



بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران. ۱۱-۹ بهمن ۱۳۹۷



## شبیه سازی انتشار باریکه گاوسی در داخل بلور فوتونی یک بعدی حاوی تک لایه های مولیبدن دی سولفاید ( $\text{MoS}_2$ )

میثم شیری<sup>۱</sup>، امیر مدنی<sup>۱</sup> و صمد روشن انتظار<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه مهندسی اپتیک و لیزر، دانشگاه بناب، بناب، آذربایجان شرقی  
<sup>۲</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز، آذربایجان شرقی

چکیده - در این مقاله انتشار باریکه گاوسی و موج تخت در داخل بلور فوتونی یک بعدی حاوی تک لایه های مولیبدن دی سولفاید شبیه سازی شده و مورد بررسی قرار گرفته است. ابتدا طیف تراگسیل بلور فوتونی در ناحیه فرکانسی مرئی و فرابنفش نزدیک با استفاده از روش ماتریس انتقال برای دو قطبش TE و TM مطالعه شده است. بلور فوتونی معرفی شده متشکل از نانو لایه های  $\text{MoS}_2$  است که بصورت تناوبی توسط لایه های دی الکتریک از هم جدا شده اند. در ادامه پروفایل میدان الکتریکی موج تخت در داخل بلور فوتونی برای طول موج های انتخاب شده از داخل و لبه گاف فوتونی رسم شده است. در پایان برای مطالعه بهتر و واقعی رفتار میدان الکتریکی در داخل بلور فوتونی پروفایل میدان الکتریکی یک باریکه گاوسی با استفاده از تبدیلات فوریه شبیه سازی شده است که انتشار باریکه در داخل ساختار را نشان می دهد.

کلیدواژه- بلور فوتونی یک بعدی، مولیبدن دی سولفاید ( $\text{MoS}_2$ )، طیف تراگسیل، پروفایل میدان الکتریکی، باریکه گاوسی.

## Numerical simulation of a Gaussian beam propagation inside a one-dimensional photonic crystal containing $\text{MoS}_2$ monolayers

Meisam Shiri<sup>1</sup>, Amir Madani<sup>1</sup>, Samad Roshan Entezar<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Laser and Optical Engineering, University of Bonab, Bonab

<sup>2</sup>Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz

E-Mails: [meisamshiri1993@gmail.com](mailto:meisamshiri1993@gmail.com) (M.S.); [a-madani@bonabu.ac.ir](mailto:a-madani@bonabu.ac.ir) (A.M.); [s-roshan@bonabu.ac.ir](mailto:s-roshan@bonabu.ac.ir) (S.R.E.)

Abstract- In this paper we have performed a numerical simulation which represents the propagation of a plane wave and a Gaussian beam at the outside and inside of a one-dimensional photonic crystal (1DPC) containing  $\text{MoS}_2$  layers. At first, the transmission spectrum of the 1DPC for the TE and TM polarized waves have been studied in the visible and UV regions using the transfer matrix method. The introduced PC is made of  $\text{MoS}_2$  monolayers which are alternately separated by dielectric slabs. Besides, the electric field amplitude of a plane wave at the PC has been plotted for wavelength which is selected from inside and the edge of the band gap. Finally, for better understanding of the electric field distribution inside the 1DPC, the numerical simulation of a Gaussian beam propagation have been performed using the Fourier transformation technique.

Keywords: one-dimensional photonic crystal,  $\text{MoS}_2$ , transmission spectrum, electric field profile, Gaussian beam

## مقدمه

مطالعه انتشار امواج الکترومغناطیسی و بررسی ویژگی های تابشی آنها از موضوع های جالب و کاربردی فیزیک و فوتونیک محسوب می شود که کمک شایانی به طراحی بلور های فوتونی، کنترل نور در داخل ساختار و غیره می کند. بلورهای فوتونی یکی از ابزار های شناخته شده کنترل نور محسوب می شوند که به طور ساده می توان یک محیط با خواص اپتیکی متناوب تعریف کرد. مهم ترین مشخصه این مواد وجود محدوده فرکانسی ممنوعه یا گاف فوتونی است [۱]. تا به حال در ساخت بلور های فوتونی از مواد گوناگونی، به عنوان مثال دی الکتریک ها، فلزات، نیم رساناها و ... استفاده شده است که در دهه گذشته تحقیقات و توجهات زیادی روی مواد دو بعدی از قبیل گرافن، MoS<sub>2</sub> و ترکیبات مشابه انجام شده است [۲].

