

表面等离激元-光子混合波导中共振能量转移增强

刘杰, 陈炫任, 王小云*, 黄勇刚**

吉首大学物理与机电工程学院, 湖南 吉首 416000

摘要 由于表面等离激元-光子混合波导具有较强的局域场增强效应和较长的传输距离,故在微纳光子学中中具有广泛的应用。基于有限元方法,系统研究不同尺寸的金属表面等离激元波导-低折射率空隙-矩形介质波导构成的混合波导中两个二能级原子间的共振能量转移(RET)增强特性。利用二维(2D)有限元方法求解波导模式,以获得波导中近似光子并矢格林函数,并将其与严格三维(3D)有限元解进行比较。结果表明,在单模情况下,由波导模式构建的光子并矢格林函数与严格解符合得较好,而其计算量远小于3D有限元方法。借助该2D快速求解方法,在1550 nm波长下,系统研究该波导单模传输所需要的尺寸和不同波导尺寸对RET增强特性的影响。结果表明:介质波导的宽度越窄,单模所允许的高度越高;当波导的宽度增大时,对于较高的介质波导,其传播距离在增大,RET增强因子在减小,而对于较矮的介质波导,其传播距离先增大后减小,RET增强因子急剧减小;随着高度的增加,传播距离先急剧减小后缓慢增大,而RET增强因子先急剧增大后缓慢变化;低折射率空隙越小,传播距离越短,RET增强因子越大。

关键词 集成光学; 共振能量转移; 光子并矢格林函数; 混合波导; 单模

中图分类号 O439

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1513002

Enhancement of Resonance Energy Transfer in Surface Plasmon-Photon Hybrid Waveguide

Liu jie, Chen Xuanren, Wang Xiaoyun*, Huang Yonggang**

College of Physics and Electromechanical Engineering, Jishou University, Jishou 416000, Hunan, China

Abstract Surface plasmon-photon hybrid waveguides have been widely used in micro-nano photonics due to their strong enhancement effect in the local field and relatively long transmission distance. Based on the finite element method, the enhancement of resonance energy transfer (RET) between two two-level atoms in a hybrid waveguide with different sizes is studied systematically. The hybrid waveguide is composed of a metal surface plasmon waveguide and a rectangular medium waveguide, with a low refractive index gap between them. The waveguide mode is solved by the two-dimensional (2D) finite element method to obtain the approximate photon dyadic Green's function in the waveguide, and it is compared with the strict three-dimensional (3D) finite element solution. The comparison results prove that for the single mode, the photon dyadic Green's function constructed by the waveguide mode agrees well with the strict solution. In addition, compared with the 3D finite element method, the 2D finite element method needs much fewer computation resources. With the help of the 2D finite element method, the size required for the single mode transmission at 1550 nm and its effect on the RET enhancement are systematically studied. It is found that a narrower waveguide is accompanied by a higher medium waveguide needed for the single mode transmission. As the waveguide widens, for a higher medium waveguide, its transmission distance increases, and the RET enhancement factor decreases. While for a lower medium waveguide, its transmission distance firstly increases and then decreases, and the RET enhancement factor declines sharply. As the height of the medium waveguide increases, the transmission distance decreases sharply at first and then increases slowly, while the RET enhancement factor increases sharply at first and then changes slowly. Furthermore, the small low refractive index gap is followed by a short transmission distance and a large RET enhancement factor.

Key words integrated optics; resonance energy transfer; photon dyadic Green's function; hybrid waveguide; single mode

收稿日期: 2022-01-27; 修回日期: 2022-02-25; 录用日期: 2022-03-07

基金项目: 国家自然科学基金(11964010, 11464013, 11464014)、湖南省自然科学基金(2020JJ4495)、湖南省教育厅项目(21A0333)、吉首大学研究生科研创新项目(Jdy19040)

通信作者: *wxyyun@163.com; **huang122012@163.com

1 引言

波导是集成光学重要的组成部分,能在一个或两个维度上约束电磁场,并将其定向传输。传统的介质波导^[1-5]能够实现低损耗导光,在纳米光子领域中具有广泛的应用,如荧光辐射增强^[1]、超辐射^[2]、全光逻辑门器件^[3]、弯曲波导的奇妙应用^[4]和单向波导^[5]等。然而,衍射极限将介质波导的模场限制在与波长相当的尺度范围内,这不利于光学器件的微型化和集成化。表面等离子激元能突破衍射极限,并将电磁场束缚在金属表面附近的纳米尺度内,可实现亚波长尺度上对光的操控。局域场增强效应使得金属纳米结构能够极大地增强光与物质的相互作用^[6-9]。利用表面等离子激元效应,在有源聚合物光波导中加入适当的金属纳米颗粒,可有效提高波导中量子点的辐射效率^[10]。当在有源聚合物波导附近交叉放置金属纳米线波导时,聚合物波导中的量子点还能将波导中的电磁能量有效转移到金属纳米线波导中,实现光子到表面等离子激元的转换^[11]。表面等离子激元波导具有模面积小的特征,但由于欧姆损耗的存在,故其难以实现远距离传输。为实现低损耗和超小模面积的波导,可将介质波导与表面等离子激元波导耦合,得到一种称之为混合波导的复合结构。该复合结构的传播模式为介质波导模和表面等离子激元波导模的叠加状态,可同时具有介质波导低损耗和表面等离子激元波导小模面积的特征^[12-13]。

在量子电动力学中,空间两个原子(施体和受体)之间的共振能量转移(RET)被广泛研究。RET是指处于激发态的施体原子释放一个光子,处于基态的受体原子吸收该光子而跃迁到激发态,能量在施体和受体间转移的过程^[14-15]。RET在诸多领域中起到重要作用,如光合作用^[16]、生物医学^[17]、生物探测^[18]和量子密钥^[19]等。对于空间非重叠的两个跃迁偶极子,RET分别表现为短程区域的Föster RET和长程区域的辐射转移。理论研究表明,在两种情况下,RET效率取决于施体辐射、受体辐射、吸收光子的速率和光子在施体与受体间的传输效率。为提高RET效率,许多不同种类的电磁环境被用来控制或改变这些特征,如光学微腔^[20-22]、纳米颗粒^[23-24]、光学透镜^[25]和波导^[26-27]等,其中:微腔能有效地提高光子的辐射速率和吸收速率,此时RET的增强因子与微腔的品质因子成正比,与模体积

