УДК 539.184

Лавриненко А.В., *д.ф.-м.н.,* **Лавриненко Ю.В.,** *к.т.н.,* **Черненко Д.С.**
Одесский государственный экологический университет

ВЫБОР ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЛНОВОДОВ НА ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Статья посвящена обоснованию наиболее оптимальных методов численного моделирования, используемых при анализе устройств на основе фотонных кристаллов .

Ключевые слова: *алгоритм, конечная разность, плоские волны, ряд Фурье, сходимость , уравнение Максвелла, фотонный кристалл.*

Введение. Задача моделирования принципов действия волноводов с последующим выбором оптимизирующего дизайна включает в себя следующие этапы.

1. Определяется факт существование фотонных запрещенных зон (ФЗЗ) для данной симметрии периодической решетки фотонного кристалла (ФК) и находятся примерно ее границы. Увеличение отношения диаметра «атомов» d к постоянной решетки Λ приводит сначала к расширению зоны, а затем к ее сужению [1]. Исходя из требований максимальной ширины зоны, находится оптимальное соотношение d/Λ. Однако, надо учитывать, что большие размеры зоны, во-первых, приведут к тому, что одномодовый режим может исчезнуть. Во-вторых, создание тонкой мембраны, большая часть площади которой представляют дырки, существенно увеличит ее хрупкость. Ввиду свойств масштабируемости, присущих уравнениям Максвелла [1], положение ФЗЗ по частоте удобно определять в относительных единицах $\omega\Lambda/2\pi c$. Это означает, что, зная границы зоны в относительных единицах, мы можем подобрать такую постоянную решетки, чтобы соответствующий ФЗЗ диапазон находился, например, в области прозрачности материала волновода.

2. Организуется волноведущий канал путем подбора его размеров и конфигурации, исходя из требований задачи. Проверяется спектральное положение дефектных мод для прямого канала. Как уже отмечалось, они должны находится в фотонной запрещенной зоне. Если канал содержит повороты или различные соединения каналов, расположенных с учетом симметрии решетки (соединение типа Y- для двумерной тригональной решетки или T-соединения для квадратной), модовая структура всей системы не изменится, и будет соответствовать прямому волноведущему участку. Определенный дизайн может относиться к установлению одномодового или многомодового режима.

3. Выбирается тип моды, обусловленный условиями постановки задачи. Существует два типа волноводных мод. Первый тип, рефракционные моды, направляемые за счет разницы в показателях преломления канала и окружающей среды, как в традиционных диэлектрических волноводах. Их отличает заметная крутизна дисперсионных кривых, что свидетельствует о высоких групповых скоростях. К ним относится и фундаментальная мода. Второй тип, дифракционные моды, направляемые за счет эффекта наличия фотонных запрещенных зон в среде,

окружающей канал. Эти моды обычно имеют плоские дисперсионные кривые, которые могут целиком находиться в ФЗЗ.

4. Выбирается симметрия моды. Моды могут различаться по симметрии в зависимости от свойств симметрии всей структуры. В прямом фотонно-кристаллическом волноводе (ФКВ) с симметричным окружением их можно разделить на четные и нечетные относительно вертикальной плоскости, проходящей через середину канала. Эта симметрия будет отражать и расположение электрических и магнитных полей. В идеальном случае четные и нечетные моды не взаимодействуют друг с другом. Однако, любое нарушение геометрической симметрии приводит к снятию симметрийного вырождения мод. При пересечении дисперсионных кривых мод различной четности они начинают взаимодействовать, вызывая так называемые антипересечения (anti-crossing), участки на которых вместо пересечения моды начинают как бы отталкиваться друг от друга.

5. Знание модовой структуры волновода позволяет определить возможность передачи оптического излучения на определенных частотах. Однако, дисперсионные кривые не дают ответа на вопрос, насколько эффективна может быть эта передача. Следующий шаг - это анализ спектральных зависимостей пропускания/отражения всей фотонно-кристаллической системы. Расшифровка спектра, т.е. сопоставление пиков пропускания соответствующим модам, позволяет найти самые эффективные из них. Отметим, что это чаще всего и наиболее ресурсо- и время-затратный процесс.