MoS<sub>2</sub> به عنوان یک نیم رسانای دو بعدی با ضخامت اتمی است که یکی از معروف ترین اعضای خانواده مواد لایه ای و اندروالسی اند. اگر از بالا به MoS<sub>2</sub> نگاه کنیم ساختاری لانه زنبوری را مشاهده می کنیم [۳]. ویژگی مهم این ماده قابل تنظیم بودن ضریب دی الکتریک توسط ولتاژ گیت و تغییرات دما است. تغییر گاف نواری از حالت غیر مستقیم ۱/۲ eV در چند لایه به حالت مستقیم ۱/۹ eV در تک لایه یکی دیگر از مزایای این ماده است که امکان ساخت سوئیچ های الکترواپتیکی را فراهم می کند. در کنار این ویژگی ها ضخامت هر لایه MoS<sub>2</sub>، ۰/۶۵ nm است [۴].

در این مقاله سعی شده است ابتدا با استفاده از روش ماتریس انتقال طیف تراگسیل بلور فوتونی یک بعدی حاوی تک لایه های MoS<sub>2</sub> بررسی شود. در ادامه نیز پروفایل میدان الکتریکی در داخل بلور فوتونی برای موج تخت و باریکه گاوسی شبیه سازی شود. فرض شده است که تک لایه های MoS<sub>2</sub> میان لایه های دی الکتریک سازنده بلور جاسازی شده اند.

## معرفی ساختار و محاسبات تئوری

ساختار معرفی شده یک ساختار یک بعدی حاوی تک لایه های MoS<sub>2</sub> است که این لایه ها مابین لایه های دی الکتریک، دی اکسید سیلیکون (SiO<sub>2</sub>) و پلی متیل متاکریلات (PMMA) به صورت SiO<sub>2</sub> / MoS<sub>2</sub> / PMMA / MoS<sub>2</sub> در کنار هم قرار گرفته اند که با آرایش تکرار شونده این سلول چهار لایه ای N=۱۵ مرتبه تکرار شده است (شکل ۱). لایه ها در موازات صفحه (y-x) بوده و محور z عمود بر لایه ها قرار گرفته است.

$$d_{MoS_2} = 0.65nm, d_{SiO_2} = 75nm, d_{PMMA} = 75nm$$

با توجه به مرجع [۵] ضریب شکست SiO<sub>2</sub> و مرجع [۶] ضریب شکست PMMA به صورت روابط زیر بیان می شود. به دلیل تاثیر ناچیز تغییر طول موج بر ضریب شکست دو دی الکتریک، پاشندگی در ساختار مطرح نمی شود و برای بیان صحیح از روابط زیر استفاده شده است.

$$\left\{ \begin{aligned} n_{SiO_2}(\lambda) &= \left( 1 + \frac{0.6962\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0684^2} + \frac{0.4080\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1162^2} + \frac{0.8975\lambda^2}{\lambda^2 - 9.8962^2} \right)^{1/2} \\ n_{PMMA}(\lambda) &= \left( 1 + \frac{0.99654\lambda^2}{\lambda^2 - 0.00787^2} + \frac{0.18964\lambda^2}{\lambda^2 - 0.02191^2} + \frac{0.00411\lambda^2}{\lambda^2 - 3.85727^2} \right)^{1/2} \end{aligned} \right. \quad (1)$$