成反比;光学透镜和波导结构可以高效地将施体辐射的光子传到受体中。

本文研究混合波导中的RET增强特性。相比介质波导,混合波导能够克服衍射极限,其模面积小,能有效地增大光子的辐射速率和吸收速率。相比表面等离子激元波导,混合波导损耗小,传播距离长,光子能有效地从施体传输到受体中。在理论上,RET可由光子并矢格林函数表达。在均匀空间或高度对称结构中,光子并矢格林函数可由解析获得^[28],但对于任意微纳结构,需采用数值方法来求解光子并矢格林函数,如准静态近似方法、边界元法、有限差分域法和有限元法等,其中有限差分域法和有限元法被广泛采用。有限差分域法采用矩形网格,其差分格式会导致台阶近似的出现,而有限元法的网格剖分更加灵活,能更好地描述含有曲面的结构,且可采用高阶基函数,可以方便地被应用于更加精细和复杂的纳米结构中,故其在表面等离子激元纳米光子学中被广泛采用^[29-32]。然而,直接的三维(3D)有限元求解所需内存大,仿真时间长。理论研究表明,对于单模波导,格林函数可近似由波导模构造得到^[33],此时借助模式分析,其求解问题可转化为二维(2D)问题,这能极大减小计算量。首先,本文分别采用3D仿真和2D近似仿真证明单模情况下2D近似求解方法可以较准确地得到光子并矢格林函数。接着,利用波导模式分析探明混合波导单模工作所需的尺寸,并研究波导尺寸对RET增强的影响,以探寻远距离较大RET增强所需的波导尺寸。

2 理论模型

两个相同的二能级原子(施体和受体)分别位于等离子体-光子混合波导中,如图1(a)所示,混合波导由金属表面等离子激元波导和高折射率介质波导组成,两者之间为纳米级的低折射率空隙,衬底为二氧化硅。设 z 轴为波导传播方向,施体和受体的坐标分别为 $r_D = [x_D \ y_D \ z_D]$ 和 $r_A = [x_A \ y_A \ z_A]$ 。波导截面如图1(b)所示,其中银的高度为 $h_{Ag} = 100 \text{ nm}$,波导宽度为 W ,低折射率空隙厚度为 h_{SiO_2} ,硅波导高度为 h_{Si} 。本文选择的参数为工作波长为 $\lambda = 1550 \text{ nm}$,二氧化硅折射率为 $n_{SiO_2} = 1.4450$,硅折射率为 $n_{Si} = 3.4450$,金属银折射率为 $n_{Ag} = 0.1453 + 11.3587i$,背景(真空)折射率为 $n_0 = 1.0000$ 。

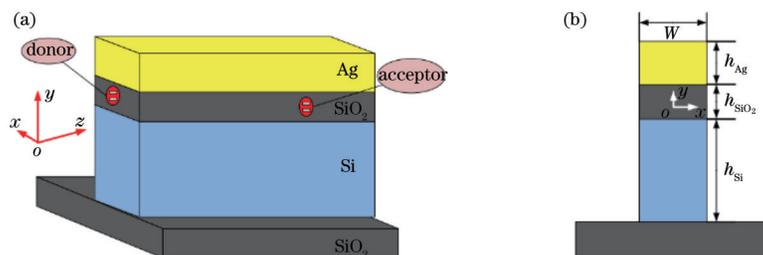


图1 系统示意图。(a) 3D结构示意图;(b)横截面示意图

Fig. 1 Schematic diagram of system. (a) 3D structure diagram; (b) cross section diagram

根据量子电动力学,以真空中的值归一化,RET 增强 $n_{\text{ETR}}^{[34]}$ 可表示为

$$n_{\text{ETR}} = \frac{|n_A G(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_D, \omega) \mathbf{n}_D|^2}{|n_A G_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_D, \omega) \mathbf{n}_D|^2}, \quad (1)$$

式中: \mathbf{n}_A 和 \mathbf{n}_D 分别为受体原子和施体原子跃迁偶极矩的单位矢量; $G(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_D, \omega)$ 为光子并矢格林函数,其中 ω 为偶极子的辐射频率; $G_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_D, \omega)$ 为真空情况下的光子并矢格林函数。

由文献[30-31]可知,光子并矢格林函数可由经典点电偶极子的辐射场计算得到,即

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{d}}{\epsilon_0}, \quad (2)$$

式中: $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 为 \mathbf{r}' 处的点电偶极子 $\mathbf{p} = \mathbf{d} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 在 \mathbf{r} 处的辐射场,其中 $\delta(\cdot)$ 为 δ 函数; \mathbf{d} 为跃迁偶极矩。利用式(2),式(1)可写为

$$n_{\text{ETR}} = \frac{|n_A E_D(\mathbf{r}_A, \omega)|^2}{|n_A E_{D,0}(\mathbf{r}_A, \omega)|^2}, \quad (3)$$

式中: $E_D(\mathbf{r}_A, \omega)$ 为施体处的点电偶极子在受体处的辐射场; $E_{D,0}(\mathbf{r}_A, \omega)$ 为真空情况下施体处的点电偶极子

在受体处的辐射场。

对于单模情况,波导中的格林函数可由波导模式^[33]近似表示为

$$G_{\text{pl}}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_D, \omega) \approx \frac{i\omega\epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}_A^i) \otimes \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_D^i)}{2 \int_{S_\infty} dS \hat{z} (\mathbf{E}_t \times \mathbf{H}_t^*)} \exp(ik|z_A - z_D|), \quad (4)$$

式中: \otimes 为张量积; ϵ_0 为真空介电常数; $\mathbf{E}(\mathbf{r}_A^i)$ 为受体原子处的电场强度; $\mathbf{E}^*(\mathbf{r}_D^i)$ 为施体原子处的电场强度 $\mathbf{E}(\mathbf{r}_D^i)$ 的复共轭; \mathbf{E}_t 为波导二维截面的电场强度; \mathbf{H}_t^* 为波导二维截面的磁场强度 \mathbf{H}_t 的复共轭; S 为波导横截面积; S_∞ 为无限长波导的长度; \hat{z} 为沿着波导传输方向的矢量; z_A 为受体原子在波导传播方向的位置; z_D 为施体原子在波导传播方向的位置; $\mathbf{r}_A^i = [x_A \ y_A]$ 和 $\mathbf{r}_D^i = [x_D \ y_D]$ 分别为施体和受体的横向坐标; $k = k_r + ik_i = n_{\text{eff}} k_0$, 其中 n_{eff} 为波导模式的有效折射率, k_i 为 RET 衰减速度, $k_0 = \omega/c$ 为真空波数, c 为真空中的光速。

