

微細構造中の光波解析理論

—フォトニック結晶を中心にして—

迫田 和彰

近年、輻射場の制御によって物質の光学的性質を自在に操り、真空中あるいは一様媒質中では起こり得ない光学応答を実現しようとする試みが盛んに行われている。そのひとつとして、可視光の波長程度の周期で誘電率が規則的に変化する物質—フォトニック結晶—が注目を集めている¹⁻⁶⁾。輻射場の固有モードの存在しない周波数領域(フォトニックバンドギャップ)の出現が理論的に示され、数多くの特異な現象が予言されている。フォトニックバンドギャップに関わる諸問題は野田先生の解説にゆずり、本稿ではフォトニック結晶中の輻射場を記述する一般的な枠組みについて紹介する。

1. バンド構造と固有モードの対称性

1.1 バンド計算

電磁場を記述するマクスウェル方程式で誘電率 ϵ が座標 \mathbf{r} に依存する(ただし、透磁率=定数=1)と仮定すれば、電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ と磁場 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ が満たす波動方程式はそれぞれ次のようになる (cgs Gauss 単位系)。

$$\nabla_{\epsilon} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \{ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

$$\nabla_H \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \equiv \nabla \times \left\{ \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right\} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

ただし、 c は光速である。以下では磁場 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ について考える。フォトニック結晶中では $\epsilon(\mathbf{r})$ が周期関数なので、結晶中の電子の場合と同様にブロッホの定理が成り立つ。したがって、結晶格子の基本並進ベクトル \mathbf{a} に対して

$$\mathbf{v}_{kn}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{v}_{kn}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

を満たすベクトル値関数 $\mathbf{v}_{kn}(\mathbf{r})$ を用いて、式(2)の固有関数は

$$\mathbf{H}_{kn}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_{kn}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (4)$$

と表すことができる。ここに、 \mathbf{k} は第1ブリルアンゾーン内の波数、 n はバンドを指定する指数である。フォトニック結晶の逆格子ベクトル \mathbf{G} を用いて $\mathbf{v}_{kn}(\mathbf{r})$ と $\epsilon^{-1}(\mathbf{r})$ をフーリエ展開する：

$$\mathbf{H}_{kn}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G}) \exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}\} \quad (5)$$

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} = \sum_{\mathbf{G}} \chi(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (6)$$

これらを式(2)に代入すると、固有値方程式は

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{G}'} \chi(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \{ (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G}') \} \\ = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} \mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G}) \end{aligned} \quad (7)$$

となる。ただし、 ω_{kn} は固有角周波数である。なお、透磁率は定数と仮定しているため磁場 $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ は横波 ($\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$) である。したがって、式(5)右辺の展開係数 $\mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G})$ は $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ と直交する必要があるため、各 $\mathbf{H}_{kn}(\mathbf{G})$ の独立な空間成分の数は2である。フォトニックバンド(フォトニック結晶中の光の分散関係)を求めるための数値計算では、式(7)の逆格子ベクトルに関する和を適当な個数 N で打ち切り、 $2N$ 次元の固有値問題を解く。通常、 $N = 500$ 程度にとれば1~10%程度の誤差で固有値が得られる。

同様のバンド計算は電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ を用いても行うことができるが、 $\epsilon(\mathbf{r})$ の空間変化のために電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ は純粋な横波ではない。したがって、式(5)に対応する展開式で係数 $\mathbf{E}_{kn}(\mathbf{G})$ には3つの空間成分が必要なので、 $3N$ 次元の固有値問題を解かねばならず、計算時間が余計にかかる。

