点  $\Gamma$ ,  $\Delta$ ,  $X$ ,  $M$  和  $\Sigma$  分别表示波矢  $k$  为  $(0, 0)$ ,  $(k_x, 0)$ ,  $(\pi/a, 0)$ ,  $(\pi/a, \pi/a)$  和  $(k_x, k_x)$ , 其中  $a$  为晶格常数,  $|k_x| \leq \pi/a$ . 显然,  $\Delta$  和  $\Sigma$  在  $C_{4h}$  点群的所有对称操作下保持不变; 除操作  $E$  外,  $\Delta$  的对称操作为  $\sigma_y$ ,  $\Sigma$  的对称操作为  $\sigma_x$ . 具有更高对称性的  $\Gamma$  为  $\Delta$  和  $\Sigma$  在  $k_x = 0$  时的特殊点,  $X$  和  $M$  分别为  $\Delta$  和  $\Sigma$  在  $k_x = \pi/a$  时的特殊点, 所以  $\Gamma$ ,  $X$  和  $M$  同样满足 (12) 式. 当波矢  $k$  位于  $\Delta$  点时, 将 (12) 式代入 (6) 式, 由于是正方格子, 可令  $m = n$ , 于是得到  $\Delta$  点  $E$  偏振本征方程为

$$\begin{aligned} & \sum_{\xi'=-m}^m \sum_{\eta'=1}^m \{C_G[\Delta | (\xi', \eta')] + \chi(\sigma_y) \\ & \times C_G[\Delta | (\xi', -\eta')]\} A[\Delta | (\xi', \eta')] \\ & + \sum_{\xi'=-m}^m C_G[\Delta | (\xi', 0)] A[\Delta | (\xi', 0)] \\ & = \frac{\omega^2}{c^2} A(\Delta | G). \end{aligned} \quad (13)$$

类似地,  $\Sigma$  点  $E$  偏振满足本征方程:

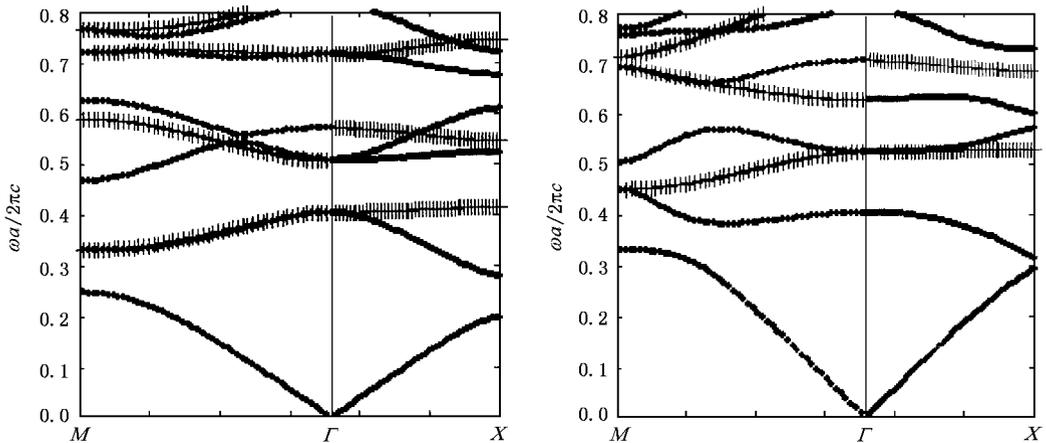
$$\begin{aligned} & \sum_{\xi'=-m}^m \sum_{\eta'=\xi'+1}^m \{C_G[\Sigma | (\xi', \eta')] + \chi(\sigma_x) \\ & \times C_G[\Sigma | (\eta', \xi')]\} A[\Sigma | (\xi', \eta')] \\ & + \sum_{\xi'=-m}^m C_G[\Sigma | (\xi', \xi')] A[\Sigma | (\xi', \xi')] \end{aligned}$$

$$= \frac{\omega^2}{c^2} A(\Sigma | G). \quad (14)$$

对任一位于  $\Delta$  和  $\Sigma$  点的波矢  $k$  而言 (13) (14) 式的本征方程矩阵元个数即  $(2m+1) \times (m+1)$  在  $m$  较大时, 几乎减少到群论应用之前即求解 (6) (7) 式时的  $(2m+1) \times (2m+1)$  的 1/2, 而系数矩阵的大小也由原来的  $(2m+1) \times (2m+1)^2$  降为  $(2m+1) \times (m+1)^2$ , 仅系数矩阵这一项, 就可减少约 3/4 的计算机内存需求.  $E$  偏振的情形类似, 将 (13) (14) 式中  $C_G$  替换成  $D_G$ , 即为  $\Delta$  和  $\Sigma$  点的  $E$  偏振改进后的本征方程, 不再赘述.

### 4. 计算实例

以  $\epsilon = 9.0$  的圆介质柱和背景  $\epsilon = 1.0$  的正方格子为例, 设晶格常数对圆柱半径之比为 1:0.38, 利用 (13) (14) 式所示的改进 PWE 后的方法, 计算该光子晶体的带结构和模式归类, 结果如图 2 所示. 图 2(a) 和 (b) 分别表示  $E, H$  偏振时的色散曲线. 纵坐标采用标度化的无量纲频率, 而横坐标采用标度化的对称波矢. 计算结果除增加了模式分类和  $H$  偏振时的结果外, 其余的与文献 [14] 用改进前的传统 PWE 公式 (6) (7) 所得结果一致. 图 2  $E$  偏振时的带隙范围 ( $\omega a/2\pi c$ ) 为  $[0.2475, 0.2760]$ ,  $[0.4136, 0.4665]$  和  $[0.6248, 0.6740]$ ;  $H$  偏振时的带隙范围很小, 为  $[0.5698, 0.5967]$  和  $[0.7040, 0.7140]$ .