此时,根据真空光子格林函数的解析解^[28]和式(4),式(1)所示的 RET 增强可近似表示为

$$n_{\text{ETR}} = \left(\frac{2}{3} \right)^2 M_{\text{en}}^2 \exp(-2k_i|z_A - z_D|) (k_0 R)^2 \times \left[\left[1 + \frac{ik_0 R - 1}{(k_0 R)^2} \right] n_A n_D + \frac{3 - 3ik_0 R - (k_0 R)^2}{(k_0 R)^2} \cdot \frac{(n_A R)(n_D R)}{R^2} \right]^{-2}, \quad (5)$$

式中: $R = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_D$; $R = |R|$; M_{en} 为增强因子,其表达式为

$$M_{\text{en}} = \frac{3\pi\epsilon_0 c}{k_0^2} \left| \frac{n_A \mathbf{E}(\mathbf{r}_A^i) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_D^i) \mathbf{n}_D}{\int_{S_\infty} dS \mathbf{u}_z (\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*)} \right|, \quad (6)$$

式中: \mathbf{u}_z 为沿波导传输方向 (z) 的单位矢量。

由式(5)可知,RET 增强随着距离 $|z_A - z_D|$ 的增加呈指数衰减 $[\exp(-2k_i|z_A - z_D|)]$, 其衰减速度 k_i 与波导传输距离 L 成反比,即 $L = 1/(2k_i)$ 。

3 理论模型数值结果

3.1 波导中并矢格林函数求解及单模工作条件

为构造混合波导中的并矢格林函数,首先利用 COMSOL Multiphysics 的模式分析求解波导模式参数,并分析其特性。当 $h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$ 、 $h_{\text{Ag}} = 100 \text{ nm}$ 、 $h_{\text{SiO}_2} = 20 \text{ nm}$ 和 $W = 200 \text{ nm}$ 时,该波导只存在一个模式,其有效折射率为 $n_{\text{eff}} = 2.2423000 + i0.0023864$, 如图 2 所示。该波导模式的 $|E_y|$ 分量在二氧化硅空隙中取较大值,且几乎均匀分布,为该模式的主要场分量,远大于 $|E_x|$ 和 $|E_z|$ 。因此,对于该区域的量子点,若跃迁偶极矩的极化方向沿着 y 方向,则易于与该波导模式发生较强的耦合。在下文中,设施体和受体的跃迁偶极矩的单位矢量为 $\mathbf{n}_{A/D} = \hat{y}$ 。

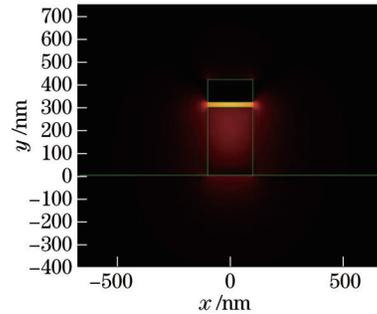


图 2 混合波导模式中主要场分量 $|E_y|$ 的分布示意图

Fig. 2 Distribution of main field component $|E_y|$ in hybrid waveguide mode

为研究该混合波导中单模近似格林函数[式(4)]的有效性,将其与 3D 数值结果进行对比。设施体和受体具有相同的横向坐标,即 $\mathbf{r}_A^i = [x_A \ y_A] = \mathbf{r}_D^i = [x_D \ y_D]$, 纵向距离为 $z = |z_A - z_D|$ 。图 3(a)、(b) 分别展示了格林函数的实部和虚部。对于格林函数的实部,如图 3(a) 所示,可以发现:当 $z \leq 2 \text{ nm}$ 时,2D 和 3D 的差别较大,这主要是因为当源点和场点相同时,格林函数的实部是发散的^[31];当 $z > 2 \text{ nm}$ 时,2D 近似格林函数与 3D 结果符合得较好。对于格林函数的虚部,如图 3(b) 所示,2D 近似格林函数与 3D 结果符合得较好。

综上所述,当 $z > 2 \text{ nm}$ 时,2D 近似方法能准确地计算单模波导中的光子并矢格林函数。其中, $\text{Re}(G)$ 为单模近似格林函数的实部, $\text{Im}(G)$ 和 $\text{Im}(G_0)$ 为单模近似格林函数和真空情况下单模近似格林函数的虚部。

由于 2D 近似格林函数方法[(4)式]只适用于单模情况,故需研究该波导承载单模传输所需的波导尺寸。首先,固定硅波导的高度为 $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$, 如图 4(a) 所示。可以发现,当 $W < 560 \text{ nm}$ 时,该波导中只存在一个模式。当硅波导的高度增大为 $h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$ 时,如

图 4(b) 所示,波导宽度需减小为 $W < 270 \text{ nm}$ 。由此可知,介质波导高度越大,承载单模传输所需的波导宽度越窄。

当固定硅波导的宽度为 $W = 100 \text{ nm}$ 时,波导高度 h_{Si} 对波导模式的影响如图 4(c) 所示。可以发现,当 $h_{\text{Si}} < 660 \text{ nm}$ 时,混合波导仅存在一个模式。当硅波导宽度增大为 $W = 300 \text{ nm}$ 时,如图 4(d) 所示,波导高度需减小为 $h_{\text{Si}} < 250 \text{ nm}$ 。结果表明,介质波导宽度越宽,承载单模传输所需的硅波导高度越小。

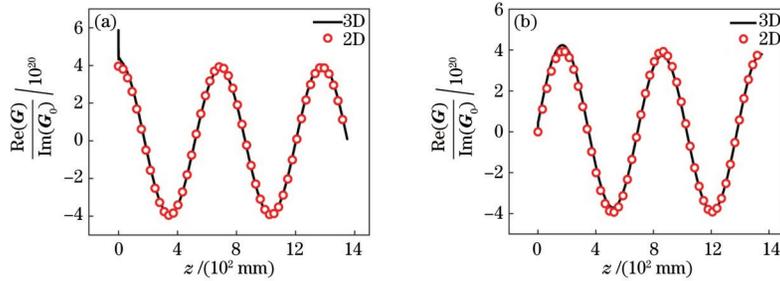


图 3 单模波导中并矢格林函数的实部和虚部。(a)实部;(b)虚部

Fig. 3 Real and imaginary parts of dyadic Green's function for single-mode waveguide. (a) Real part; (b) imaginary part