1.2 固有モードの対称性

フォトニック結晶が何らかの空間的対称性(例えば立方

北海道大学電子科学研究所 (〒060 札幌市北区北12西6)
E-mail: sakoda@el.hokudai.ac.jp

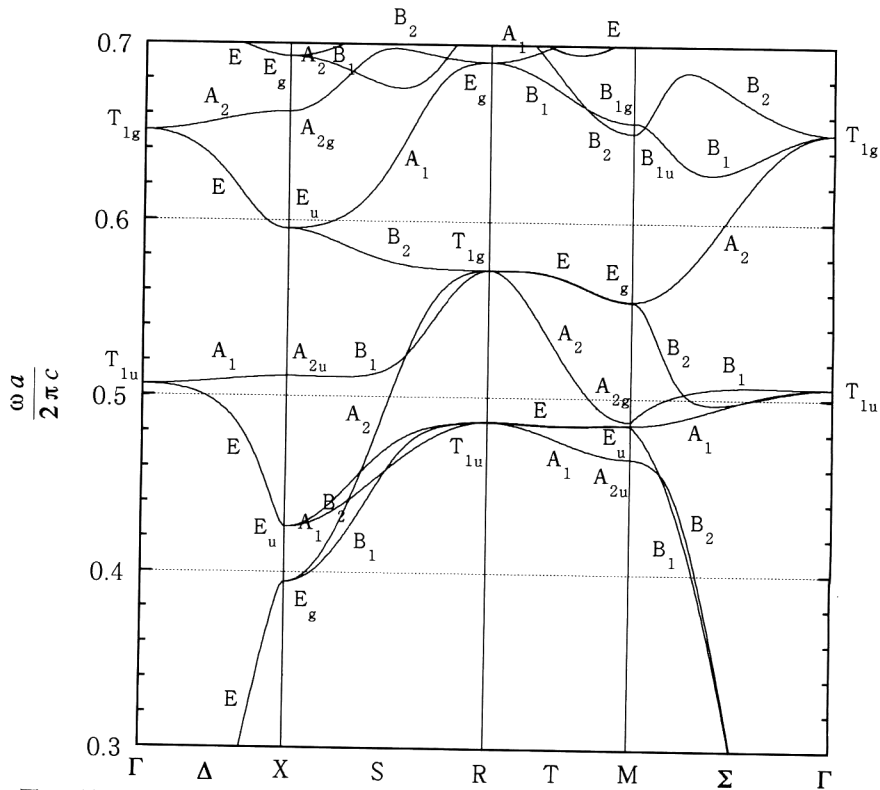


図1 誘電体球からなる単純立方格子のフォトニックバンド. 計算には以下の数値を用いた. 格子定数と球の半径の比=1:0.3, 球の誘電率=13 (文献9) より).

対称, 正方対称など) をそなえている場合, 固有モードにもその対称性が反映する⁷⁻⁹⁾. そこで, フォトニック結晶が点群 M のもとで不変であると仮定しよう. すなわち, M に属する対称操作 R のもとで $\epsilon(\mathbf{r})$ が不変であるとする. このとき, 式(1)と式(2)に現れた微分演算子が R と可換であることが証明できる:

$$R\Omega_E R^{-1} = \Omega_E, \quad R\Omega_H R^{-1} = \Omega_H \quad (8)$$

したがって, よく知られた群論の定理から, 固有関数 $\mathbf{E}_{k\mathbf{n}}(\mathbf{r})$ と $\mathbf{H}_{k\mathbf{n}}(\mathbf{r})$ は \mathbf{k} 群 M_k の既約表現であり, それぞれ固有の空間対称性を有する.

例として, 図1は誘電体球からなる単純立方格子のフォトニックバンドである⁹⁾. 縦軸は格子定数 a と光速 c で規格化した周波数, 横軸は第1ブリルアンゾーン内の波数であり, 図は対称性の高い点について描いた. 図中の T_{1g} 等の記号は磁場 $\mathbf{H}_{k\mathbf{n}}(\mathbf{r})$ の対称性を表す. この図で重要なことは, 対称性の不整合のために Δ 点上の A_1, A_2, B_1, B_2 モード, および, Σ 点上の A_1, A_2 モードが外場(平面波)と結合しないことである. したがって, 例えば周波数が $\omega a/2\pi c \approx 0.6$ の平面波を Γ - M 方向 [(1, 1, 0) 方向] へ入射させても Σ 点上の A_2 モードを励起することはできない. すなわち, 固有モードが存在するにもかかわらず, この周波数領域の透過率はきわめて小さい値になる. 逆に,

フォトニック結晶内部で発生したこの種の電磁モードは結晶外に出ていくことがほとんどできない. したがって, 例えば共振ミラーなしでもレーザー発振が可能である.

