

# 南京大学研究生毕业论文中文摘要首页用纸

毕业论文题目：人工微结构在开放量子系统强耦合现象与经典波调控中的研究

声学 专业 2013 级博士生姓名：李睿奇

指导教师（姓名、职称）：程建春 教授

安东尼奥·费尔南德斯 助理教授

## 摘 要

随着上世纪中期量子光学理论的产生和不断完善，光与物质的相互作用得以从微观量子力学的角度做出理论解释，并因此得以进一步深入探索。其中量子发射单元(Quantum Emitter, QE)与光学结构表面支持的表面等离激元(Surface Plasmon, SP)模式的耦合成为了近年来的研究热点。本世纪初提出的变换光学(Transformation Optics, TO)理论则为设计新异结构以调控经典波动提供了理论工具。同时，随着实验技术的进步，尤其是纳米微加工技术和 3D 打印技术的日趋成熟，上述领域的实验研究也得到了迅速推进。本论文以近年来研究者在上述领域取得的相关成果为立足点，通过进一步探索，取得了一些有意义的新成果。论文的组织安排如下：

第一章为绪论，介绍了变换光学理论的研究现状，表面等离激元(Surface Plasmon, SP)的研究现状以及量子发射单元与表面等离激元强耦合效应的研究进展。通过对相关领域研究进展的介绍，为本论文工作的理论重要性和潜在的应用价值做出了初步的定位。

第二章为相关理论和计算方法，重点介绍了变换光学理论，电磁波辐射场的

正则量子化, 量子发射单元(Quantum Emitter, QE)与电磁场的相互作用, 系统的谱密度以及 Wigner-Weiskopf 问题, 最后介绍了声子晶体在长波近似下的等效媒质理论. 本章介绍的理论和方法在论文工作中均有涉及, 为后续章节提供了理论依据.

第三章为对纳米光腔中 QE-SP 强耦合(Strong Coupling, SC)现象的研究. 本章在变换光学理论的框架下, 从求解 QE 与纳米颗粒二聚体(Dimer)型腔体构成的系统的谱密度出发, 通过数值计算系统的动力学特性(Population Dynamics)和对系统谱密度的 Lorentz 共振模式分解, 揭示了该系统在强耦合时存在两组具有不同空间对称特性的 SP 模式及各自的激发条件. 最后利用本工作提出的理论较好地验证了室温下单个染色分子与 SP 强耦合的实验结果.

第四章为利用经典波演示天体运动规律的研究. 本章利用复平面上的保角变换获得了模拟天体黑洞附近光线传播行为的声学结构. 为在实验室尺度下观察和研究天体物理中的现象提供了一种可能的方案.

第五章为波导管中声波的单向传播研究. 本章提出了波导管中基于梯度材料的二维不对称声传播结构. 它具有与之前提出的模型有完全不同的物理机制. 我们同时给出该结构基于声子晶体的一种实现方案. 数值仿真结果表明, 基于声子晶体的实现方案实现了宽带的声波非对称传播. 另外, 该结构不会出现反射声干扰声源的问题. 这一特性使得本结构应用在聚焦超声治疗等领域时具有独特的优势.

最后在第六章, 我们给出了本文的主要创新点和结论, 以及对今后工作的展望.

本文主要的创新点有: 1. 第一次将变换光学理论用于解决量子光学中的

QE-SP 强耦合问题, 通过数值和近似的解析结果, 揭示了纳米颗粒二聚体型腔体与 QE 强耦合的物理机制, 并成功分析了最近发表的单分子与微纳腔体在室温下实现强耦合的实验, 所得结果与实验结果获得了较好的吻合. 2. 第一次在声学领域提出模拟天体力学现象的全方向吸声体结构, 并提出了可能的实现方案. 3. 第一次在平直的声波导管中实现了声波的非对称传输.

**关键词:** 变换光学, 表面等离激元, 强耦合, 等效媒质理论, 非对称声传播

## 南京大学研究生毕业论文英文摘要首页用纸

THESIS: Study on the strong coupling phenomenon in open quantum systems and the manipulation of classical waves via artificial microstructures

SPECIALIZATION: Acoustics

POSTGRADUATE: Rui-Qi Li

MENTOR: Professor Jian-Chun Cheng;  
Assistant Professor  
Antonio I. Fernández-Domínguez.

### **Abstract**

With the emergence and constant improvement of the theory of quantum optics since the middle of 20th century, the light-matter interactions are now comprehensively depicted by modern quantum theory. And it is still being further investigated. The strong coupling between quantum emitter (QE) and the surface plasmonic (SP) modes supported by nanometric cavities has been a hot topic recently. At the beginning of this century, the theory of Transformation Optics (TO) is proposed and extensively developed by exploiting the fruitful existing results in complex analysis and general relativity. The theory opens a new way of devising artificial structures to control classical wave motion. Meanwhile, with the rapid development of new technologies in experiment, especially the nanometric fabrication

and the 3D printing techniques, the experimental investigation in the above-mentioned fields has also been fruitful. In this thesis, we are going to exhibit the research results obtained during my PhD years, which are based on the achievements made by numerous researchers in the related fields.

The thesis is divided into following sections:

In Chapter I, a brief introduction is given on the research status of Transformation Optics (TO), Surface Plasmon Polariton (SPP), and the strong coupling (SC) phenomenon of quantum emitters (QEs) in plasmonic nanocavities.

In Chapter II, the theories and methods utilized throughout the thesis are reviewed, including the theory of Transformation Optics, the canonical quantization of radiative electromagnetic (EM) fields, quantum description of the interaction between QEs and EM fields, the introduction of the spectral density and the Wigner-Weiskopf problem, and the effective medium theory of phononic crystals under the long-wavelength approximation.

In Chapter III, the plasmon-exciton strong coupling in nanocavities is studied. Under the theoretical framework of Transformation Optics, the spectral density of the QE-dimer system is obtained both numerically and quasi-analytically. The population dynamics is also studied which gives sufficient support for exploring the physical mechanism of SC of single QEs with SPs in a metallic dimer cavity. With the help of the Lorentzian-mode decomposition of the spectral density, two groups of hybridized SP modes with even and odd spatial symmetries and their corresponding excitation conditions are discovered. Finally the results of the recently published

experiment on single-molecule strong coupling at room temperature in plasmonic nanocavities is retrieved with the developed theory with a relatively high accuracy.

In Chapter IV, the classical wave analogue of celestial mechanics is studied. The conformal transformation is utilized to mimick the light propagation near celestial black holes. This analogue provides a possible scheme of investigating celestial phenomena under the conditions of the common optics laboratories.

In Chapter V, the asymmetric acoustic propagation in a waveguide is studied. A two-dimensional gradient index configuration is proposed, which renders completely different physical mechanism compared with the previously devised structures. An implementation based on phononic crystals is designed, which shows very good agreement with the parameter-based prototype in numerical simulations. This configuration has its unique potential applications in fields like ultrasound therapy.

Finally, in Chapter VI, the conclusions and the innovation points are summarized and the outlook of future development of the current works is briefly described.

The main innovations of this paper are as follows: 1. For the first time, the theory of TO is used to solve the QE-SP strong coupling problem in quantum optics. Numerical and quasi-analytic results reveal the physical mechanism of QE-SP strong coupling in the dimer cavity. Based on the acquired results, we analyzed the recently published experiment which realized the single QE-SP strong coupling at room temperature. The analytical results exhibit a good match with the experimental data; 2. For the first time in acoustics we proposed an omnidirectional sound absorber that mimics celestial mechanics with acoustic beams, and put forward the possible

realization of the structure; 3 we achieved the asymmetric transmission of sound waves in a straight acoustic waveguide.

**Keywords:** Transformation Optics, Surface plasmon (SP), Strong coupling (SC), Effective medium theory, asymmetric acoustic propagation.

# 目 录

目 录.....	VIII
第 1 章 绪论.....	1
1.1 变换光学理论的研究现状.....	2
1.2 量子发射单元与表面等离激元强耦合的研究现状.....	7
1.2.1 表面等离激元(Surface Plasmon, SP)简介 .....	7
1.2.2 量子发射单元与表面等离激元的强耦合.....	10
参考文献.....	14
第 2 章 理论与方法.....	26
2.1 变换光学理论和反演变换.....	27
2.2 电磁辐射场的量子化.....	30
2.3 量子发射单元(QE)与电磁场的相互作用.....	32
2.3.1 QE 的二能级系统 (2LS) 近似.....	32
2.3.2 耦合体系的 Hamilton 量 .....	32
2.3.3 系统的谱密度以及 Wigner-Weiskopf 问题 .....	33
2.4 长波近似下声子晶体的等效媒质理论.....	36
2.5 有限元方法简介.....	39
参考文献.....	41
第 3 章 纳米光腔中量子发射单元与表面等离激元的强耦合.....	43
3.1 研究背景.....	44
3.2 系统模型及反演变换.....	45
3.3 准静态近似.....	48



3.4 利用谱密度和系统动力学特征研究强耦合的物理机制.....	50
3.5 对 Baumberg 课题组实验的验证.....	58
3.6 小结.....	61
3.7 附：基于变换光学理论求解系统谱密度.....	62
参考文献.....	68
第 4 章 利用经典波演示天体运动规律.....	72
4.1 研究背景.....	73
4.2 结构的提出.....	75
4.3 数值模拟.....	78
4.4 小结.....	82
参考文献.....	83
第 5 章 波导管中声波的非对称传输.....	85
5.1 研究背景.....	86
5.2 模型的提出和理论分析.....	87
5.3 小结.....	93
参考文献.....	94
第 6 章 结束语与工作展望.....	96
致谢.....	98

## 第1章 绪论

19 世纪末, 以经典力学、经典电动力学、经典热力学和统计力学为三大支柱的经典物理学日臻完善. 它不仅呈现出完整而又严谨的理论体系, 而且推动了人类社会物质文明的巨大进步. 然而, 新的物理学发现接踵而至, 使经典物理学理论显得无能为力. 量子力学和相对论的诞生, 使 20 世纪的物理学看到了新的曙光. 相对论彻底刷新了人类的时空观以及对引力的认识. 而量子力学则精确地描述了除广义相对论中的引力以外的所有其它物理基本相互作用. 随着对经典电磁理论中的辐射的成功量子化, 量子光学在描述光与物质相互作用方面取得了巨大的成功. 随着实验技术的不断提高, 利用量子光学的强有力理论武器探索人工微结构中的新异物理现象, 成为了当今研究者们极为感兴趣的研究方向之一. 同时, 在相对论中对时间和空间的黎曼几何描述, 也让物理学家开始重新审视经典物理中的一般规律. 变换光学(Transformation Optics)这一新的理论框架让研究者们看到了经典电磁理论与广义相对论的联系竟然是如此紧密. 本章介绍本世纪初兴起的变换光学理论的研究现状和量子光学中的一个热点问题, 即量子发射单元与表面等离激元强耦合的研究现状, 同时对经典理论下的表面等离激元做一个简单的回顾. 对这些理论与热点问题的既得成果的总结, 既为本论文的创新和探索提供了立足点, 也为本论文在理论和实际中的重要性的定位提供了一些依据.

## 1.1 变换光学理论的研究现状

变换光学(Transformation Optics)的提出始于 2006 年. J. B. Pendry 和 U. Leonhardt 分别独立提出了利用坐标变换控制光的传播. Pendry 的理论以 Maxwell 方程组在坐标变换下的形式不变性为基础, 揭示了空间的扭曲形变与介电常数和磁导率的空间分布的等效关系.<sup>[1]</sup> Leonhardt 的理论始于几何光学中的 Fermat 原理, 利用 Helmholtz 方程在保角变换下的形式不变性获得了保角变换改变光线传播路径与相应的介质折射率分布的等效关系.<sup>[2]</sup> 随后, 基于 Maxwell 方程组在四维时空坐标中的协变性, Leonhardt 等引用广义相对论的相关结论, 将控制光线传播路径的所谓变换媒质 (transformation media) 的本构参数由弯曲时空的度规张量来表达.<sup>[3]</sup> 三种表述虽然各有侧重, 但是本质上都是利用几何映射实现对光波传播的控制.

变换光学理论最受瞩目的一个应用就是隐身斗篷(invisible cloak)的设计. 最初的方案即由 Pendry 在提出变换光学理论时作为例子给出.<sup>[1]</sup> 该方案通过对空间的压缩产生了不受光场影响的区域, 被隐身的物体放置其中.<sup>[4,5]</sup> 值得注意的是, 基于该设计的若干实现方案均只能完美地工作在单一频率. 例如, Schurig 等利用开环谐振器(SRR)实现了微波频段(8.5 GHz)的隐身斗篷.<sup>[6]</sup> Cai 等设计出了光学频段 (波长 632.8 nm) 的隐身斗篷.<sup>[7]</sup> 为了在较宽的频带内实现隐身效果, Chen 等提出了简化方案, 该方案基于通过牺牲散射截面换取了较宽的频带, 为实现宽带隐身斗篷提供了理论支持.<sup>[8]</sup> Kildishev 等通过引入特定的色散媒质来实现宽带效果, 却同时引入了损耗.<sup>[9]</sup> 此后, Li 等利用导体平面作为几何边界, 提出了所谓地毯式斗篷.<sup>[10]</sup> 由于巧妙地利用真实空间中的全反射边界使用了所谓准保角变换, 变换媒质的参数不出现奇点并可进一步做到各向同性, 这为宽带斗篷的实现又提供了新的思路. Kan 等进一步利用任意弯曲边界提出了更易实现的隐身结

构.<sup>[11,12]</sup> 除了利用对空间的压缩, Lai 等基于折叠变换提出的互补媒质斗篷使得被隐身物可以放置于斗篷外,<sup>[13]</sup> Zhu 等进一步提出了基于单负参数媒质的非双盲斗篷,<sup>[14]</sup> 使得被隐身物体可以接收到外界的信号,这些都成为区别于 Pendry 斗篷的各具特点的隐身解决方案. 除了隐身斗篷,实现其它新颖功能的结构也通过变换光学理论提出. Yang 等利用折叠变换的互补媒质,实现了超散射体结构 (superscatterer) 以增大散射体的散射截面.<sup>[15]</sup> 基于超散射体的提出, Luo 等提出了对通道入口的电磁隐藏,使得在电磁波的探测下呈现为一个全反射壁面.<sup>[16]</sup> 与隐身斗篷将物体隐藏而免于被探测不同的是, Lai 等再次利用折叠变换实现了光学幻象,使得一个物体在电磁波的探测下表现为另一物体,即具有另一物体的散射场特征.<sup>[17]</sup> 除了对真实物体散射场的消除利用了折叠变换外,对目标物体散射场的建立则使用了压缩变换. 光学幻象的提出使得传统的隐身斗篷成为了幻象装置的一种特例,使得隐藏这一概念的外延大大拓宽.

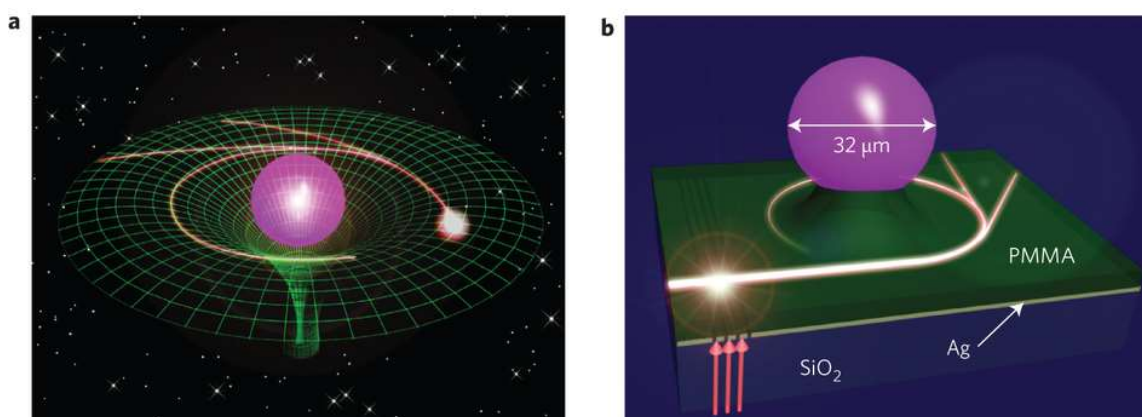


图 1.1 (a) 大质量天体附近光线受引力场作用发生偏折. (b) 小球附近的光波导用来模拟光线被引力场的偏折.<sup>[28]</sup>

除了隐身斗篷和光学幻象等一系列以隐藏物体为基本目的的应用外,变换光学与广义相对论中相关结论的结合催生了在实验室尺度下模拟天体物理现象这一有趣的研究

方向. 以 Leonhardt 等的结论为理论依据,<sup>[3]</sup> Genov 等提出了模拟天体运动规律的若干光学模型.<sup>[19]</sup> 其中光学黑洞模拟了光线在大质量天体 (如恒星, 星云, 星系等) 附近的弯折, 成为后来的热点问题. Narimanov 等提出了另一个各向同性的光学黑洞方案 (以下简称“Narimanov 型黑洞”), 该方案从 Hamilton 光学的角度利用更为简单的线性分布的折射率实现了对光的全方向吸收.<sup>[20,21]</sup> 这两个光学黑洞方案都实现了对光的全吸收, 同时避免了使用运动媒质, 与之前的方案相比是一个突破.<sup>[22]</sup> 随后, 与 Narimanov 等的方案类似的结构以及一些实验结果相继出现. Lu 等严格分析了 TM 波入射时 Narimanov 型黑洞的特性并给出了基于五种各向同性材料的实现方案.<sup>[23,24]</sup> Wang 等在近红外区域利用 Narimanov 型黑洞组成的周期性阵列实现了宽角度光吸收体.<sup>[25]</sup> Argyropoulos 等利用 FDTD 的计算方法研究了二维和三维的 Narimanov 型黑洞, 其光吸收率达到 95%.<sup>[26]</sup> 实验方面, Narimanov 型黑洞由 Cheng 等利用非共振梯度折射率材料首先实现.<sup>[27]</sup> Genov 提出的方案由 Sheng 等实现.<sup>[28]</sup> Narimanov 型黑洞结构很快被研究者拓展到弹性波 (利用保角变换)<sup>[29]</sup> 和流体中的声波 (基于二维 Maxwell 方程与流体声波方程的对应关系) 中.<sup>[30]</sup> 然而, Genov 型黑洞与 Narimanov 型黑洞均不是 Einstein 场方程的解. Chen 等根据真实 Schwarzschild 黑洞系统的度规张量提出了变换媒质的本构参数. 这是第一个真正意义上的 Schwarzschild 型黑洞的光学类比.<sup>[31]</sup> Odabasi 等受该工作的启发, 研究了凹凸表面的无反射光吸收进而提出所谓伪黑洞 (pseudo black holes) 的概念.<sup>[32]</sup> 此外, 研究者们还提出了模拟天体动力学中其他有趣现象的经典波结构. Greenleaf 等设计出模拟宇宙中虫洞的光学结构, 该结构使得光波能从结构中的管道一侧传播至另一侧, 而整个结构不能被垂直于管道方向的电磁波探测到.<sup>[33]</sup>

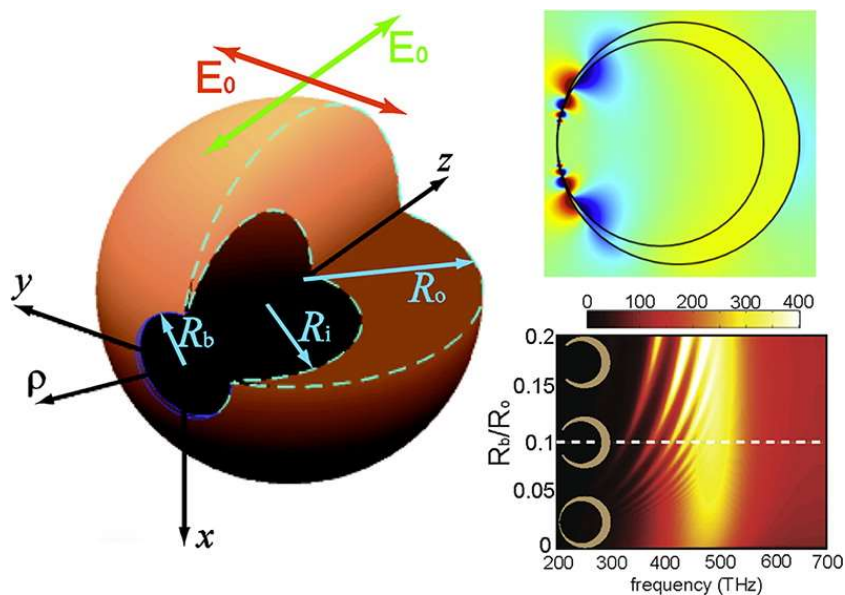


图 1.2 三维新月形金属腔体的结构示意图(左), 利用反演变换求得的电场分布(右上), 吸收截面频谱与结构开合程度的关系(右下).<sup>[39]</sup>

变换光学除了在设计变换媒质以控制光波传播方面发挥了巨大作用外, 在求解具有复杂几何边界的电磁场中也触发了新工作的诞生. 必须说明的是, 在计算电磁场和计算流体力学等领域, 利用坐标映射以获得简单而规则的求解域边界是先于变换光学提出的成熟计算方法.<sup>[34]</sup> 这里, 我们只关注近几年受变换光学启发而产生的新工作, 并不对所使用的方法是否是严格意义上的变换光学作讨论.<sup>[35]</sup> Luo 等将二维金属电介质层状结构与楔形结构, V 型凹槽结构, 新月形结构, 粗糙金属表面等之间建立了保角映射, 将复杂的几何结构都转化为理论上已经解决的层状结构, 方便地获得了复杂结构附近的场分布, 结构的吸收截面等重要特性.<sup>[36]</sup> 对于三维结构, Fernández-Domínguez 等直接利用反演变换将互相接触的双球模型映射为双无限厚平板结构, 获得了接触的双球模型的吸收截面和光场分布, 尤其是解析地描述了近场的场增强现象.<sup>[37,38]</sup> Fernández-Domínguez 等进一步利用反演变换分析了三维新月形金属腔体.<sup>[39]</sup> Li 等第一次将反演变换用于量子光学,

描述了量子发射单元与二聚体(Dimer)系统的强耦合问题的物理机制, 揭示了具有不同空间对称性特征的模式的不同激发机制.<sup>[40]</sup> 在此期间, Pendry 等先总结了二维情形下, 利用保角变换消除结构几何奇异性的例子.<sup>[41]</sup> 随后, 又总结了反演变换在三维二聚体系中的运用.<sup>[42]</sup>

由此可见, 变换光学通过与复变函数, 黎曼几何, 广义相对论, 反演几何等领域的融合, 不断发展至今. 这证明了该理论具有很强的生命力和巨大的发展前景.

## 1.2 量子发射单元与表面等离子激元强耦合的研究现状

### 1.2.1 表面等离子激元(Surface Plasmon, SP)简介

表面等离子激元(SP)是导体与电介质的分界面处的电荷集体振荡。该振荡包括两种形式: (1) 沿导体表面传播的电荷密度波; (2) 局域化的电荷振荡(见于金属纳米颗粒表面等)。金属纳米颗粒上形成局域化电荷振荡, 主要是由于纳米级金属颗粒的大小尺度与外界电磁场对金属的穿透深度相当, 电磁场可以穿过颗粒传播, 造成电荷的定向聚集, 进而产生恢复力, 形成振荡。从宏观角度看, 沿金属表面传播的电荷密度波对应着导体和电介质分界面处的 TM 表面波(即 SPP), 它沿界面法线向两侧衰减, 沿着界面传播。金属纳米颗粒上的局域化电荷振荡对应于局域化等离子激元(Localized Surface Plasmon, LSP), 这是非传播的电磁场模式。<sup>[43]</sup>

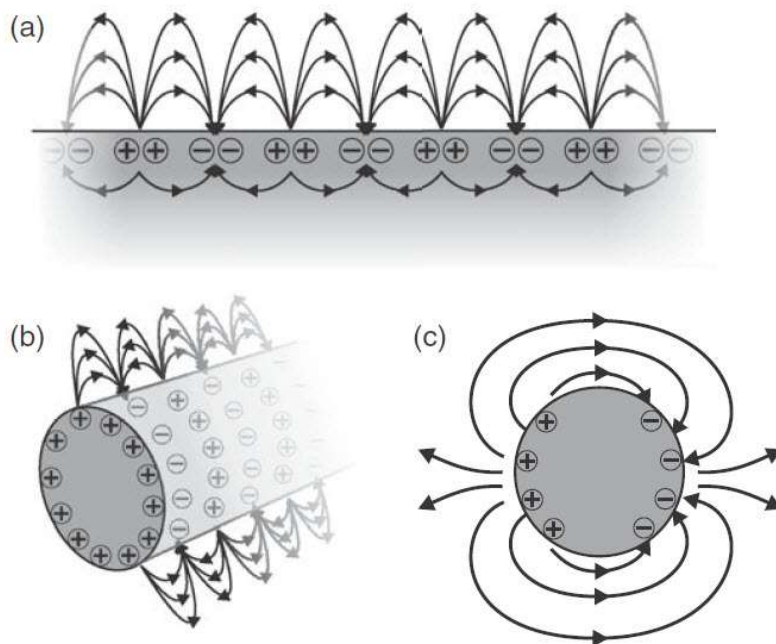


图 1.3 不同几何表面 SP 模式的电荷分布示意图. (a) 导体表面为平面; (b) 圆柱形导体线 (c) 纳米金属球表面的偶极 SP 模式.