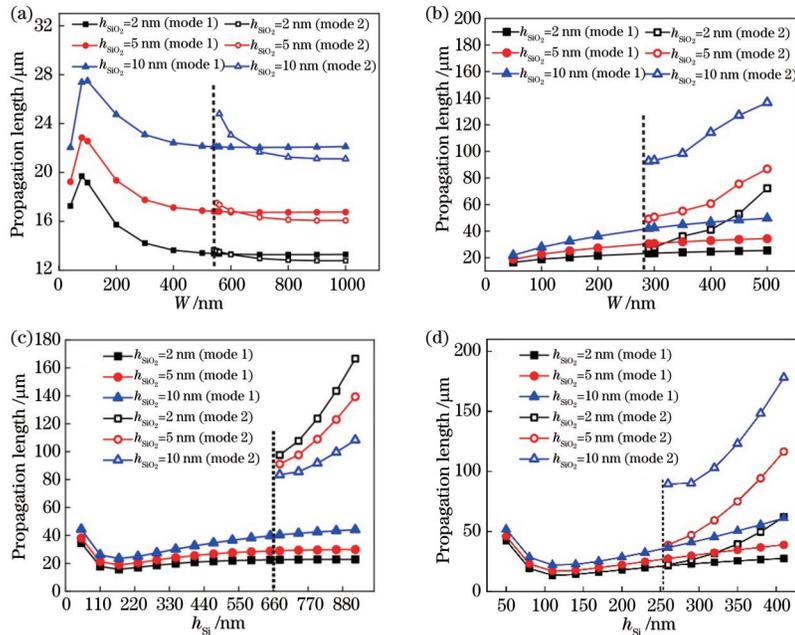


图 4 W 和 h_{Si} 对波导模式的影响。(a) 当 $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$ 时, W 对波导模式的影响; (b) 当 $h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$ 时, W 对波导模式的影响; (c) 当 $W = 100 \text{ nm}$ 时, h_{Si} 对波导模式的影响; (d) 当 $W = 300 \text{ nm}$ 时, h_{Si} 对波导模式的影响

Fig. 4 Effect of W and h_{Si} on waveguide modes. (a) Effect of W on waveguide modes when $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$; (b) effect of W on waveguide modes when $h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$; (c) effect of h_{Si} on waveguide modes when $W = 100 \text{ nm}$; (d) effect of h_{Si} on waveguide modes when $W = 300 \text{ nm}$

此外,从图 4 中还可以发现传播距离随尺寸的变化情况。随着波导宽度 W 的增大,当硅波导高度较小 ($h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$) 时,传播距离先增大后减小,如图 4(a) 所示。当硅波导高度较大 ($h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$) 时,随着波导宽度 W 的增大,传播距离一直在增大,如图 4(b) 所示。出现该现象的原因:当宽度较窄 ($W = 20 \text{ nm}$) 时,能流密度主要集中在金属表面附近的真空中,如图 5(a) 所

示,其分布与真空中金属纳米柱非常类似,如图 5(b) 所示,此时硅波导对模式起较小的微扰作用,传输模式主要为金属纳米柱的表面等离子激元模式;随着宽度的增加,损耗在减小,传播距离在变长,当宽度增大为 $W = 100 \text{ nm}$ 时,能流密度如图 5(c) ($h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$) 和图 5(d) ($h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$) 所示,能流密度逐渐过渡到主要集中在二氧化硅空隙和高介电常数的硅波导中。图 5

(e) 表示入射波能量从二氧化硅空隙和高介电常数的硅波导中传输所占的比例(区域内能流密度的积分比上总的能流)。对于较高($h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$)的硅波导,随着宽度的增加,该比例急剧增大,当宽度增大到 120 nm 时,该比例超过 55% ,混合传输模式由主要为表面等离子激元模式逐渐向介质波导传输模式过渡,损

耗逐渐减小,传播距离逐渐增大。然而,对于高度较小($h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$)的硅波导,由于衍射极限的存在,硅波导束缚电磁场的能力较弱,故二氧化硅衬底和空气中的能流权重较大,如图 5(f) 所示,这一现象非常类似于文献[35]所述的硅基型波导,传播距离随宽度 W 的增大而减小。

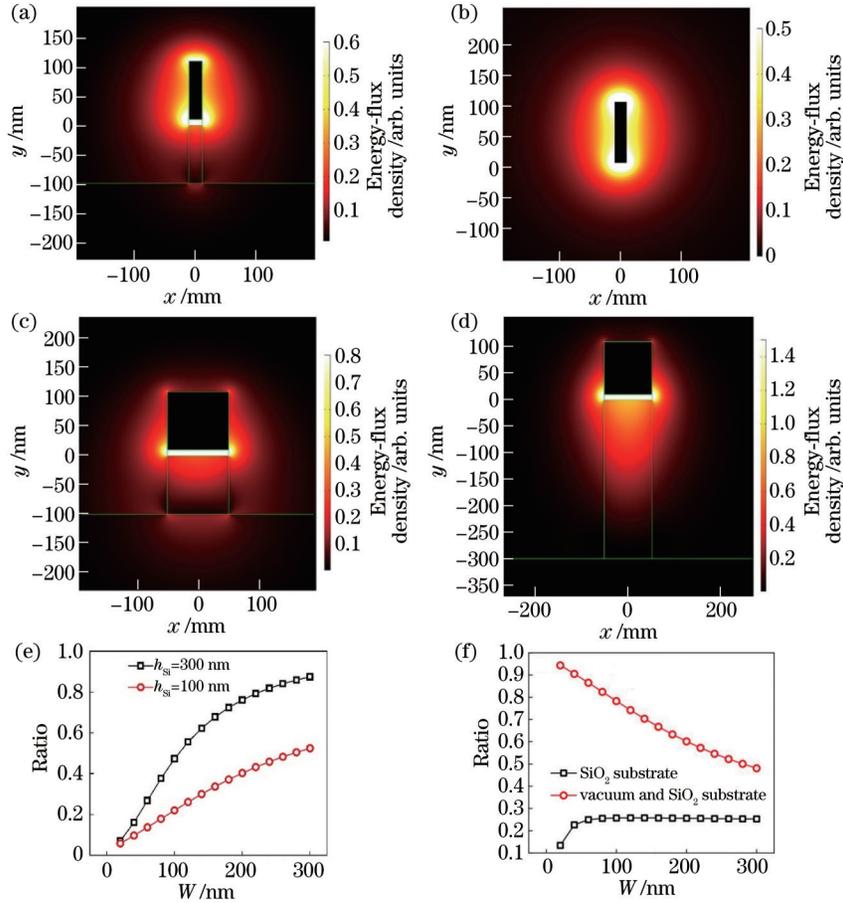


图 5 能流密度分布示意图和能量通过波导不同区域传输所占的比例。(a) $W = 20 \text{ nm}$ 时混合波导中的能流密度分布;(b)真空中金属纳米柱的能流密度分布;(c) $W = 100 \text{ nm}$ 、 $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$ 时的能流密度分布;(d) $W = 100 \text{ nm}$ 、 $h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$ 时的能流密度分布;(e)能量从二氧化硅空隙和硅波导中传输所占的比例;(f)当 $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$ 时,二氧化硅衬底和真空中的能流所占的比例