6. Оптимизация параметров системы производится по спектрам пропускания. Может включать в себя как дизайн формы и размеров отдельных элементов, так и подбор материалов для соответствующего диапазона.

Несмотря на отдельные попытки аналитического решения задачи моделирования ФКВ для случаев, когда возможно редуцирование размерности системы, основным все же является численный метод.

Современные вычислительные методы, используемые в оптике ФК, таковы: метод конечных разностей во временной области (FDTD — finite-difference time-domain); метод разложения по плоским волнам (PWE — plane wave expansion); метод матрицы рассеяния (SMM — scattering matrix method); метод матрицы передачи (TMM — transfer matrix method); метод многократного рассеяния (MST –multiple scattering technique) или строгая теория дифракции на периодических системах рассеивателей; алгоритмы разложения по собственным модам (EME — eigenmode expansion); метод распространения пучка (BPM — beam propagation methods); метод линий (MoL — method of lines); строгий метод связанных мод (RCWA — rigorous coupled-wave analysis) или по-другому модовый Фурье-метод (FMM — Fourier modal method); техника функций Грина (GFT — Green’s function technique). Из всех выше названных методов наибольший интерес представляют PWE и FDTD, поскольку являются лучшими по критерию стоимость-эффективность, т.е. позволяют получить удовлетворительный результат при приемлемых затратах.

1. **Метод разложения по плоским волнам**

(PWE — plane wave expansion)

В историческом плане это был самый первый метод, который был использован для вычисления фотонной зональной структуры двух- и трехмерных периодических структур. Его подробное описание дается в работах [1,2]. По своей сути метод PWE представляет решение задачи на собственные значения и собственные векторы для волнового уравнения, вытекающего из уравнений Максвелла при гармонической временной зависимости

$$\nabla^{\times}\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla^{\times}\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{H}(\mathbf{r}),$$

(1) т.е. это метод в частотной области.

В общем случае вектор магнитного поля в трехмерной периодической среде представим в виде векторной блоховской функции

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{Gr}}\,\mathbf{H}_{\mathbf{G},\omega}(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

где $\mathbf{G}$ – блоховский волновой вектор (вектор обратной решетки), $\mathbf{H}_{\mathbf{G},\omega}(\mathbf{r})$ – некоторая периодическая функция, определяемая свойствами одной элементарной ячейки – носителя свойств симметрии всей структуры.

Эта функция может быть разложена по полному набору плоских волн в пространстве волновых чисел. Для целей численного анализа базис плоских волн должен быть оборван, т.е. вместо бесконечной суммы используется конечное число слагаемых

$$\mathrm{H}_{\mathrm{k,G},\omega}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda}\sum_{n=1}^{N} e^{i(\mathbf{k}+n\mathbf{G})\mathbf{r}}\mathbf{h}_{\mathbf{k},n,\lambda}, \qquad (3)$$

где индекс λ означает одно из двух поляризационных базисных состояний, лежащих в плоскости ортогональной вектору $\mathbf{k}+n\mathbf{G}$.

Подобное разложение используется и для функции $\varepsilon(\mathbf{r})$. Подставляя все эти разложения в уравнение (1), мы получаем систему линейных алгебраических уравнений, условие совместимости которых позволяет найти частоту, а решения — коэффициенты разложений блоховских функций по системе плоских волн в k-пространстве. С их помощью восстанавливаются собственные векторы уравнения (1) – векторы магнитного поля. В дальнейшем по вектору $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ с помощью стандартной процедуры восстановления находится вектор электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Метод содержит ряд Фурье преобразований из обычного пространства в пространство волновых векторов и обратно.