1899年, Sommerfeld 第一次描述了不同媒质的界面上存在电磁表面波模式, 并且其传播可由界面导引.<sup>[44]</sup> 1907年, Ze neck 从数学上验证了其正确性.<sup>[45]</sup> 历史上首次观察到的与 SP 有关的实验现象可追溯到 1902年 Robert W. Wood 观测到金属光栅的透射谱存在一个无法解释的零点 (后称为 Wood 异常).<sup>[46]</sup> 此时虽然没有提出 SP 的概念, Fano 却利用 Sommerfeld 等的理论解释了这一现象.<sup>[47]</sup> 1957年, Ritchie 在关于电子透过金属薄膜能量损失的研究报告中提出 SP 模式可存在于金属表面附近. 这是历史上第一次对 SP 的理论描述.<sup>[48]</sup> 随后, Wood 异常被成功地解释为由金属光栅表面的表面等离子共振 (SPR) 所致.<sup>[49]</sup> 随后, SP 与金属纳米颗粒的光学特性之间的联系开始被建立. 1970年, Kreibig 等第一次用 SP 的概念来描述 Au 和 Ag 纳米颗粒的光学性质.<sup>[50]</sup> 四年后, Cunningham 等正式提出 SPP, 即表面等离子极化激元的概念.<sup>[51]</sup> 最近, 随着制造和加工工艺水平的不断提高, 金属纳米结构得到了极大的重视, 这使得在纳米尺度上控制光的传播取得飞速的发展. 例如, Takahara 等的研究表明, 纳米级直径的金属线可以传导光束.<sup>[52]</sup> Ebbesen 等则首先在实验中观测到亚波长金属孔阵列的异常透射现象 (Extraordinary Optical Transmission, EOT). 该现象引起了研究者的极大兴趣, 他们从理论上彻底地分析了该现象的物理机制与金属表面 SP 之间的关系,<sup>[53-56]</sup> 指出金属孔阵列的上下表面的 SP 通过孔中的倏逝波形成耦合, 是金属结构较薄时的超透射成因. 当金属结构增厚以致上下表面的 SP 不出现耦合时, 透射峰出现在 SP 在界面内的波数等于  $2\pi/d$  ( $d$  为空洞阵列的长度周期) 时对应的波长处.<sup>[54]</sup> 不久后, Lezec 等发现入射面被周期性凹槽包围的单个孔隙也会产生 EOT 现象.<sup>[57]</sup> 而且, 当周期性凹槽位于出射波一侧的表面时, 光束出现所谓自准直或定向发射的现象. García-Vidal 和 Martín-Moreno 等理论上给出了 TM 波入射时, 凹槽包围的单孔结构的超透射特性, 并给出了实验验证. 此时除了单孔中波导模式的作用,

凹槽内的谐振模式再辐射至单孔位置时的同相位现象导致了透射的增强. 自准直现象与 EOT 一样也源于凹槽表面的表面波模式.<sup>[58-62]</sup> 事实上, 由理想导体构成的孔洞阵列也存在 EOT 现象.<sup>[63]</sup> 虽然理想导体平面不支持 SP, 具有周期性凹槽或空洞结构的理想导体却可以支持所谓的 Spoof SP, 实则仅为宏观上的表面波模式, 与电子密度波无关, 亦即不是传统定义上的 SPP.<sup>[64,65]</sup> 表层被周期性调制的光子晶体同样支持与周期性凹槽包围的单孔类似的 EOT 和自准直现象. 这也是光子晶体表面的表面波模式导致的.<sup>[66]</sup>

在 EOT 现象被广泛研究的同时, 金属条带(Metal Strips, MS)上的 SPP 也引起表面波光学器件研究者的兴趣. Berini 等在研究中发现 MS 能支持长程 SPP 模式. 这些模式在通信频段传输距离可达到毫米量级.<sup>[67-69]</sup> 研究者们利用 MS 在 SPP 方面的特性已经在实验上制备了调制器和耦合器等器件,<sup>[70-72]</sup> 这些突破必将推动共面结构的集成光学系统设计.

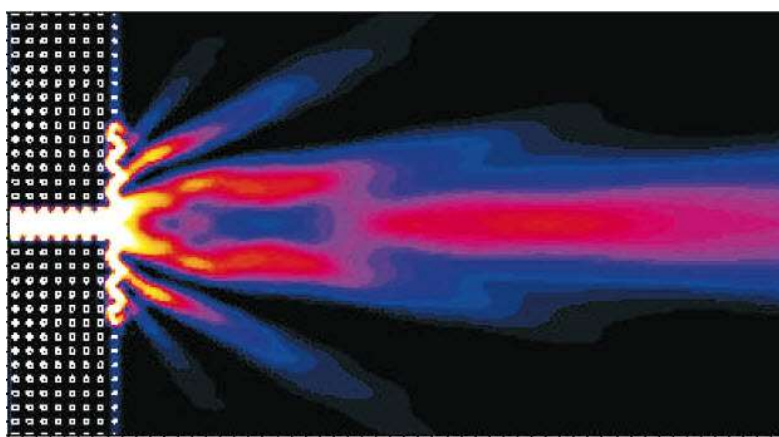


图 1.4 表层光子晶体被周期性调制后, 透过狭缝的光场能流分布.<sup>[66]</sup>

总之, SP 在理论研究和技术应用领域均有广阔的发展空间. 一方面, 它具有在亚波长尺度上控制和局域电磁场的能力, 并能以表面波模态传播高达数百个波长之距. 另一

方面, SP 将宏观电磁场与微观电子振荡联系在一起. 作为联系了宏观和微观两个尺度的物理现象, SP 必将更有可能与其他领域结合, 产生更多有意义的新结果.

### 1.2.2 量子发射单元与表面等离激元的强耦合

量子发射单元(Quantum Emitter, QE)的能级跃迁导致的光子辐射受体系中光学环境影响. 近年来, 随着纳米级微加工工艺水平的提高和 SP 具有极小的模式体积这一独特优势, QE 与 SP 的强耦合受到了广泛关注. 当 QE 与 SP 相互作用较弱时, 仅发生自发辐射速率的改变, 系统处于所谓弱耦合区(Weak Coupling, WC). 当两者的相互作用足够强时, QE 与 SP 在远小于二者存在寿命的时间尺度内不断交换能量, 此时称整个系统进入强耦合区(Strong Coupling, SC). 处于强耦合区时, 系统色散曲线与非耦合时相比发生能量(频率)偏移(图 1.5), 即所谓 Rabi 分裂.

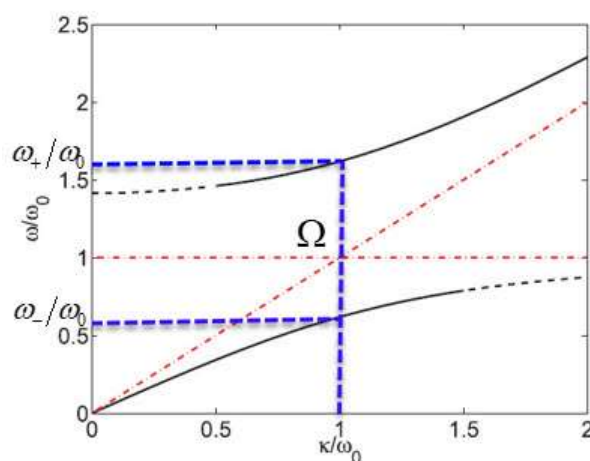


图 1.5 红色点划线为不存在耦合时, QE 和 SPP 的色散曲线. 黑色实线为 QE-SPP 系统在强耦合时的色散曲线.

实验方面, 研究者们首先观测到 J-聚集体(J-aggregates)与 SP 的强耦合.<sup>[73-76]</sup> Bellessa 等将 J-聚集体放置于 Ag 薄膜上, 室温下测量到的 Rabi 分裂达到 180 meV.<sup>[73]</sup> Dintinger 等深入研究了 J-聚集体与亚波长孔阵列表面的 SP 的相互作用, 测量到高达 250 meV 的 Rabi 分裂.<sup>[74]</sup> 随后, 其他染料分子 (Dye Molecules),<sup>[77,78]</sup> 光致变色分子 (Photochromic Molecules)<sup>[79]</sup> 以及量子点<sup>[80]</sup> 与 SP 的强耦合也在实验上观测到. 通常分子与 SP 的强耦合在极低温度下才较易实现, 最近, Chikkaraddy 等报道了室温下单个染色分子与 SP 的强耦合.<sup>[81]</sup> 实验中使用了间距为 0.9 nm 的 Au 纳米颗粒和 Au 薄膜构成的光学微腔, 亚甲基蓝染料分子置于间隙中. 对于单个分子的情形, 研究者观测到 90 meV Rabi 分裂, 而分子数为 10 时, Rabi 分裂可达到 300 meV. 该成果证明, 对单分子来说, 即使在室温条件和金属有很强光吸收作用的情况下, 分子与 SP 的强耦合仍可实现.

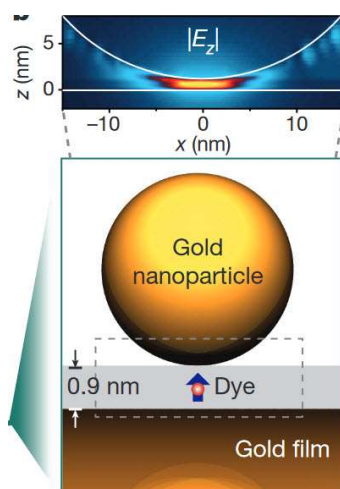


图 1.6 Baumberg 教授课题组的实验结构示意图. 染料分子置于 Au 纳米颗粒和 Au 薄膜的间隙中. 间隙 0.9 nm. 图中给出了间隙及附近的电场分布.<sup>[81]</sup>

理论方面, González-Tudela 等建立了二维金属表面的 QE 和传播态 SPP 相互作用的

纯量子模型. 模型考虑了系统耗散和失谐等因素. 该模型深入分析了 QE-SPP 强耦合的物理机制, 指出了对强耦合至关重要的物理参数.<sup>[82]</sup> 几乎同时, Hümmer 等利用 Green 函数方法建立了二能级 QE 与单模波导中的 SPP 相互作用的量子理论,<sup>[83]</sup> 并利用数值计算具体分析了波导的不同几何形状, 环境的温度等因素对强耦合的影响. González-Tudela 等率先研究了单个 QE 与金属平面 SPP 强耦合时的可逆动力学特性 (Reversible Dynamics).<sup>[84]</sup> 此时系统的谱密度可近似表示为单个 Lorentz 共振模式, 这使得动力学特性在所谓旋波近似(RWA)下可以获得近似的解析形式. 除了金属平面, QE 与金属纳米颗粒的强耦合也是研究者感兴趣的问题.<sup>[85-90]</sup> Vlcek 等利用 Green 函数方法研究了单个量子点与金属纳米颗粒的相互作用, 讨论了对量子点使用偶极近似与否对结果的影响, 以及高阶 SP 模式对局域光子态密度 (LDOS) 和光子 Lamb 移位的重要影响.<sup>[85]</sup> Delga 等继续深入研究了 QE 与金属纳米颗粒的强耦合. 结论指出, 对于单个 QE, 参与能量交换的 SP 模式为由非辐射的多极模式构成的所谓伪模式(Pseudomode); 对于 QE 群, 偶极模式与 QE 的能量交换也会发生.<sup>[91,92]</sup> 近来, 一个引起广泛关注的结构是纳米颗粒二聚体(Dimer)系统.<sup>[93-97]</sup> 由于两个颗粒的节点处巨大的场增强相应, 已经在表面增强 Raman 光谱 (SERS)等领域体现出了独具的应用价值.<sup>[93,94]</sup> 然而, 对于 QE 与金属纳米颗粒二聚体中 SPP 的强耦合的研究还未曾深入. Savasta 等利用精确的散射计算得出, 单个 QE 置于金属纳米颗粒二聚体间隙时, 可以出现真空 Rabi 分裂现象. 然而, 他们尚未揭示强耦合现象的物理机制是两个金属纳米球各自与 QE 作用还是二聚体的杂化模式与 QE 作用. Li 等利用变换光学理论, 对纳米二聚体型中 QE-SP 的强耦合做了深入的研究. 结论指出, 此时虽然依然是所谓伪模式 (一系列高阶模式的重叠导致) 控制了系统的强耦合过程, 但是高阶模式中存在对称与反对称两类模式, 而反对称模式即为二聚体所支持的杂化模

式. 因此, 金属纳米二聚体中 QE-SP 的强耦合与二聚体支持的杂化 SP 模式是有关的.

关于 QE-SP 强耦合的研究还在突飞猛进的进行中. 理论方面的研究已经对该问题给出了较为准确的描述. 随着纳米加工制造工艺水平的进一步提高, 相应的实验研究必将继续取得更大突破.

## 参考文献

- [1] J. B. Pendry, D. Schurig and D. R. Smith, "Controlling Electromagnetic Fields," *Science* **312**, 1780 (2006).
- [2] U. Leonhardt, "Optical Conformal Mapping," *Science* **312**, 1777 (2006).
- [3] U. Leonhardt and T. G. Philbin, "General relativity in electrical engineering," *New J. Phys.* **8**, 247 (2006).
- [4] S. A. Cummer, B.-I. Popa, D. Schurig, D. R. Smith, and J. B. Pendry, "Full-wave simulations of electromagnetic cloaking structures," *Phys. Rev. E* **74**, 036621 (2006).
- [5] D. Schurig, J. B. Pendry and D. R. Smith, "Calculation of material properties and ray tracing in transformation media," *Opt. Express* **14**, 9794 (2006).
- [6] D. Schurig, J. J. Mock, B. J. Justice, S. A. Cummer, J. B. Pendry, A. F. Starr, and D. R. Smith, "Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies," *Science* **314**, 977 (2006).
- [7] W. Cai, U. K. Chettiar, A. V. Kildishev, and V. M. Shalaev, "Optical cloaking with metamaterials," *Nat. Photonics* **1**, 224 (2007).
- [8] H. Y. Chen, Z. Liang, P. Yao, X. Jiang, H. Ma and C. T. Chan, "Extending the bandwidth of electromagnetic cloaks," *Phys. Rev. B* **76**, 241104(R) (2007).
- [9] A. V. Kildishev, W. Cai, U. K. Chettiar and V. M. Shalaev, "Transformation optics: approaching broadband electromagnetic cloaking," *New J. Phys.* **10**, 115029 (2008).
- [10] J. Li and J. B. Pendry, "Hiding under the Carpet: A New Strategy for Cloaking," *Phys. Rev. Lett.* **101**, 203901 (2008).

- [11] W. Kan, B. Liang, X. Zhu, R. Li, X. Zou, H. Wu, J. Yang and J. Cheng, "Acoustic illusion near boundaries of arbitrary curved geometry," *Sci. Rep.* **3**, 1427 (2013).
- [12] W. Kan, V. M. García-Chocano, F. Cervera, B. Liang, X. Zou, L. Yin, J. Cheng, and José Sánchez-Dehesa, "Broadband acoustic cloaking within an arbitrary hard cavity," *Phys. Rev. Applied* **3**, 064019 (2015).
- [13] Y. Lai, H. Chen, Z.-Q. Zhang, and C. T. Chan, "Complementary Media Invisibility Cloak that Cloaks Objects at a Distance Outside the Cloaking Shell," *Phys. Rev. Lett.* **102**, 093901 (2009).
- [14] X. Zhu, B. Liang, W. Kan, X. Zou, J. Cheng, "Acoustic cloaking by a superlens with single-negative materials," *Phys. Rev. Lett.* **106**, 014301 (2011).
- [15] Yang T, H. Y. Chen, and H. Ma, "Superscatterer: Enhancement of scattering with complementary media," *Opt. Express* **16**, 18545 (2008).
- [16] X. Luo, T. Yang, Y. Gu, H. Y. Chen and H. Ma, "Conceal an entrance by means of superscatterer," *Appl. Phys. Lett.* **94**, 223513 (2009).
- [17] Y. Lai, J. Ng, H. Y. Chen, D. Z. Han, J. J. Xiao, Z.-Q. Zhang and C. T. Chan, "Illusion Optics: The Optical Transformation of an Object into Another Object," *Phys. Rev. Lett.* **102**, 253902 (2009).
- [18] N. I. Landy, N. Kundtz, and D. R. Smith, "Designing Three-Dimensional Transformation Optical Media Using Quasiconformal Coordinate Transformations," *Phys. Rev. Lett.* **105**, 193902 (2010).



- [19] D. A. Genov, S. Zhang, and X. Zhang, "Mimicking celestial mechanics in metamaterials," *Nat. Phys.* **5**, 687 (2009).
- [20] E. E. Narimanov and A. V. Kildishev, "Optical black hole: Broadband omnidirectional light absorber," *Appl. Phys. Lett.* **95**, 041106 (2009).
- [21] A. V. Kildishev, L. J. Prokopeva, and E. E. Narimanov, "Cylinder light concentrator and absorber: theoretical description," *Opt. Express* **18**, 16646 (2010).
- [22] U. Leonhardt and P. Piwnicki, "Relativistic Effects of Light in Moving Media with Extremely Low Group Velocity," *Phys. Rev. Lett.* **84**, 822 (2000).
- [23] W. Lu, J. Jin, Z. Lin, and H. Chen, "A simple design of an artificial electromagnetic black hole," *J. Appl. Phys.* **108**, 064517 (2010).
- [24] S. Liu, L. Li, Z. Lin, H. Y. Chen, J. Zi, and C. T. Chan, "Graded index photonic hole: Analytical and rigorous full wave solution," *Phys. Rev. B* **82**, 054204 (2010).
- [25] H.-W. Wang and L.-W. Chen, "Wide-angle absorber achieved by optical black holes using graded index photonic crystals," *J. Opt. Soc. Am. B* **29**, 2222 (2012).
- [26] C. Argyropoulos, E. Kallos, and Y. Hao, "FDTD analysis of the optical black hole," *J. Opt. Soc. Am. B* **27**, 2020 (2010).
- [27] Q. Cheng, T. J. Cui, W. X. Jiang, B. G. Cai, "An omnidirectional electromagnetic absorber made of metamaterials," *New J. Phys.* **12**, 063006 (2010).
- [28] C. Sheng, H. Liu, Y. Wang, S. N. Zhu and D. A. Genov, "Trapping light by mimicking gravitational lensing," *Nat. Photonics* **7**, 902 (2013).

- [29] Z. Chang and G. Hu, "Elastic wave omnidirectional absorbers designed by transformation method," *Appl. Phys. Lett.* **101**, 054102 (2012).
- [30] R. Q. Li, X. F. Zhu, B. Liang, Y. Li, X. Y. Zou, and J. C. Cheng, "A broadband acoustic omnidirectional absorber comprising positive-index materials," *Appl. Phys. Lett.* **99**, 193507 (2011).
- [31] H. Y. Chen, R.-X. Miao, and M. Li, "Transformation optics that mimics the system outside a Schwarzschild black hole," *Opt. Express* **18**, 15183 (2010).
- [32] H. Odabasi, F. L. Teixeira, and W. C. Chew, "Impedance-matched absorbers and optical pseudo black holes," *J. Opt. Soc. Am. B* **28**, 1317 (2011).
- [33] A. Greenleaf, M. Lassas, and G. Uhlmann, "Electromagnetic wormholes and virtual magnetic monopoles from metamaterials," *Phys. Rev. Lett.* **99**, 183901 (2007).
- [34] A. J. Ward and J. B. Pendry, "Refraction and geometry in Maxwell's equations," *J. Mod. Opt.* **43**, 773 (1996).
- [35] R. T. Thompson and M. Fathi, "Shrinking cloaks in expanding space-times: The role of coordinates and the meaning of transformations in transformation optics," *Phys. Rev. A* **92**, 013834 (2015).
- [36] Y. Luo, J. B. Pendry, and A. Aubry, "Surface Plasmons and Singularities," *Nano Lett.* **10**, 4186 (2010).
- [37] A. I. Fernández-Domínguez, S. A. Maier, and J. B. Pendry, "Collection and Concentration of Light by Touching Spheres: A Transformation Optics Approach," *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266807 (2010).

- [38] A. I. Fernández-Domínguez, S. A. Maier, and J. B. Pendry, "Transformation optics description of touching metal nanospheres," *Phys. Rev. B* **85**, 165148 (2012).
- [39] A. I. Fernández-Domínguez, Y. Luo, A. Wiener, J. B. Pendry, and S. A. Maier, "Theory of Three-Dimensional Nanocrescent Light Harvesters," *Nano Lett.* **12**, 5946 (2012).
- [40] Rui-Qi Li, D. Hernangómez-Pérez, F. J. García-Vidal, and A. I. Fernández-Domínguez, "Transformation Optics Approach to Plasmon-Exciton Strong Coupling in Nanocavities," *Phys. Rev. Lett.* **117**, 107401 (2016).
- [41] J. B. Pendry, A. Aubry, D. R. Smith, and S. A. Maier, "Transformation Optics and Subwavelength Control of Light," *Science* **337**, 549 (2012).
- [42] J. B. Pendry, A. I. Fernández-Domínguez, Y. Luo, and R. Zhao, "Capturing photons with transformation optics," *Nat. Phys.* **9**, 518 (2013).
- [43] S. A. Maier, *Plasmonics: Fundamentals and Applications*, Boston: Springer, 2007.
- [44] A. Sommerfeld, "Über die Fortpflanzung elektrodynamischer Wellen längs eines Drahtes," *Ann. Der Physik und Chemie* **303**, 233 (1899).
- [45] J. Zenneck, "Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche und ihre Beziehung zur drahtlosen telegraphie," *Ann. Der Physik* **328**, 846 (1907).
- [46] R.W. Wood, "On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum," *Phil. Mag.* **4**, 396 (1902).
- [47] U. Fano, "The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi-Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves)," *J. Opt. Soc. Am.* **31**, 213 (1941).

- [48] R.H. Ritchie, "Plasma losses by fast electrons in thin films," *Phys. Rev.* **106**, 874 (1957).
- [49] R.H. Ritchie, E.T. Arakawa, J.J. Cowan, and R.N. Hamm, "Surface-plasmon resonance effect in grating diffraction," *Phys. Rev. Lett.* **21**, 1530 (1968).
- [50] U. Kreibig, and P. Zacharias, "Surface plasma resonances in small spherical silver and gold particles," *Z. Physik* **231**, 128 (1970).
- [51] S.L. Cunningham, A.A. Maradudin, and R.F. Wallis, "Effect of a charge layer on the surface-plasmonpolariton dispersion curve," *Phys. Rev. B* **10**, 3342 (1974).
- [52] J. Takahara, S. Yamagishi, H. Taki, A. Morimoto, and T. Kobayashi, Guiding of a one-dimensional optical beam with nanometer diameter, *Opt. Lett.* **22**, 475–478 (1997).
- [53] J. A. Porto, F. J. García-Vidal and J. B. Pendry, "Transmission Resonances on Metallic Gratings with Very Narrow Slits," *Phys. Rev. Lett.* **83**, 14 (1999).
- [54] L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal, H. J. Lezec, K. M. Pellerin, T. Thio, J. B. Pendry and T. W. Ebbesen, "Theory of Extraordinary Optical Transmission through Subwavelength Hole Arrays," *Phys. Rev. Lett.* **86**, 6 (2001).
- [55] A. Krishnan, T. Thio, T.J. Kim, H.J. Lezec, T.W. Ebbesen, P. A. Wolff, J. Pendry, L. Martín-Moreno and F. J. García-Vidal, "Evanescently coupled resonance in surface plasmon enhanced transmission," *Opt. Commun.* **200**, 1 (2001).
- [56] F. J. García-Vidal and L. Martín-Moreno, "Transmission and focusing of light in one-dimensional periodically nanostructured metals," *Phys. Rev. B* **66**, 155412 (2002).
- [57] H. J. Lezec, A. Degiron, E. Devaux, R. A. Linke, L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal and T. W. Ebbesen, "Beaming light from a subwavelength aperture," *Science* **297**, 820 (2002).

- [58] L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal, H. J. Lezec, A. Degiron and T. W. Ebbesen, "Theory of Highly Directional Emission from a Single Subwavelength Aperture Surrounded by Surface Corrugations," *Phys. Rev. Lett.* **90**, 16 (2003).
- [59] F. J. García-Vidal, H. J. Lezec, T. W. Ebbesen and L. Martín-Moreno, "Multiple paths to enhance optical transmission through a single subwavelength slit," *Phys. Rev. Lett.* **90**, 21 (2003).
- [60] J. Bravo-Abad, F. J. García-Vidal and L. Martín-Moreno, "Wavelength de-multiplexing properties of a single aperture flanked by periodic arrays of indentations," *Photon. Nanostruct.* **1**, 55 (2003).
- [61] F. J. García-Vidal and L. Martín-Moreno, H. J. Lezec and T. W. Ebbesen, "Focusing light with a single subwavelength aperture flanked by surface corrugations," *Appl. Phys. Lett.* **83**, 22 (2003).
- [62] J. Bravo-Abad, L. Martín-Moreno and F. J. García-Vidal, "Transmission properties of a single metallic slit: From the subwavelength regime to the geometrical-optics limit," *Phys. Rev. E* **69**, 026601 (2004).
- [63] L. Martín-Moreno and F. J. García-Vidal, "Optical transmission through circular hole arrays in optically thick metal films," *Opt. Express* **12**, 16 (2004).
- [64] J. B. Pendry, L. Martín-Moreno and F. J. García-Vidal, "Mimicking Surface Plasmons with Structured Surfaces," *Science*, **305**, 847 (2004).
- [65] F. J. García-Vidal, L. Martín-Moreno and J. B. Pendry, "Surfaces with holes in them: new plasmonic metamaterials," *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **7**, S97 (2005).

- [66] E. Moreno, F. J. García-Vidal and L. Martín-Moreno, "Enhanced transmission and beaming of light via photonic crystal surface modes," *Phys. Rev. B* **69**, 121402(R) (2004).
- [67] P. Berini, "Plasmon-polariton waves guided by thin lossy metal films of finite width: Bound modes of symmetric structures," *Phys. Rev. B* **61**, 10484 (2000).
- [68] P. Berini, "Plasmon-polariton waves guided by thin lossy metal films of finite width: Bound modes of asymmetric structures," *Phys. Rev. B* **63**, 125417 (2001).
- [69] S.I. Bozhevolnyi, T. Boltasseva, T. Sondergaard, T. Nikolajsen, and K. Leosson, "Photonic bandgap structures for long-range surface plasmon polaritons," *Opt. Commun.* **250**, 328 (2005).
- [70] T. Nikolajsen, K. Leosson, and S.I. Bozhevolnyi, "Surface plasmon polariton based modulators and switches operating at telecom wavelengths," *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5833 (2004).
- [71] T. Nikolajsen, K. Leosson, S.I. Bozhevolnyi, "In-line extinction modulator based on long-range surface plasmon polaritons," *Opt. Commun.* **244**, 455 (2005).
- [72] S.I. Bozhevolnyi, T. Boltasseva, T. Sondergaard, T. Nikolajsen, and K. Leosson, "Photonic bandgap structures for long-range surface plasmon polaritons," *Opt. Commun.* **250**, 328 (2005).
- [73] J. Bellessa, C. Bonnand, J. C. Plenet, and J. Mugnier, "Strong Coupling between Surface Plasmons and Excitons in an Organic Semiconductor," *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036404 (2004).

