

## 8 . フォトニックバンドに関するプログラムの開発

大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授 張 紀久夫

近い将来C M Dワークショップで教材として用いることを念頭に置いて開発を進めている  
フォトニックバンド関連の2つの問題

- 1) フォトニックバンドの高精度計算法 /1/
- 2) 多分枝域における入射光の分岐比の計算方法 /2/

について、その基礎になる光学応答理論の新しい局面を含めて、紹介した。

1)については、従来マクスウェル方程式のフーリエ表示を連立1次方程式の形をした固有値問題として解く方法(行列の次元は考慮すべき逆格子ベクトルの数に相当)が一般的であった。それに比べて新しく開発した方法は、一般的な方法における行列の逆行列を対角化することに相当する定式化であること、このため有限次元の行列対角化という近似において無視する部分の寄与を小さくできるという利点があること、これを利用すると実質的に数万個の平面波を取り入れた計算が比較的容易に実行できること、が分かっている。当研究室における計算は特定の結晶モデルに限られていたが、近い将来にこれを拡張したプログラムを提供しようとしている。この計算の途中段階で感受率テンソル成分の評価が必要になるが、個々の成分は逆格子ベクトル成分に関する行列で、それらの行列の成分が絡み合った定義式を用いてそれらの数値的評価を行う方法についても言及した。図1に「交差する四角柱のモデル」によるフォトニックバンドの最低振動数域のギャップが「計算に用いる有効平面波の数」に対してどのように収束するかを示す。通常の方法より容易に収束値が予想できるような計算であることがわかる。

このように、対角化によって光と物質の相互作用系における固有モードの振動数の逆数(の2乗)が求められるという形式は、我々が開発してきた「微視的・非局所光学応答理論」/3/という一般的な枠組みを誘電体周期構造に対して応用した結果である。この理論の特徴を言葉で表現すると、以下ようになる。

- 従来の光学応答理論で常に用いられる長波長近似を超える状況を扱うことができる。
- 電磁場と誘起分極を互いにセルフコンシステントになるように決めるので、共鳴応答を扱うのに適している。
- 誘起分極は与えられた微視的な物質モデルから量子論的に計算したものをを用いるので、分極と電場の関係を表す感受率(テンソル)は非局所的な積分核として表現される、すなわち、電場が作用した点と誘起分極が発生する点は同じとは限らない。
- (マクスウェル方程式の解として得られる)電磁場も電磁場のグリーン関数を媒介として分極と電場の非局所的な関係を与えるので、電磁場と分極を決める関係式はどちらも非局所的な積分核を持つ積分方程式のセットになる。
- しかし、感受率が一般に分離型積分核になることを利用すると、積分方程式のセットは

連立代数方程式のセットに書き直すことができる。

- この代数方程式の次数 $N$ は注目する光学過程の次数に等しい、すなわち線形過程では $N = 1$ 、2次高調波発生では $N = 2$ 、ポンプ・プローブ過程や4光波混合過程では $N = 3$  etc. である。
- 線形過程の場合これらの代数方程式は行列形式で  $S X = F$  という形に書かれるが、 $X$ は誘起分極の展開係数、 $F$ は入射光で決まる定数である。係数行列は  $S = (E - w) 1 + A$  と書かれるが、 $E$ は物質系の励起エネルギー、 $w$ は光のエネルギー、 $A$ は誘起分極の間の遅延相互作用である。(  $1$ は単位行列 )
- 遅延相互作用 $A$ は誘起分極成分と電磁場グリーン関数により定義されており、考えている系のミクロな詳細を忠実に反映する。
- 応答電磁場の振幅は  $1/\det(S)$  に比例するので、 $\det(S)=0$  が全系の固有エネルギーを与える。これを誘電体周期系に当てはめた結果が上記のフォトニックバンドの分散関係になる。
- このようにして求めた固有モードのエネルギーは物質の励起エネルギーに輻射寿命幅とシフトを加えたものになる。
- このような光・物質相互作用系の一般論によって得られる物質の姿は従来用いられてきた Lorentz 振動子モデルを一般化した描像を与える。すなわち、物質は空間的に広がった振動子の集まりで、これらの振動子は互いに光を媒介にして相互作用している。
- このような枠組みは非線型光学過程にも同様に応用可能である。

