

光子晶体微波加速结构的计算与设计*

宋瑞英 吴丛凤¹⁾ 何笑东 董赛

(中国科学技术大学国家同步辐射实验室 合肥 230029)

摘要 用有限差分法计算了由金属棒分别按方形和三角形晶格分布的二维光子晶体的色散曲线, 得出了带隙图. 计算结果表明: 对于三角形晶格, 当金属棒半径和棒间距比值小于0.2时, 由该种光子晶体构成的微波加速结构可约束主模、抑制高次模; 用Microwave Studio软件模拟计算了三角形晶格分布的二维光子晶体加速结构, 研究了新加速结构的RF参数与结构尺寸的关系, 优化出一组RF频率为9.37GHz时此种加速腔的结构尺寸, 计算还表明该种新加速结构具有较高的分路阻抗和品质因数.

关键词 光子晶体 微波加速结构 有限差分法 带隙 抑制高次模

1 引言

将来的直线加速器的工作频率希望从S波段增加到X波段, Ku波段或更高, 因为击穿场强随着频率提高而增大, 而且频率高时腔内储存的能量更多, 功耗更少一些, 即可以提高加速器的效率. 但随着频率的提高, 由高次模引起的尾场效应增强, 这将使电子的横向运动加大, 导致束流发射度变大^[1], 这对加速粒子是非常不利的. 因此对于加速结构来说, 抑制高次模是一项关键技术.

光子晶体是20世纪80年代末提出的新概念和新材料, 由于它能构成特殊的周期性结构而具备独特的性能, 被用于制作全新的高性能光学器件, 光通信上也有重要的用途. 近些年美国的科学家把光子晶体引入到加速器领域, 开展光子晶体加速结构的研究, 并初步进行了光子晶体电子直线加速器实验^[2]. 本领域的光子晶体是指由介质或金属(棒)在空间按一定周期性排列的材料. 通过设计和构造特殊结构的光子晶体, 限制某些频率的波在晶体中的传播, 这些不能传播的频率范围叫带隙. 如果在光子晶体中引入缺陷可将带隙中的模约束在缺陷(可视为波导)中传播, 而其他模, 如束团尾场激起的高阶模则被引出周期结构^[2, 3]. 这样, 采用光子晶体作为加速结构, 也称光子

带隙(PBG)加速结构, 具备约束主模, 有效引出高次模的能力, 从而保证束流低发射度.

近期备受关注的是二维金属光子晶体微波加速结构, 加速单元是由铜棒按方形或三角形周期排列构成. MIT已经用6个PBG单元(三角形排列)构成的行波结构进行了实验^[2], 由实验估算出加速梯度已达到35MV/m.

本文计算了两种二维金属光子晶体(方形晶格和三角形晶格)的带隙, 并在此基础上模拟计算了X波段三角形晶格二维光子晶体加速结构的RF参数与结构尺寸的关系, 优化出一组尺寸, 为研制该种型式的新加速腔奠定了基础.

2 色散曲线、带隙图的数值计算

由于从带隙结构可以判断约束主模, 抑制高次模的条件, 所以我们首先分别计算方形和三角形晶格分布二维金属光子晶体的色散曲线, 分析带隙结构的特点.

2.1 本征值问题的公式

光子晶体结构的横截面如图1(a,b)所示, (a)方形晶格, (b)为三角形晶格. 其中 a 为金属棒半径, b 为金属棒间距.

2006-09-06 收稿, 2006-11-23 收修改稿

* 国家自然科学基金(10375060, 10675116)资助

1) E-mail: cfwu@ustc.edu.cn

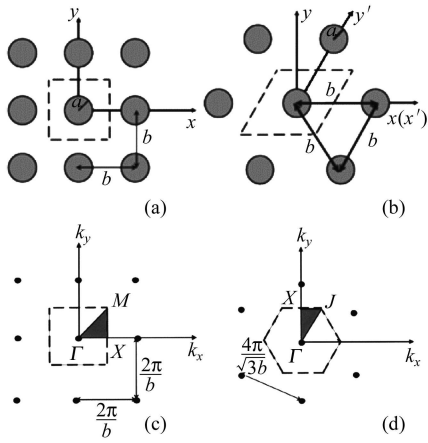


图 1 PBG 结构图

- (a) 方形晶格; (b) 三角晶格. 金属棒半径 a , 间距 b ;
(c) 方形晶格的倒格子; (d) 三角形晶格的倒格子, 阴影部分为第一布里渊区.