- [74] J. Dintinger, S. Klein, F. Bustos, W. L. Barnes, and T. W. Ebbesen, "Strong coupling between surface plasmon-polaritons and organic molecules in subwavelength hole arrays," *Phys. Rev. B* **71**, 035424 (2005).
- [75] G. A. Wurtz, P. R. Evans, W. Hendren, R. Atkinson, W. Dickson, R. J. Pollard, A. V. Zayats, W. Harrison and C. Bower, "Molecular Plasmonics with Tunable Exciton-Plasmon Coupling Strength in J-Aggregate Hybridized Au Nanorod Assemblies," *Nano Lett.* **7**, 1297 (2007).
- [76] J. Chovan, I. E. Perakis, S. Ceccarelli, and D. G. Lidzey, "Controlling the interactions between polaritons and molecular vibrations in strongly coupled organic semiconductor microcavities," *Phys. Rev. B* **78**, 045320 (2008).
- [77] F. Valmorra, M. Broll, S. Schwaiger, N. Welzel, D. Heitmann and S. Mendach, "Strong coupling between surface plasmon polariton and laser dye rhodamine 800," *Appl. Phys. Lett.* **99**, 051110 (2011).
- [78] S. V. Baieva, T. K. Hakala and J. J. Toppari, "Strong coupling between surface plasmon polaritons and Sulforhodamine 101 dye," *Nanoscale Res. Lett.* **7**, 191 (2012).
- [79] T. Schwartz, J. A. Hutchison, C. Genet, and T. W. Ebbesen, "Reversible Switching of Ultrastrong Light-Molecule Coupling," *Phys. Rev. Lett.* **106**, 196405 (2011).
- [80] D. E. Gomez, K. C. Vernon, P. Mulvaney and T. J. Davis, "Surface Plasmon Mediated Strong Exciton-Photon Coupling in Semiconductor Nanocrystals," *Nano Lett.* **10**, 274 (2010).

- [81] R. Chikkaraddy, B. de Nijs, F. Benz, S. J. Barrow, O. A. Scherman, E. Rosta, A. Demetriadou, P. Fox, O. Hess, and J. J. Baumberg, "Single-molecule strong coupling at room temperature in plasmonic nanocavities," *Nature* **535**, 127 (2016).
- [82] A. González-Tudela, P. A. Huidobro, L. Martín-Moreno, C. Tejedor, and F. J. García-Vidal, " Theory of Strong Coupling between Quantum Emitters and Propagating Surface Plasmons," *Phys. Rev. Lett.* **110**, 126801 (2013).
- [83] T. Hümmer, F.J. García-Vidal, L. Martín-Moreno, and D. Zueco, "Weak and strong coupling regimes in plasmonic QED," *Phys. Rev. B* **87**, 115419 (2013).
- [84] A. González-Tudela, P. A. Huidobro, L. Martín-Moreno, C. Tejedor, and F. J. García-Vidal, "Reversible dynamics of single quantum emitters near metal-dielectric interfaces," *Phys. Rev. B* **89**, 041402(R) (2014).
- [85] C. Van Vlack, P. T. Kristensen, and S. Hughes, "Spontaneous emission spectra and quantum light-matter interactions from a strongly coupled quantum dot metal-nanoparticle system," *Phys. Rev. B* **85**, 075303 (2012).
- [86] A. Trügler and U. Hohenester, "Strong coupling between a metallic nanoparticle and a single molecule," *Phys. Rev. B* **77**, 115403 (2008).
- [87] E. Waks and D. Sridharan, "Cavity QED treatment of interactions between a metal nanoparticle and a dipole emitter," *Phys. Rev. A* **82**, 043845 (2010).
- [88] M. M. Dvoynenko and J.-K. Wang, "Revisiting strong coupling between a single molecule and surface plasmons," *Opt. Lett.* **38**, 760 (2013).



- [89] K. V. Nerkararyan and S. I. Bozhevolnyi, "Relaxation dynamics of a quantum emitter resonantly coupled to a metal nanoparticle," *Opt. Lett.* **39**, 1617 (2014).
- [90] H. Varguet, B. Rousseaux, D. Dzsotjan, H. R. Jauslin, S. Guérin, and G. Colas des Francs, "Dressed states of a quantum emitter strongly coupled to a metal nanoparticle," *Opt. Lett.* **41** 4480 (2016).
- [91] A. Delga, J. Feist, J. Bravo-Abad, and F. J. García-Vidal, "Quantum Emitters Near a Metal Nanoparticle: Strong Coupling and Quenching," *Phys. Rev. Lett.* **112**, 253601 (2014).
- [92] A. Delga, J. Feist, J. Bravo-Abad, and F. J. García-Vidal, " Theory of strong coupling between quantum emitters and localized surface plasmons," *J. Opt.* **16** 114018 (2014).
- [93] K. Kneipp, H. Kneipp, I. Itzkan, R.R. Dasari, and M.S. Feld, "Ultrasensitive chemical analysis by Raman spectroscopy," *Chem. Rev.* **99**, 10 2957 (1999).
- [94] H. X. Xu, E. J. Bjerneld, M. Kall, and L. Borjesson, "Spectroscopy of single hemoglobin molecules by surface enhanced Raman scattering," *Phys. Rev. Lett.* **83**, 21 4357 (1999).
- [95] M. Futamata, Y. Maruyama, and M. Ishikawa, "Local electric field and scattering cross section of Ag nanoparticles under surface plasmon resonance by finite difference time domain method," *J. Phys. Chem. B* **10**, 7(31) 7607 (2003).
- [96] J. Prikulis, F. Svedberg, M. Kall, J. Enger, K. Ramser, M. Goksor, and D. Hanstorp: "Optical spectroscopy of single trapped metal nanoparticles in solution," *Nano Lett.* **4**, 1 115 (2004).
- [97] K. H. Su, Q. H. Wei, X. Zhang, J. J. Mock, D. R. Smith, and S. Schultz, "Interparticle coupling effects on plasmon resonances of nanogold particles," *Nano Lett.* **3**, 8 1087 (2003).

- [98] A. Manjavacas, F. J. García de Abajo, and P. Nordlander, "Quantum Plexcitonics: Strongly Interacting Plasmons and Excitons," *Nano Lett.* **11**, 2318 (2011).
- [99] S. Savasta, R. Saija, Alessandro Ridolfo, O. D. Stefano, P. Denti, and F. Borghese, "Nanopolaritons: vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in the center of a dimer nanoantenna," *ACS Nano* **4**, 6369 (2010).
- [100] R.-Q. Li, D. Hernángoomez-Pérez, F. J. García-Vidal, and A. I. Fernández-Domínguez, "Transformation Optics Approach to Plasmon-Exciton Strong Coupling in Nanocavities," *Phys. Rev. Lett.* **117**, 107401 (2016).

## 第2章 理论与方法

本章介绍论文用到的基本理论和计算方法. 其中 2.1 节变换光学理论在第 3 章中被用来简化求解系统的几何边界以获得便于解析求解的高对称性结构, 在第 4 章中用来设计全方向声吸收体, 并将具有不同梯度分布的声束偏转器归纳于同一类坐标变换之下. 2.2 节和 2.3 节为第 3 章解决 QE-SP 强耦合问题的理论基础. 2.4 节介绍了声子晶体的等效媒质理论, 作为梯度折射率媒质的一种实现方案在第 5 章中涉及到. 2.5 节介绍的有限元计算方法贯穿于全文所有进行数值仿真的计算.

## 2.1 变换光学理论和反演变换

变换光学基于 Maxwell 方程组在坐标变换下的形式不变性, 从不同空间中电磁场之间的几何映射出发, 建立起媒质的本构参数之间的关系, 从而为设计新颖的电磁波器件提供了方案. 本节从 Maxwell 方程组出发, 推导得出变换光学理论. 接着介绍一种特殊的几何变换: 反演变换. 这将成为第 3 章的理论基础.

考虑空间 1 到空间 2 的坐标变换表示  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}'(\mathbf{r})$ , 其中  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{r}'$  分别为空间 1 和空间 2 的位置矢量, 同时约定空间 2 中的算符和物理量均用上标撇标出以示区分, 该约定针对后面所有章节. Jacobi 矩阵  $\Lambda$  的矩阵元则可表示为  $\Lambda_{ij} = \partial \mathbf{r}'_i / \partial \mathbf{r}_j$ . 对于标量场  $\varphi$ , 在坐标变换下保持值不变  $\varphi'(\mathbf{r}') = \varphi(\mathbf{r})$ . 对于矢量场  $\mathbf{v}$ , 在变换下须满足关系:  $\mathbf{v} = \Lambda^T \mathbf{v}'$ . 对于矢量算符同样有:  $\nabla = \Lambda^T \nabla'$ .

空间 1 中, 微分形式的自由空间 Maxwell 方程组可写作:<sup>[1]</sup>

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.1.1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2.1.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (2.1.1c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (2.1.1d)$$

本构关系表示为:  $\mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B} = \boldsymbol{\mu} \mathbf{H}$ . 其中,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  和  $\boldsymbol{\mu}$  分别为空间 1 中的介电张量 (permittivity) 和磁导率 (permeability) 张量.

在变换  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}'(\mathbf{r})$  下, 方程(2.1.1a)左侧可化为  $(\Lambda^T \nabla') \times (\Lambda^T \mathbf{E}') = |\Lambda| \Lambda^{-1} (\nabla' \times \mathbf{E}')$ . 右侧可化为  $-\boldsymbol{\mu} \partial \mathbf{H} / \partial t = -\boldsymbol{\mu} \Lambda^T \partial \mathbf{H}' / \partial t$ . 因此有:  $|\Lambda| \Lambda^{-1} (\nabla' \times \mathbf{E}') = -\boldsymbol{\mu} \Lambda^T \partial \mathbf{H}' / \partial t$ . 与空间 2 中  $\nabla' \times \mathbf{E}' = -\boldsymbol{\mu}' \partial \mathbf{H}' / \partial t$  对比可得空间 2 中的磁导率张量:  $\boldsymbol{\mu}' = |\Lambda|^{-1} \Lambda \boldsymbol{\mu} \Lambda^T$ .

类似地, 利用方程(2.1.1b)可得空间 2 中的介电张量:  $\boldsymbol{\varepsilon}' = |\Lambda|^{-1} \Lambda \boldsymbol{\varepsilon} \Lambda^T$ . 于是,

在坐标变换  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}'(\mathbf{r})$  下, 空间 2 中媒质的本构参数须满足:[2]

$$\boldsymbol{\varepsilon}' = \frac{\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\Lambda}^T}{|\boldsymbol{\Lambda}|}, \quad (2.1.2a)$$

$$\boldsymbol{\mu}' = \frac{\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\Lambda}^T}{|\boldsymbol{\Lambda}|}. \quad (2.1.2b)$$

其中  $\boldsymbol{\Lambda}$  为 Jacobi 矩阵, 其矩阵元  $\Lambda_{ij} = \partial \mathbf{r}_i / \partial \mathbf{r}'_j$ .

对于任意的标量波动, 其空间变化部分  $\psi(\mathbf{r})$  都可以用 Helmholtz 方程来描述:  $(\nabla^2 + n^2 k_0^2)\psi(\mathbf{r}) = 0$ . 这里  $k_0$  为电磁波在真空中的波数,  $n = c/v$  为折射率( $c$  为真空中电磁波速,  $v$  为介质中电磁波速, 对于必须依赖介质传播的机械波, 选取一种参考介质即可). 特别地, 对于二维问题, 存在空间 1 到空间 2 的复映射  $z' \rightarrow z = z(z')$ , 同时 Helmholtz 方程写作:  $(\frac{\partial^2}{\partial z \partial z^*} + n^2 k_0^2)\psi(\mathbf{r}) = 0$ , 其中符号  $*$  表示复共轭. 为使方程在坐标变换下形式保持不变, 空间 2 的折射率分布  $n(z)$  满足:[3]

$$n(z) = n'(z') \left| \frac{dz'}{dz} \right|. \quad (2.1.3)$$

利用复变量描述二维空间的变换光学在第 4 章中有运用.

反演变换是反演几何(inversive geometry)中的最基本操作, 它将点  $\mathbf{r}$  关于反演中心  $\mathbf{R}_0$  映射到其反演点  $\mathbf{r}'$ .  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{r}'$  之间满足关系:[4]

$$\mathbf{r} - \mathbf{R}_0 = \frac{R_1^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{R}_0|^2} (\mathbf{r}' - \mathbf{R}_0), \quad (2.1.4a)$$

对于从空间 1 到空间 2 的反演变换, 须在空间 2 中另取反演点  $\mathbf{R}'_0$ , (2.1.4a)变为:

$$\mathbf{r} - \mathbf{R}_0 = \frac{R_1^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{R}'_0|^2} (\mathbf{r}' - \mathbf{R}'_0). \quad (2.1.4b)$$

这里的  $R_1^2$  为任意常数. 反演变换是保角变换, 具有很多有用的性质, 在第 3 章中有应用. 尤其重要的性质是: 球面在反演变换后依然为球面, 且反演点与球面的位置关系(这里指点在球内, 球面或球外)不改变.

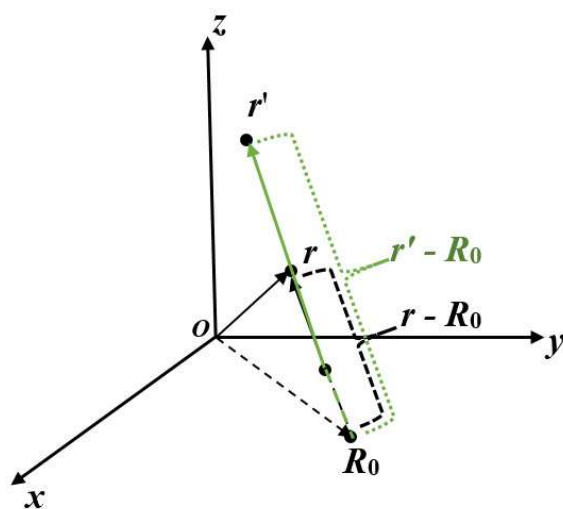


图 2.1 反演变换 (2.1.4a)示意图. 反演点为  $\mathbf{R}_0$ . 点  $\mathbf{r}$  经反演变换映射为点  $\mathbf{r}'$ . 对于不同坐标系之间的反演映射, 须在两坐标系中分别选取反演点.

## 2.2 电磁辐射场的量子化

考虑自由空间 Maxwell 方程组(2.1.1), 场变量  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  可以由标量势  $\phi$  和矢量势  $\mathbf{A}$  来表示:<sup>[1]</sup>

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad (2.2.1a)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.2.1b)$$

当取 Coulomb 规范  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  时, 自由空间里的矢量势  $\mathbf{A}$  满足齐次波动方程而标量势  $\phi$  满足 Laplace 方程:<sup>[1]</sup>

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.2.2a)$$

$$\nabla^2 \phi = 0. \quad (2.2.2b)$$

考虑一个边长为  $L$  的立方腔体, 即所谓量化腔(quantization cavity), 并设定其具有周期性边界条件. 矢量势  $\mathbf{A}$  可写成腔体的一系列行波模式的叠加:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} [A_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega_{\mathbf{k}}t} + A_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega_{\mathbf{k}}t}]. \quad (2.2.3)$$

其中,  $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|c$  为模式的简正频率.  $\lambda = 1, 2$  分别表示相互垂直的两个极化方向. 周期性边界条件使得波矢  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  的三个坐标分量满足  $k_i = 2\pi\nu_i/L$ ,  $\nu_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, i = x, y, z$ . 单位矢量  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$  表示波矢为  $\mathbf{k}$  的平面波的第  $\lambda$  个极化方向. 而 Coulomb 规范  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  的选取使得  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{k} = 0$ ,  $\lambda = 1, 2$ .

以下求解量化腔中辐射场的能量. 由于电场中的无旋部分  $-\nabla\phi$  由方程(2.2.2b)决定, 这是静电场, 因此必须剔除. 故辐射电场取  $\mathbf{E}_{\text{rad}} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ , 即:

$$\mathbf{E}_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} -\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega_{\mathbf{k}}t-\frac{\pi}{2}} + A_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega_{\mathbf{k}}t+\frac{\pi}{2}}]. \quad (2.2.4)$$

辐射磁场  $\mathbf{B}_{\text{rad}} = \nabla \times \mathbf{A}$ , 即:

$$\mathbf{B}_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \mathbf{i}\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} [A_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega_{\mathbf{k}}t} - A_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega_{\mathbf{k}}t}]. \quad (2.2.5)$$

因此, 量化腔中的辐射电磁场的总能量为:

$$E_{\text{rad}} = \frac{1}{2} \iiint_{\text{cavity}} (\varepsilon_0 \mathbf{E}_{\text{rad}} \cdot \mathbf{E}_{\text{rad}} + \mu_0^{-1} \mathbf{B}_{\text{rad}} \cdot \mathbf{B}_{\text{rad}}) d^3\mathbf{r}. \quad (2.2.6)$$

将(2.2.4)和(2.2.5)代入(2.2.6), 最后得到:

$$E_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{k}}^2 [A_{\mathbf{k}\lambda} A_{\mathbf{k}\lambda}^* + A_{\mathbf{k}\lambda}^* A_{\mathbf{k}\lambda}]. \quad (2.2.7)$$

而一维线性量子谐振子的 Hamilton 量可写作:<sup>[5]</sup>

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}) = \hbar \omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.2.8)$$

令  $A_{\mathbf{k}\lambda} \rightarrow \sqrt{\hbar/(2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{k}})} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ ,  $A_{\mathbf{k}\lambda}^* \rightarrow \sqrt{\hbar/(2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{k}})} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ , 辐射场能量(2.2.7)化为辐射场的 Hamilton 量:

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left( \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.2.9)$$

从(2.2.9)可以清楚地看出, 电磁辐射场可看做一系列具有不同固有频率  $\omega_{\mathbf{k}}$  的一维线性量子谐振子的叠加. (2.2.9) 中的算符  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$  和  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$  分别称为光子的产生和湮灭算符. 其性质完全类似一维线性量子谐振子 Hamilton 量中的  $\hat{a}^\dagger$  和  $\hat{a}$ .

以下为了方便, 略去(2.2.9)第二个等号后括号内的常数1/2, 该项仅仅对各能级的能量值作了平移. 因此(2.2.9)可写成:

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (2.2.10)$$

辐射电场也可由算符表示:

$$\hat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} -\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\hbar \omega_{\mathbf{k}} / (2\varepsilon_0 L^3)} [\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega_{\mathbf{k}}t-\frac{\pi}{2}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega_{\mathbf{k}}t+\frac{\pi}{2}}]. \quad (2.2.11)$$



## 2.3 量子发射单元(QE)与电磁场的相互作用

### 2.3.1 QE 的二能级系统 (2LS) 近似

如绪论中所述, 实际中 QE (如半导体量子点或分子等) 的能级分布通常要远远复杂于 2LS 模型. 然而, 我们研究中感兴趣的只是其中两个能级之间的跃迁, 其他的能级与它们之间往往存在足够大的能级差以致于对我们感兴趣的跃迁过程的影响可以基本忽略. 当 QE 近似地用 2LS 描述时, 我们只须关注两个参数, 跃迁频率  $\omega_0$  (transition frequency) 和跃迁电偶极矩  $\boldsymbol{\mu}$  (transition dipole moment). 用  $|g\rangle$  和  $|e\rangle$  分别表示两个能级中的较低能级(基态)和较高能级(激发态), 则  $\sigma^\dagger = |e\rangle\langle g|$  和  $\sigma = |g\rangle\langle e|$  分别表示 QE 的产生(creation)和湮灭(annihilation)算符. 其 Hamilton 量可表示为:<sup>[5]</sup>

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega_0\sigma^\dagger\sigma. \quad (2.3.1)$$

### 2.3.2 耦合体系的 Hamilton 量

在偶极近似下, QE 与电磁场的相互作用 Hamilton 量可表示为  $\hat{H}_1 = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{E}}$ . 其中 QE 的电偶极矩算符  $\hat{\mathbf{d}} = \boldsymbol{\mu}(\sigma + \sigma^\dagger)$ . 利用(2.2.11)式, 相互作用 Hamilton 量计算如下:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t) &= \boldsymbol{\mu}(\sigma e^{-i\omega_0 t} + \sigma^\dagger e^{i\omega_0 t}) \cdot \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}} / (2\varepsilon_0 L^3)} [\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t - \frac{\pi}{2}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}} t + \frac{\pi}{2}}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar g_{\mathbf{k}\lambda} (\sigma e^{-i\omega_0 t} + \sigma^\dagger e^{i\omega_0 t}) [\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t - \frac{\pi}{2}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}} t + \frac{\pi}{2}}]. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

其中  $g_{\mathbf{k}\lambda} = \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}/(2\hbar\varepsilon_0 L^3)} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$  定义为耦合常数. 由于  $\sigma \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i(\omega_0 + \omega_{\mathbf{k}})t - \frac{\pi}{2}}$  和  $\sigma^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_0)t + \frac{\pi}{2}}$  为快速振荡项, 故其周期平均值可忽略, 即所谓旋波近似 (RWA). 因此, 周期平均后的相互作用 Hamilton 量为:

$$\hat{H}_I = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar g_{\mathbf{k}\lambda} (\sigma \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \sigma^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}). \quad (2.3.3)$$

系统的总 Hamilton 量为:

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_I = \hbar\omega_0 \sigma^\dagger \sigma + \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar g_{\mathbf{k}\lambda} (\sigma \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \sigma^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}). \quad (2.3.4)$$

值得注意的是, (2.3.4) 中的两个求和项如果只取单模, 即选定一组  $\mathbf{k}$  和  $\lambda$ , 就退化为著名的 Jaynes-Cummings 模型.

### 2.3.3 系统的谱密度以及 Wigner-Weiskopf 问题<sup>[6]</sup>

获得了体系的 Hamilton 量以后, 我们可以求解系统的动力学特性 (population dynamics). 整个系统可能处于两种状态: 1. QE 处于激发态  $|e\rangle$ , 未有光子辐射出, 故系统没有任何电磁波模式, 系统的总波函数记作  $|e, 0\rangle$ ; 2. QE 处于基态  $|g\rangle$ , 此时由于 QE 释放出光子  $\hbar\omega_0$ , 系统具有一个电磁波模态, 故系统的总波函数记作  $|g, 1_{\mathbf{k}}\rangle$ , 下标  $\mathbf{k}$  表示模态的波矢. 为了计算方便, 以上两种状态均可借助算符用  $|g\rangle$  和  $|0\rangle$  来表示:

$$|e, 0_{\mathbf{k}}\rangle = \sigma^\dagger |g\rangle |0_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.3.5a)$$

$$|g, 1_{\mathbf{k}}\rangle = |g\rangle a_{\mathbf{k}}^\dagger |0_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.3.5b)$$

则系统演化过程中任一时刻  $t$  的波函数  $|\Phi(t)\rangle$  可表示为  $|e, 0\rangle$  和  $|g, 1_{\mathbf{k}}\rangle$  的线性组合:

$$|\Phi(t)\rangle = c_e(t) |e, 0_{\mathbf{k}}\rangle + c_g(t) |g, 1_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.3.6)$$

将(2.3.6)代入 Schrödinger 方程:

$$i\hbar \frac{\partial |\Phi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{\text{tot}} |\Phi(t)\rangle, \quad (2.3.6)$$

最终得到关于  $c_e(t)$  的微分积分方程:

$$\frac{d}{dt} c_e(t) = -\int_0^\infty d\tau \int_0^\infty d\omega J(\omega) e^{i(\omega_0 - \omega)(t - \tau)} c_e(\tau). \quad (2.3.7)$$

式中  $J(\omega)$  即系统的谱密度(spectral density). 它由下式定义:

$$J(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi \epsilon_0 \hbar c^2} \boldsymbol{\mu} \cdot \text{Im} \{ \mathbf{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega) \} \cdot \boldsymbol{\mu}. \quad (2.3.8)$$

其中,  $\mathbf{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega)$  为系统的 Dyadic Green 函数在源点  $\mathbf{r}_0$  的值. 方程(2.3.7)即为著名的 Wigner-Weiskopf 问题, 它联系了系统的谱密度(频域特性)和动力学特性之间的关系. 其中  $n(t) = |c_e(t)|^2$  (population dynamics)给出了单个系统处于激发态的概率或相应系综中处于激发态的系统数的占比.

另一方面, 当光源为偶极子时, 经典光学中的 Purcell 因子可表示为:<sup>[7]</sup>

$$P = \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \text{Im} \{ \mathbf{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega) \} \cdot \boldsymbol{\mu}}{\boldsymbol{\mu} \cdot \text{Im} \{ \mathbf{G}_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega) \} \cdot \boldsymbol{\mu}}. \quad (2.3.9)$$

(2.3.9) 式分母中的  $\mathbf{G}_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega)$  是自由空间 Dyadic Green 函数在源点  $\mathbf{r}_0$  的值. 我们根据(2.3.8)写出自由空间系统的谱密度:

$$J_0(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi \epsilon_0 \hbar c^2} \boldsymbol{\mu} \cdot \text{Im} \{ \mathbf{G}_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega) \} \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad (2.3.10)$$

由于  $\mathbf{G}_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \omega)$  已知, 故  $J_0(\omega)$  亦已知. 比较(2.3.8), (2.3.9)和(2.3.10)式, 我们得到 Purcell 因子与系统谱密度的重要关系:

$$P(\omega) = \frac{J(\omega)}{J_0(\omega)}. \quad (2.3.11)$$

因此, 我们可通过求解 Purcell 因子  $P(\omega)$  来获得系统的谱密度  $J(\omega)$ . (2.3.11) 式

的重要意义在于，它联系了经典光学和量子光学中的物理量，使得量子光学问题的求解可以部分借助经典光学理论进行。这在第 3 章里有应用。

## 2.4 长波近似下声子晶体的等效媒质理论<sup>[8-11]</sup>

本节给出长波近似下二维声子晶体的等效媒质参数. 由于求解过程使用了多重散射法(MST), 等效参数的解析形式较容易获得. 这使得对等效媒质参数与几何参数之间的依赖关系的讨论变得十分方便, 物理意义也显得非常明确.