2. フォトニック結晶の光透過スペクトル

透過スペクトルの計算法としては, 離散化したマクスウェル方程式の数値解の方法¹⁰⁾, 球面波展開法¹¹⁾, 平面波展開法¹²⁾がある. 図2は平面波展開法で計算した, ポリマー ($\epsilon=2.1$) 中に形成した空洞円柱からなる2次元正方格子の透過スペクトルである¹³⁾. この方法では, フォトニック結晶中の電磁場をフーリエ展開し, 結晶表面で境界条件が正しく満たされるように展開係数を定める. $\omega a/2\pi c \approx 0.72$ を中心とする透過率のくぼみはバンドギャップに対応している. また, その両側に見られる全く周期の異なる2種類の干渉模様は, 群速度が互いに大きく異なる2つのバンドに由来する.

3. フォトニック結晶の光学応答

まず, フォトニック結晶中に生じた外来的な分極, すなわち $\epsilon(\mathbf{r})$ では記述されない分極 $\mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t)$ を源とする電磁場を求める問題を考えよう¹⁴⁾. マクスウェル方程式から次の非斉次波動方程式を得る:

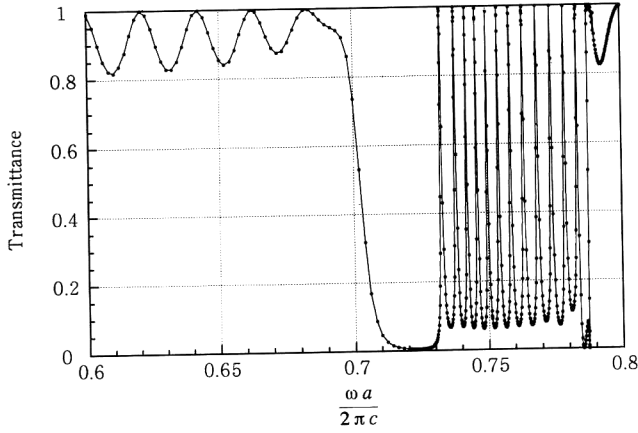


図2 ポリマー ($\epsilon=2.1$) 中に形成した空洞円柱からなる正方格子 (16 層) の透過スペクトル. 横軸は無次元化した周波数. 円柱の軸方向に偏光した入射光が $(1,0)$ 方向に入射するものとして計算した (文献 13) より.

$$-\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + H\right) \mathbf{Q}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c^2 \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t) \quad (9)$$

ただし,

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t) \equiv \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (10)$$

$$H\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \nabla \times \left\{ \nabla \times \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \mathbf{Q}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (11)$$

$\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t)$ が周期的境界条件を満たすとき, H がエルミート演算子であることが証明できる. したがって, H の固有関数の全体は完全正規直交系をなす. この固有関数は,

$$\nabla \times \left\{ \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \mathbf{Q}_{kn}^{(L)}(\mathbf{r}) \right\} = 0 \quad (12)$$

を満たす擬縦モード $\mathbf{Q}_{kn}^{(L)}(\mathbf{r}, t)$ と,

$$\nabla \cdot \left\{ \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})} \mathbf{Q}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r}) \right\} = 0 \quad (13)$$

を満たす擬横モード $\mathbf{Q}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r}, t)$ とに分類できる. これらを用いて, 式(9)の遅延グリーン関数(テンソル) $\underline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ が

$$\underline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -\frac{c^2}{V} \sum_{kn} \left\{ \frac{\sin \omega_{kn}^{(T)} t}{\omega_{kn}^{(T)}} \mathbf{Q}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r}) \otimes \mathbf{Q}_{kn}^{(T)*}(\mathbf{r}') + t \mathbf{Q}_{kn}^{(L)}(\mathbf{r}) \otimes \mathbf{Q}_{kn}^{(L)*}(\mathbf{r}') \right\} \quad (14)$$

と与えられる. ただし, V はフォトニック結晶の体積, \otimes はベクトルの成分同士の積からできるテンソルを表す. これを用いて, 非斉次波動方程式(9)の解は