此结构沿 z 向均匀, 场 ψ 沿 z 轴和时间的傅立叶变换可表示为^[4]

$$\psi(\mathbf{x}_\perp, k_z, \omega) = \iint \psi(\mathbf{x}_\perp, z, t) e^{i(k_z z - \omega t)} dz dt, \quad (1)$$

其中 $\mathbf{x}_\perp = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y$ 为横向位移, $\psi(\mathbf{x}_\perp)$ 为轴向场分量. 这里考虑频率 ω 和纵向波数 k_z 为定值的情况, 从麦克斯韦方程出发可以推出其满足的亥姆霍兹方程:

$$\nabla_\perp^2 \psi(\mathbf{x}_\perp) = \left(k_z^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \right) \psi(\mathbf{x}_\perp). \quad (2)$$

所有场分量都可以用轴向场分量来表示. 对于加速结构, 考虑 TM 模情况, 金属棒表面 S 满足边界条件

$$\psi|_S = 0, \quad (3)$$

由 Floquet 定理得周期边界条件为

$$\psi(\mathbf{x}_\perp + \mathbf{T}_{mn}) = \psi(\mathbf{x}_\perp) e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{T}_{mn}}, \quad (4)$$

其中 $\mathbf{k}_\perp = k_x\hat{e}_x + k_y\hat{e}_y$ 为任意的横向波数. \mathbf{T}_{mn} 为周期矢量, m, n 为整数, 定义如下:

$$\mathbf{T}_{mn} = \begin{cases} mb\hat{e}_x + nb\hat{e}_y & (\text{方形晶格}), \\ \left(m + \frac{n}{2}\right)b\hat{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}nb\hat{e}_y & (\text{三角形晶格}). \end{cases} \quad (5)$$

色散曲线表示的是频率随波数 \mathbf{k} 的变化, 为了计算方便, 把晶格坐标空间转换到 \mathbf{k} 空间表示. 根据式 (5) 可以求出此种二维光子晶体横截面的 \mathbf{k} 空间表示^[5], 如图 1(c,d) 中虚线所示. 对于周期结构, 仅需解第一布里渊区 (阴影部分) 方程即可. 图 1(c) 中 3 个特殊点 Γ, X, M 对应的横向波数分别为

$$\mathbf{k}_\perp = 0, \quad \mathbf{k}_\perp = (\pi/b)\hat{e}_x, \quad \mathbf{k}_\perp = (\pi/b)(\hat{e}_x + \hat{e}_y);$$

图 1(d) 中 3 个特殊点 Γ, J, X 对应的横向波数分别为

$$\mathbf{k}_\perp = 0, \quad \mathbf{k}_\perp = (2\pi/3b)(\hat{e}_x + \sqrt{3}\hat{e}_y), \quad \mathbf{k}_\perp = (2\pi/\sqrt{3}b)\hat{e}_y.$$

为了计算在二维 PBG 结构中传输波的本征值, 采用实空间有限差分法. 首先推导基本差分公式, 网格划分的步长为 h . 基本单元网格数为 $(2N+1)^2$. 方形晶格的差分公式为

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \cong \frac{\psi_2 + \psi_4 + \psi_6 + \psi_8 - 4\psi_0}{h^2}. \quad (6)$$

对于三角形晶格, 为了划分网格的准确与方便, 进行坐标变换, 如图 1(b) 所示.

$$x' = x - y/\sqrt{3}; \quad y' = 2y/\sqrt{3}. \quad (7)$$

根据坐标变换公式得:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2},$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{4}{3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y'^2} - \frac{4}{3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x' \partial y'} + \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2}. \quad (8)$$

最后得到三角形晶格差分公式一般形式:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \cong \frac{4}{3} \left(\frac{\psi_2 + \psi_4 + \psi_6 + \psi_8 - 4\psi_0}{h^2} - \frac{\psi_3 - \psi_5 + \psi_7 - \psi_1}{4h^2} \right). \quad (9)$$

接下来进行亥姆霍兹方程的离散化及本征值计算. 采用实空间有限差分法, 在金属棒外, 亥姆霍兹方程可由 $\psi(\mathbf{x}_\perp)$ 在网格点 (i, j) (网格点 $i = j = 0$ 对应基本单元的原点) 处函数值 $\psi_{i,j}$ 间的线性关系近似表示如下.

四方形晶格:

$$\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + \psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j} = -\gamma^2 h^2 \psi_{i,j}, \quad (10)$$

三角形晶格:

$$4(\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + \psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}) -$$

$$(\psi_{i+1,j+1} + \psi_{i-1,j-1} - \psi_{i-1,j+1} - \psi_{i+1,j-1}) -$$

$$16\psi_{i,j} = -3\gamma^2 h^2 \psi_{i,j}. \quad (11)$$

其中 $\gamma^2 = \omega^2/c^2 - k_z^2$.