Fig. 5 Schematic diagram of energy-flux density distribution and ratio of energy transferred through different parts of waveguide. (a) Energy-flux density distribution of hybrid waveguide when $W = 20 \text{ nm}$; (b) energy-flux density distribution of isolated metal nanorod in vacuum; (c) energy-flux density distribution when $W = 100 \text{ nm}$ and $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$; (d) energy-flux density distribution when $W = 100 \text{ nm}$ and $h_{\text{Si}} = 300 \text{ nm}$; (e) ratio of energy transferred through low refractive index gap and vacuum; (f) ratio of energy transferred through substrate and vacuum when $h_{\text{Si}} = 100 \text{ nm}$

如图 4(c)、(d) 所示,当宽度固定时,随着硅波导高度 h_{Si} 的增大,传播距离先急剧减小后缓慢增大。图 6 展示了当宽度为 $W = 300 \text{ nm}$ 时,入射电磁能量在波导结构不同区域中传输的比例。随着硅波导高度的增大,高折射率硅束缚电磁场的能力逐渐变强,入射电磁能量通过二氧化硅基底传输的比例急剧减小,通过高折射率的硅波导传输的比例急剧增大,通过金属周围的真空和二氧化硅空隙的传输比例先急剧增大后缓慢减小,进而导致传播距离先急剧减小后缓慢增大。当硅波导高度增大到 120 nm 左右时,金属周围的真空和二氧化硅空隙中的传输比例增大到最大,达到 52% 左

右,此时传播距离接近最小。随着硅波导的高度进一步增大,能量在高折射率的硅波导中传输的比例增大,损耗减小,传播距离增大。

图 6 所示结果表明:介质波导越高,硅波导越高,承载单模传输所需的宽度越窄;波导越宽,承载单模传输所需的硅波导越矮。在单模情况下,硅波导的高度对传播距离有较大的影响:对于较矮的硅波导,随着宽度的增大,传播距离先增大后减小;对于较高的硅波导,随着宽度的增大,传播距离一直在增大。当宽度固定时,随着硅波导高度 h_{Si} 的增大,传播距离 L 先急剧减小后缓慢增大。

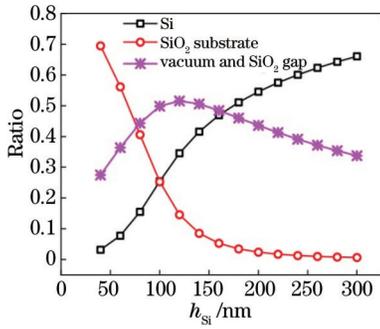


图 6 入射电磁能量在波导结构不同区域中传输的比例
Fig. 6 Ratio of incident electromagnetic energy transferred through different parts of waveguide

由式(5)可知,RET增强取决于增强因子 M_{en} 和传播距离 L 。 M_{en} 为波导截面上的位置函数,用 $M_{en,max}$ 表

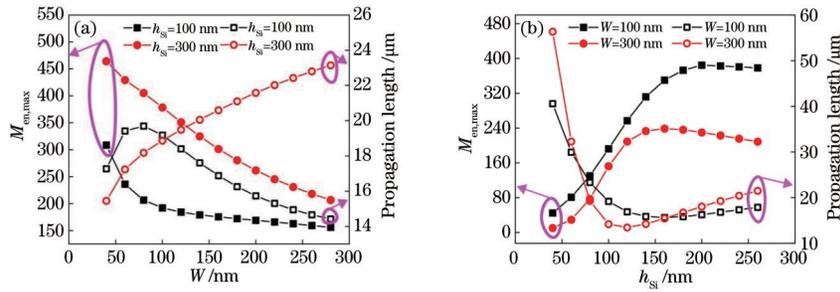


图 7 $M_{en,max}$ 和 L 随 h_{Si} 与 W 的变化。(a) 不同 h_{Si} 下 $M_{en,max}$ 和 L 随 W 的变化;(b) 不同 W 下 $M_{en,max}$ 和 L 随 h_{Si} 的变化
Fig. 7 $M_{en,max}$ and L varying with h_{Si} and W . (a) $M_{en,max}$ and L varying with W under different h_{Si} ; (b) $M_{en,max}$ and L varying with h_{Si} under different W

图 7 所示结果表明:波导的宽度越窄, $M_{en,max}$ 越大;在相同宽度下,随波导高度的增大, $M_{en,max}$ 先急剧增大后缓慢减小;当 $W = 100$ nm 时, $h_{Si} = 200$ nm 左右可得到最大的增强因子 $M_{en,max}$ 。

接着,研究低折射率空隙(h_{SiO_2})对最大增强因子 $M_{en,max}$ 和传播距离 L 的影响。图 8(a) 为硅波导高度为 $h_{Si} = 200$ nm 时的结果,随着低折射率空隙的增大, $M_{en,max}$ 急剧减小,而传播距离几乎呈线性增大趋势。对于较窄 ($W = 100$ nm) 的波导,当 $h_{SiO_2} = 20$ nm 时,最大的共振能量增强因子为 $M_{en,max} = 90.8$,传播距离