在二维声子晶体中, 假定填充物为  $N$  个柱体, 密度为  $\rho_a$ , 声速为  $c_a$ . 其位置用  $\mathbf{R}_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, N$ ) 表示. 背景媒质密度  $\rho_b$ , 声速  $c_b$ . 入射声场可写为:

$$p^{\text{ext}}(r, \theta) = \sum_q A_q^{\text{ext}} J_q(kr) e^{iq\theta}. \quad (2.4.1)$$

其中  $k = \omega/c_b$ ,  $J_q(\cdot)$  为 Bessel 函数. 整个声子晶体的总散射场  $p^{\text{scatt}}$  为  $N$  个圆柱体的散射场之和, 即  $p^{\text{scatt}}(r, \theta) = \sum_{\alpha=1}^N p_\alpha^{\text{scatt}}(r, \theta)$ . 其中单个散射体的散射场  $p_\alpha^{\text{scatt}}$  可写为:

$$p_\alpha^{\text{scatt}}(r, \theta) = \sum_q A_{\alpha,q} H_q(kr_\alpha) e^{iq\theta_\alpha}. \quad (2.4.2)$$

其中,  $H_q(\cdot)$  为第一类 Hankel 函数,  $(r_\alpha, \theta_\alpha)$  为原点位于柱体  $\alpha$  处的极坐标. 作用于柱体  $\alpha$  的总入射场  $p_\alpha^{\text{inc}}$  为  $p^{\text{ext}}$  与其余  $N-1$  个柱体的散射场之和. 这里先形式上将  $p_\alpha$  用 Bessel 函数展开:

$$p_\alpha^{\text{inc}}(r_\alpha, \theta_\alpha) = \sum_s B_{\alpha,s} J_s(kr_\alpha) e^{is\theta_\alpha}. \quad (2.4.3)$$

根据上述  $p_\alpha^{\text{inc}}$ ,  $p^{\text{ext}}$ ,  $p^{\text{scatt}}(r, \theta)$  三者的关系, 可得系数  $B_\alpha$  和  $A_\beta$  ( $\beta \neq \alpha$ ) 之间满足:

$$B_{\alpha,q} = \sum_s [A_s^{\text{ext}} J_{s-q}(kR_\alpha) e^{i(s-q)\Phi_\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} A_{\beta,s} H_{q-s}(kr_{\alpha\beta}) e^{i(s-q)\theta_{\alpha\beta}}]. \quad (2.4.4)$$

同时,  $A_\alpha$  与  $B_\alpha$  之间还满足线性关系:

$$A_{\alpha,q} = \sum_s T_{\alpha,qs} B_s. \quad (2.4.5)$$

(2.4.4) 两边乘以  $T_{\alpha,rq}$  并对指标  $q$  求和, 可得:

$$A_{\alpha,r} - \sum_s \sum_{\beta} G_{\alpha\beta,rs} A_{\beta,s} = S_{\alpha,r}. \quad (2.4.6)$$

其中,  $G_{\alpha\beta,rs} = \sum_q (1 - \delta_{\alpha\beta}) T_{\alpha,rq} H_{q-s}(kr_{\alpha\beta}) e^{i(s-q)\theta_{\alpha\beta}}$ ,  $S_{\alpha,r} = \sum_s \sum_q T_{\alpha,rq} J_{s-q}(kR_{\alpha}) e^{i(s-q)\Phi_{\alpha}} A_s^{\text{ext}}$ .

令  $M_{\alpha\beta,rs} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{rs} - G_{\alpha\beta,rs}$ , 可将(2.4.6)写为:

$$\sum_{\beta} \sum_s M_{\alpha\beta,rs} A_{\beta,s} = S_{\alpha,r}. \quad (2.4.7)$$

其中指标  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$ . 指标  $r, s$  取决于对式 (2.4.1) 至 (2.4.3) 级数展开的截断. 这里假定(2.4.1)中指标  $q$  取  $|q| \leq q_{\max}$ . 这样, 所有  $N$  个散射体的散射系数  $A_{\alpha,r}$  均可由矩阵方程(2.4.7)求得, 形式上写为:

$$A_{\alpha,r} = \sum_{\beta} \sum_s M_{\alpha\beta,rs}^{-1} S_{\beta,s}. \quad (2.4.8)$$

整个声子晶体的区域外部, 总散射场  $p^{\text{scatt}}$  除了表示为  $N$  个散射体的散射场之和, 也可看做一个中心位于原点的等效柱形散射体的散射, 因此可直接表示为第一类 Hankel 函数的级数:

$$p^{\text{scatt}} = \sum_p A_p^{\text{out}} H_p(kr) e^{ip\theta}. \quad (2.4.9)$$

其中  $r > \max\{R_{\alpha}, \forall \alpha \in [1, N]\}$ . 系数  $A_p^{\text{out}}$  与单个散射体的散射系数  $A_{\alpha,q}$  的关系可表示为:

$$A_p^{\text{out}} = \sum_{\alpha} \sum_q A_{\alpha,q} J_{p-q}(kR_{\alpha}) e^{i(q-p)\Phi_{\alpha}}. \quad (2.4.10)$$

将(2.4.8)代入(2.4.10), 最终可得  $A_p^{\text{out}} = \sum_s T_{ps}^{\text{eff}} A_s^{\text{ext}}$ , 其中:

$$T_{ps}^{\text{eff}} = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{r, q, t} J_{\alpha, pq} M_{\alpha\beta, qr}^{-1} T_{\beta, rt} J_{\beta, st}^*. \quad (2.4.11)$$

另一方面, 一个柱体的  $\mathbf{T}$  矩阵可由自身的几何参数, 物理参数(密度, 弹性模量等)共同确定.<sup>[10]</sup> 因此, 上述等效柱体的  $\mathbf{T}$  矩阵实则已知, 假定矩阵元可以记为  $T_{ps}^{\text{cyl}}$ .

在长波近似下, 等效柱体的散射场趋近于声子晶体总散射场等价于:

$$T_{ps}^{\text{eff}} = T_{ps}^{\text{cyl}}, \quad \forall p, s. \quad (2.4.12)$$

通过求解(2.4.12), 即可确定等效柱体的几何参数和物理参数. 如果假定所有柱体均为圆柱, 则等效密度  $\rho_{\text{eff}}$  和等效声速  $c_{\text{eff}}$  可表示为:

$$\rho_{\text{eff}} = \frac{\rho_a(\Delta + f) + \rho_b(\Delta - f)}{\rho_a(\Delta - f) + \rho_b(\Delta + f)} \rho_b; \quad (2.4.13a)$$

$$\frac{1}{\rho_{\text{eff}} c_{\text{eff}}^2} = \left( \frac{f}{\rho_a c_a^2} + \frac{1-f}{\rho_b c_b^2} \right). \quad (2.4.13b)$$

其中参数  $\Delta$  定义为  $\Delta^{-1} = N^{-1} \sum_{\alpha, \beta} M_{\alpha\beta, 11}^{-1}$ . 对于绝对刚性圆柱构成的声子晶体, 令  $\rho_a \rightarrow \infty$ , (2.4.13)简化为:

$$\rho_{\text{eff}} = \frac{1+f}{1-f} \rho_b; \quad (2.4.14a)$$

$$c_{\text{eff}} = \frac{c_b}{\sqrt{1+f}}. \quad (2.4.14b)$$

本文的第5章将利用亚波长尺度下声子晶体的等效媒质特性, 给出实现波导管中声波单向传输的一种方案.

## 2.5 有限元方法简介

随着电子计算机的计算能力突飞猛进的提高,有限元方法已经成为科学研究和工程设计中应用最为广泛的数值方法之一.

有限元法的基本思想是这样的:首先将求解区域划分为若干个单元,各单元通过边界上的结点相互连接.每个结点上要求解的物理量设为未知数.这样就把求解连续分布的场量的问题简化为有限未知量的求解问题.然后建立求解该组未知量的数学模型,得到求解结点未知数的所谓有限元求解方程.解出各结点处物理量的值后,根据每个单元内部的选取的合适的插值函数,求出每个单元内的物理量.

在实际计算中,无论使用成熟的商用软件还是为具体问题编写个性化解决方案,有限元方法的执行流程必须包含以下步骤:

(1) 建立积分方程 (弱形式),根据变分原理或方程余量与权函数正交化原理,建立与微分方程初边值问题等价的积分表达式.

(2) 单元剖分,根据求解区域的形状及实际问题的物理特点,将区域剖分为若干相互连接,不重叠的单元.除了给单元和节点进行编号和确定相互之间的关系,还要表示节点的位置坐标,并列出自然边界和本质边界的节点序号和相应的边界值.

(3) 确定单元基函数,根据单元中节点数目及对近似解精度的要求,选择满足一定插值条件的插值函数作为单元基函数.

(4) 单元分析.将各个单元中的求解函数用单元基函数的线性组合表达式逼近;再将近似函数代入积分方程,并对单元区域进行积分,可获得含有待定系数



(即单元中各节点的参数值)的代数方程组,称为单元有限元方程。

(5) 总体合成. 在得出单元有限元方程之后,将区域中所有单元有限元方程按一定法则累加,形成总体有限元方程。

(6) 边界条件的处理. 一般边界条件有三种形式:本质边界条件,自然边界条件,混合边界条件. 自然边界条件一般在积分表达式中可自动得到满足. 本质边界条件和混合边界条件需按一定法则对总体有限元方程进行修正满足。

(7) 解有限元方程: 根据边界条件修正的总体有限元方程组,是含所有待定未知量的封闭方程组,采用适当的数值计算方法求解,可求得各节点的函数值。

本文使用的为商业有限元软件 COMSOL Multiphysics. 该软件最初为 MATLAB 软件的一个工具包,后逐步发展为一个独立的软件. 该软件界面友好,求解效率高,且能求解多物理场耦合问题,在科学研究和工程设计中的应用非常广泛。

## 参考文献

- [1] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd Edition, New York: Wiley, 1999.
- [2] A. V. Kildishev, W. Cai, U. K. Chettiar and V. M. Shalaev, "Transformation optics: approaching broadband electromagnetic cloaking," *New J. Phys.* **10**, 115029 (2008).
- [3] U. Leonhardt, "Optical Conformal Mapping," *Science* **312**, 1777 (2006).
- [4] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Moscow: Pergamon Press, 1960.
- [5] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, 3rd Edition, Oxford: Oxford University Press, 2000.
- [6] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford: Oxford University Press, 2002.
- [7] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*, 2nd Edition, Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
- [8] D. Torrent, A. Håkansson, F. Cervera, and J. Sánchez-Dehesa "Homogenization of Two-Dimensional Clusters of Rigid Rods in Air," *Phys. Rev. Lett.* **96**, 204302 (2006).
- [9] D. Torrent and J. Sánchez-Dehesa, "Effective parameters of clusters of cylinders embedded in a nonviscous fluid or gas," *Phys. Rev. B* **74**, 224305 (2006).
- [10] P. C. Waterman, "New Formulation of Acoustic Scattering," *J. Acoust. Soc. Am.* **45**, 1417 (1969).
- [11] 程建春, 声学原理, 第1版, 北京: 科学出版社, 2012.
- [12] Giuseppe Pelosi. "The finite-element method, Part I: R. L. Courant: Historical

Corner," (2007).

## 第3章 纳米光腔中量子发射单元与表面等离子激元的强耦合

随着量子光学理论的日趋成熟,光与物质的相互作用问题的理论研究得到了长足的发展. 21 世纪以来,纳米微加工技术日趋成熟,微纳光腔与量子发射单元(QE)的相互作用成为了一个热点问题. 在这之中, QE 与微纳腔体支持的 SP 之间的强耦合问题备受关注. 其中的一个原因是在未来的量子信息处理系统中, QE-SP 强耦合体系有望成为其中的基本构建单元. 本章研究的是 QE-SP 在二聚体(Dimer)型腔体中强耦合的物理机制. 鉴于 Dimer 型腔体可看做单个纳米球, NPoM 型腔体等结构的一般化情况, 研究它具有较强的理论意义, 也对未来相关腔体中进行强耦合实验具有指导意义.

### 3.1 研究背景

作为纳米尺度上光与物质相互作用的重要物理机制,量子发射单元(QE)与表面等离激元(SP)的耦合效应引起了研究者的极大兴趣<sup>[1-3]</sup>. 研究者关注的焦点源于突破经典光学衍射极限对电磁场的控制和放大增强. 当 QE 和 SP 之间的相互作用进入强耦合方式时,两个子系统在短于它们各自寿命的时间尺度内交换能量,共同构成了被称作等离激元-激子-极化子(plasmon-exciton-exciton, PEP)的复合体系<sup>[2]</sup>. 对 QE 与 SP 构成的 PEP 的研究在理论<sup>[4-9][14-16]</sup>上已取得了重大进展. 对 QE 集合体与 SP 的相互作用的实验研究也已逐渐深入<sup>[10-13]</sup>,而单个 QE 与 SP 耦合实验的实验研究则随着纳米微加工工艺水平的提高逐步展开<sup>[17]</sup>. 尽管如此,本工作利用变换光学为工具描述 PEP 复合体系的强耦合机理,这在该领域尚属首次. 利用变换光学对结构的几何特征的灵活转化,本工作从全新的角度阐释了二聚体型纳米颗粒与 2LS 强耦合的物理机制和激发条件,为实验上进一步研究单个 QE 与 SP 构成的 PEP 系统提供了理论依据.

### 3.2 系统模型及反演变换

图 3.1 给出本工作研究的系统模型. 它由两个半径均为  $R$  的纳米小球 (nanosphere) 构成一个纳米颗粒二聚体(dimer). 量子发射器(QE)置于两纳米小球的宽为  $\delta$  间隙中, 即  $z$  轴上的  $z = z_E$  处. 根据第 3 章的理论, QE 由理想的二能级系统(2LS)来模拟, 其性质由跃迁频率  $\omega_E$  和跃迁电偶极矩  $\mu_E$  决定. 本章始终取电偶极矩方向沿  $z$  轴, 即  $\mu_E = \mu_E \hat{z}$ . 纳米金属球介电常数取 Drude 模型:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (3.2.1)$$

背景媒质为均匀电介质, 介电常数  $\varepsilon_D$ .

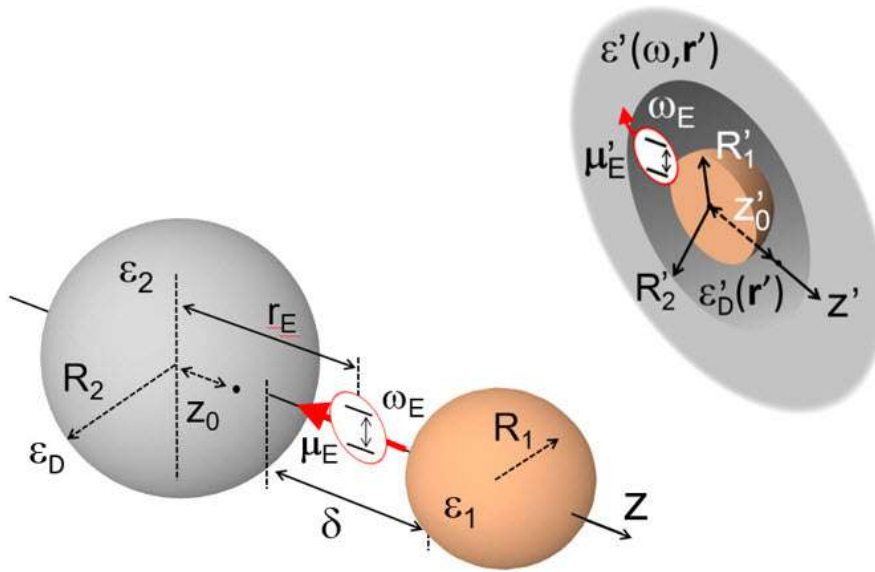


图3.1 系统模型及反演变换示意图. 左下为纳米颗粒二聚体, 由半径分别为  $R_1$  和  $R_2$ , 介电常数为  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon(\omega)$  的纳米小球构成. 两个纳米小球之间的间隙宽度  $\delta$ . 取  $z$  轴为对称轴. QE 置于  $z$  轴上的  $z = r_E$  处, 跃迁频率  $\omega_E$ , 跃迁电偶极矩  $\mu_E = \mu_E \hat{z}$ . 背景媒质为介电常数  $\varepsilon_D$  的电介质. 右上为经过反演变换(3.3.1)式后的同心球结构. 原空间中半径  $r = R_2$  的球体

被映射到  $r' = R_2'$  的球面外部. 原空间中半径  $r = R_1$  的球体被映射到  $r' = R_1'$  的球面内部. 原空间中背景媒质被映射到  $R_1' < r' < R_2'$  的壳层中. 注意到原空间和变换后空间中反演点的位置分别为  $z = z_0$  和  $z' = z_0'$ .

直接求解二聚体型腔体周围的电场分布是困难的. 这里利用 2.1 节里的反演变换获得高度对称的几何结构. 反演变换在三维直角坐标系中可写作<sup>[21-25]</sup>:

$$\mathbf{p} = \frac{R_T^2}{\rho'^2 + (z' - z_0')^2} \mathbf{p}', \quad (3.2.2a)$$

$$z - z_0 = -\frac{R_T^2}{\rho'^2 + (z' - z_0')^2} (z' - z_0'). \quad (3.2.2b)$$

其中  $\mathbf{p} = (x, y)$ ,  $\mathbf{p}' = (x', y')$ ,  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $\rho' = \sqrt{x'^2 + y'^2}$  (式(3.2.3)和(3.2.4)中亦用该定义). (3.2.2b) 中的负号仅为了使变换后空间中的反演点位于  $+z'$  轴. 本章依然按照 2.1 节的约定, 变换后空间的所有量用撇号区分. 其中  $z = z_0$  和  $z' = z_0'$  分别为原空间和变换后空间中的反演点位置. 根据(3.2.2)式, 原空间中半径  $r = R_2$  的球体被映射到  $r' = R_2'$  的球面外部. 原空间中半径  $r = R_1$  的球体被映射到  $r' = R_1'$  的球面内部. 原空间中背景媒质被映射到  $R_1' < r' < R_2'$  的壳层中. 反演点的位置  $z = z_0$  的选取不是任意的, 它必须确保变换后空间中的半径分别为  $R_1'$  和  $R_2'$  的球的球心均为坐标系原点. 以下推导出反演点坐标须满足的关系以及变换后空间中的各几何参数.

### 1. 原空间中反演点坐标 $z_0$ .

原空间中坐标原点取球  $R_2$  的球心. 则球  $R_1$  和球  $R_2$  的方程分别可写成:

$$\rho^2 + (z - L)^2 = R_1^2, \quad (3.2.3a)$$

$$\rho^2 + z^2 = R_2^2. \quad (3.2.3b)$$

其中  $L = R_1 + R_2 + \delta$ . 经过变换(3.2.1)后, 在新空间中分别为:

$$\rho'^2 + \left[ z' - z'_0 - \frac{R_1^2(z_0 - L)}{(z_0 - L)^2 - R_1^2} \right]^2 = \frac{R_1^4 R_1^2}{[(z_0 - L)^2 - R_1^2]^2}, \quad (3.2.4a)$$

$$\rho'^2 + \left( z' - z'_0 - \frac{R_1^2 z_0}{z_0^2 - R_2^2} \right)^2 = \frac{R_1^4 R_2^2}{(z_0^2 - R_2^2)^2}. \quad (3.2.4b)$$

为使球心重合, 有:

$$z'_0 + \frac{R_1^2(z_0 - L)}{(z_0 - L)^2 - R_1^2} = z'_0 + \frac{R_1^2 z_0}{z_0^2 - R_2^2}. \quad (3.2.5)$$

解方程(3.2.5)可得原空间中的反演点坐标  $z_0$ :

$$z_0 = \frac{1}{2L} \left[ (L^2 + R_2^2 - R_1^2) - \sqrt{(2R_1 + \delta)\delta(2L - \delta)(2R_2 + \delta)} \right]. \quad (3.2.6)$$

## 2. 变换后空间中两球半径 $R'_1, R'_2$ .

原空间中  $(0, 0, R_2)$  和  $(0, 0, -R_2)$ , 被映射到  $(0, 0, z_0 - R_1^2/d)$  和  $(0, 0, z_0 + d'_2)$ .

其中  $d = R_2 - z_0$ ,  $d'_2 = R_1^2/(2R_2 - d)$ . 因此  $R'_2 = (R_1^2/d + d'_2)/2$ .

原空间中  $(0, 0, R_2 + \delta)$  和  $(0, 0, 2R_1 + R_2 + \delta)$ , 被映射到  $(0, 0, z_0 - R_1^2/(\delta + d))$

和  $(0, 0, z_0 - d'_1)$ . 其中  $d'_1 = R_1^2/(2R_1 + \delta + d)$ . 因此  $R'_1 = [R_1^2/(\delta + d) - d'_1]/2$ .

## 3. 变换后空间中反演点坐标 $z'_0$ .

变换后两同心球的球心在坐标原点, 可得  $R'_0 = [R_1^2/(\delta + d) + d'_1]/2$ .

反演变换将二聚体型腔体映射为具有高度对称性的同心球结构, 使得系统的求解大为简化, 具体方法见 3.7 节.



### 3.3 准静态近似<sup>[21]</sup>

准静态近似要求电磁场的变化足够缓慢，场和源有瞬时的对应关系。该对应关系类似于静态场的场和源的关系，因此称作准静态。准静态近似必须满足以下条件：

1. 位移电流足够小，以致可以忽略。这就要求：

$$\left| \frac{\partial \mathbf{D} / \partial t}{\sigma \mathbf{E}} \right| \ll 1. \quad (3.3.1)$$

假定为时谐场  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ ，该条件即：

$$\omega \ll \frac{\sigma}{\varepsilon}. \quad (3.3.2)$$

对于金属，通常须满足  $\omega \ll 10^{17} \text{ rad/s}$ 。本工作考虑的频率范围  $\hbar\omega \leq 4 \text{ eV}$ ，相当于  $\omega \leq 10^{15} \text{ rad/s}$ ，充分满足此条件。

2. 忽略推迟效应。设  $\mathbf{r}_0$  处的源在  $\mathbf{r}$  处产生的电场为  $\mathbf{E}$ ，则  $\mathbf{E}$  可写作：

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega \left( t - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{c} \right)} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} \left( 1 - \frac{i}{c} \omega |\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| + \dots \right). \quad (3.3.3)$$

忽略推迟效应，可令  $i\omega |\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|/c \ll 1$ ，得：

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \ll \frac{\lambda}{2\pi}. \quad (3.3.4)$$

即波长  $\lambda$  远大于结构尺寸。本工作中考虑的波长  $\lambda > 300 \text{ nm}$ 。远大于纳米金属球的最大尺寸。

从以上两点估算可知，本工作中使用准静态近似是合理的。同时，我们利用有限元方法仿真了  $\delta = R/15$ ，半径  $R$  取不同值时系统的 Purcell 因子。通过与利用变换光学结合准静态近似得到了数值结果的比较，可看出两者能较好地吻合。在低频区，当  $R \geq 30 \text{ nm}$  时，有限元仿真结果与准静态近似的结果有偏差，这些

偏差并不是准静态近似失效的表现，因为频率越低，准静态近似就越准确。结果的偏差来源于纳米小球的辐射效应。在准静态近似下，系统可以用静电势来描述。对于无源区域，静电势满足 Laplace 方程，这与直接求解 Maxwell 方程组相比大为简化而又不失精确度。

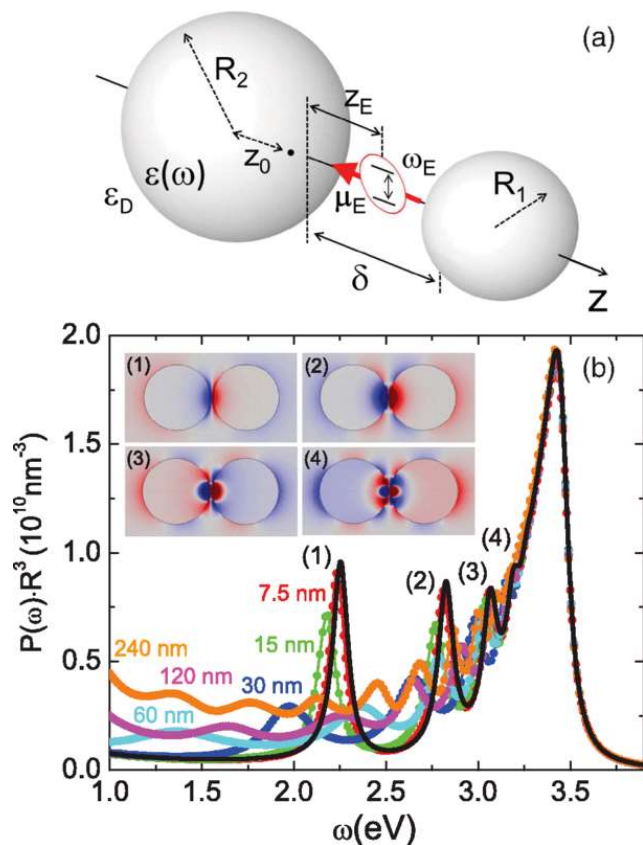


图 3.2 (a) 模型的示意图。二聚体型微腔由半径分别为  $R_1$  和  $R_2$ ，介电常数均为  $\epsilon(\omega)$  的纳米小球构成。两个纳米小球之间的间隙宽度  $\delta$ 。取对称轴为  $z$  轴。QE 置于  $z$  轴上的  $z = z_E$  处，跃迁频率  $\omega_E$ ，跃迁电偶极矩  $\mu_E = \mu_E \hat{z}$ 。背景媒质为介电常数  $\epsilon_D$  的电介质。(b) 归一化的 Purcell 因子。QE 位于间隙中央位置。  $R_1 = R_2 = R$ ，  $\delta = R/15$ 。彩色点和曲线为不同  $R$  取值下的仿真结果。黑色实线为基于变换光学理论的数值计算结果。左上角插图为图中标示的四个最低 SP 模式的电荷分布。

### 3.4 利用谱密度和系统动力学特征研究强耦合的物理机制

由 2.3 节可知, 系统的谱密度可用 Dyadic Green 函数表示, 这里进一步用散射 Dyadic Green 函数写成<sup>[26,27]</sup>:

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\mu_E^2 \omega^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \left\{ 1 + \frac{6\pi c}{\omega} \text{Im}[G_{zz}^{\text{sc}}(\mathbf{r}_E, \mathbf{r}_E, \omega)] \right\}. \quad (3.4.1)$$

其中散射 Dyadic Green 函数由下式确定:

$$\mathbf{E}^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \omega) = \omega^2 \mu_0 \mu \vec{\mathbf{G}}^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_E, \omega) \boldsymbol{\mu}. \quad (3.4.2)$$

散射电场  $\mathbf{E}^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \omega)$  及散射 Dyadic Green 函数的具体求解方法见 3.6 节.