由周期边界条件可得:

$$\psi_{N+1,j} = \psi_{-N,j} e^{ik_x b} \quad (\text{方形}), \quad (12)$$

$$\psi_{i,N+1} = \psi_{i,-N} e^{ik_y b}$$

$$\psi_{N+1,j} = \psi_{-N,j} e^{ik_x b} \quad (\text{三角形}), \quad (13)$$

$$\psi_{i,N+1} = \psi_{i,-N} e^{i(b/2)(k_x + \sqrt{3}k_y)}$$

2.2 带隙计算结果

对于 TM 模, 金属棒内的电场为零, 所以我们只需

要解 $(2N + 1)^2 - M$ 阶矩阵方程就可以求出色散曲线. 其中 M 为金属棒内的网格点数.

编程应用的是 Mathematica 软件, 计算中发现, 当 $N > 20$ 以后, 本征值几乎不变, 所以最终取 $N = 20$, 得出色散曲线.

图 2(a,b) 是方形和三角形晶格结构在 $a/b = 0.16$ 时典型计算结果. k_{\perp} 的变化范围是从图 1 中的布里渊区域的中心 Γ 点变化到 X 点, 再到 M 点 (或 J 点), 最后回到 Γ 点. 图中的阴影部分为带隙部分. 可以看到, 方形晶格结构此时有两条带隙, 而三角形晶格结构只有一条带隙. 如果在光子晶体中引入缺陷, 方形晶格的光子晶体会约束两个模, 而三角形晶格的光子晶体只约束一个模. 即该种条件下, 三角形晶格可能具备约束一个模 (主模), 引出高次模的条件; 而方形晶格不能保证只约束一个主模.

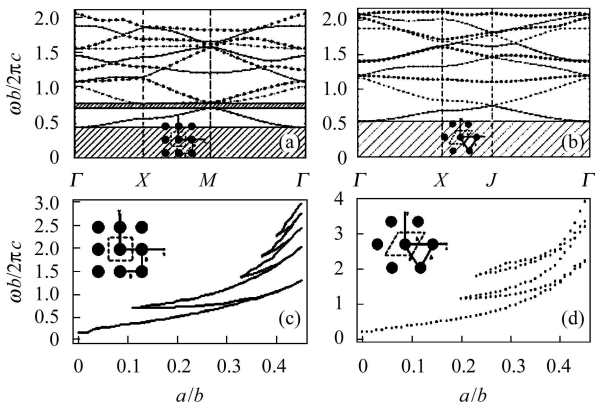


图 2 (a) 方形光子晶体 10 个最低次归一化本征模随波数 k_{\perp} 的变化; (b) 三角形光子晶体 10 个最低次归一化本征模随波数 k_{\perp} 的变化; (c) 方形光子晶体全域带隙随 a/b 的变化; (d) 三角形光子晶体全域带隙随 a/b 的变化

图 2(c,d) 是全域带隙图. 由图可见, 方形晶格结构在 a/b 大于大约 0.1 时就开始出现两条带隙, 随着比值增大带隙个数变多. 但三角形晶格结构开始出现两条带隙的 a/b 临界值约是 0.2. 考虑实际加工的难度, a/b 的值略大些便于加工. 另外三角形晶格与方形晶格相比, 具有更好的对称性, 这对加速结构来说也是比较重要的. 综合以上分析, 我们在设计金属光子带隙加速结构选用三角形晶格结构. 并且在 $a/b < 0.2$ 的条件下, 可保证加速结构 (含缺陷) 支持单模传输.

3 二维光子带隙加速结构设计

3.1 光子带隙加速结构的加速原理

金属棒的周期排列是一种特殊的二维光子晶体, 由前面 2.2 节得到的二维金属棒光子晶体加速单元的

色散曲线结论可知, 由于二维光子晶体带隙的存在, 可以构成 PBG 波导, 该种加速结构通过移掉三角形阵列中间的一根金属棒来形成缺陷, 如图 3 左侧所示, 带隙内的主模不能传出 PBG 结构, 被约束在缺陷中, 由于 PBG 结构只能支持带隙结构内的模传输, 从而提供了选择性地抑制高次模 (由尾场激励的) 的可能. 如果被约束的主模是类 TM_{01} 模, 那么就能有效加速粒子, 因此加速腔单元选择盘荷负载 PBG 结构 (图 3 右侧).