为 $L = 31.2 \mu\text{m}$ 。接下来,研究波导宽度 W 和高度 h_{Si} 对 M_{en} 和传播距离 L 的影响。

如图 7(a) 所示,在 $h_{Si} = 100$ nm 和 $h_{Si} = 300$ nm 的情况下, $M_{en,max}$ 均随波导宽度的增大而减小。相比 $h_{Si} = 100$ nm 的情况, $h_{Si} = 300$ nm 时的 $M_{en,max}$ 更大。对于传播距离, $h_{Si} = 100$ nm (空心矩形) 和 $h_{Si} = 300$ nm (空心圆圈) 的两条曲线相交于 $W = 100$ nm 附近,对于较窄的波导宽度,即在交点的左侧,传播距离差别不大。图 7(b) 展示了不同波导宽度下 $M_{en,max}$ 随高度的变化情况。相比 $W = 300$ nm 的情况, $W = 100$ nm 时的 $M_{en,max}$ 更大,且随着硅波导高度的增大, $M_{en,max}$ 先急剧增大后缓慢减小。对于 $W = 100$ nm 的波导,当 $h_{Si} = 200$ nm 左右时,可以得到最大的 $M_{en,max}$ 。对于传播距离,在较宽的波导高度范围 ($60 \text{ nm} < h_{Si} < 260 \text{ nm}$) 内, $W = 100$ nm (空心矩形) 和 $W = 300$ nm (空心圆圈) 之间的差别较小。

为 $L = 31.2 \mu\text{m}$ 。当硅波导高度增大到 $h_{Si} = 300$ nm 时,如图 8(b) 所示,此时最大的共振能量增强因子变为 $M_{en,max} = 93.7$,传播距离变为 $L = 36.2 \mu\text{m}$ 。在两种硅波导高度下, $M_{en,max}$ 相差不大,但传播距离差别相对较大 ($5.1 \mu\text{m}$),这是因为随着硅波导高度的增加,更多的能量被约束在硅层中,传输模式从表面等离激元模式向硅波导模式过渡。图 8 所示结果表明:低折射率空隙越小,共振能量增强因子越大,传播距离越小;在相同空隙大小的情况下,硅波导越高,传播距离越长。

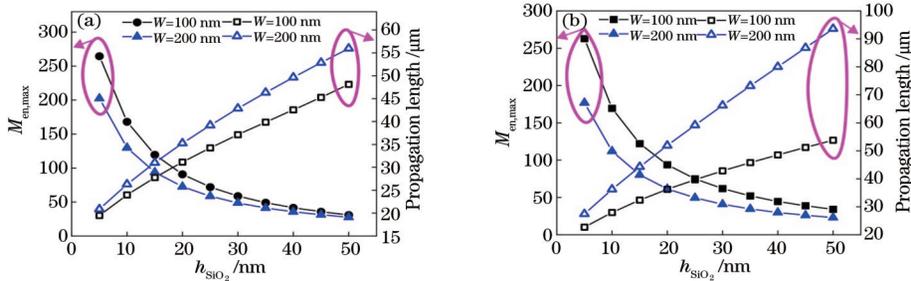


图 8 不同 h_{Si} 下 $M_{en,max}$ 和 L 随 h_{SiO_2} 的变化特性。(a) $h_{Si} = 200$ nm;(b) $h_{Si} = 300$ nm
Fig. 8 $M_{en,max}$ and L varying with h_{SiO_2} under different h_{Si} . (a) $h_{Si} = 200$ nm; (b) $h_{Si} = 300$ nm

3.2 共振能量转移增强

本节研究单模波导中的 RET 增强特性。首先,验证单模波导中 2D 快速求解方法的准确性。根据 3.1 节的分析,当 $W = 100 \text{ nm}$, 硅波导高度为 $h_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$ 左右时,能得到最大的增强因子 $M_{\text{en,max}}$,进而选用该宽度和高度。低折射率空隙厚度可调节 $M_{\text{en,max}}$ 的大小和传播距离 L , 设 $h_{\text{SiO}_2} = 10 \text{ nm}$ 。图 9(a) 展示了 RET 增强随量子点间距离的变化特性。可以发现, 2D 和 3D 结果符合得很好。接下来,借助 2D 快速求解方法研究不同尺寸单模波导中的 RET 增强特性。如图 9(b) 所示, 当 $W = 100 \text{ nm}$, $h_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$ 时, 二氧化硅空隙厚度越小, 共振能量增强最大值越大, 当 $h_{\text{SiO}_2} = 2 \text{ nm}$ 时, 最大为 $n_{\text{ETR}} = 1.5 \times 10^8$, 而当 $h_{\text{SiO}_2} = 10 \text{ nm}$ 时, 最大为 $n_{\text{ETR}} = 6.4 \times 10^7$ 。随着施体和受体间距离的增大, RET 增强先增大后减小, 二氧化硅空隙越小, n_{ETR} 随距离增加得越快, 其最大值越大, 且取最大值所对应的距离 z 也越小。这主要是因为由式(5)可知, 当 $n_{\text{A/D}} = \hat{y}$ 且 $R = z\hat{z}$ 时, 共振能量增强可进一步化简为 $n_{\text{ETR}} = (2/3)^2 M_{\text{en}}^2 \exp(-2k_{\parallel}|z|) (k_0 z)^2 [1 - (k_0 z)^{-2} + (k_0 z)^{-4}]^{-1}$ 。当

$k_0 z \ll 1$ 时, $n_{\text{ETR}} \approx (2/3)^2 M_{\text{en}}^2 \exp(-z/L) (k_0 z)^6$, 此时若 $z \ll 6L$, 则 n_{ETR} 随 z 的增大而急剧增大。当 $k_0 z \gg 1$ 时, $n_{\text{ETR}} \approx (2/3)^2 M_{\text{en}}^2 \exp(-z/L) (k_0 z)^2$, 此时若 $z \leq 2L$, 则 n_{ETR} 随 z 的增大而增大, 若 $z \geq 2L$, 则 n_{ETR} 随 z 的增大而减小, 且当 $z \rightarrow +\infty$ 时, $n_{\text{ETR}} \rightarrow 0$, n_{ETR} 在 $z = 2L$ 处取极大值。对于图 9(b) 中 $h_{\text{SiO}_2} = 2 \text{ nm}$ 的波导, 传播距离为 $L \approx 18 \mu\text{m}$, 而 n_{ETR} 在 $z = 33 \mu\text{m}$ 附近处取得极大值, 此时 z 约为传播距离的 2 倍。因此, 随着二氧化硅空隙厚度的增大, 传播距离在变长, n_{ETR} 取最大值时所对应的距离 z 也在增大。

固定二氧化硅空隙厚度为 $h_{\text{SiO}_2} = 2 \text{ nm}$, 当硅波导高度为 $h_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$ 时, 不同宽度下的共振能量增强如图 9(c) 所示。结果表明, 波导越窄, 共振能量增强最大值越大。当 $W = 50 \text{ nm}$ 时, 最大的共振能量增强为 $n_{\text{ETR}} = 1.7 \times 10^8$, 而当 $W = 200 \text{ nm}$ 时, 最大的共振能量增强降为 $n_{\text{ETR}} = 1.0 \times 10^8$ 。图 9(d) 展示了当波导宽度为 $W = 100 \text{ nm}$ 时, 不同高度硅波导中 RET 增强随着施体和受体间距离的变化情况。可以发现, 硅波导高度越大, 最大的共振能量增强越大。