ضریب شکست MoS<sub>2</sub> بصورت رابطه (۲) محاسبه می شود.

$$n_{MoS_2}(\lambda) = \sqrt{\epsilon_{MoS_2}} \quad (2)$$

در این رابطه، برای ضریب دی الکتریک وابسته به طول موج MoS<sub>2</sub> از مدل hybrid Lorentz-Drude-Gaussian ارائه شده در مرجع [۷] استفاده شده است که به صورت رابطه (۳) بیان می شود.

$$\left\{ \begin{aligned} \epsilon_c^{LD} &= \epsilon_\infty + \sum_{j=0}^5 \frac{a_j \omega_p^2}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega_j} \\ \epsilon_c^G &= \epsilon_r^G + i\epsilon_i^G \left\{ \begin{aligned} \epsilon_i^G(\omega) &= \alpha \exp\left(-\frac{(\hbar\omega - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \epsilon_r^G(\omega) &= -\frac{1}{\pi} pv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_i^G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \end{aligned} \right. \end{aligned} \right. \quad (3)$$

$$\begin{cases} E_r(k_x) = rE(k_x) \\ E_t(k_x) = tE(k_x) \end{cases} \quad (۸)$$

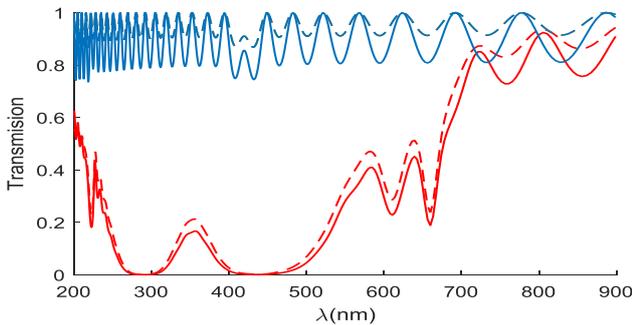
سپس با استفاده از تبدیلات فوریه معکوس باریکه گاوسی خروجی و بازتابی را محاسبه نمود.



شکل ۱: ساختار بلور فوتونی یک بعدی حاوی مولیبدن دی سولفاید.

### نتایج و بحث

شبیه سازی انتشار میدان الکتریکی در داخل ساختار مستلزم معرفی طیف تراگسیل و ضرایب عبور و بازتاب است. ابتدا ضریب دی الکتریک وابسته به طول موج Lorentz-Drude-Gaussian با MoS<sub>2</sub> بهره گیری از مدل محاسبه شده است. طیف تراگسیل بلور فوتونی ارائه شده، تحت تابش  $\theta=30^\circ$  برای دو قطبش TE و TM در شکل ۲ رسم شده است. به دلیل اختلاف کم ضریب شکست دو دی الکتریک گاف براگ (گاف ساختاری) نداریم، فقط حضور MoS<sub>2</sub> باعث ایجاد دو گاف فوتونی در حوالی طول موج های ۲۸۹ nm و ۴۴۳ nm شده است که در شکل زیر قابل مشاهده است.



شکل ۲: طیف تراگسیل بلور فوتونی بدون MoS<sub>2</sub> (آبی)، حاوی MoS<sub>2</sub> (قرمز)، برای قطبش TE (خط) و قطبش TM (خط چین).

با استناد به طیف تراگسیل شکل ۲ و محاسبه ضریب بازتاب و عبور ساختار، پروفایل میدان الکتریکی قطبش

فرض شده است موج تختی از هوا با زاویه  $\theta$  نسبت به خط عمود بر سطح ساختار به بلور فوتونی تابیده شود، تراگسیل ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال بصورت زیر محاسبه می شود [۸].

$$T = \left| \frac{2q_0}{(q_0 M_{11} + q_t M_{22}) - (M_{21} + q_0 q_t M_{12})} \right|^2 \quad (۴)$$