Обрывание бесконечных рядов типа (3) вносит основную погрешность в расчеты зонной структуры, поэтому приходится использовать весьма большое число волн. Например, в работе [2] для каждого собственного состояния использовалось 750 000 волн, преобразования Фурье выполнялись по 12 000 точек в каждой из 32 элементарных ячеек, а сами расчеты соответственно проводились на суперкомпьютерах типа CRAY-2. В последнее время предпринимались шаги по улучшению схождения процедуры расчета с помощью PWE метода. Причем, многие оптимизирующие процедуры заимствованы из квантовой теории твердого тела и решения уравнения Шредингера для систем многих частиц. К ним относятся, метод погружения, метод переменного шага решетки, вариационный принцип, метод эффективного тензора диэлектрической проницаемости, оптимальный выбор начального приближения в задаче на собственные значения, использование вместо плоских волн набор локализованных функций. Это позволяет ограничиваться даже в случае трехмерных ФК набором порядка N = 500 плоских волн, что обеспечивает возможность решения такой задачи на современных персональных компьютерах.

В PWE методе используются наименьшая область пространства, содержащая все основные характерные черты строения структуры, ограничиваемая периодическими граничными решениями. Поэтому наиболее точные решения получаются для периодических сред в отсутствии всяких дефектов или искажений симметрии. Тогда можно ограничиться одной зоной Бриллюэна периодической решетки или ее неприводимой частью.

В случае наличия, например, линейного дефекта в ФКВ приходится применять приближении суперячейки, захватывающей область дефекта и несколько соседних рядов атомов. Среда, поля и дисперсионные диаграммы в которой ищутся таким образом, будет представлять собой набор периодически повторяемых в пространстве линейных волноводов. Количество боковых слоев выбирается, как правило, не менее четырех-пяти, чтобы свести влияние соседних каналов друг на друга к минимуму. С увеличением размеров структурной ячейки а соответственно и числа точек расчетов, возрастает число требуемых плоских волн. Требования к компьютерной памяти в PWE методе с ростом числа волн N возрастают линейно, а время счета как $N \log N$.

Метод PWE является сейчас основным методом для расчета зонного спектра ФК, дисперсионных кривых ФКВ, построения картины полей на тех или иных участках исследуемого устройства. Необходимо отметить, что программный пакет для вычисления фотонной зонной структуры, содержащий работающую версию PWE кода, находиться в свободном доступе на сайте Массачусетского Технологического Института (адрес http://ab-initio.mit.edu/mpb/).

2. Метод конечных разностей во временной области

(FDTD — finite-difference time-domain).

Остановимся подробнее на метод конечных разностей во временной области Этот метод в настоящее время можно считать наиболее распространенным. Впервые он был описан в 1966 году [3], однако получил широкое признание в практических задачах электродинамики в 90-х годах. А для расчетов фотонно-кристаллических структур стал применяться только со второй половины прошедшего десятилетия.

FDTD метод основан на прямом численном решении системы уравнений Максвелла с помощью аппроксимации частных производных полевых векторов конечными разностями – разновидность сеточного метода для дифференциальных уравнений в частных производных. Как правило, для пространственных производных используются конечные разности второго порядка точности, а для временных – первого порядка. Попытки численного решения уравнений Максвелла предпринимались неоднократно. Как отмечено в работе [4], важнейшее требование, предъявляемое к численному алгоритму состоит в том, чтобы соотношение $div\ rot\ \mathbf{F} = 0$, $\mathbf{F} = \mathbf{E}, \mathbf{H}$ автоматически выполнялось на дискретной сетке (за исключением погрешностей округления). Однако лобовое применение конечных разностей приводило к тому, что в ходе численной процедуры значения дивергенции электрического и магнитного полей не отличались стабильностью. Они не только не обращались в нуль, но, более того, их значения возрастали в ходе реализации пошаговой эволюции полей. Таким образом, решения оказывались, во-первых, с ложными источниками, а, во-вторых, неустойчивы.