我们首先研究当 QE 位于两个纳米小球间隙中央时, 系统的谱密度  $J(\omega)$  (由  $\mu_E^2/R^3$  归一化) 与参量  $\delta/R$  的关系. 计算结果如图 3.3 所示. 随着间隙的增大, 谱密度整体减小, 各峰值均出现蓝移, 并最终与所谓的伪模式 ( $\omega = \omega_{\text{ps}}$ ) 共振峰汇聚 (伪模式实则为一系列高阶 SP 模式的重叠效应, 详见 3.6 节). 图 3.3 给出了二聚体型腔体谱密度的总体变化趋势, 为接下来寻找系统实现强耦合的物理机制提供了直观的线索.

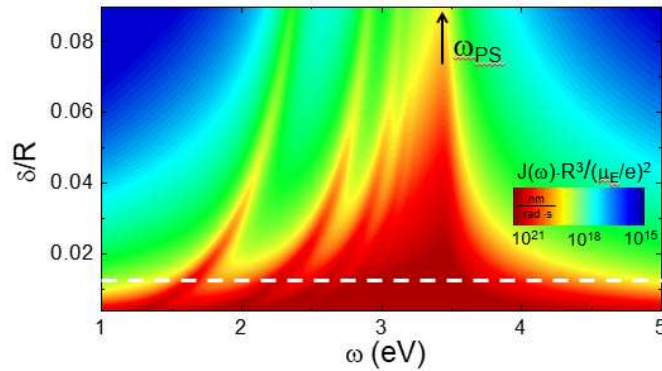


图 3.3 QE 位于两个纳米小球间隙中央, 系统的谱密度  $J(\omega)$  (由  $\mu_E^2/R^3$  归一化) 与参量  $\delta/R$  的关系, 随着间隙  $\delta$  的增大, 谱密度  $J(\omega)$  整体减小, 各峰值均出现蓝移, 并最终与所谓伪

模式( $\omega = \omega_{ps}$ )共振峰汇聚.

求解出系统的谱密度  $J(\omega)$  后, 我们便可根据(2.3.7)考察系统的动力学特性  $n(t)$ . 计算中设定纳米小球半径  $R = 120 \text{ nm}$ (以下均同), 跃迁偶极矩  $\mu_E = 1.5 e \text{ nm}$ . QE 置于间隙中点处, 其跃迁频率  $\omega_E$  取两组值: (1)  $J(\omega)$  的最低共振峰频率  $\omega_{dp}$  (图 3.4 (a)); (2)  $J(\omega)$  的伪模式共振峰频率  $\omega_{ps}$  (图 3.4 (b)). 从图 3.4 (a)(b)中可以看出, 当  $\delta < 3 \text{ nm}$  时, 跃迁频率无论取  $\omega_{dp}$  还是  $\omega_{ps}$ ,  $n(t)$ 均表现为相同的强烈振荡( $n$  值从 1 到 0)的特性. 这表明 QE 与 SP 模式处于强耦合状态, 二者之间持续进行能量交换. 当  $\delta > 4 \text{ nm}$  时,  $n(t)$ 均单调减小, 故不存在 QE 与 SP 的能量交换, 仅表现为 QE 向基态跃迁并辐射光子. 此情况下, 外界腔体的 SP 模式仅对  $n(t)$ 衰减速率有影响, 系统处于所谓的弱耦合区. 比较图 3.4 (a)(b)还可看出在弱耦合区二者衰减速率并不一致, 这是所谓的失谐效应所致(detuning effect).

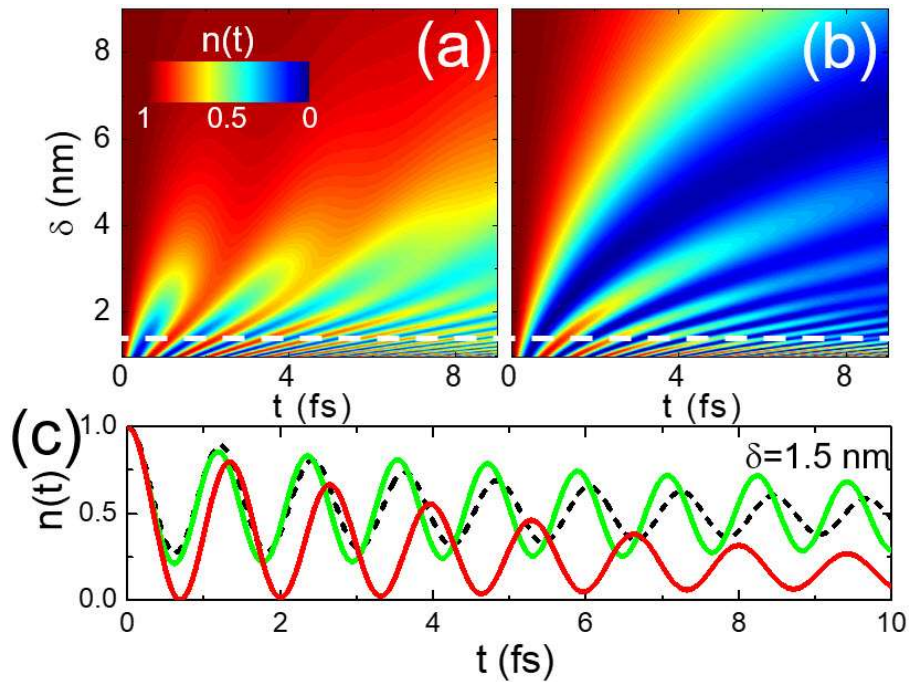


图 3.4  $n(t)$ 随间隙宽度  $\delta$ 的变化. 设定纳米小球半径  $R = 120 \text{ nm}$ ,  $\mu_E = 1.5 e \text{ nm}$ . QE 置于间隙中点处. 其跃迁频率  $\omega_E$  取: (a)  $J(\omega)$  的最低共振峰频率  $\omega_{DP}$ ; (b)  $J(\omega)$  的伪模式共振峰频率  $\omega_{PS}$ . (c) 三种情形下的  $n(t)$ . 设定间隙宽度  $\delta = 1.5 \text{ nm}$ . 绿色实线为  $\omega_E = \omega_{DP}$  的情形, 红色实线为  $\omega_E = \omega_{PS}$  的情形, 黑色虚线为谱密度  $J(\omega)$  只保留伪模式且  $\omega_E = \omega_{DP}$  的情形.

从图 3.4 (a)(b)的比较可以得知, QE 的跃迁频率  $\omega_E$  取  $\omega_{DP}$  还是  $\omega_{PS}$ , 对强耦合区域的影响很小, 这使得我们必须进一步探索究竟是哪个 SP 模式在强耦合中起作用, 亦或是偶极模式( $\omega = \omega_{DP}$ )和伪模式( $\omega = \omega_{PS}$ 处的一系列高阶模式)共同作用. 为此, 我们对三种情形下的  $n(t)$ 做了对比. 三种情形均设定间隙宽度  $\delta = 1.5 \text{ nm}$ , 对应于图 3.4 (a)(b)中的白色虚线位置. 图 3.4 (c)中的绿色实线为  $\omega_E = \omega_{DP}$  的情形, 红色实线为  $\omega_E = \omega_{PS}$  的情形, 黑色虚线为谱密度只保留伪模式且  $\omega_E = \omega_{DP}$  的情形. 从绿色实线和黑色虚线的比较可以看出, 偶极模式对强耦合的作用极其微弱以致可以忽略. 而红色实线和黑色虚线基本吻合, 这表明伪模式对系统强耦合起了决定作用. 因此, 以下集中分析伪模式( $\omega = \omega_{PS}$ )的特性以及怎样激发出伪模式中包含的所有高阶模式, 以期获得系统最高程度的强耦合效应.

从图 3.4 的计算中可以看出, 当 QE 置于腔体间隙的中点时, 产生强耦合的间隙  $\delta$  阈值约  $4 \text{ nm}$ . 而 QE 置于单个相同大小纳米球附近时  $\delta$  的阈值约  $2 \text{ nm}$ . 这说明二聚体型腔体在阈值附近并没有产生两个纳米球 SP 模式的协同作用, 而是与 QE 和单个纳米球的耦合机制相同. 为了进一步分析 QE 置于腔体间隙中点时的耦合特性, 我们在图 3.5 中计算了比值  $J(\omega_{PS})/[2J_0(\omega_{PS})]$ 与  $\delta$  的关系. 其中  $J(\omega_{PS})$  为 QE 置于腔体间隙  $\delta$  的中点时谱密度最大峰值,  $J_0(\omega_{PS})$  为 QE 和单个纳米球耦

合且间距为  $\delta/2$  时谱密度最大峰值. 从图中看出, 仅当  $\delta < 1.5 \text{ nm}$  时, 该比值达到 10 以上, 体现出二聚体型腔体中由于两纳米球 SP 模式的协同作用导致的耦合增强. 然而, 当间隙  $\delta$  逐渐增大, 其耦合效应与单个纳米球趋于相同. 需要注意的是, 纳米球半径为 120 nm, 1.5 nm 的间隙与之相比非常微小. 如果考虑实际实验中的纳米球尺寸(Baumberg 小组实验使用的是半径 20 nm 的小球), 间隙值将缩小至不可精确控制的尺度. 因此  $\delta < 1.5 \text{ nm}$  的区域不作讨论. 以下集中讨论如何在较为实际的间隙取值下实现最高程度的强耦合.

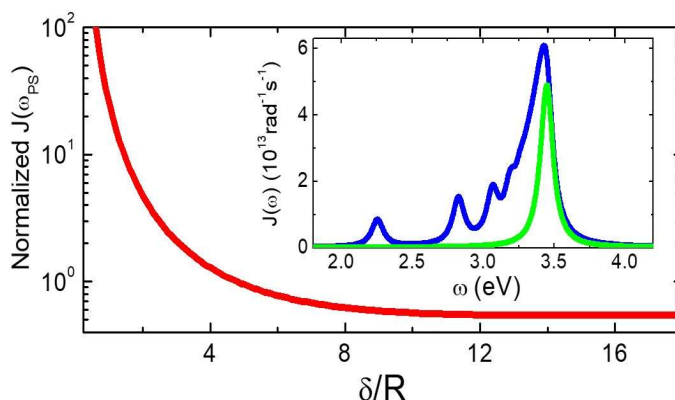


图 3.5  $J(\omega_{\text{PS}})/[2J_0(\omega_{\text{PS}})]$  与  $\delta$  的关系. 其中  $J(\omega_{\text{PS}})$  为 QE 置于腔体间隙  $\delta$  的中点时谱密度最大峰值,  $J_0(\omega_{\text{PS}})$  为 QE 和单个纳米球耦合且间距为  $\delta/2$  时谱密度最大峰值. 插图:  $\delta = 8 \text{ nm}$  时, QE 置于腔体间隙中点时谱密度(蓝色实线)和 QE 置于单个小球附近 4 nm 时谱密度(绿色实线).

以下我们以  $\delta = 8 \text{ nm}$  为例, 研究二聚体型腔体中伪模式与系统强耦合的关系.

由图3.5右上角插图可以看出,当QE置于腔体间隙的中点时,谱密度最高峰与单个纳米球的情形差异很小,均处于弱耦合状态(见图 3.4 (b)).我们接下来计算当QE在腔体间隙中沿着 $z$ 轴移动时, $J(\omega_{\text{ps}})$ 的变化.图 3.6(a)中黑色虚线为 $J(\omega_{\text{ps}}, z_{\text{E}})/J(\omega_{\text{ps}}, \delta/2)$ 与QE的位置 $z_{\text{E}}$ 的关系.其中 $J(\omega_{\text{ps}}, \delta/2)$ 为QE置于腔体中央时,谱密度的伪模式峰值.从该曲线可以看出,当QE向构成腔体的其中一个纳米球靠近时,谱密度最大峰值逐渐增大到QE位于中点时的 $10^3$ 以上.谱密度峰值的大幅增加可能由两种原因导致:(1)纯粹由于QE靠近了其中一个纳米球,导致QE与单个纳米球表面的SP模式耦合增强;(2)QE位置的偏移引起了两个纳米球表面SP与QE的协同作用,或者说产生了所谓杂化模式(hybridization).为了进一步解释耦合机理,红色实线画出了 $J(\omega_{\text{ps}}, z_{\text{E}})/[J_1(\omega_{\text{ps}}, z_{\text{E}}) + J_2(\omega_{\text{ps}}, \delta - z_{\text{E}})]$ 与 $z_{\text{E}}$ 的关系. $J_1(\omega_{\text{ps}}, z_{\text{E}})$ 和 $J_2(\omega_{\text{ps}}, \delta - z_{\text{E}})$ 分别为QE置于单个小球附近 $z_{\text{E}}$ 处和 $\delta - z_{\text{E}}$ 处时的谱密度最大峰值.从红色实线可以看到,QE偏离中心后,谱密度的峰值比QE单独与两个纳米小球分别作用的谱密度峰值之和高出 $10^2$ 倍.这说明:当QE偏离中心后,谱密度最大峰值的增强不是由QE与单个纳米球表面SP耦合的简单增强导致,而是由于产生了新的杂化模式.在图 3.6 (b)中,我们画出了当QE位于 $z_{\text{E}} = 4 \text{ nm}, 2.4 \text{ nm}, 1.2 \text{ nm}$ 三个位置时 $n(t)$ 的振荡曲线,可以看到随着QE位置的偏移,系统从弱耦合区进入了强耦合区.这从动力学的角度得出:QE偏离中心确会增强QE与SP的耦合.至此,我们通过数值计算定性的判断出纳米颗粒二聚体和单个纳米颗粒在与QE强耦合时有不同的物理机制,二聚体型腔体中产生了杂化模式,以下我们给出谱密度的近似解析解,并对其作模式分解,从而分析杂化模式的特征和激发途径.

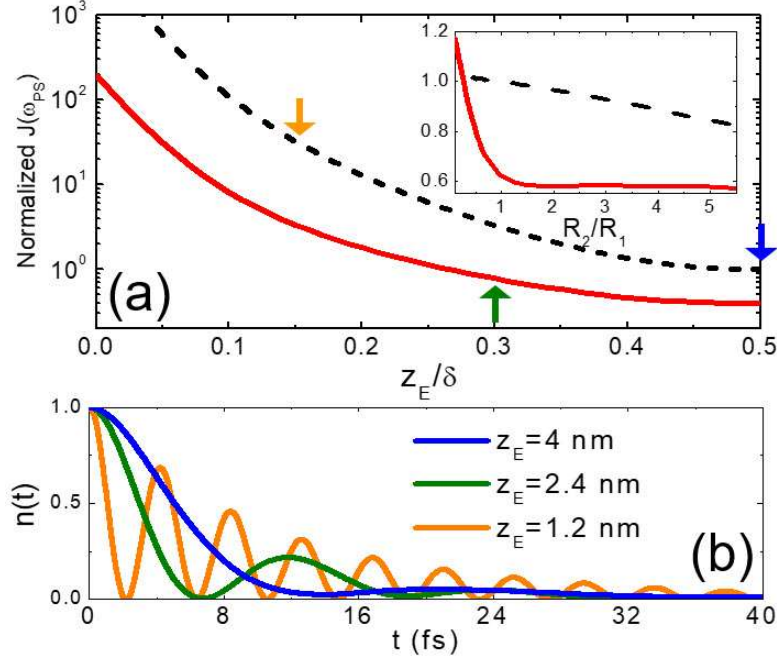


图 3.6 (a) 中黑色虚线为  $J(\omega_{PS}, z_E)/J(\omega_{PS}, z_E = \delta/2)$  与 QE 的位置  $z_E$  的关系. 红色实线为  $J(\omega_{PS}, z_E)/[J_1(\omega_{PS}, z_E) + J_2(\omega_{PS}, \delta - z_E)]$  与  $z_E$  的关系. 其中  $J(\omega_{PS}, z_E = \delta/2)$  即 QE 置于腔体中央时, 谱密度的最大峰值.  $J_1(\omega_{PS}, z_E)$  和  $J_2(\omega_{PS}, \delta - z_E)$  分别为 QE 置于单个小球附近  $z_E$  处和  $\delta - z_E$  处时的谱密度最大峰值. (b)  $\omega_E = \omega_{PS}$ ,  $\delta = 8$  nm, QE 置于  $z_E = 4$  nm, 2.4 nm, 1.2 nm 时,  $n(t)$  曲线. 可观察到 QE 偏离间隙中心后, 系统明显从弱耦合区进入强耦合区.

求解谱密度的解析表达式时我们假定系统满足如下两个近似: (1) 腔体中两小球的间隙远小于小球半径, 即  $\delta \ll R$ . 这在上述数值计算和已发表的相关实验中均能满足; (2) 腔体工作在所谓高品质谐振近似 (high-quality resonator approximation)<sup>[28]</sup>. 最后我们得到系统的谱密度  $J(\omega)$  可写成一系列 Lorentz 共振模式的叠加 (详细推导见 3.7 节):

$$(3.4.3)$$



式中,  $\gamma$  是金属介电常数 Drude 模型(3.2.1)里的阻尼系数.  $\sigma = \pm 1$  将所有模态分成两组, 它们在空间上分别关于间隙中心呈现对称和反对称. 下面会看到它们在不同的条件下被激发.  $g_{l\sigma}$  是耦合常数.  $\omega_{l\sigma}$  是相应模态的共振频率. 它们均可表达为材料本构参数和结构几何参数的函数. 共振频率  $\omega_{l\sigma}$  可写为:

$$\omega_{l\sigma} = \frac{\omega_p}{\sqrt{\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \frac{\xi_l + \sigma}{\xi_l - \sigma}}}. \quad (3.4.4)$$

其中  $\xi_l$  有如下形式:

$$\xi_l = \left[ \frac{(3R + \delta - z_0)(R + \delta - z_0)}{(R - z_0)(R + z_0)} \right]^{l+\frac{1}{2}}. \quad (3.4.5)$$

不难发现, 当  $l$  充分大时,  $\xi_l \gg 1$ . 共振频率趋于  $\omega_p / \sqrt{\varepsilon_\infty + \varepsilon_D}$ . 这是金属与电介质的界面为平面时 SP 模式的渐近频率. 这里可以用于估计伪模式的峰值位置  $\omega_{ps}$ . 耦合常数  $g_{l\sigma}$  具体形式将在 3.7 节给出.

图 3.7 (a) 给出 QE 置于  $z_E = 2.4$  nm 处的谱密度. 其中红色点划线为基于变换光学的准静态数值结果, 黑色虚线为有限元数值仿真结果. 绿色实线为由(3.4.3)式得到的结果. 除了低频处的红移, 该结果与基于变换光学的数值结果和有限元仿真均较好地吻合. 蓝色虚线对应于  $\sigma = 1$  的前 5 阶模式, 橘色实线对应于  $\sigma = -1$  的前 5 阶模式. 注意到  $\sigma = 1$  的 SP 模式随着阶数增加而蓝移,  $\sigma = -1$  的 SP 模式随着阶数增加而红移. 数学上, 该现象源于(3.4.4)中  $(\xi_l + \sigma)/(\xi_l - \sigma)$  在  $\sigma$  取  $\pm 1$  时不同的渐近行为. 图 3.7 (a) 中的插图画出了  $\sigma = -1$  对应的最低阶的两个模态的感应电荷密度分布. 值得注意的是, 我们称  $\sigma = -1$  为反对称模式是指电场分布关于间隙中心反对称. 根据  $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$  可知, 电荷密度应为对称分布, 如图所示. 相应地我们称  $\sigma = 1$  为对称模式.

在图 3.7 (b)(c)(d)中, 我们分别画出了当 QE 位于  $z_E = 1.2 \text{ nm}$ ,  $2.4 \text{ nm}$ ,  $4 \text{ nm}$  三个位置时, 各模式的耦合常数  $g_{l\sigma}^2$ . 可以看出, 当 QE 位于间隙中央( $z_E = 4 \text{ nm}$ )时, 只有偶模式( $\sigma = 1$ )被激发. 当 QE 偏离间隙中心时, 反对称模式( $\sigma = -1$ )逐渐被激发. 当 QE 偏离中心距离增大时, 反对称模式的幅度也逐渐增大. 如图 3.7 (b)所示, 当  $z_E = 1.2 \text{ nm}$  时, 对称模式与反对称模式幅值已经基本相当. 值得注意的是, 在 QE 偏离间隙中心的过程中, 对称模式的幅值变化并不明显, 至多增大了 1 倍. 然而, 反对称模式随着 QE 的偏移从无到有, 从小变大, 以至于最终与偶模式幅值相当. 这样, 我们发现了通过偏移 QE 使系统实现强耦合的物理机制, 即: QE 偏移腔体间隙中心激发出一组新 SP 模式( $\sigma = -1$ ), 它们与  $\sigma = 1$  模式共同构成了伪模式, 使伪模式的幅值急剧增大.

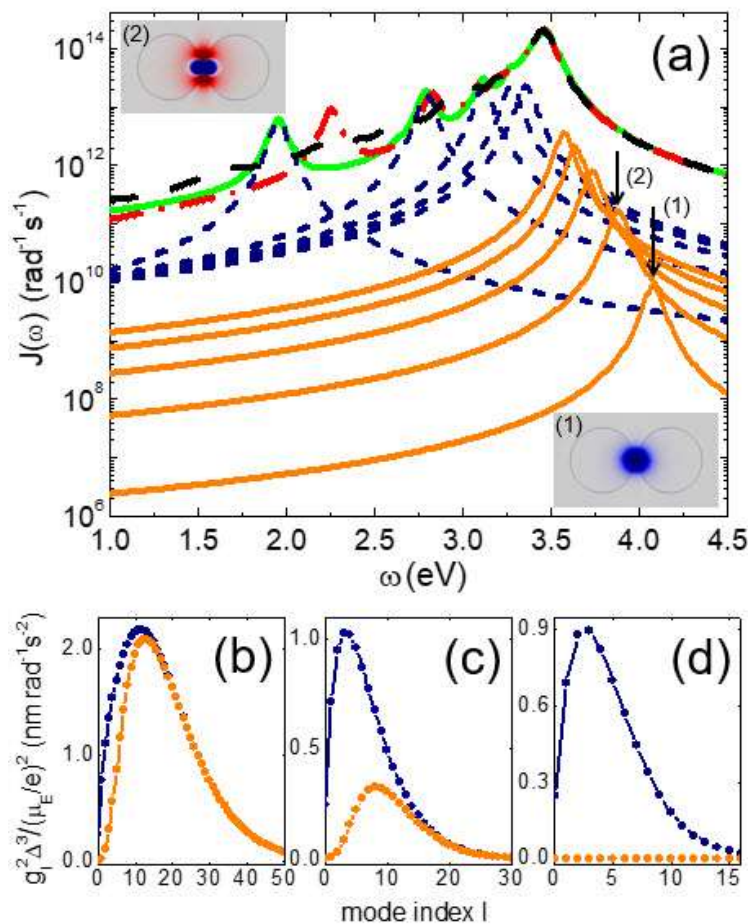


图 3.7 (a) QE 置于  $z_E = 2.4$  nm 处的谱密度. 其中红色点划线为基于变换光学的准静态数值结果, 黑色虚线为有限元数值仿真结果. 绿色实线为由(3.4.3)式得到的结果. 蓝色虚线对应于  $\sigma = 1$  的前 5 阶模式, 橘色实线对应于  $\sigma = -1$  的前 5 阶模式. 插图:  $\sigma = -1$  对应的最低阶两个模式的感应电荷密度分布. (b-d): QE 位于(b)  $z_E = 1.2$  nm (c)  $z_E = 2.4$  nm (d)  $z_E = 4$  nm 三个位置时, 各模式的耦合常数  $g_{l\sigma}^2$ . 蓝色为偶模式, 橘色为奇模式.

### 3.5 对 Baumberg 课题组实验的验证

本节我们利用 3.4 节阐述的方法对 Baumberg 教授课题组最近发表的室温下等离激元微纳腔体中的单分子强耦合实验做理论性验证. 我们设定以下参数以模拟该工作中的实验结构:  $R_2 = 20$  nm,  $R_1/R_2 \gg 1$  (模拟金属平面),  $\delta = 0.9$  nm,  $\epsilon_D = 1.96$ . 纳米球材料的介电常数由 Drude 模型(3.2.1)近似描述, 其中各参数取:  $\epsilon_\infty = 9.7$ ,  $\hbar\omega_p = 8.91$  eV,  $\hbar\gamma = 0.08$  eV. QE 的跃迁电偶极矩  $\mu_E = 3.8$  D =  $0.079$  e nm.