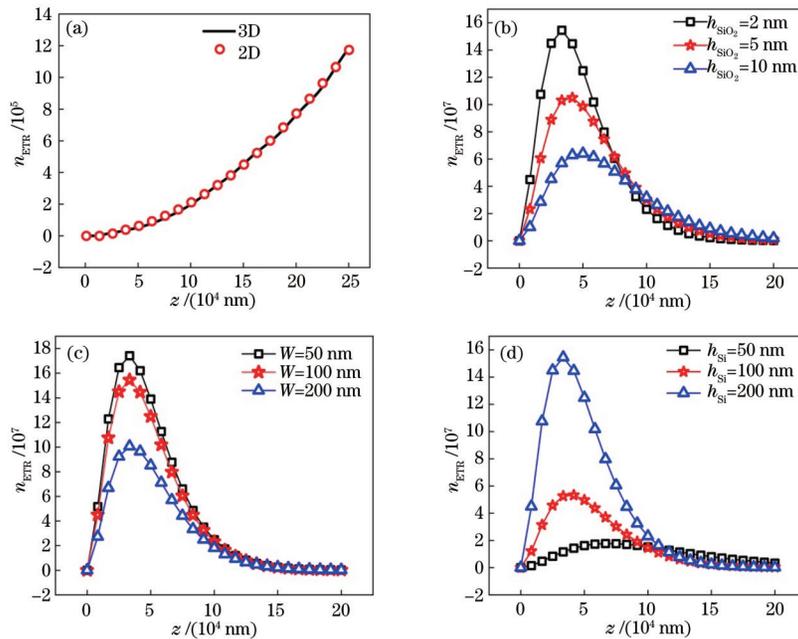


图 9 RET 增强随施体原子 $r_{\text{D}} = [0 \ 0 \ 0]$ 和受体原子 $r_{\text{A}} = [0 \ 0 \ z]$ 间距离 z 的变化特性。(a) 3D 和 2D 数值结果; (b) h_{SiO_2} 对 RET 增强的影响; (c) W 对 RET 增强的影响; (d) h_{Si} 对 RET 增强的影响

Fig. 9 RET enhancement varying with distance z between donor atom $r_{\text{D}} = [0 \ 0 \ 0]$ and acceptor atom $r_{\text{A}} = [0 \ 0 \ z]$.

(a) Numerical results obtained by 3D and 2D methods; (b) effect of h_{SiO_2} on RET enhancement; (c) effect of W on RET enhancement; (d) effect of h_{Si} on RET enhancement

4 结 论

研究混合波导中两个二能级原子间的 RET 增强特性。在单模波导中, 首先证明光子并矢格林函数可由波导模构造得到, 该方法将 3D 问题简化为 2D 问题, 且快速准确。借助该光子并矢格林函数的求解方法, 可方便研究各种不同材料和截面形状的单模波导中的

RET、自发辐射、能级移动和量子纠缠等物理问题。在 1550 nm 波长下, 系统地研究波导尺寸对波导模式、传输距离和最大 RET 增强的影响。结果表明: 1) 该混合波导单模工作情况依赖于介质波导宽度和高度, 硅波导高度越大, 承载单模传输所需宽度越窄, 波导越窄, 承载单模传输所需硅波导越高; 2) 二氧化硅空隙越小, RET 增强因子越大, 而传播距离越小; 3) 硅波导的

高度对传播距离有较大的影响,对于较矮的硅波导,随宽度的增大,传播距离先增大后减小,而对于较高的硅波导,传播距离一直在增大;4)当宽度固定时,随硅波导高度 h_{Si} 的增大,传播距离先急剧减小后缓慢增大;5)波导越窄, $M_{\text{en,max}}$ 越大,在相同宽度下,随硅波导高度的增大, $M_{\text{en,max}}$ 先急剧增大后缓慢减小,当 $W = 100 \text{ nm}$, $h_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$ 左右时,可以得到最大的增强因子 $M_{\text{en,max}}$;6)随施体和受体间距离的增大,RET 增强先增大后减小,约在 2 倍传播距离处取得最大值;7)当硅波导足够高时,二氧化硅空隙越小,波导宽度越窄,最大 RET 增强越大;8)当 $h_{\text{SiO}_2} = 2 \text{ nm}$ 、 $W = 50 \text{ nm}$ 和 $h_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$ 时,RET 增强能达到 $n_{\text{ETR}} = 1.7 \times 10^8$ 。通过优化波导结构,这一增强还可进一步提高。例如,根据避雷针效应,在低折射率空隙中引入小曲率半径的楔形凸起,可产生极端增强的模场。这些研究表明,本团队可在人工结构中实现远距离原子间的强耦合,这对量子纠缠态的制备、远距离 RET 探针的设计等具有重要的指导作用。此外,本研究工作还可进一步拓展到研究可极化介质粒子间、蛋白质分子与表面等离激元纳米粒子、染料分子间和半导体量子点间的 RET。