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \underline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t-t') \\ &\quad \times \frac{4\pi}{c^2 \sqrt{\epsilon(\mathbf{r}')} } \frac{\partial^2}{\partial t'^2} \mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}', t') \\ &= -\frac{4\pi \mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t)}{\epsilon(\mathbf{r})} + \frac{4\pi}{V} \sum_{kn} \frac{\mathbf{Q}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r})}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \int d\mathbf{r}' \\ &\quad \times \int_{-\infty}^t dt' \frac{\mathbf{Q}_{kn}^{(T)*}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}', t')}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r}')}} \end{aligned}$$

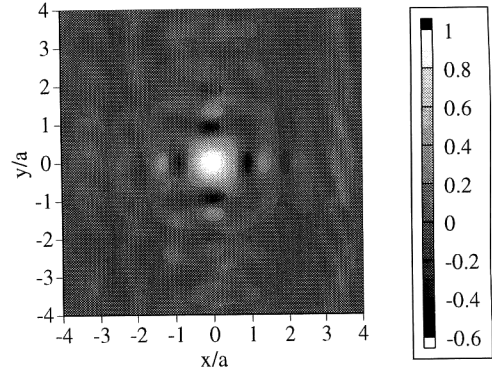


図3 誘電体円柱からなる2次元正方格子上の局在モードの電場分布. 原点の誘電体円柱1本が取り除かれている. 計算には McCall ら¹⁶⁾ の実験に合わせて以下の数値を用いた. 格子定数と円柱の半径の比=1.27:0.48, 円柱の誘電率=9.0 (文献 18) より.

$$\times \omega_{kn}^{(T)} \sin \omega_{kn}^{(T)} (t-t') \quad (15)$$

と求めることができる.

式(15)は種々の問題に応用することができる. まず, 双極子輻射を考えてみよう¹⁴⁾. 双極子の大きさを $\boldsymbol{\mu}$, 角周波数を ω , 位置を \mathbf{r}_0 とすれば, 振動双極子のつくる分極は

$$\mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\mu} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \exp(-i\omega t) \quad (16)$$

これを式(15)に代入して電場を求め, さらにポインティングベクトルを計算すれば, 単位時間当たりに振動双極子から放射される電磁エネルギー U が

$$U = \frac{\pi^2 \omega^2}{V} \sum_{kn} |\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_{kn}^{(T)}(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(\omega - \omega_{kn}^{(T)}) \quad (17)$$

と求まる.

同じ方法は各種の非線形光学応答 (例えば和周波発生) やコヒーレント光学応答 (例えば自由誘導減衰) にも適用することができる^{14,15)}. 前者の場合には $\mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t)$ として結晶中に誘起された非線形分極をとればよく, 後者の場合には密度行列を用いて量子力学的に記述される分極をとればよい. また, 非線形光学応答に関しては, ① バンド端の遅い群速度による増強効果, ② フォトニック結晶特有の分散関係を利用した位相整合, ③ 固有モードの対称性に由来する選択則の存在, が示される.

4. ギャップ内局在モード

フォトニック結晶の周期的な誘電率に局所的乱れを導入すると, バンドギャップ中に局在モードが生じる場合がある^{16,17)}. 局在モードの固有周波数 ω_d と固有関数 $\mathbf{E}_d(\mathbf{r})$ は次のような方法で精度よく求めることができる¹⁸⁾. それには誘電率の局所的な乱れの近傍に置かれた振動双極子からの輻射場を考える. まず, 誘電率の虚数部などに由来する固有周波数のボケ(緩和定数) γ を考慮すると, 式(15)から

電場 $E(\mathbf{r}, t)$ は

$$E(\mathbf{r}, t) \simeq -\frac{2\pi\omega_d \{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_d^*(\mathbf{r}_0)\} \mathbf{E}_d(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)}{V(\omega - \omega_d + i\gamma)} \quad (18)$$

と求まる。また、式(17)は次のように修正される。

$$U \simeq \frac{\pi\omega_d^2 \gamma |\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_d(\mathbf{r}_0)|^2}{V\{(\omega - \omega_d)^2 + \gamma^2\}} \quad (19)$$

ただし、 ω_d はギャップ中で孤立しているものとし、 $\omega \simeq \omega_d$ を仮定して注目する局在モード以外の固有モードからの寄与を無視した。このとき、 ω の関数として U を計算することができれば、共鳴周波数から ω_d が求まる。また、そのときの輻射電場が $\mathbf{E}_d(\mathbf{r})$ に比例する。