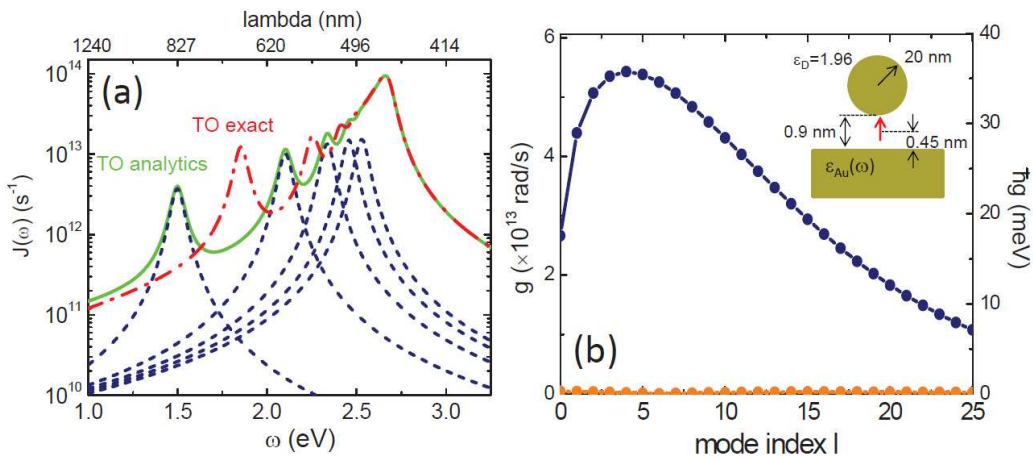


图 3.8 (a) Baumberg 教授课题组实验系统的谱密度计算结果. 红色点划线为基于变换光学的数值结果, 绿色实线为近似解析解. 蓝色虚线为最低的 5 个 SP 模式. 注意到实验中 QE 置于间隙中点, 故这 5 个模式均为偶模式( $\sigma = 1$ ), 奇模式( $\sigma = -1$ )未被激发出. (b) 各阶模式的耦合常数  $g_{l\sigma}$ . 蓝色和橙色曲线分别代表偶模式和奇模式. 右上角插图: 实验系统示意图及几何参数.

图 3.8 (a)计算了该系统的谱密度. 红色点划线为基于变换光学的数值结果, 绿色实线为近似解析解. 蓝色虚线为最低的 5 个 SP 模式. 注意到实验中 QE 置于间隙中点, 故这 5 个模式均为偶模式( $\sigma = 1$ ), 奇模式( $\sigma = -1$ )未被激发. 从图中可看出, 最低阶模式(偶极模式)的共振频率位于  $1.85 \text{ eV}$  处, 对应于波长  $670 \text{ nm}$ , 与实验中给出的  $665 \text{ nm}$  波长吻合得非常好. 对应于该模式的 Purcell 因子经计算为  $4.3 \times 10^6$ , 与测量值  $3.5 \times 10^6$  也很一致. 图 3.8 (b)给出了各阶模式的耦合常数  $g_{l\sigma}$ . 此处的耦合常数均由近似解析解给出. 对于偶极模式,  $g_{01} = 19 \text{ meV}$ . 基于变换光学的准确数值结果则给出  $g_{\text{dipole}} = 36 \text{ meV}$ . 两者均与实验结果  $g_{\text{exp}} = 90 \text{ meV}$  相差较大. 然而, 伪模式的等效耦合常数  $g_{\text{PS}}^{\text{eff}}$  可表示为:

$$g_{\text{PS}}^{\text{eff}} = \sqrt{\sum_{l=2}^{\infty} g_{l,+1}^2}. \quad (3.5.1)$$

由于奇模式未被激发, 故只取  $\sigma = +1$ . 从谱密度曲线可看出  $l = 0$  和  $l = 1$  两个模式对伪模式无贡献, 故剔除. 经计算得,  $g_{\text{PS}}^{\text{eff}} = 120 \text{ meV}$ . 而基于变换光学的准确数值结果给出  $g_{\text{PS}}^{\text{eff}} = 122 \text{ meV}$ . 这与实验结果  $g_{\text{exp}} = 90 \text{ meV}$  较好地吻合(注意到实验中会出现诸如 QE 位置的不精确, 金属表面的非绝对光滑以及背景媒质非绝对均匀等诸多不可控因素). 该结果有非常重要的意义: (1) 我们提出的基于变换光

学处理 QE-SP 强耦合的理论被实验证明是合理有效的; (2) 高阶 SP 模态对单个分子的 QE-SP 强耦合也有贡献(报道该实验工作的文章认为主要是 QE 与偶极模式的耦合<sup>[20]</sup>).

---

### 3.6 小结

本章以变换光学为工具描述了纳米颗粒二聚体型腔体中的 QE-SP 的强耦合现象. 结论表明, 腔体所支持的在频谱上交叠的一系列高阶模式构成了所谓的伪模式, 它们控制了 QE-SP 系统的强耦合现象. 通过给出近似的解析结果, 我们发现 QE 偏离间隙中心会导致耦合的急剧增强, 这源于反对称杂化模式的激发. 我们对近期发表的室温下单个染色分子与 SP 的强耦合实验结果的验证, 这有力地说明了我们提出的理论描述的正确性. 作为变换光学理论在量子光学领域的首次成功运用, 本工作将对今后微纳腔体与单个 QE 构成的强耦合系统的设计提供了理论支持.

### 3.7 附: 基于变换光学理论求解系统谱密度

#### 1. 散射电场分布 $\mathbf{E}_z^{\text{sc}}$

二聚体型微腔及经反演变换所得的同心球几何结构见图 3.1. 求解系统谱密度的关键就是求解系统 Dyadic Green 函数, 最终归结为求电场分布. 由 3.2 节知, 准静电近似适用. 对于静电势, 在坐标变换  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}'(\mathbf{r})$  下满足  $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi'[\mathbf{r}'(\mathbf{r})]$ .

经过反演变换(3.2.2)后, 电势  $\Phi'$  并不满足 Laplace 方程, 却可写成  $\Phi'(\mathbf{r}') = |\mathbf{r}' - \mathbf{z}'_0| \phi'(\mathbf{r}')$ , 其中  $\phi'(\mathbf{r}')$  满足变换后空间中的 Laplace 方程. 于是  $\phi'(\mathbf{r}')$  可用球谐函数展开,  $\Phi'(\mathbf{r}')$  则相应可表示为如下形式:

$$\Phi'_{r' < R'_1} = \sum_{l \geq |m|} a_{lm}^{\text{in}} |\mathbf{r}' - \mathbf{z}'_0| (r'/z'_0)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.7.1a)$$

$$\Phi'_{R'_1 < r' < |r'_E|} = \sum_{l \geq |m|} |\mathbf{r}' - \mathbf{z}'_0| [(a_{lm}^+ + a_{lm}^{s+})(r'/z'_0)^l + a_{lm}^- (r'/z'_0)^{-(l+1)}] Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.7.1b)$$

$$\Phi'_{|r'_E| < r' < R'_2} = \sum_{l \geq |m|} |\mathbf{r}' - \mathbf{z}'_0| [(a_{lm}^+ (r'/z'_0)^l + (a_{lm}^- + a_{lm}^{s-})(r'/z'_0)^{-(l+1)})] Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.7.1c)$$

$$\Phi'_{r' > R'_2} = \sum_{l \geq |m|} a_{lm}^{\text{out}} |\mathbf{r}' - \mathbf{z}'_0| (r'/z'_0)^{-(l+1)} Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.7.1d)$$

其中, QE 所在位置  $\mathbf{r}_E$  被映射到  $\mathbf{r}'_E$ . 这里对源 QE 的处理较为特殊, 直接将其静电势  $\Phi_E(\mathbf{r})$  在变换后空间中的展开系数  $a_{lm}^{s+}$  和  $a_{lm}^{s-}$  反馈入(3.7.1)的展开式中, 而并没有以 Poisson 方程源项的形式出现. 利用在  $r' = R'_1$  和  $r' = R'_2$  两个球面上电势连续和电位移径向分量连续两个边界条件, 便可得出关于系数的一系列矩阵方程, 注意到这些矩阵方程对于指标  $m$  解耦. 因此, 可对任一特定的  $m$  写出如下形式的矩阵方程:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{S}_{11} & 0 \\ 0 & \mathbf{S}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{s+} \\ \mathbf{a}^{s-} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{12} \\ \mathbf{T}_{21} & \mathbf{T}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{a}^- \end{bmatrix}. \quad (3.7.2)$$

其中, 分块矩阵  $\mathbf{T}$  的四个子矩阵均为三对角型矩阵. 它们的矩阵元可表示为:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{11}(l, l') = & -\delta_{ll'}[(l+1)r_1'^2 + l]r_1'^l \\ & + (2l'+1)r_1'^{l'+1}[A_+(l'+1)\delta_{ll'+1} + A_-(l'+1)\delta_{ll'-1}], \end{aligned} \quad (3.7.3a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{12}(l, l') = & \delta_{ll'} \left\{ \frac{r_1'^2 - 1}{\tilde{\varepsilon} - 1} - [(l+1)r_1'^2 + l]e^{-\alpha} \right\} r_1'^{l'+1} \\ & + e^{-\alpha} (2l'+1)r_1'^{l'-l}[A_+(l'+1)\delta_{ll'+1} + A_-(l'+1)\delta_{ll'-1}] \end{aligned}, \quad (3.7.3b)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{21}(l, l') = & \delta_{ll'} \left\{ \frac{r_2'^2 - 1}{\tilde{\varepsilon} - 1} - [lr_2'^2 + (l+1)]e^{-\alpha} \right\} r_2'^l \\ & - e^{-\alpha} (2l'+1)r_2'^{l'+1}[A_+(l'+1)\delta_{ll'+1} + A_-(l'+1)\delta_{ll'-1}] \end{aligned}, \quad (3.7.3c)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{22}(l, l') = & \delta_{ll'}[lr_2'^2 + (l+1)]r_2'^{l-(l+1)} \\ & - (2l'+1)r_2'^{l'-l}[A_+(l'+1)\delta_{ll'+1} + A_-(l'+1)\delta_{ll'-1}]. \end{aligned} \quad (3.7.3d)$$

其中，无量纲化介电常数  $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/\varepsilon_D$ ，无量纲化半径  $r_{1,2}' = R_{1,2}'/z_0'$ ， $e^{-\alpha} = (\tilde{\varepsilon} + 1)/(\tilde{\varepsilon} - 1)$ ， $A_+(l) = \sqrt{(l+1)^2/[l(2l+1)(2l+3)]}$ ， $A_-(l) = \sqrt{l^2/[l(2l-1)(2l+1)]}$ 。因此，只要获得了偶极子源在变换后空间中的展开系数  $\mathbf{a}^{s+} = [a_{m,m}^{s+}, a_{m+1,m}^{s+}, a_{m+2,m}^{s+}, \dots]^T$  和  $\mathbf{a}^{s-} = [a_{m,m}^{s-}, a_{m+1,m}^{s-}, a_{m+2,m}^{s-}, \dots]^T$ ，便可以解出散射场系数  $\mathbf{a}^+ = [a_{m,m}^+, a_{m+1,m}^+, a_{m+2,m}^+, \dots]^T$  和  $\mathbf{a}^- = [a_{m,m}^-, a_{m+1,m}^-, a_{m+2,m}^-, \dots]^T$ 。对于电偶极矩  $\boldsymbol{\mu}_E = \mu_E \hat{\mathbf{z}}$  的偶极子源，只能取  $m = 0$ 。

故在变换后的空间中的其电势  $\Phi'_E(\mathbf{r}')$  的展开系数为：

$$a_l^{s+} = \frac{\mu_E}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_D} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \frac{\zeta^2}{R_T^2\Delta} \left[ 1 + \frac{(l+1)\zeta}{1-\zeta} \right] (1-\zeta)^{-(l+1)}, \quad (3.7.4a)$$

$$a_l^{s-} = -\frac{\mu_E}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_D} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \frac{\zeta^2}{R_T^2\Delta} \left( 1 - \frac{l\zeta}{1-\zeta} \right) (1-\zeta)^l. \quad (3.7.4b)$$

其中， $\Delta = \frac{2(\delta+d)}{(1+\Delta_1)}$ ， $\Delta_1 = \frac{\delta+d}{2R_1+\delta+d}$ ， $\zeta = \frac{\Delta}{r_E - z_0}$ ，指标  $m = 0$  省略(以下同)。

获得了  $\mathbf{a}^{s+}$  和  $\mathbf{a}^{s-}$ ，利用矩阵方程(3.6.2)便可求出散射场系数  $\mathbf{a}^+$  和  $\mathbf{a}^-$ ，进而获得变换后的同心球空间的电势分布  $\Phi'(\mathbf{r}')$ 。返回到原空间，有  $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi'[\mathbf{r}'(\mathbf{r})]$ 。从而得到散射电场分布  $\mathbf{E}^{sc}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi^{sc}(\mathbf{r})$ 。



## 2. $\mathbf{E}_z^{\text{sc}}$ 的近似解析形式

以下推导近似解析形式. 考虑到  $\delta/R_{1,2} \ll 1$ , 所以有  $r_1'^2 \approx 1$ ,  $r_2'^2 \approx 1$ . 因此, 我们略去  $\mathbf{T}_{12}(l, l')$  中的  $(r_1'^2 - 1)/(\tilde{\epsilon} - 1)$  以及  $\mathbf{T}_{21}(l, l')$  中的  $(r_2'^2 - 1)/(\tilde{\epsilon} - 1)$ . 这样做使得矩阵  $\mathbf{T}$  的求逆大大简化. 从而有:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{a}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{\text{s}+} \\ \mathbf{a}^{\text{s}-} \end{bmatrix}. \quad (3.7.5)$$

其中分块矩阵  $\mathbf{R} = \mathbf{T}^{-1}$  可表示为:

$$\mathbf{R}_{11}(l, l') = \delta_{ll'} [\mathbf{e}^{-2\alpha} (r_2'/r_1')^{2l+1} - 1]^{-1}, \quad (3.7.6a)$$

$$\mathbf{R}_{12}(l, l') = -\delta_{ll'} \mathbf{e}^{-\alpha} r_1'^{-(2l+1)} [\mathbf{e}^{-2\alpha} (r_2'/r_1')^{2l+1} - 1]^{-1}, \quad (3.7.6b)$$

$$\mathbf{R}_{21}(l, l') = -\delta_{ll'} \mathbf{e}^{-\alpha} r_2'^{2l+1} [\mathbf{e}^{-2\alpha} (r_2'/r_1')^{2l+1} - 1]^{-1}, \quad (3.7.6c)$$

$$\mathbf{R}_{22}(l, l') = \mathbf{R}_{11}(l, l'). \quad (3.7.6d)$$

利用(3.7.4)和(3.7.5)可得散射场系数:

$$a_l^+ = \frac{a_l^{\text{s}+} - \mathbf{e}^{-\alpha} r_1'^{-(2l+1)} a_l^{\text{s}-}}{\mathbf{e}^{-2\alpha} (r_2'/r_1')^{2l+1} - 1}, \quad (3.7.7a)$$

$$a_l^- = \frac{-\mathbf{e}^{-\alpha} r_2'^{2l+1} a_l^{\text{s}+} + a_l^{\text{s}-}}{\mathbf{e}^{-2\alpha} (r_2'/r_1')^{2l+1} - 1}. \quad (3.7.7b)$$

这样, 变换后空间中的电势分布  $\Phi'$  的解析形式已经给出. 最终可得原空间散射

电场  $E_z^{\text{sc}} = -\partial\Phi^{\text{sc}}/\partial z$  在源点的取值:

$$E_z^{\text{sc}}(\mathbf{r}_E) = -\frac{R_{\text{T}}^2}{(r_E - z_0)^2} \sum_{l \geq 0} \left( \begin{aligned} & [a_l^+ (\zeta - 1)^l + a_l^- (\zeta - 1)^{-(l+1)}] \\ & + \zeta [a_l^+ l (\zeta - 1)^{l-1} - a_l^- (l+1) (\zeta - 1)^{-(l+2)}] \end{aligned} \right) Y_{l0}(\pi). \quad (3.7.8)$$

下一步获得散射系数  $a_l^+$  和  $a_l^-$  的 Lorentz 共振形式, 这里以  $a_l^+$  为例, 写出推导过程:

$$\begin{aligned}
 a_i^+ &= \frac{a_i^{s+} - e^{-\alpha} r_1'^{-(2l+1)} a_i^{s-}}{e^{-2\alpha} (r_2'/r_1')^{2l+1} - 1} \\
 &= \frac{a_i^{s+} - (r_1' r_2')^{-(2l+1)/2} a_i^{s-}}{2[e^{-\alpha} (r_2'/r_1')^{(2l+1)/2} - 1]} + \frac{-a_i^{s+} - (r_1' r_2')^{-(2l+1)/2} a_i^{s-}}{2[e^{-\alpha} (r_2'/r_1')^{(2l+1)/2} + 1]} \quad (3.7.9) \\
 &= \frac{(\varepsilon_M - \varepsilon_D)[a_i^{s+} - (r_1' r_2')^{-(2l+1)/2} a_i^{s-}]}{2[(r_2'/r_1')^{(2l+1)/2} - 1](\varepsilon_M + \varepsilon_D \eta_{2l+1,1})} + \frac{(\varepsilon_M - \varepsilon_D)[-a_i^{s+} - (r_1' r_2')^{-(2l+1)/2} a_i^{s-}]}{2[(r_2'/r_1')^{(2l+1)/2} + 1](\varepsilon_M + \varepsilon_D \eta_{2l+1,-1})}
 \end{aligned}$$

其中定义了  $\eta_{\beta,\sigma}$  ( $\sigma = \pm 1$ ):

$$\eta_{\beta,\sigma} \equiv \frac{(r_2'/r_1')^{\beta/2} + \sigma}{(r_2'/r_1')^{\beta/2} - \sigma}, \quad (3.7.10)$$

(3.7.9) 式中频率相关的部分进一步做近似, 写为:

$$\begin{aligned}
 \frac{\varepsilon_M - \varepsilon_D}{\varepsilon_M + \varepsilon_D \eta_{2l+1,1}} &= \frac{\omega(\omega + i\gamma)(\varepsilon_\infty - \varepsilon_D)/(\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \eta_{2l+1,1}) - \omega_{2l+1,1}^2}{\omega(\omega + i\gamma) - \omega_{2l+1,1}^2} \\
 &\approx \frac{-(1 + \eta_{2l+1,1})\varepsilon_D}{\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \eta_{2l+1,1}} \frac{\omega_{2l+1,1}^2}{\omega(\omega + i\gamma) - \omega_{2l+1,1}^2} \\
 &\approx \frac{-\omega_{2l+1,1}^2 \varepsilon_D (1 + \eta_{2l+1,1})}{2(\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \eta_{2l+1,1})\omega[(\omega - \omega_{2l+1,1}) + i\gamma/2]} \\
 &\approx \frac{-\omega_{2l+1,1} \varepsilon_D (1 + \eta_{2l+1,1})}{2(\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \eta_{2l+1,1})[(\omega - \omega_{2l+1,1}) + i\gamma/2]} \quad (3.7.11)
 \end{aligned}$$

其中  $\omega_{2l+1,\sigma} = \omega_p^2 / (\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \eta_{2l+1,\sigma})$ . 注意到(3.7.11)中第二个约等号利用了所谓高品质因数近似, 即<sup>[28]</sup>

$$\omega(\omega - i\gamma) - \omega_{2l+1,1}^2 \approx 2\omega[(\omega - \omega_{2l+1,1}) + i\gamma/2]. \quad (3.7.12)$$

将(3.7.11)代入(3.7.9), 得:

$$a_i^+ \approx \sum_{\sigma} (-\psi_{2l+1,\sigma}^+) \frac{(\omega - \omega_{2l+1,\sigma}) - i\gamma/2}{(\omega - \omega_{2l+1,\sigma})^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (3.7.13)$$

取其虚部:

$$\text{Im}(a_i^+) \approx \sum_{\sigma} \psi_{2l+1,\sigma}^+ \frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_{2l+1,\sigma})^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (3.7.14)$$

其中, 定义了:

$$\psi_{2l+1,\sigma}^+ = \frac{\omega_{2l+1,\sigma} \varepsilon_D (1 + \eta_{2l+1,\sigma})}{4(\varepsilon_\infty + \varepsilon_D \eta_{2l+1,\sigma})} \frac{\sigma a_l^{s+} - (r_1' r_2')^{-(2l+1)/2} a_l^{s-}}{(r_2'/r_1')^{(2l+1)/2} - \sigma}. \quad (3.7.15)$$

至此, (3.7.14)给出了  $a_l^+$  的 Lorentz 共振形式的表达式. 相应的计算也可对  $a_l^-$  进行, 这里仅写出其形式:

$$\text{Im}(a_l^-) \approx \sum_{\sigma} \psi_{2l+1,\sigma}^- \frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_{2l+1,\sigma})^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (3.7.16)$$

将(3.7.14)和(3.7.16)代入(3.7.8), 得:

$$\text{Im}[E_z^{\text{sc}}(\mathbf{r}_E)] = -\frac{R_T^2}{(r_E - z_0)^2} \sum_{l \geq 0} \sum_{\sigma = \pm 1} \frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_{2l+1,\sigma})^2 + (\gamma/2)^2} \Psi_{2l+1,\sigma}. \quad (3.7.17)$$

其中:

$$\Psi_{2l+1,+1} = \psi_{2l+1,+1}^+ [(\zeta - 1)^l + \zeta l (\zeta - 1)^{l-1}] + \psi_{2l+1,+1}^- [(\zeta - 1)^{-(l+1)} - \zeta(l+1)(\zeta - 1)^{-(l+2)}], \quad (3.7.18a)$$

$$\Psi_{2l+1,-1} = \psi_{2l+1,-1}^+ [(\zeta - 1)^l + \zeta l (\zeta - 1)^{l-1}] + \psi_{2l+1,-1}^- [(\zeta - 1)^{-(l+1)} - \zeta(l+1)(\zeta - 1)^{-(l+2)}]. \quad (3.7.18b)$$

由(3.4.2)可得:

$$G_{zz}^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_E, \omega) = \frac{E_z^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \omega)}{\mu_E \omega^2 \mu_0 \mu}. \quad (3.7.19)$$

将(3.7.18)代入(3.4.1)得:

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\mu_E^2 \omega^3}{3\pi \varepsilon_0 \hbar c^3} \left\{ 1 + \frac{6\pi c}{\mu_E \omega^3 \mu_0 \mu} \text{Im}[E_z^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \omega)] \right\}. \quad (3.7.20)$$

$\text{Im}[E_z^{\text{sc}}(\mathbf{r}, \omega)]$  的 Lorentz 模式分解已经写成(3.7.16)式, 代入(3.6.19)即得谱密度

$J(\omega)$  的 Lorentz 共振模式分解, 最后将结果重写如下:

$$J(\omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{g_{l\sigma}^2}{\pi} \frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_{l\sigma})^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (3.7.21)$$

其中，模式的共振频率  $\omega_{2l+1,\sigma} = \omega_p^2 / (\epsilon_\infty + \epsilon_D \eta_{2l+1,\sigma})$ ，参数  $\eta$  的定义见式(3.7.10).  $\gamma$  即为金属介电常数的 Drude 模型中的耗散因子. 耦合常数  $g_{l\sigma}$  可写为  $g_{l\sigma}^2 = -R_T^2 \mu_E \Psi_{2l+1,\sigma} / [\hbar(r_E - z_0)^2]$ . 值得注意的是，这里的耦合常数形式上看似含有反演变换的任意常数因子  $R_T^2$ ，实则与其无关. 这是由于  $\Psi_{2l+1,\sigma}$  中含有偶极子源的展开系数  $a_l^{s+}$  和  $a_l^{s-}$ ，它们的表达式中含有  $R_T^{-2}$ .

## 参考文献

- [1] M. S. Tame, K. R. McEnery, S. K. Özdemir, J. Lee, S. A. Maier, and M. S. Kim, "Quantum plasmonics," *Nat. Phys.* **9**, 329 (2013).
- [2] D. E. Chang, A. S. Sorensen, P. R. Hemmer, and M. D. Lukin, "Quantum Optics with Surface Plasmons," *Phys. Rev. Lett.* **97**, 053002 (2006).
- [3] P. Törmä and W. L. Barnes, "Strong coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review," *Rep. Prog. Phys.* **78**, 013901 (2015).
- [4] A. González-Tudela, P. A. Huidobro, L. Martín-Moreno, C. Tejedor, and F. J. García-Vidal, "Reversible dynamics of single quantum emitters near metal-dielectric interfaces," *Phys. Rev. B* **89**, 041402(R) (2014).
- [5] A. Trügler and U. Hohenester, "Strong coupling between a metallic nanoparticle and a single molecule," *Phys. Rev. B* **77**, 115403 (2008).
- [6] E. Waks and D. Sridharan, "Cavity QED treatment of interactions between a metal nanoparticle and a dipole emitter," *Phys. Rev. A* **82**, 043845 (2010).
- [7] S. Savasta, R. Saija, A. Ridolfo, O. Di Stefano, P. Denti, and F. Borghese, "Nanopolaritons: Vacuum Rabi Splitting with a Single Quantum Dot in the Center of a Dimer Nanoantenna," *ACS Nano* **4**, 6369 (2010).
- [8] A. Manjavacas, F. J. García de Abajo, and P. Nordlander, "Quantum Plexcitonics: Strongly Interacting Plasmons and Excitons," *Nano Lett.* **11**, 2318 (2011).
- [9] R. Esteban, J. Aizpurua, and G.W. Bryant, "Strong coupling of single emitters interacting with phononic infrared antennae," *New J. Phys.* **16**, 013052 (2014).