$M_{11}, M_{12}, M_{21}, M_{22}$  مولفه های ماتریس انتقال کل ساختار و  $M_{N\text{-unitsell}} = (M_S \times M_M \times M_P \times M_M)^N$  است. ماتریس های انتقال  $M_j$  میدان ها را در دو نقطه  $z$  و  $z+dz$  در هر لایه را توسط رابطه زیر به هم مرتبط می کنند.

$$M_j = \begin{pmatrix} \cos(k_{z_j} d_j) & \frac{i}{q_0} \sin(k_{z_j} d_j) \\ iq_j \sin(k_{z_j} d_j) & \cos(k_{z_j} d_j) \end{pmatrix} \quad (۵)$$

در این روابط  $j = 0, t, S, M, P$  برای قطبش TE و TM به ترتیب داریم:  $q_j = k_{z_j} / \omega \mu_j \mu_0$  و  $q_j = -k_{z_j} / \omega \epsilon_j \epsilon_0$ .

باریکه فرودی به شکل گاوسی با میدان الکتریکی به صورت رابطه (۶) بیان شده است که به دلیل ناچیز بودن تاثیر مولفه شعاعی از آن صرف نظر شده است. در این رابطه پهنای باریکه فرودی  $a = 2\lambda$  است که پهنای باریکه دو برابر طول موج نور فرودی است. همچنین مولفه مماسی با سطح بردار موج فرودی به صورت  $k_{xi} = k_i \sin \theta$  بیان می شود که در این مقاله زاویه تابش فرودی  $\theta = 30^\circ$  و عدد موج باریکه به صورت  $k_i = \frac{\omega \sqrt{\epsilon_i \mu_i}}{c}$  است.

$$E(x) = \exp\left(-\left(\frac{x^2}{4a^2}\right) + ik_{xi}x\right) \quad (۶)$$

می توان با استفاده از تبدیلات فوریه آن را به مولفه های موج تخت بسط داد:

$$E(k_x) = \int_{-\infty}^{\infty} E(x) \exp(-ik_x x) dx \quad (۷)$$

و با استفاده از ماتریس های انتقال برای هر مولفه تخت باریکه عبوری و بازتابی را محاسبه کرد:

برد و همچنین تاثیر هر لایه روی میدان الکتریکی را مشاهده کرد که در طراحی بلور های فوتونی و چیدمان لایه ها در رسیدن به ساختار مدنظر کاربرد دارد.

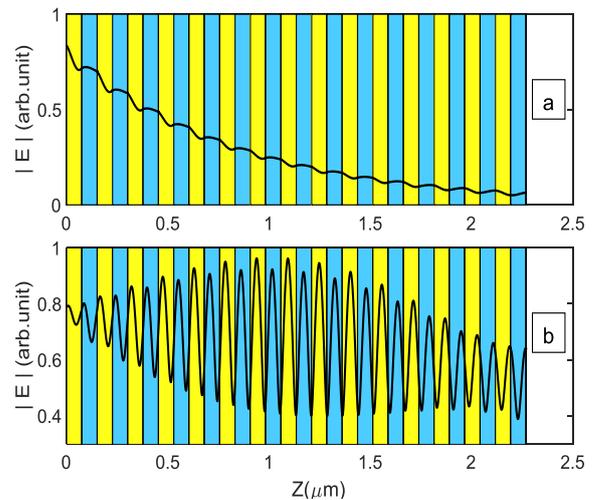
### نتیجه گیری

در این مقاله ابتدا طیف تراگسیل ساختار مورد بررسی قرار گرفته است که نشان می دهد وجود  $\text{MoS}_2$  باعث ایجاد دو گاف فوتونی در ناحیه مرئی و فرابنفش نزدیک شده است. در ادامه پروفایل میدان الکتریکی موج تخت و باریکه گاوسی در داخل ساختار با استفاده از روش تبدیلات فوریه برای طول موج انتخاب شده از داخل گاف فوتونی در  $460\text{ nm}$  شبیه سازی شده است. میزان تاثیر هر لایه از بلور فوتونی بر رفتار و نحوه انتشار میدان الکتریکی قابل مشاهده است که میرایی سریع و حالت نوسانی کمتری را نشان می دهد.