ここで、 $\mathbf{P}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t)$ が式(16)で与えられる場合について非齊次波動方程式(15)を離散化して数値的に解く。求めるべき固有関数が空間的に局在しているので、比較的小さな領域だけを対象にして数値解を求めればよく、計算時間は短くてすむ。図3は、誘電体円柱 ($\epsilon=9$) からなる規則的な2次元正方格子から円柱を1本だけ抜き取ったときに生じる、ギャップ内モードの空間分布である¹⁸⁾。波動関数が正方対称で、欠陥部分(原点)から離れるとともに速やかに減衰していることがわかる。また、共鳴周波数から求めた固有周波数は実験値¹⁶⁾と誤差2%で一致した。

本稿ではフォトニック結晶中の光の分散関係、固有モードの対称性、透過スペクトル、光学応答の一般論、局在モードといった事項について述べた。特に、具体的な計算法について解説した。表面モードやソリトン等、紙数の都合で割愛した事柄については文献1)~3)などを参照していただきたい。

文 献

- 1) J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn: *Photonic Crystals* (Princeton University Press, Princeton, 1995).
- 2) C. M. Soukoulis ed.: *Photonic Band Gaps and Localization* (Plenum, New York, 1993).
- 3) C.M. Soukoulis ed.: *Photonic Band Gap Materials* (Kluwer Academic, Dordrecht, 1996).

- 4) 花村栄一: “フォトニックバンドギャップ”, 応用物理, **63** (1994) 604-607.
- 5) 大高一雄: “光子バンドと重い光子”, 日本物理学会誌, **52** (1997) 328-335.
- 6) K. Sakoda: “Photonic crystals,” *Optical Properties of Low-Dimensional Materials, Vol. 2*, eds. T. Ogawa and Y. Kanemitsu (World Scientific, Singapore), in press.
- 7) K. Ohtaka and Y. Tanabe: “Photonic bands using vector spherical waves III: Group-theoretical treatment,” J. Phys. Soc. Jpn., **65** (1996) 2670-2684.
- 8) K. Sakoda: “Symmetry, degeneracy, and uncoupled modes in two-dimensional photonic lattices,” Phys. Rev. B, **52** (1995) 7982-7986.
- 9) K. Sakoda: “Group-theoretical classification of eigenmodes in three-dimensional photonic lattices,” Phys. Rev. B, **55** (1997) 15345-15348.
- 10) J. B. Pendry and A. MacKinnon: “Calculation of photon dispersion relations,” Phys. Rev. Lett., **69** (1992) 2772-2775.
- 11) K. Ohtaka and Y. Tanabe: “Photonic bands using vector spherical waves II: Reflectivity, coherence and local field,” J. Phys. Soc. Jpn., **65** (1996) 2276-2284.
- 12) K. Sakoda: “Optical transmittance of a two-dimensional triangular photonic lattice,” Phys. Rev. B, **51** (1995) 4672-4675.
- 13) K. Sakoda: “Numerical analysis of the interference patterns in the optical transmission spectra of a square photonic lattice,” J. Opt. Soc. Am. B, **14** (1997) 1961-1966.
- 14) K. Sakoda and K. Ohtaka: “Optical response of three-dimensional photonic lattices: Solutions of inhomogeneous Maxwell’s equations and their applications,” Phys. Rev. B, **54** (1996) 5732-5741.
- 15) K. Sakoda and K. Ohtaka: “Sum-frequency generation in a two-dimensional photonic lattice,” Phys. Rev. B, **54** (1996) 5742-5749.
- 16) S. L. McCall, P. M. Platzman, R. Dalichaouch, D. Smith and S. Schultz: “Microwave propagation in two-dimensional dielectric lattices,” Phys. Rev. Lett., **67** (1991) 2017-2020.
- 17) E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer and J. D. Joannopoulos: “Donor and acceptor modes in photonic band structure,” Phys. Rev. Lett., **67** (1991) 3380-3383.
- 18) K. Sakoda and H. Shiroma: “Numerical method for localized defect modes in photonic lattices,” Phys. Rev. B, **56** (1997) 4830-4835.

(1997年8月21日受理)