- [10] J. Bellessa, C. Bonnand, J. C. Plenat, and J. Mugnier, "Strong Coupling between Surface Plasmons and Excitons in an Organic Semiconductor," *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036404 (2004).
- [11] T. Schwartz, J. A. Hutchison, C. Genet, and T.W. Ebbesen, "Reversible Switching of Ultrastrong Light-Molecule Coupling," *Phys. Rev. Lett.* **106**, 196405 (2011).
- [12] F. Todisco, S. D'Agostino, M. Esposito, A. I. Fernández-Domínguez, M. De Giorgi, D. Ballarini, L. Dominici, I. Tarantini, M. Cuscuna, F. D. Sala, G. Gigli, and D. Sanvitto, "Exciton–Plasmon Coupling Enhancement via Metal Oxidation," *ACS Nano* **9**, 9691 (2015).
- [13] G. Zengin, M. Wersäll, S. Nilsson, T. J. Antosiewicz, M. Käll, and T. Shegai, "Realizing Strong Light-Matter Interactions between Single-Nanoparticle Plasmons and Molecular Excitons at Ambient Conditions," *Phys. Rev. Lett.* **114**, 157401 (2015).
- [14] A. Salomon, R. J. Gordon, Y. Prior, T. Seideman, and M. Sukharev, "Strong Coupling between Molecular Excited States and Surface Plasmon Modes of a Slit Array in a Thin Metal Film." *Phys. Rev. Lett.* **109**, 073002 (2012).
- [15] A. González-Tudela, P. A. Huidobro, L. Martín-Moreno, C. Tejedor, and F. J. García-Vidal, "Theory of Strong Coupling between Quantum Emitters and Propagating Surface Plasmons," *Phys. Rev. Lett.* **110**, 126801 (2013).
- [16] A. Delga, J. Feist, J. Bravo-Abad, and F. J. García-Vidal, "Quantum Emitters Near a Metal Nanoparticle: Strong Coupling and Quenching," *Phys. Rev. Lett.* **112**, 253601 (2014).

- [17] T. Hartsfield, W.-S. Chang, S.-C. Yanga, T. Ma, J. Shi, L. Sun, G. Shvets, S. Link, and X. Li, "Single quantum dot controls a plasmonic cavity's scattering and anisotropy," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **112**, 12288 (2015).
- [18] S.-H. Gong, J.-H. Kim, Y.-H. Ko, C. Rodriguez, J. Shin, Y.-H. Lee, L. S. Dang, X. Zhang, and Y.-H. Cho, "Self-aligned deterministic coupling of single quantum emitter to nanofocused plasmonic modes," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **112**, 5280 (2015).
- [19] T. B. Hoang, G. M. Akselrod, and M. H. Mikkelsen, "Ultrafast Room-Temperature Single Photon Emission from Quantum Dots Coupled to Plasmonic Nanocavities," *Nano Lett.* **16**, 270 (2016).
- [20] R. Chikkaraddy, B. de Nijs, F. Benz, S. J. Barrow, O. A. Scherman, E. Rosta, A. Demetriadou, P. Fox, O. Hess, and J. J. Baumberg, "Single-molecule strong coupling at room temperature in plasmonic nanocavities," *Nature (London)* **535**, 127 (2016).
- [21] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media* Moscow: Pergamon Press, 1960.
- [22] J. B. Pendry, A. Aubry, D. Smith, and S. A. Maier, "Transformation Optics and Subwavelength Control of Light," *Science* **337**, 549 (2012).
- [23] J. B. Pendry, A. I. Fernández-Domínguez, Y. Luo, and R. Zhao, "Capturing photons with transformation optics," *Nat. Phys.* **9**, 518 (2013).
- [24] J. B. Pendry, Y. Luo, and R. Zhao, "Transforming the optical landscape," *Science* **348**, 521 (2015).
- [25] R. Zhao, Y. Luo, A. I. Fernández-Domínguez, and J. B. Pendry, "Description of

van der Waals Interactions Using Transformation Optics," *Phys. Rev. Lett.* **111**, 033602 (2013).

[26] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* Oxford: Oxford University Press, 2002.

[27] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics* Cambridge: Cambridge University Press, 2012.

[28] E. Waks and D. Sridharan, "Cavity QED treatment of interactions between a metal nanoparticle and a dipole emitter," *Phys. Rev. A* **82**, 043845 (2010).



## 第4章 利用经典波演示天体运动规律

天体物理学研究的一个重要方向是天体的运动以及天体与天体之间的相互作用. 而广义相对论成为其重要的理论基础, 引力被赋予四维时空中的几何描述. 在经典波(光, 声, 固体中的弹性波)领域, 基于新兴的变换光(声)学理论利用变换媒质调控波束的传播轨迹, 是近年来一个热门研究方向. 两个领域虽然研究对象的大小尺度相差甚远, 但却在描述方法上有着相近之处, 即将研究对象与空间的几何描述建立了联系. 这启发我们将经典波传播轨迹与天体运动轨迹联系起来, 在实验室中通过研究前者为观测后者提供一个方便的途径.

## 4.1 研究背景

1915 年, Einstein 的广义相对论基本完成. 它是基于相对性原理利用几何语言描述的引力理论. 引力被描述为四维时空的曲率(curvature). 时空的曲率与其中的物质及辐射的能量与动量之间的定量关系由 Einstein 场方程给出:

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}Rg_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4}T_{\mu\nu}. \quad (4.1.1)$$

其中,  $R_{\mu\nu}$  为 Ricci 曲率张量,  $R$  是标量曲率,  $g_{\mu\nu}$  是四维时空的度量张量,  $T_{\mu\nu}$  是能量-动量-应力张量,  $c$  是真空中光速.

1 个月后, 德国天文学家 Schwarzschild 即得到 Einstein 场方程的一个球对称精确解, 即 Schwarzschild 解. 给出了对点质量和球形质量产生的引力场描述. 该解预言了 Schwarzschild 黑洞的存在<sup>[2,3]</sup>. Schwarzschild 黑洞一般为密度极高的大质量天体, 当其他天体接触到黑洞外围半径为所谓 Schwarzschild 半径的球面时, 便会被其吞噬. 从牛顿力学的角度解释, 可以认为 Schwarzschild 黑洞的逃逸速度  $\sqrt{2GM/R}$  ( $M$  为天体质量,  $R$  为天体半径) 大于或等于真空中光速  $c_0$ , 然而准确给出 Schwarzschild 半径必须基于 Einstein 场方程的 Schwarzschild 解. 直接观测黑洞几乎无法实现, 科学家们一方面利用引力透镜(gravitational lensing)效应预测黑洞的存在, 另一方面通过测量其附近的其他天体的运动来推测未知黑洞的质量.

利用经典波在实验室尺度下模拟天体运动是近几年的一个热门话题, 由于便于直接观察, 为演示难以观测的天文现象开辟了一条新途径.<sup>[1]</sup> Genov 等提出了模拟天体运动规律的若干光学模型.<sup>[1]</sup> 其中光学黑洞模拟了光线在大质量天体(如恒星, 星云, 星系等)附近的弯折, 成为后来的热点问题. 而绪论中提到的所

谓 Narimanov 型黑洞), 该方案从 Hamilton 光学出发利用线性分布的折射率提出光的全方向吸收体. 随后, 与 Narimanov 等的方案类似的结构和相应的实验结果相继出现. Lu 等解析地分析了 TM 波入射 Narimanov 型黑洞的特性并提出利用各向同性材料的实现方案.<sup>[7,8]</sup> 实验方面, Narimanov 型黑洞由 Cheng 等利用非共振梯度折射率材料首先实现.<sup>[10]</sup> Genov 提出的方案由 Sheng 等实现.<sup>[11]</sup> Chen 等根据真实 Schwarzschild 黑洞的度规张量提出了第一个真正意义上的 Schwarzschild 黑洞的光学类比.<sup>[12]</sup>

本工作利用保角变换, 将基于梯度折射率媒质的 Narimanov 型黑洞及与之类似的波束偏转器归为一类, 同时将光学的结论延伸至流体中的声波.

## 4.2 结构的提出

在实验室的尺度下，利用变换光学可以设计出模拟黑洞对附近天体全吸收特性的结构。在二维情形下，假设空间 1 为真空。考虑空间 1 到空间 2 的复映射：

$$z' = Az^m, \quad (4.2.1a)$$

其中  $A, m \in \mathbb{R}$ ,  $m \neq 0$ 。利用  $z = r e^{i\varphi}$  把模和幅角分开，且各幅角均取主值，可得空间 2 中的对应点  $(r', \varphi')$ ：

$$r' = Ar^m; \quad \varphi' = m\varphi. \quad (4.2.1b)$$

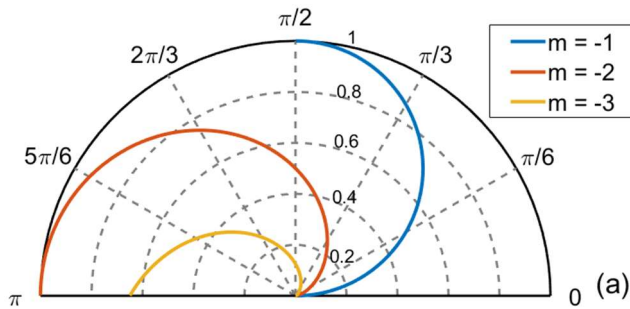
特别地，对于空间 1 中的直线  $r \sin \varphi = B$  ( $B$  为常数)，经过上述映射后，成为空间 2 中的曲线：

$$\left(\frac{r'}{A}\right)^{\frac{1}{m}} \sin \frac{\varphi'}{m} = B. \quad (4.2.1c)$$

利用(2.1.3)式，可得空间 2 中的折射率分布：

$$n'(z) = \left| \frac{d(Az^m)}{dz} \right| = A|m|r^{(m-1)}. \quad (4.2.1d)$$

注意到(4.2.1d)为  $m \neq 0$  的情况。图 4.2.1 给出了空间 2 中光线的轨迹：



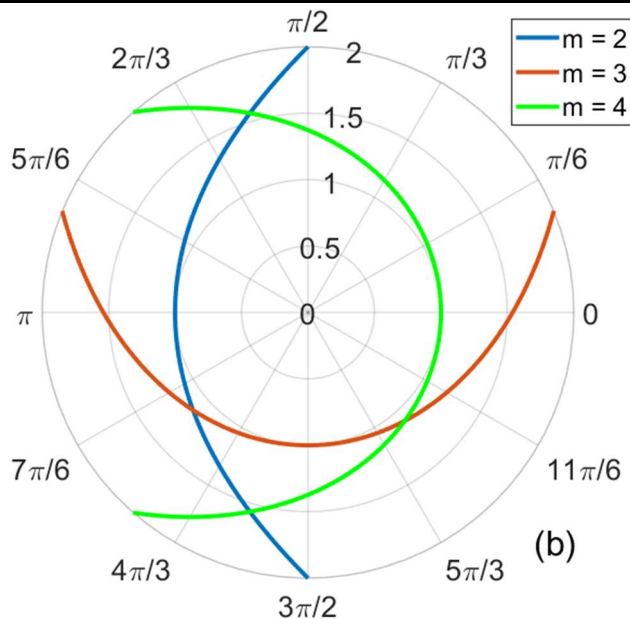


图 4.2.1 在坐标变换(4.2.1a)作用下, 空间 2 中光线的传播轨迹. 取  $A = B = 1$ , 并取  $z^m$  中幂指数为 (a)  $m = -1, -2, -3$ . 对应于光线被吸引至原点. (b)  $m = 1, 2, 3$ . 对应于光线远离原点逃逸.

对于  $m = 0$ , 变换(4.2.1a)失去意义. 为使  $n(z)$  能归入(4.2.1d), 另取坐标变换:

$$z' = A \ln z, \quad (4.2.2a)$$

利用(2.1.3)式, 可得空间 2 中的折射率分布:

$$n'(z) = \left| \frac{d(A \ln z)}{dz} \right| = Ar^{-1}. \quad (4.2.2b)$$

$m = 0$  的情况正是下文提出的全方向吸收体结构. 从几何光学的角度看, 该结构利用对光线的吸引过程近似模拟了天体被 Schwarzschild 黑洞吸收时的运动轨迹.

从几何光学中的 Fermat 原理出发, 可以直接从所得折射率(4.2.2b)求出光线轨迹.

在折射率  $n$  仅有径向分布的情形下, 光线的轨迹与折射率  $n(r)$  的关系如下<sup>[4]</sup>:

$$\varphi = \sigma \int \frac{dr}{r \sqrt{n^2 r^2 - \sigma^2}}. \quad (4.2.3)$$

其中常数  $\sigma$  由光线的初始位置确定. 将(4.2.2b)代入(4.2.3), 可得光线轨迹方程:

$$\varphi = \frac{\sigma}{\sqrt{A^2 - \sigma^2}} \ln r. \quad (4.2.4)$$

为使结构物理上易实现, 我们将折射率按(4.2.2b)分布的区域限定在圆形区域  $r < R_2$  内, 外部仍为真空. 考虑到能量守恒, 区域中心  $r < R_1$  放置耗散介质以吸收光能(耗散性质由  $\varepsilon$  的虚部体现). 这样, 结构的介电常数  $\varepsilon$  可以写为<sup>[5-8]</sup>:

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} 1 & r > R_2 \\ \frac{r^2}{R_2^2} & R_1 < r < R_2 \\ \frac{R_1^2}{R_2^2} + i\gamma & r < R_1 \end{cases} \quad (4.2.5)$$

### 4.3 数值模拟

基于上一节的分析, 我们方便地得出了全方向声吸收体的结构参数. 假定背景媒质的质量密度和绝热体弹性模量分别为  $\rho_0$  和  $\kappa_0$ , 并取结构的质量密度也为  $\rho_0$ , 弹性模量的分布应满足<sup>[9]</sup>:

$$\kappa(r) = \begin{cases} \kappa_0 & r > R_2 \\ \frac{r^2}{R_2^2} \kappa_0 & R_1 < r < R_2 \\ \frac{R_1^2}{R_2^2} \kappa_0 + i\gamma & r < R_1 \end{cases} \quad (4.3.1)$$

其中  $r < R_1$  区域媒质的声耗散特性体现在弹性模量  $\kappa$  的虚部  $\gamma$  上.

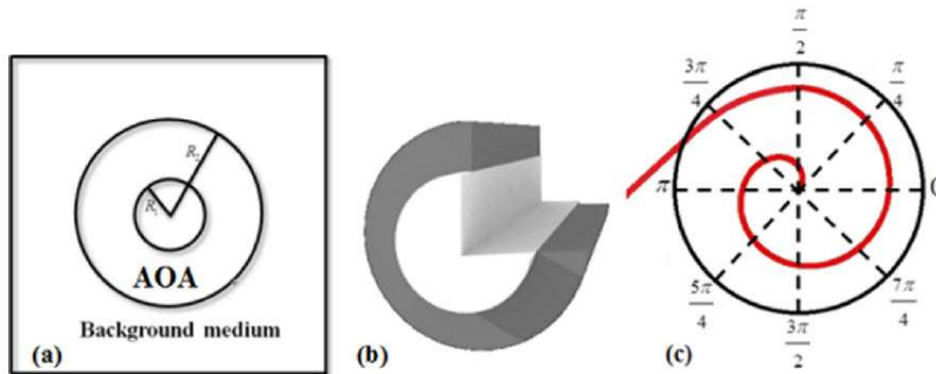


图 4.3.1 (a) 全方向声吸收体的二维结构图,  $R_1 < r < R_2$  是具有径向分布弹性模量的壳层结构,  $r < R_1$  为耗散媒质. (b) 全方向声吸收体的三维剖面图. (c) 声束在全方向声吸收体中的传播轨迹, 即(4.1.4)式.

我们利用有限元法对结构与声波的相互作用进行数值模拟. 取  $R_1 = 4 \text{ cm}$ ,  $R_2 = 12 \text{ cm}$ . 设定背景媒质为水( $\rho_0 = 998 \text{ kg/m}^3$ ,  $c_0 = 1483 \text{ m/s}$ ). 当入射波为高斯声

束时(波长  $\lambda_1 = 7.4 \text{ mm} = 0.06 R_2$ ), 声束轨迹(图 4.3.2a)与图 4.3.1(c)的理论预测一致. 当入射声束的中心位置与结构的外边界相切时, 可观察到由于声束具有一定宽度而被分裂成两部分, 与结构接触的部分被吸引, 未与结构接触的部分逃逸. 当声束对准结构中心入射时, 声束被直接吸收而并不改变直线传播的轨迹, 这对应于(4.2.4)式中  $\sigma = 0$  的情形.

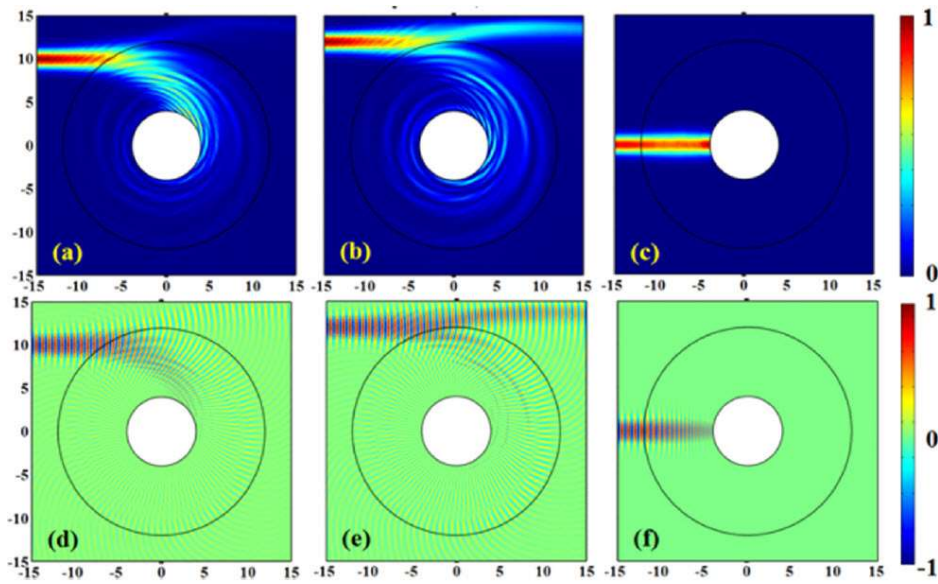


图 4.3.2 (a)-(c) 高斯声束入射时的声强分布. (d)-(f)  $R_1 < r < R_2$  是具有径向分布弹性模量的壳层结构,  $r < R_1$  为耗散媒质. (b) 全方向声吸收体的三维剖面图. (c) 声束在全方向声吸收体中的传播轨迹, 即(4.2.4)式.

从实际应用的角度看, 该结构增加了耗散媒质的吸声截面, 可大幅提高吸声媒质的吸声效率, 在噪声控制领域有潜在的应用价值. 这一点可以从以下的仿真结果看出. 此时, 设定入射声波为平面波, 波长  $\lambda_2 = 2.47 \text{ cm} = 0.2 R_2$ . 当结构只保留  $r < R_1$  部分的耗散媒质时, 仅有宽度为  $2R_1$  的影区(图 4.3.3(b)). 当相同的入



射波作用于完整的结构时, 影区的宽度增大至  $2R_2$  (图 4.3.3(a)). 影区的增大幅度与  $R_2 / R_1$  的值密切相关. 因此, 在实际应用时通过调节  $R_2 / R_1$ , 可以灵活而有效的控制吸声区域的大小, 与传统方法相比可以较少地使用吸声材料.

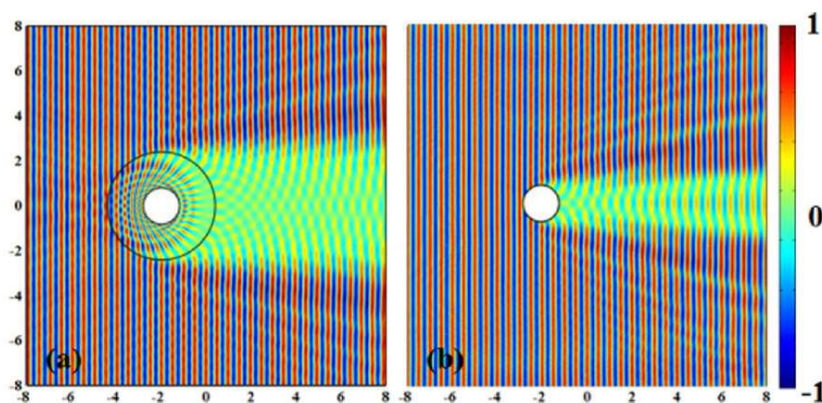


图 4.3.3 (a) 波长  $\lambda_2 = 2.47 \text{ cm} = 0.2 R_2$  的平面波入射, 作用于整个全向吸声体结构. (b) 相同的平面波入射, 作用于  $r < R_1$  部分的耗散媒质.

由于本工作是从坐标变换和几何光学(声学)的角度出发提出以上结构模型, 考察结构的频率响应特性就非常必要, 尤其是考察在几何光学(声学)失效的低频区域, 即波长与结构尺寸相当甚至远大于结构尺寸时, 该结构是否有效. 在数值仿真中, 入射波波长  $\lambda$  从  $2\pi R_2 / \lambda = 5.12$  变化至  $2\pi R_2 / \lambda = 130.2$ , 计算出取每个波长值时耗散媒质吸收的声功率. 该计算也分别对单独的耗散媒质(图 4.3.4(b)中红色曲线)和整个结构(图 4.3.4(b)中蓝色曲线)进行, 从结果可以看出, 在不考虑耗散媒质的吸声性能的频率响应时, 结构是宽带的. 然而, 耗散媒质的具体实现形式将决定弹性模量的虚部  $\gamma$  的频率响应, 该因素会影响结构的有效带宽. 另一方面, 梯度变化的媒质层  $R_1 < r < R_2$  一般将会基于等效媒质理论用亚波长结构实

现, 这也将引入结构带宽的下限. 这些因素在结构的具体制作中都应重点考虑, 以实现具体问题中所要求的带宽.

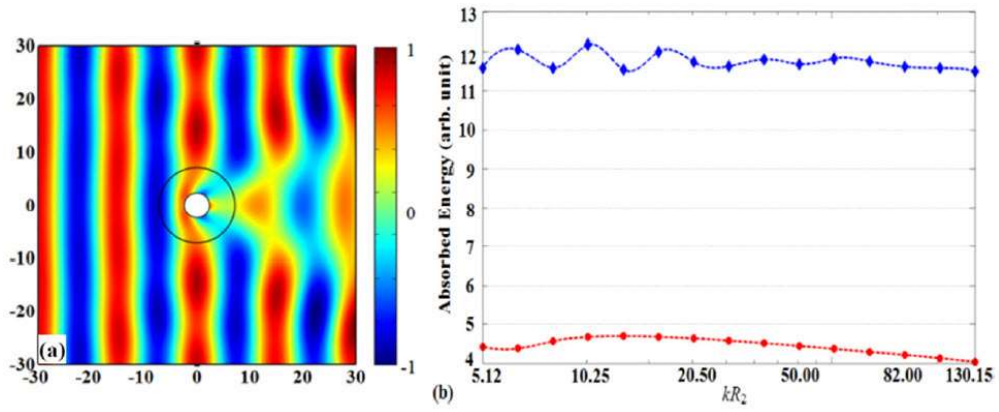


图 4.3.4 (a) 入射平面波波长为  $\lambda = 24.7$  cm 时的声压分布. (b) 蓝色和红色曲线分别为整个结构和单独的耗散媒质的声吸收功率.

#### 4.4 小结

本章从复平面上的变换光学出发, 结合几何光学理论, 提出了能近似模拟天体黑洞的吸收特性的声全方向吸收体. 在仿真中, 我们验证了它控制声束轨迹以致将其吸引以及增大声耗散媒质吸收截面的特性. 最后, 我们讨论了影响其宽带特性的若干因素, 对于结构的实现有一定指导意义. 该结构在对天体物理现象的实验室演示以及噪声控制工程中均有潜在的应用价值.

## 参考文献

- [1] D. A. Genov, S. Zhang, and X. Zhang, "Mimicking celestial mechanics in metamaterials," *Nat. Phys.* **5**, 687 (2009).
- [2] K. Schwarzschild, Über das Gravitationsfeld eines Massenpunktes nach der Einsteinschen Theorie, *Sitzungsberichte der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Klasse für Mathematik, Physik, und Technik*, 189 (1916).
- [3] K. Schwarzschild, Über das Gravitationsfeld einer Kugel aus inkompressibler Flüssigkeit nach der Einsteinschen Theorie, *Sitzungsberichte der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Klasse für Mathematik, Physik, und Technik*, 424 (1916).
- [4] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, 7th Edition, Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [5] E. E. Narimanov and A. V. Kildishev, "Optical black hole: Broadband omnidirectional light absorber," *Appl. Phys. Lett.* **95**, 041106 (2009).
- [6] A. V. Kildishev, L. J. Prokopenko, and E. E. Narimanov, "Cylinder light concentrator and absorber: theoretical description," *Opt. Express* **18**, 16646 (2010).
- [7] W. Lu, J. Jin, Z. Lin, and H. Chen, "A simple design of an artificial electromagnetic black hole," *J. Appl. Phys.* **108**, 064517 (2010).
- [8] S. Liu, L. Li, Z. Lin, H. Y. Chen, J. Zi, and C. T. Chan, "Graded index photonic hole: Analytical and rigorous full wave solution," *Phys. Rev. B* **82**, 054204 (2010).

- [9] R. Q. Li, X. F. Zhu, B. Liang, Y. Li, X. Y. Zou, and J. C. Cheng, "A broadband acoustic omnidirectional absorber comprising positive-index materials," *Appl. Phys. Lett.* **99**, 193507 (2011).
- [10] Q. Cheng, T. J. Cui, W. X. Jiang, B. G. Cai, "An omnidirectional electromagnetic absorber made of metamaterials," *New J. Phys.* **12**, 063006 (2010).
- [11] C. Sheng, H. Liu, Y. Wang, S. N. Zhu and D. A. Genov, "Trapping light by mimicking gravitational lensing," *Nat. Photonics* **7**, 902 (2013).
- [12] H. Y. Chen, R.-X. Miao, and M. Li, "Transformation optics that mimics the system outside a Schwarzschild black hole," *Opt. Express* **18**, 15183 (2010).

## 第5章 波导管中声波的非对称传输

波导管中声波的传输问题是理论声学中的一个经典问题. 研究的内容一般包括对某种特定横截面的波导中的各种传播模式的空间分布和截止频率的讨论. 同时也涉及波导管的截面突变或者截面周期性变化的波导管中的传播性质. 声波的非对称传输是近几年提出的一个新概念, 由于该现象曾经在电子线路中(电子二极管)产生了革命性的影响, 故再次引起了相关研究者的极大兴趣. 本章讨论如何利用梯度折射率媒质在平直的波导管中实现声波的非对称传输, 对声波的非对称传输的研究做出进一步的探索.