### مرجع ها

- [1] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, "Photonic crystals: modeling the flow of light," *Princeton university press, USA* (2011).
- [2] A. Madani, S. Roshan Entezar, "Optical properties of one-dimensional photonic crystals containing graphene sheets," *Physica B*, **431** (2013) 1–5.
- [3] Xiao, D., et al., "Coupled spin and valley physics in monolayers of  $\text{MoS}_2$  and other group-VI dichalcogenides," *Phys. Rev. Lett.* **108** (19) 196802 (2012) 1–5.
- [4] C. Qin, Y. Gao, Z. Qiao, prof. L. Xiao, prof. S. Jia, "Atomic-layered  $\text{MoS}_2$  as a tunable optical platform," *Adv. Optical mater.* **4** (2016) 1429-1456.
- [5] I.H. Malitson, "Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica", *J. Opt. Soc. Am.* **55** (1965) 1205–1208.
- [6] M.N. Polyanskiy. Refractive Index Database <<http://refractiveindex.info>>.
- [7] B. Mukherjee, F. Tseng, D. Gunlycke, K.K. Amara, G. Eda, E. Simsek, "Complex electrical permittivity of the monolayer molybdenum disulfide ( $\text{MoS}_2$ ) in near UV and visible, " *Opt. Mater. Express.* **5** (2015) 447-455.
- [8] P. Yeh, P.A. Yariv, and C-S Hong, "Electromagnetic Propagation in periodic stratified media. I. General theory", *Optical Society of America* **67**, No. 4 (1997) 423-438.

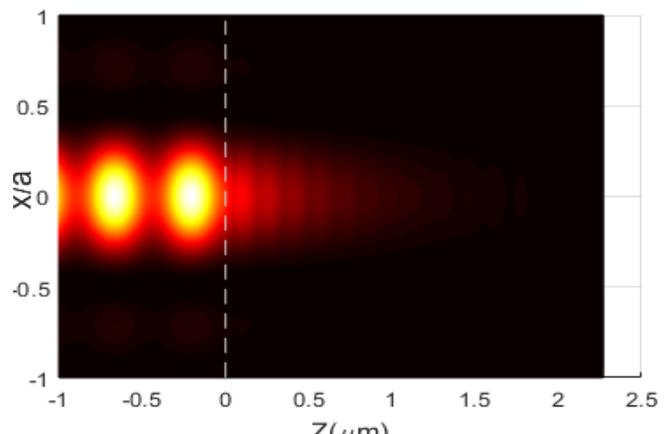
TE موج تخت برای طول موج های  $460\text{ nm}$  و  $228\text{ nm}$  رسم شده است.



شکل ۳: پروفایل میدان در داخل بلور فوتونی برای طول موج انتخاب شده از داخل گاف فوتونی (a) در  $460\text{ nm}$  و لبه گاف اول (b) در  $228\text{ nm}$ .

شکل ۳ مشاهده می شود که پروفایل میدان مربوط به گاف از حالت نوسانی کمتری برخوردار است و همچنین رفتار موج در داخل هر لایه از بلور فوتونی قابل مشاهده است.

در پایان پروفایل میدان الکتریکی باریکه گاوسی برای قطبش TE با استفاده از تبدیلات فوریه و برای طول موج انتخاب شده از داخل گاف شبیه سازی شده است.



شکل ۴: پروفایل میدان الکتریکی موج گاوسی در داخل بلور فوتونی برای طول موج انتخاب شده از داخل گاف فوتونی در  $460\text{ nm}$ .

انتشار میدان الکتریکی قبل از ورود به ساختار و داخل ساختار که با خط چین از هم جدا شده اند را مشاهده می کنیم. هدف از انتخاب این طول موج این است که می توان به میزان نفوذ و شدت میرایی باریکه در داخل ساختار پی