参 考 文 献

- [1] Rao V S C M, Hughes S. Single quantum dot spontaneous emission in a finite-size photonic crystal waveguide: proposal for an efficient "on chip" single photon gun[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99(19): 193901.
- [2] Goban A, Hung C L, Hood J D, et al. Superradiance for atoms trapped along a photonic crystal waveguide[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(6): 063601.
- [3] 虞若兰, 李军, 陈伟伟, 等. 基于交叉相位调制效应的硅基全光 Fredkin 门[J]. *光学学报*, 2021, 41(9): 0912001.
Yu R L, Li J, Chen W W, et al. Silicon-based all-optical Fredkin gate using cross-phase modulation effect[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(9): 0913001.
- [4] 何润秋, 梁国华, 刘辉, 等. 弯曲波导上的光学调控与应用[J]. *光学学报*, 2021, 41(8): 0823002.
He R Q, Liang G H, Liu H, et al. Optical control and applications on curved waveguides[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(8): 0823002.
- [5] 李雪梅, 张明达, 朱小冬, 等. 光通信波段中基于谷霍尔效应的单向波导[J]. *光学学报*, 2021, 41(19): 1913001.
Li X M, Zhang M D, Zhu X D, et al. Unidirectional wave guide based on valley Hall effect in optical communication band[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(19): 1913001.
- [6] Yang X G, Bao D H, Li B J. Plasmon-mediated whispering-gallery-mode emission from quantum-dot-coated gold nanosphere[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, 119(45): 25476-25481.
- [7] Liu R M, Zhou Z K, Yu Y C, et al. Strong light-matter interactions in single open plasmonic nanocavities at the quantum optics limit[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 118(23): 237401.
- [8] Tian M, Huang Y G, Wen S S, et al. Level shift and decay dynamics of a quantum emitter around a plasmonic nanostructure[J]. *Physical Review A*, 2019, 99(5): 053844.
- [9] Wen S S, Huang Y G, Wang X Y, et al. Bound state and non-Markovian dynamics of a quantum emitter around a surface plasmonic nanostructure[J]. *Optics Express*, 2020, 28(5): 6469-6489.
- [10] Yang X G, Xu R, Bao D H, et al. Gold nanorod-enhanced light emission in quantum-dot-doped polymer nanofibers[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2014, 6(15): 11846-11850.
- [11] Yang X G, Li Y C, Lou Z Z, et al. Optical energy transfer from photonic nanowire to plasmonic nanowire [J]. *ACS Applied Energy Materials*, 2018, 1(2): 278-283.
- [12] Dai D X, He S L. A silicon-based hybrid plasmonic waveguide with a metal cap for a nano-scale light confinement[J]. *Optics Express*, 2009, 17(19): 16646-16653.
- [13] 许丹, 黄勇刚, 王小云, 等. 低损耗超小模面积杂化表面等离激元波导[J]. *光学学报*, 2015, 35(6): 0623003.
Xu D, Huang Y G, Wang X Y, et al. Hybrid surface plasmon polariton waveguide of low-loss and ultra-small modal area[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(6): 0623003.
- [14] Dung H T, Knöll L, Welsch D G. Intermolecular energy transfer in the presence of dispersing and absorbing media [J]. *Physical Review A*, 2002, 65(4): 043813.
- [15] Yu Y C, Liu J M, Jin C J, et al. Plasmon-mediated resonance energy transfer by metallic nanorods[J]. *Nanoscale Research Letters*, 2013, 8(1): 209.
- [16] Engel G S, Calhoun T R, Read E L, et al. Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems[J]. *Nature*, 2007, 446(7137): 782-786.
- [17] Lakowicz J R. Radiative decay engineering: biophysical and biomedical applications[J]. *Analytical Biochemistry*, 2001, 298(1): 1-24.
- [18] Wang L Y, Yan R X, Huo Z Y, et al. Fluorescence resonant energy transfer biosensor based on upconversion-luminescent nanoparticles[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2005, 44(37): 6054-6057.
- [19] Nellore V, Xi S, Dwyer C. Self-assembled resonance energy transfer keys for secure communication over classical channels[J]. *ACS Nano*, 2015, 9(12): 11840-11848.
- [20] Hopmeier M, Guss W, Deussen M, et al. Enhanced dipole-dipole interaction in a polymer microcavity[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(20): 4118-4121.
- [21] Andrew P, Barnes W L. Förster energy transfer in an optical microcavity[J]. *Science*, 2000, 290(5492): 785-788.
- [22] Huang Y G, Chen G Y, Jin C J, et al. Dipole-dipole interaction in a photonic crystal nanocavity[J]. *Physical Review A*, 2012, 85(5): 053827.

- [23] Lakowicz J R, Józef K, Shen Y B, et al. Effects of metallic silver particles on resonance energy transfer between fluorophores bound to DNA[J]. *Journal of Fluorescence*, 2003, 13(1): 69-77.
- [24] Xu D, Wang X Y, Huang Y G, et al. Position-dependent property of resonant dipole: dipole interaction mediated by localized surface plasmon of an Ag nanosphere[J]. *Chinese Physics B*, 2015, 24(2): 024205.
- [25] Shokoufi N, Heshi S V. Enhancement of photo-thermal lens of fluorescence molecules by fluorescence resonance energy transfer mechanism[J]. *Journal of Fluorescence*, 2021, 31(2): 587-593.
- [26] Fiscelli G, Rizzuto L, Passante R. Resonance energy transfer between two atoms in a conducting cylindrical waveguide[J]. *Physical Review A*, 2018, 98(1): 013849.
- [27] Martín-Cano D, Martín-Moreno L, García-Vidal F J, et al. Resonance energy transfer and superradiance mediated by plasmonic nanowaveguides[J]. *Nano Letters*, 2010, 10(8): 3129-3134.
- [28] Tai C T. Dyadic Green's functions in electromagnetic theory[M]. San Francisco: IEEE Press, 1994.
- [29] Zhao Y J, Tian M, Wang X Y, et al. Quasi-static method and finite element method for obtaining the modifications of the spontaneous emission rate and energy level shift near a plasmonic nanostructure[J]. *Optics Express*, 2018, 26(2): 1390-1401.
- [30] Tian M, Huang Y G, Wen S S, et al. Finite-element method for obtaining the regularized photon Green function in lossy material[J]. *EPL*, 2019, 126(1): 13001.
- [31] 赵运进, 田锰, 黄勇刚, 等. 基于有限元法的光子并矢格林函数重整化及其在自发辐射率和能级移动研究中的应用[J]. *物理学报*, 2018, 67(19): 193102.
- Zhao Y J, Tian M, Huang Y G, et al. Renormalization of photon dyadic Green function by finite element method and its applications in the study of spontaneous emission rate and energy level shift[J]. *Acta Physica Sinica*, 2018, 67(19): 193102.
- [32] Wen S S, Tian M, Yang H, et al. Effect of spatially nonlocal versus local optical response of a gold nanorod on modification of the spontaneous emission[J]. *Chinese Physics B*, 2021, 30(2): 027801.
- [33] Martín-Cano D, González-Tudela A, Martín-Moreno L, et al. Dissipation-driven generation of two-qubit entanglement mediated by plasmonic waveguides[J]. *Physical Review B*, 2011, 84(23): 235306.
- [34] Novotny L, Hecht B. Principles of nano-optics[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- [35] 赵丽美, 关建飞. 硅基结构混合等离子体波导模式特性的数值研究[J]. *红外与激光工程*, 2015, 44(4): 1329-1334.
- Zhao L M, Guan J F. Numerical study on the modal characteristics of silicon-based hybrid plasmonic waveguides[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(4): 1329-1334.