## 5.1 研究背景

电子二极管作为实现电流的单向流动的电子器件，奠定了当代的信息科学技术等领域的基石，产生了革命性的影响。随后，受电子二极管的启发，研究者们开始致力于设计控制其他形式能量单向流动的器件。最近，Liang 等在声波非对称传输的理论和试验工作中取得了重要进展。他们提出的所谓声波二极管结构，由一维声子晶体和强非线性媒质组成<sup>[1,2]</sup>。随后，在线性和非线性声学范畴均提出了多种其它设计方案<sup>[3-5]</sup>。尽管已经提出的结构在组成和性能上有明显不同，它们的内部机制本质上是相似的。这些结构由两部分构成，一个将入射波在频率空间<sup>[4,5]</sup>或波矢空间<sup>[3,4]</sup>进行转化的转化器，和一个对原始入射波和转化而得的波具有不同的透射效果的滤波器。

然而，基于上述机制的设计不可避免的导致若干共同的缺陷。首先，该机制只能对具有特定波长的入射波起作用，这导致了结构的窄带特性。同时，在利用衍射或非线性机制对入射波的转化中，存在较强的能量损失<sup>[2,3]</sup>。其次，转化器与滤波器在界面上的不匹配导致了反射波对声源的干扰，鉴于此，本文提出了与上述机制完全不同的，基于具有梯度声速分布的声子晶体结构非对称声传播结构。

## 5.2 模型的提出和理论分析

本模型的结构示意图如图 1 (a)所示. 梯形区域 ABGF 包含三部分. 第一部分为平行四边形区域 ABCD, 该区域声速沿  $x$  轴从  $c_0$  (背景媒质声速) 梯度变化至  $c_1$  ( $c_0 > c_1$ ), 同时保持沿着 AB 方向均匀. 不失一般性, 我们选取一个线性函数:  $c(x, y) = c_0 + (c_1 - c_0)(x + y \tan \theta) / l$  (坐标系如图 1(a)中所示). 这里,  $l$  是线段 BC 的长度而角度  $\theta$  的正切值表征了 AB 的斜率. 结构的第二部分为三角形区域 DEC, 其声速恒为  $c_1$ . 第三部分为矩形区域 EFGC, 其声速从  $c_1$  梯度变化至  $c_0$ . 所有的边界均为刚性壁面除了在 AD 边界处附有理想的吸声材料. 整个结构的密度与背景媒质相同, 记为  $\rho_0$ . 声波的非对称传输主要在平行四边形区域 ABCD 中实现. 结构中的另外两部分仅仅为了消除边界处声阻抗的不匹配.

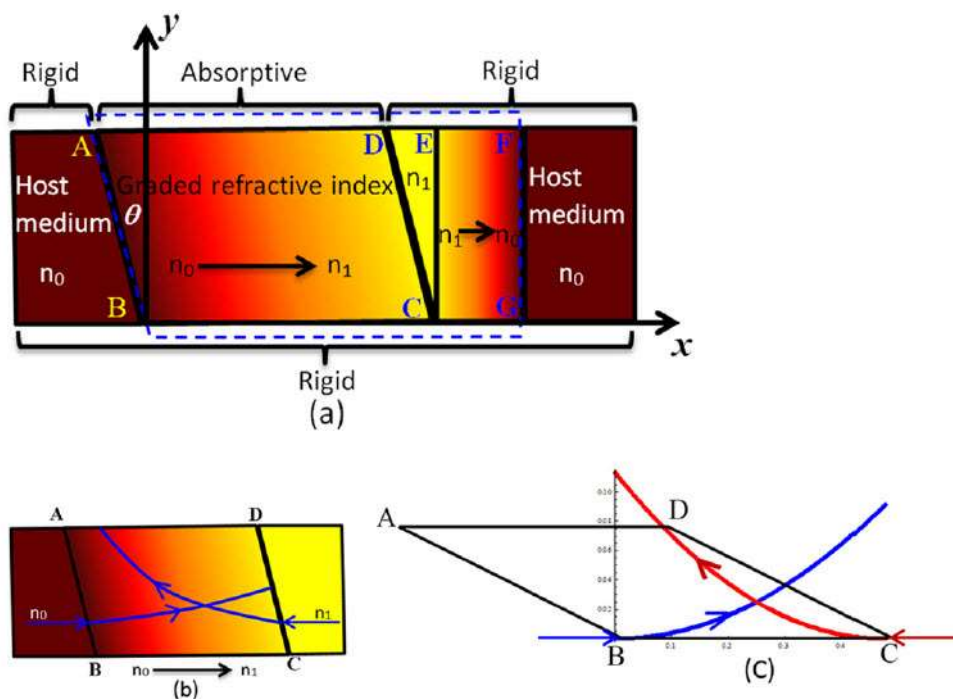


图 5.1 (a) 模型的几何示意图, 渐变的颜色表示梯度分布的声速. (b) 非对称声波轨迹的示意



图.(c) 由数值计算方程(5.2)得到的非对称声传播轨迹.

众所周知, 声波在不同媒质的分界面上的传播行为遵守 Snell 定律, 即  $\sin \theta_i / \sin \theta_t = c_i / c_t$ . 这里  $c_i$  和  $c_t$  分别为入射波和透射波所在媒质的声速,  $\theta_i$  和  $\theta_t$  分别为入射角和折射角. 当左侧入射的平面波进入结构, 它将不断地遇到逐渐变小的声速. 在任何一个平行于 AB 的平面上, 透射角  $\theta_t$  永远小于入射角  $\theta_i$ , 因此法线方向成为光线传播方向的渐近线. 这表明左侧入射的平面波是可以透过结构的. 相反, 对于右侧入射的平面波, 透射角  $\theta_t$  永远大于入射角  $\theta_i$ , 这使得波的传播方向可以被弯曲至几乎与 AB 平行. 最终, 声波被放置于上壁面处的完美吸声材料吸收, 这导致右侧入射的声波不能透过结构. 由于结构放置于特定的背景媒质中, 故保持与背景媒质的阻抗匹配极其重要. 这就是结构中第二部分和第三部分的作用.

声波在该结构中的传播轨迹可以在几何声学的近似下求得. 根据 Fermat 原理, 任意两点  $P$  和  $Q$  之间波的实际传播路径取所有可能路径中最短的一条, 数学上表示为<sup>[7]</sup>:  $\delta \int_p^Q n(\mathbf{r}) ds = 0$ . 式中  $\delta$  为一阶变分算符,  $s$  为声线的长度,  $n(\mathbf{r})$  为媒质的折射率分布. 如果将声波的轨迹用参数方程表示:  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$ ,  $z = z(t)$ , 我们可以将费马原理写成,  $\delta \int_p^Q L dt = 0$ . 这里  $L = n(\mathbf{r}) \sqrt{(dx/dt)^2 + (dy/dt)^2 + (dz/dt)^2}$  称为 Lagrange 函数. 与分析力学类似,  $L$  满足 Lagrange 方程. 最后, 声线轨迹满足的方程可表示为<sup>[7]</sup>:

$$\frac{d}{ds} \left( n \frac{d\mathbf{r}}{ds} \right) = \nabla n, \quad (5.1)$$

其中  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s)$  为声波的传播轨迹. 这里我们只计算沿  $x$  轴水平入射声波, 故声波在

媒质中未发生大角度偏折. 这允许我们用  $dx$  代替  $ds$ . 于是, 方程(1)可近似表示为:

$$n \frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{\partial n}{\partial x} \frac{dy}{dx} = \frac{\partial n}{\partial y}. \quad (5.2)$$

数值求解(5.2)给出了声波沿不同方向入射的轨迹. 这里去结构的几何参数为  $l = 0.475$  m,  $CG = 0.075$  m,  $\tan \theta = 2$  ( $\theta \approx 63.4^\circ$ ). 声速(单位 m/s)分布写作  $c(x, y) = -134.7(x + 2y) + 337$ . 方程的边界条件设为: 左边入射时  $y(0) = 0$ ,  $y'(0) = 0$ ; 右边入射时  $y(0.475) = 0$ ,  $y'(0.475) = 0$ . 计算所得的声线轨迹如图 5.1 (c)所示. 尽管使用了近轴近似, 不对称传播的轨迹依然可以观察到. 注意到左侧入射的声波经过结构并被反射时, 并不能返回到声源处, 这是由于反射波将按照右侧入射的轨迹传播, 最终被上壁面放置的吸声材料吸收. 这是本结构由于先前的设计的一个优势.

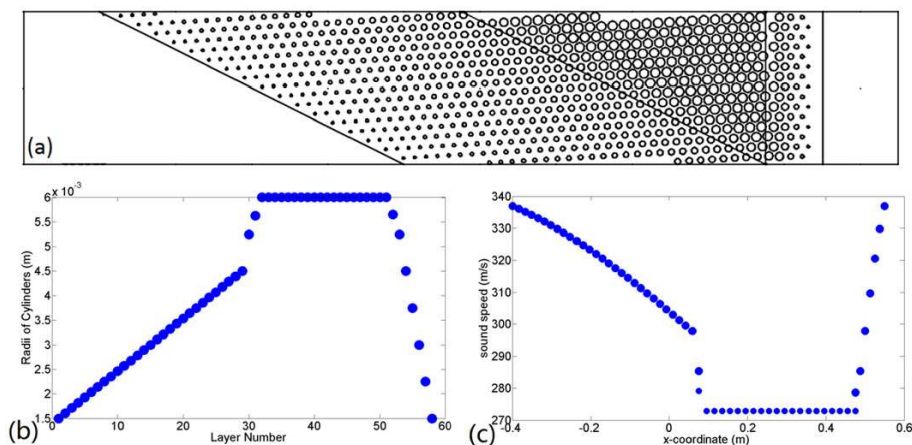


图 5.1 (a) 基于声子晶体的实现方案的几何示意图, 渐变的颜色表示梯度分布的声速. (b) 前 51 个点为结构第一和第二部分的圆柱体填充物的半径, 最后 7 个点为结构第三部分的圆柱体填充物的半径. (c) 由等效媒质理论得到的等效声速分布(沿直线  $y = 0.2$ ).

为了证明该结构的易实现性, 我们用基于声子晶体的超材料给出一种实施

方案. 早先的研究已经证实, 填充率变化的声子晶体时梯度折射率材料的一种较好的实现方案. 尽管移动媒质也可提供不对称声速分布, 但是梯度声子晶体显然是一个更简单方便的选择.<sup>[8-10]</sup> 这里我们选用填充物为有机玻璃( $\rho = 1180 \text{ kg/m}^3$ ,  $c = 2700 \text{ kg/m}^3$  的圆柱体的六角形声子晶体, 如图 5.2 (a)所示. 为了便于和之前的理论计算作对比, 我们取与之前相同的几何参数. 背景媒质为空气( $\rho_0 = 1.25 \text{ kg/m}^3$ ,  $c_0 = 343 \text{ m/s}$ ). 在亚波长区域, 声子晶体的等效声速可以由改变填充率  $f$  来调节, 亦即调节圆柱体的半径.<sup>[10]</sup> 因此, 在本实现方案中, 圆柱体的半径沿声速改变方向梯度变化, 而晶格常数设为定值  $a = 1.5 \text{ cm}$ . 为了证明基于声子晶体的实现方案的有效性, 我们同时使用等效媒质理论模拟了声场的分布以作比较. 对于低填充率的声子晶体, 其等效声速  $c_{\text{eff}}$  与填充率  $f$  的关系可以用以下公式表述:  $c_{\text{eff}} = c_0 / \sqrt{1+f}$ .<sup>[9]</sup> 同时, 六角形声子晶体的填充率  $f$  与圆柱体形填充物的半径  $r$  的关系可表示为:  $f = 2\pi(r/a)^2 / \sqrt{3}$ .<sup>[9]</sup> 根据以上公式计算所得结构的声子晶体的等效参数见图 5.2 (c).

我们利用有限元仿真的方法验证了结构的有效性. 图 5.3(a)和(b)分别为入射声波的波长为  $\lambda = 7.62 \text{ cm} \approx 5a$  时, 基于声子晶体的结构产生的效果图, 用声强幅值的分布表征. 作为对比, 图 5.3(c)和(d)为基于图 5.2 (c)等效参数的仿真结果. 可以观察到, 基于等效参数的仿真结果与基于声子晶体的实现方案吻合得非常好. 两者微小的差别来源于基于多重散射的局域化效应.

图 5.3 的仿真结果与图 5.1 中基于声线方程的数值预测也很一致. 这进一步说明了该实现方案的有效性. 同时, 声子晶体的实现方案与等效媒质理论的结果也吻合得很好进一步说明利用声子晶体实现我们提出的方案是准确可行的. 值

得注意的是, 非对称的栅格或狭缝结构会在不同的传播方向上出现不同的透射声的模式,<sup>[11,12]</sup> 这些机制也有可能被利用于实现声波的非对称传输. 然而, 本方案是在亚波长区域基于几何声学的理论提出的非对称传输, 而不涉及非对称的声传播模态. 因此, 我们的方案理论上具有更大的带宽.

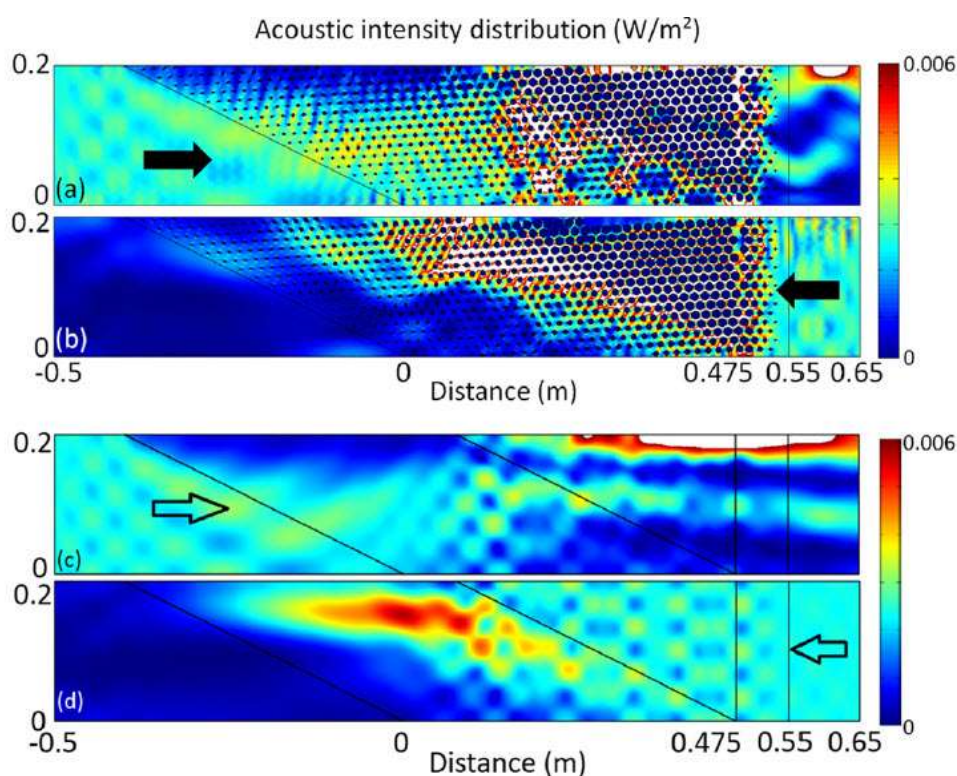


图 5.3 分别为入射声波的波长为  $\lambda = 7.62 \text{ cm} \approx 5a$  时的声强分布. (a)(b)基于声子晶体的结构产生的效果图; (c)(d)基于等效参数模型的效果图. 图中箭头为入射波方向.

为了证明本结构的宽带特性, 我们数值计算了系统透射系数的频率响应(从 100 Hz 到 11 kHz), 如图 5.4 (a)所示. 结果显示, 基于声子晶体的实现方案的有效带宽从 2 kHz 至 8 kHz (相应的波长从  $3a$  到  $11a$ ), 带宽与中心频率之比达到 120%. 同时, 基于等效媒质理论计算所得的透射系数(如图 5.4 (b)所示)与声子晶体实现

方案在总趋势上基本一致. 在低频极限处, 由于声波衍射效应趋于显著而使结构部分失效. 此时, 由于结构尺寸与波长相当甚至小于波长, 声波从两个方向入射后的传输基本是对称的. 与等效媒质的计算结果不同的是, 基于声子晶体的实现方案同时具有有效频率上限. 当声波波长减小至等效媒质理论的有效临界波长值, 声子晶体将出现传输禁带, 这时声波沿两个方向入射均不能传输, 如图 5.4 (a)的高频部分所示. 然而, 通过调节晶格常数  $a$  可以实现具体实验中需要的带宽. 另外, 置于结构上壁面的吸声材料可以使用传统的微穿孔板或多孔媒质等等, 也可以使用声子晶体实现.<sup>[13]</sup> 声子晶体中声波的衰减特性与声波波长和填充率同时有关. 通过恰当地调节晶格单元的尺寸和填充率, 我们可以获得足够的吸声能力来作为上壁面处的填充材料.

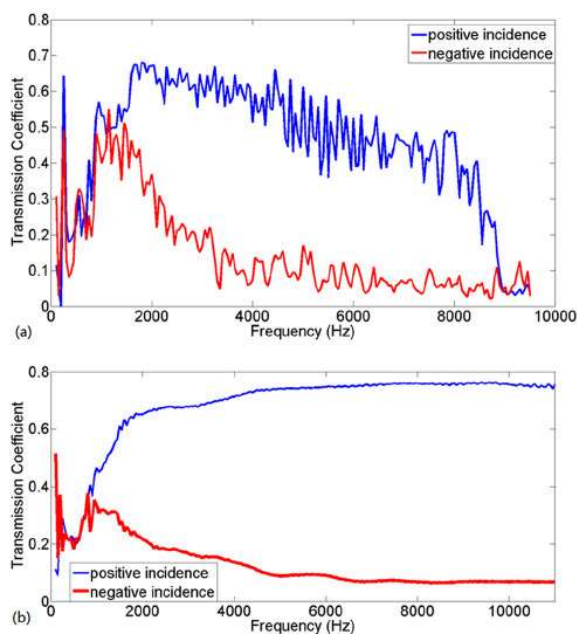


图 5.4 透射系数的频率特性, 蓝色实线为左侧入射情形, 红色实线为右侧入射情形. (a) 基于声子晶体的实现方案 (b) 基于等效媒质理论的模型.

---

### 5.3 小结

本章提出了一个二维基于梯度材料的不对称声传输结构. 它具有与之前提出的模型完全不同的物理机制. 我们同时提出了基于声子晶体的一种实现方案. 数值仿真结果表明, 基于声子晶体的实现方案实现了宽带的声波非对称传播. 另外, 该结构不会出现反射声波干扰声源的问题. 这一点使得本结构应用在聚焦超声治疗等领域时具有独特的优势. 同时, 基于二维 Maxwell 方程和声波方程之间的变量对应关系, 未来在电磁波领域也可以设计和实现具有相似机制的非对称传输结构.

## 参考文献

- [1] B. Liang, B. Yuan, and J.-C. Cheng, "Acoustic Diode: Rectification of Acoustic Energy Flux in One-Dimensional Systems," *Phys. Rev. Lett.* **103**, 104301 (2009).
- [2] B. Liang, X. S. Guo, J. Tu, D. Zhang, and J. C. Cheng, "An acoustic rectifier," *Nat. Mater.* **9**, 989 (2010).
- [3] X. F. Li, X. Ni, L. Feng, M. H. Lu, C. He, and Y. F. Chen, "Tunable Unidirectional Sound Propagation through a Sonic-Crystal-Based Acoustic Diode," *Phys. Rev. Lett.* **106**, 084301 (2011).
- [4] X. F. Zhu, X. Zou, B. Liang, and J. C. Cheng, "One-way mode transmission in one-dimensional phononic crystal plates," *J. Appl. Phys.* **108**, 124909 (2010).
- [5] N. Boechler, G. Theocharis, and C. Daraio, "Bifurcation-based acoustic switching and rectification," *Nat. Mater.* **10**, 665 (2011).
- [6] J. Christensen and M. Willatzen, "Flow-induced resonance shift in sonic slit array metamaterials," *Phys. Rev. B* **85**, 094304 (2012).
- [7] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, 7th Edition, Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [8] D. Torrent, A. Hakansson, F. Cervera, and J. Sanchez-Dehesa, "Homogenization of Two-Dimensional Clusters of Rigid Rods in Air," *Phys. Rev. Lett.* **96**, 204302 (2006).
- [9] D. Torrent and J. Sanchez-Dehesa, "Effective parameters of clusters of cylinders embedded in a nonviscous fluid or gas," *Phys. Rev. B* **74**, 224305 (2006).

- [10] A. Climente, D. Torrent, and J. Sanchez-Dehesa, "Sound focusing by gradient index sonic lenses," *Appl. Phys. Lett.* **97**, 104103 (2010).
- [11] Z. He, S. Peng, Y. Ye, Z. Dai, C. Qiu, M. Ke, and Z. Liu, "Asymmetric acoustic gratings," *Appl. Phys. Lett.* **98**, 083505 (2011).
- [12] S. Xu, C. Qiu, and Z. Liu, "Acoustic transmission through asymmetric grating structures made of cylinders," *J. Appl. Phys.* **111**, 094505 (2012).
- [13] A. Climente, D. Torrent, and J. Sanchez-Dehesa, "Omnidirectional broadband acoustic absorber based on metamaterials," *Appl. Phys. Lett.* **100**, 144103 (2012).
- [14] J. V. Sanchez-Perez, D. Caballero, R. Martinez-Sala, C. Rubio, J. Sanchez-Dehesa, F. Meseguer, J. Llinares, and F. Galvez, "Sound Attenuation by a Two-Dimensional Array of Rigid Cylinders," *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5325 (1998).
- [15] S. A. Cummer and D. Schurig, "One path to acoustic cloaking," *New J. Phys.* **9**, 45 (2007).



## 第6章 结束语与工作展望

随着纳米加工工艺水平的提高和 3D 打印技术的广泛应用, 人工微结构在诸多物理领域显示出强大的生命力. 上世纪中期兴起的量子光学理论经过半个多世纪的发展日趋成熟, 很好的描述了光与物质的相互作用过程. 这为当前处于科技前沿的量子通信和量子计算等领域提供了强有力的理论保障. 本世纪初兴起的变换光学理论作为描述和控制电磁场的新工具也引起了研究者的极高兴趣. 经过十年的发展, 变换光学自身从最初在 Descartes 坐标系下的简单映射, 发展到真实空间与复平面上黎曼面之间的复变量映射, 再到利用广义相对论的有关结论基于四维时空坐标的映射, 实现了时空斗篷等结构.

本文的工作均基于以上理论和方法, 主要的创新点有:

1. 第一次将变换光学理论用于解决量子光学中的 QE-SP 强耦合问题, 通过数值和近似的解析结果, 揭示了纳米颗粒二聚体型腔体与 QE 强耦合的物理机制, 并成功分析了最近发表的单分子与微纳腔体在室温下实现强耦合的实验, 所得结果与实验结果获得了较好的吻合.

2. 第一次在声学领域提出模拟天体力学现象的全方向吸声体结构, 并提出了可能的实现方案.

3. 第一次在平直的声波导管中实现了声波的非对称传输. (注意到先前的工作是在 V 字形的波导管中实现的非对称声传输).

未来工作展望:

1. 进一步细化创新点 1 中的理论工作, 研究几何形状非对称, 材料参数非对称等情况下腔体与 QE 组成的系统的性质. (注意到, 第 3 章中对单分子室温下与 SP 的强耦合实验的分析已经是几何结构非对称的一个例子).
2. 结合广义相对论的相关结论, 针对其他的天体力学现象设计出经典波下的类比结构, 包括混沌现象等.
3. 进一步设计基于其他物理机制的声波非对称传播结构, 针对在超声治疗等应用领域的具体要求提出更加易于实际使用的新结构.

## 致谢

本论文是在导师**程建春教授**的悉心指导下完成的。六年的硕士和博士生活转瞬即逝。在科研上，程老师为我指定了研究方向，在遇到疑难时与我一同商讨解决方案，避免了不必要的弯路。在国内的三年以及国外的两年多的时间里，程老师给予我精神上的极大鼓励和支持，生活上的亲切关心和帮助。程老师严谨的治学态度，高深的学术造诣，宽广的胸怀气魄成为我现在和将来不断前进的动力。在此，向恩师表示崇高的敬意和衷心的感谢。

感谢课题组的梁彬教授，邹欣晔副教授，杨京副教授和王金兰高工的关心和帮助。感谢 Universidad Autónoma de Madrid 的 Francisco José García-Vidal 教授和 Antonio I. Fernández-Domínguez 老师的学术指导以及生活上的帮助。感谢中国社会科学院拉丁美洲研究所齐峰田老师在留学期间对我的帮助。

感谢导师程建春教授课题组和 Francisco José García-Vidal 教授课题组的所有同学与我一同度过六年的硕博生活。和你们在一起的每次欢声笑语都令人难忘。特别地，感谢祝雪丰师兄的科研指导。感谢阚威威师兄，李勇师兄的关心和支持。

感谢我的父母亲。

李睿奇

2017年7月

研究生期间的工作成果:

- [1] **Rui-Qi Li**, D. Hernngomez-Prez, F. J. Garca-Vidal, and A. I. Fernndez-Domnguez, "Transformation Optics Approach to Plasmon-Exciton Strong Coupling in Nanocavities," *Phys. Rev. Lett.* **117**, 107401 (2016).
  
- [2] **Rui-Qi Li**, F. J. Garca-Vidal, and A. I. Fernndez-Domnguez, "Plasmon-Exciton Coupling in Symmetry-Broken Nanocavities," *ACS Photonics* (Under review).
  
- [3] **Rui-Qi Li**, Bin Liang, Yong Li, Wei-Wei Kan, Xin-Ye Zou and Jian-Chun Cheng, "Broadband asymmetric acoustic transmission in a gradient-index structure," *Appl. Phys. Lett.* **101**, 263502 (2012).
  
- [4] **Rui-Qi Li**, Xue-Feng Zhu, Bin Liang, Yong Li, Xin-Ye Zou and Jian-Chun Cheng, "A broadband acoustic omnidirectional absorber comprising positive-index materials," *Appl. Phys. Lett.* **99**, 193507 (2011).