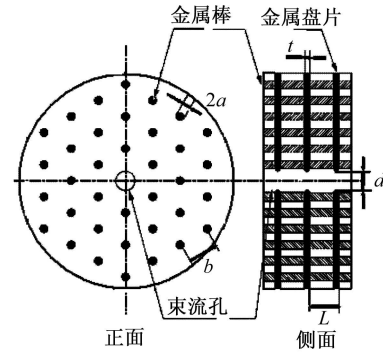


图 3 盘荷负载 PBG 行波加速器结构
金属棒半径 a , 间距 b , 盘片厚度 t , 盘片内半径 (束流孔半径) $d/2$, 周期长度 l .

3.2 不同的 a/b 值对加速单元场分布的影响

依据前面 2.2 节带隙计算的结果, 采用三维电磁场计算软件 Microwave Studio 进行模拟计算, 得出这种加速结构不同 a/b 情况下的场型图, 典型计算结果如图 4 所示. 图 4(a) 对应 $a/b < 0.2$ 情况, 可初步判断类 TM_{01} 模在缺陷中传输, 类 TM_{01} 模加速粒子的场型与盘荷波导的 TM_{01} 类似, 类 TM_{11} 模 (横向模) 能传出光子晶体, 即可以被引出, 达到了约束主模的目的, 同时偶极模并没有集中在中心区. 如果在外围加吸收材料就可以将高次模引出, 从而将其吸收掉. 而图 4(b) 对应 $a/b > 0.2$ 的情况, 虽然主模得到了约束, 但高次模也集中在加速区, 这样不能将高次模引出而被抑制. 以上计算结果与图 2 的结论是一致的.

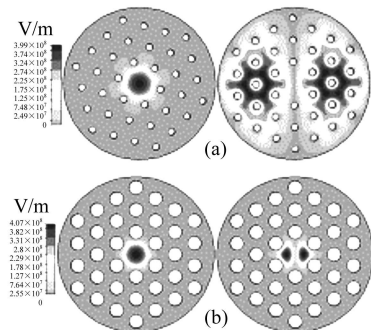


图 4 不同比值时 PBG 谐振腔的基模与偶极模的场
(a) $a/b = 0.15$; (b) $a/b = 0.3$.

3.3 加速腔设计研究

前面计算结果给出了能够约束主模、抑制高次模的结构范围,为PBG加速器的设计提供了参考.构成盘荷负载PBG行波加速结构图如图3所示.行波PBG加速器的结构设计必须确定如下参数:棒半径 a ,棒间距 b ,板间距 l ,每单元最佳相位变化 φ ,盘片厚度 t 和束流孔半径 $d/2$.另外,耦合单元必须单独设计.

对于加速器结构,每单元相位变化选为 $\varphi = 2\pi/3$,则板间距为 $l=10.665\text{mm}$.选盘片厚度 $t=1.5\text{mm}$ 是考虑了加工的要求及为获得高的分路阻抗.最后要优化 a, b, d 以达到所需频率并保证RF性能要求,而且选 $a/b \approx 0.15$ 以有效抑制高次模.为此我们进行了大量的模拟计算,得出频率为 9.37GHz ,不同束流孔半径时各物理参数与特征尺寸变化的关系.这里主要分析尺寸变化对品质因数 Q ,分路阻抗 R_S , R_S/Q 和群速度的影响,如图5(a—d)所示.计算结果表明:

品质因数 Q 随着棒半径 a 的增大而增大,束流孔半径 d 对其影响不大,可以选较大棒半径 a 以获得较大的 Q 值.

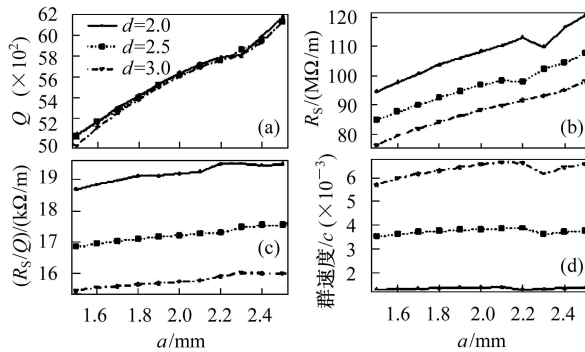


图5 (a) 品质因数 Q 与金属棒半径的关系; (b) 分路阻抗与金属棒半径 a 的关系; (c) R_S/Q 与金属棒半径 a 的关系; (d) 群速度与金属棒半径 a 的关系

分路阻抗 R_S 随着棒半径 a 的增大而增大,随着束流孔半径 d 的增大而减小,可选用较大 a ,较小 d 以获得较大的 R_S 值. R_S/Q 的规律与 R_S 相似.