(a)  $E$  偏振 (b)  $H$  偏振

图 2 二维正方格子带结构 ● 为 A 模, + 为 B 模

图 3 比较了应用群论改进 PWE 法之前和之后的平面波个数和计算时间(按照平面波个数为 441 时, 所耗费的计算时间进行归一化)与数值误差 ( $m$

取不同值时在  $[0, 0.8]$  解得的本征值  $\omega a/2\pi c$  与  $m = 11$  时的最大相对偏差)的关系. 从图 3 可以看出,  $E$  偏振和  $H$  偏振的收敛特性差别不大, 计算时间与展

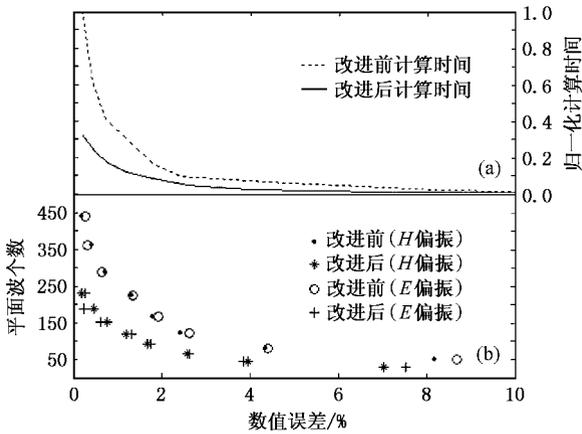


图 3 PWE 法改进前后的平面波数目和归一化计算时间与数值误差的关系比较

开的平面波个数(即方程本征矢量的维数)的关系也不是简单的线性关系,而是随着平面波个数的增多,计算时间的增长速度加快,如本征矢量个数增加一倍,其对应的方程系数矩阵就要增加三倍。很明显,改进后的 PWE 法的计算速度加快:在  $m = 8$  时,改进前后的 PWE 法的数值误差分别为 0.72% 和 0.76%,差别不大,均已下降到 1% 以下,而所用的平面波个数前者(289 个)却是后者(153 个)的 1.9 倍,

前者耗费的时间(0.41)为后者(0.17)的 2.4 倍。另外,使用改进后的 PWE 法只需 276 个平面波即可达到文献[14]中采用的 441 个平面波相当的误差效果,在用相同数值算法和计算硬件条件解本征方程时,前者可比后者节约 2/3 的计算时间。从图 3 还可推断趋势:随着改进前 PWE 法在带隙计算中所需展开平面波个数的继续增加,比较获得相同数值误差时的改进后 PWE 法,后者在计算时间的节约程度方面的优势将更加明显。

## 5. 结 论

光子晶体带隙计算中,考虑不可约布里渊区内高度对称的波矢子集,结合光子晶体内电磁场的对称操作特点,将这些特殊波矢点下的电场、磁场的 PWE 系数的模式特性引入麦克斯韦方程中,从而减少平面波数目和内存空间的需求,将 PWE 法的计算速度提高一倍以上。换言之,当机器的计算速度和内存配置相同时,可以在相同时间内计算具有更高阶介电常数空间调制的光子晶体带隙。这里虽然只讨论了二维光子晶体的情形,但其原理在三维光子晶体的带隙计算中同样适用。

[1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059  
 [2] Pendry J B and MacKinnon A 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2772  
 [3] Wang H and Li Y P 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2172 (in Chinese)  
 [王 辉、李永平 2001 物理学报 **50** 2172]  
 [4] Chou G X, Lin F L and Li Y P 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 600 (in Chinese)  
 [仇高新、林芳蕾、李永平 2003 物理学报 **52** 600]  
 [5] Liu N H et al 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1418 (in Chinese)  
 [刘念华等 2003 物理学报 **52** 1418]  
 [6] Sozuer H S, Haus J W and Inguva R 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13962

[7] Plihal M and Maradudin A A 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8565  
 [8] Sakoda K 1995 *Phys. Rev. B* **52** 7982  
 [9] Sakoda K 1997 *Phys. Rev. B* **55** 15347  
 [10] Li Z Y and Ho K M 2003 *Phys. Rev. B* **67** 165104  
 [11] Li Z Y and Ho K M 2003 *J. Opt. Soc. Am. B* **20** 801  
 [12] Plihal M and Maradudin A A 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4969  
 [13] Inui T, Tanabe Y and Onodera Y 1990 *Group Theory and Its Applications in Physics* (Berlin: Springer) p234  
 [14] Sakoda K, Ueta T and Ohtaka K 1997 *Phys. Rev. B* **56** 4830

# Applications of group theory to calculations of photonic band gap<sup>\*</sup>

Zhang Hai-Tao<sup>1)</sup> Gong Ma-Li<sup>1)</sup> Wang Dong-Sheng<sup>1)</sup> Li Wei<sup>1)</sup> Zhao Da-Zun<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>( *Department of Precision Instruments and Mechanology, Tsinghua University, Beijing 100084, China* )

<sup>2)</sup>( *National Key Laboratory of Color Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China* )

( Received 20 October 2003 ; revised manuscript received 26 January 2004 )

## Abstract

Group theory is introduced into the calculation of photonic band gap with the plane wave expansion method, and improved calculation formulae are derived. Both the analysis and the practical band gap calculation for an exemplary two-dimensional case have shown that, as compared with the conventional plane wave method, the group theory based improved algorithm can substantially release memory-space requirement and reduce computational time.

**Keywords** : group theory, photonic crystal, photonic band gap, plane wave expansion

**PACC** : 0350, 4270Q

---

<sup>\*</sup> Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China ( Grant No. 51307 ).