2) 大概のフォトニックバンドでは、最低の振動数域を除くと(与えられた振動数に対して複数個の実数の波数ベクトルを持つ状態が存在するような)多分枝域が頻繁に現れる。このような振動数を持つ外部光が入射したとき、各分枝にはどのような割合でポインティングベクトルが分配されるかという問題を定式化し、具体的モデルについて数値的な計算例を示した。定式化の物理的なポイントは表面の逆格子ベクトル成分ごとに内外の波をなめらかにつなぐという境界条件で、数学的な問題点は、(与えられた振動数ごとに)必要とされるバルクモードの波数ベクトルを複素成分まで含めて如何に精度よく計算するか、ということである。これについても1)と同じモデルについて計算し、入射条件に応じて分岐比や反射率がどのように変わるかを示した。この問題についても、フォトニック結晶のモデルを拡張することと、入射角度・偏光方向・表面の形状など入射条件を一般化した計算ソフトを目指して開発を進めている。図2に図1と同じモデルに対して計算されたバンド図と反射スペクトルの表面切断位置依存性を示す。

文献：

- /1/. T. Minami, K. Sekine, H. Ajiki and K. Cho: J. Lumin. **87-89** (2000) 378
- /2/. T. Minami and K. Cho: Physica E **13** (2002) 432
- /3/ K. Cho: *Optical Response of Nanostructures*, (Springer Verlag, 2003)

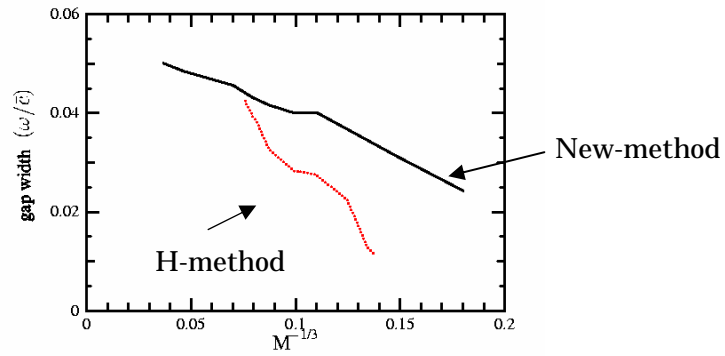


Fig.1: フォトニックギャップの実効的平面波数に対する依存性。比較のために従来の方法 (H-method) による結果も示してある。

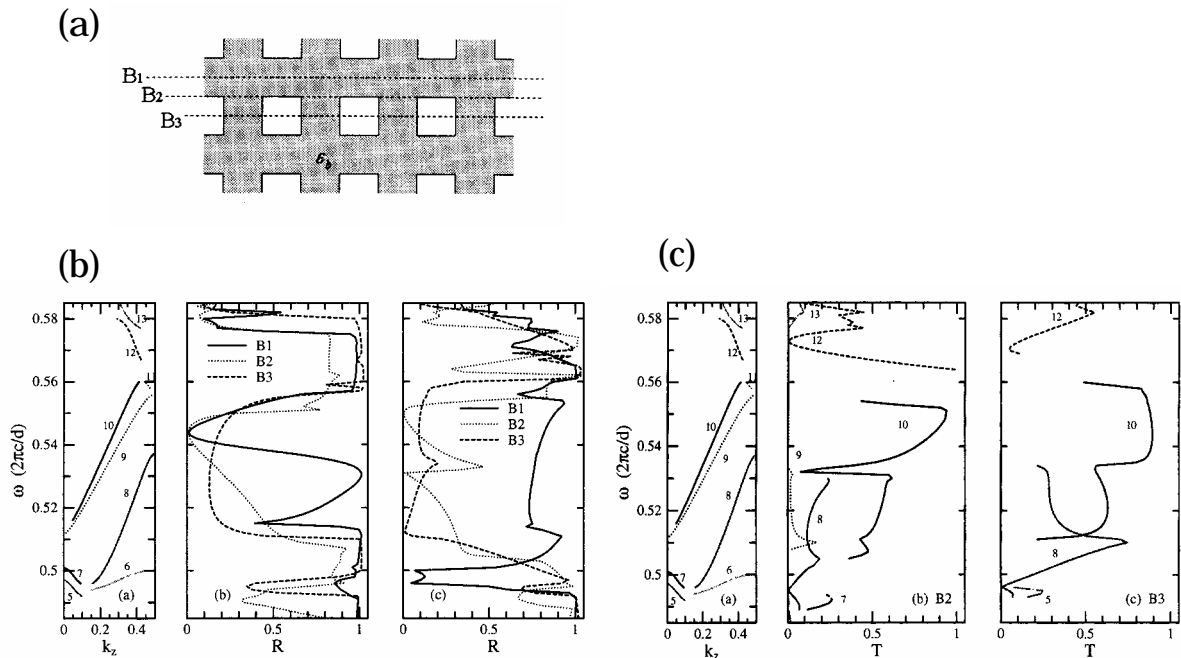


Fig 2: 交差する四角柱のモデルによるバンド計算と透過 ( T ) および反射 ( R ) スペクトル。透過率はバンドごとの寄与 ( 分岐比 ) を示し、反射率は表面の切り出し方 ( a ) に示した 3 通り : [ 001 ] 表面 ) による違いを示す。