В 1966 году в статье [3] была предложена специальная схема пространственного расположения узлов — решетки для электрического и магнитного полей сдвинуты относительно друг друга на полпериода по всем трем пространственным направлениям (как при вышивании «крестиком» — отсюда и название сетки – staggered grid). Пространственное расположение узлов, в которых задается магнитное поле, и поляризация поля таковы, что они как бы образуют виртуальную окружность, охватывающую соответствующую компоненту электрического поля. Для любого из компонент магнитного поля эта геометрия векторов электрического поля повторяется. К тому же электрические и магнитные поля вычисляются для сдвинутых на полшага моментов времени. В итоге распространяющиеся поля, рассчитываемые по FDTD методу, сохраняют свое важнейшее свойство волнового движения: вихреобразность или равенство нулю дивергенции.

Хотя эта схема оказалась устойчивой при решении уравнений Максвелла, мировое сообщество физиков и инженеров по электронике не сразу оценили ее преимущество. Только с 80-х годов с развитием компьютерной техники было показано, что FDTD схема позволяет рассчитывать характеристики, как небольших систем, так и макрообъектов весьма сложной формы типа самолетов. В настоящее время FDTD метод является одной из важнейших и часто применяемых алгоритмических схем численного анализа в электродинамике и оптике сложных структур.

Широкому внедрению FDTD метода способствовало изобретение высокоэффективных граничных условий для ограничения численного пространства — идеально согласующегося слоя (ИСС) или (PML - perfect matched layer) [5]. Такой слой принадлежит к группе так называемых поглощающих граничных условий (ПГУ), используемых для моделирования реальных условий открытых систем при рассеянии или излучении волн. ИСС с одной стороны эффективно подавлял нежелательное отражение волн назад в расчетное пространство, с другой стороны, был весьма экономным по привлекаемым ресурсам памяти и процессорного времени. В настоящее время ПГУ в виде ИСС стал основным видом граничных условий в численном анализе открытых оптических систем.

Если проследить за численными алгоритмами, использовавшимися в оптике ФК, то обнаружится весьма примечательная закономерность: в начале в основном применялся метод разложения по плоским волнам. Это соответствовало задачам, стоявшим на повестке дня — анализу зонной структуры периодических упаковок «атомов» различных видов симметрии. Когда оптимальные симметрии были установлены и кроме зонной структуры понадобилось проанализировать пропускание, как на отдельных частотах, так и по всему спектру, то развитие получили методы матриц передачи и рассеяния и FDTD алгоритм. Определенный стимул в применении последнего для расчета ФК дало изобретение ИСС.

Возможность моделирования распространения волн в композитных структурах, состоящих из тонких разнородных слоев, зависит от устойчивости алгоритма особенно в пограничных точках пространственной решетки. Метод вычисления эффективных значений тензора диэлектрической проницаемости для приграничных областей, продемонстрированный в [6], значительно расширяет границы применимости FDTD подхода.

Отправной датой внедрения FDTD в оптику ФК можно считать работу [7], в которой традиционные задачи, решаемые плосковолновым разложением, (расчет зонной структуры и эффективной диэлектрической проницаемости в двух- и трехмерном пространстве) были решены с помощью метода конечных разностей во временной области. Было показано, что с увеличением размеров системы (числа расчетных точек N), время счета растет пропорционально N, в то время как в оптимизированных PWE алгоритмах эта зависимость была NlogN. Для больших систем выигрыш был весьма значительным. Поэтому авторы назвали свой метод расчета просто методом порядка N (order-N method).

Первой работой, в которой продемонстрирована возможность расчетов спектра пропускания, была работа массачусетской группы Яннополуса [8]. В ней, наряду с приоритетным физическим результатом о возможности высокоэффективного прохождения электромагнитных волн по волноводам с резкими поворотами, интерес вызвало сообщение о том, что в расчетах был использована именно FDTD схема. Как оказалось, то, что обычно было камнем преткновения для устойчивости большинства численных методов, а именно наличие большого числа зон резкого контраста диэлектрических проницаемостей, не является препятствием в FDTD технике. Последнее обстоятельство оказалось решающим для широкого распространения данного алгоритма.