群速度 v_g 随着棒半径 a 的增大变化不大,但随束流孔半径 d 的增大而减小很快,由于此种加速结构的群速度总体较低,所以要选择合适的束流孔半径 d 以满足加速结构对群速度的要求.

综合上述结果,通过计算取 $d=3\text{mm}$, $b=12.699\text{mm}$, $a=2\text{mm}$.接下来考虑耦合单元设计,耦合单元设计形状如图6所示.用三维电磁场计算软件

Microwave Studio进行计算,计算表明:在PBG结构中去掉3根棒,调 a 与 b 的值进行计算,反射系数可达到较低值,约为0.015左右.最后所得的耦合腔参数为: $a=1.99\text{mm}$, $b=12.699\text{mm}$.PBG加速器结构的所有结构参数列入表1,同时表1也给出了设计的PBG加速器结构的RF参数计算值.从计算结果看,设计符合加速要求,而且 Q 值、 R_S 较高.

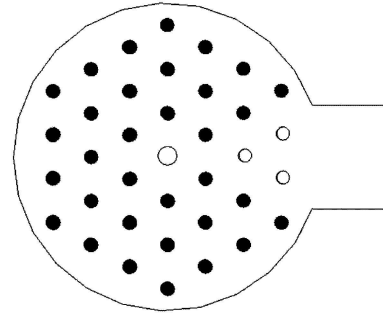


图6 加速器耦合单元
实心圆为金属棒,外侧3个空心圆为去掉的金属棒,中心处的空心圆为束流孔.

表1 盘荷负载PBG加速结构单元参数

结构参数		结构参数	
工作频率	9.37GHz	周期长度, l	10.665mm
工作模式	$2\pi/3$	盘片厚度, t	1.5mm
金属棒半径(行波单元/耦合单元), a	1.99/2mm	分路阻抗, R_S	88.14MΩ/m
金属棒间距, b	12.699mm	品质因数, Q	5604
束流孔半径, $d/2$	3mm	R_S/Q	15.728kΩ/m
加速腔半径	44.447mm	群速度	0.00657c

4 结论

我们用实空间有限差分法对二维金属棒按方形晶格和三角形晶格分布的PBG结构的色散特性进行了计算.计算结果表明,对于三角形晶格,当 $a/b < 0.2$,可保证该种加速结构(含缺陷的)可约束单模(主模)传输,有效抑制高次模.采用Microwave Studio优化设计了该种新加速结构,得出了 X 波段(9.37GHz)的典型设计尺寸,而且计算结果显示,该种新型加速结构的分路阻抗 R_S 和 Q 值较高.以上计算为实现光子晶体新加速结构的研制提供了必要的理论依据.

感谢国家同步辐射实验室领导对本课题的支持和有关老师的帮助,同时感谢林辉同学在工作中给予的热心帮助.

参考文献(References)

- 1 Adolphsen C, Bane K, Higo T et al. Phys. Rev. Lett., 1995, **74**: 2475
- 2 Smirnova E I et al. Phys. Rev. Lett., 2005, **95**: 074801
- 3 Cowan B. Photonic Crystal Laser-Driven Photonic Accelerator Structure. Proceedings of the 2005 Particle Accelerator Conference. IEEE, Knoxville, Tennessee, 2005. 2720
- 4 Smirnova E I et al. J. Appl. Phys., 2002, **91**: 960
- 5 HUANG K. Solid State Physics. Beijing: Higher Education Press, 1988 (in Chinese)
(黄昆. 固体物理. 北京: 高等教育出版社, 1988)

Simulation and Design of the Photonic Crystal Microwave Accelerating Structure^{*}

SONG Rui-Ying WU Cong-Feng¹⁾ HE Xiao-Dong DONG Sai

(NSRL, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China)

Abstract We have derived the global band gaps for general two-dimensional (2D) photonic crystal microwave accelerating structures formed by square or triangular arrays of metal posts. A coordinate-space, finite-difference code was used to calculate the complete dispersion curves for the lattices. The fundamental and higher frequency global photonic band gaps were determined numerically. The structure formed by triangular arrays of metal posts with a missing rod at the center has advantages of higher-order-modes (HOM) suppression and main mode restriction under the condition of $a/b < 0.2$. The relationship between the RF properties and the geometrical parameters have been studied for the 9.37GHz photonic crystal accelerating structure. The R_S , Q , R_S/Q of the new structure may be comparable to the disk-loaded accelerating structure.

Key words photonic crystals, microwave accelerating structure, finite-difference code, band gap, higher-order-modes (HOM) suppression

Received 6 September 2006, Revised 23 November 2006

^{*} Supported by NSFC (10375060, 10675116)

1) E-mail: cfwu@ustc.edu.cn