За прошедшие время количество сообщений об использовании FDTD в численных расчетах по ФК и ФКВ нарастало лавинообразно. Одним из показателей активного использования методов конечных разностей служит недавнее появление коммерческих продуктов, основанных на FDTD технике: американской компании RSoft, швейцарской группы EMLAB, и английской компании Photon Design.

Рассмотрим применение FDTD подхода в задачах оптики ФК и ФКВ. Хотя уже и отмечалось выше, что бурное развитие методы конечных разностей во временной области получили вследствие потребности вычисления спектральных зависимостей пропускания и отражения, однако, как оказалось, практически все типы постановок задач для ФК могут исследоваться FDTD техникой.

1) Исследование зонной структуры или построение так называемых дисперсионных диаграмм (ω-k диаграмм) для периодических сред различной симметрии, а также периодических сред с дефектами. Считается, что в этой области FDTD метод является конкурентно-способным с основным — PWE алгоритмом. К достоинствам трехмерных FDTD вычислений по сравнению с PWE можно отнести способность рассчитывать полную картину мод, включая вытекающие моды с большим временем жизни. Их иногда называют еще резонансными. Поскольку эти моды находятся выше световой линии, то они теряют энергию со временем, связываясь с континуумом излучающих мод, существующих в окружающем ФК пространстве. PWE метод не может разрешить такую структуру мод в излучающем континууме.

2) Задача, в решение которой FDTD метод вносит основной вклад — определение спектральных характеристик отражения и пропускания сложными

системами, содержащими ФКВ и другие дефектные образования. В работах до 2000 годов в основном вычисления проводились для двумерных ФК. Однако, со временем с осознанием факта, что основные потери при распространении волн в ФКВ связаны с рассеянием из плоскости слоев, расчеты все больше ориентируются на трехмерный случай. Поэтому можно ориентироваться на такую модель: двухмерные расчеты, как более доступные, могут использоваться для качественного анализа работоспособности тех или иных структур, в то время как трехмерные служат для точной верификации результатов при сравнении с экспериментом.

3) Определение пространственного распределения компонент полевых векторов или локальных направлений векторов потока энергии. Эта задача весьма доступна для решения, поскольку данные являются непосредственным (или побочным) продуктом расчетов. Картины распределений весьма важны в случае, например, определения четности волноводных мод или симметрии колебаний, возбуждаемых в полости ФК. В отличие от PWE метода, где изначально вычисления ведутся в частотной области и поэтому поля данной моды достаточно просто выделяются, в FDTD алгоритме построение компонент полевых векторов возможно только после проведения Фурье преобразования из временной области в частотную. Это требует сохранения полей в дополнительном числе точек, что, в свою очередь, требует добавочных массивов памяти.

4) Изучение характеристик излучающих центров, помещенных в микрорезонаторы с характерными размерами порядка длины волны излучения. Интерес к этой задаче был заметно простимулирован концепцией создания материалов с фотонными запрещенными зонами. Убирая один или семь атомов в тригональной двумерной периодической решетке, мы организуем тем самым дефектную зону, имеющую несколько мод. Подстраивая параметры дефекта или решетки можно добиться того, чтобы частоты дефектных мод оказались внутри ФЗЗ. Тогда будет наблюдаться заметная пространственная локализация энергии излучения атома в микрорезонаторе на соответствующих частотах в области запрещенной зоны ФК, в дефект которого помещается излучающий атом. Это как раз и должно изменить уровень спонтанной эмиссии. Более того, описанная схема может оказаться весьма выгодной с точки зрения эффективного связывания спонтанного излучения с радиационными модами, обеспечивая весьма высокий коэффициент вывода излучения из резонатора в направлении, ортогональном плоскости периодического рисунка. FDTD методика оказывается наиболее эффективной из всех численных алгоритмов при анализе спектральных зависимостей уровня спонтанной эмиссии или фотолюминесценции, коэффициента связывания, а также пространственной направленности излучения диполя или ансамбля диполей.

Выводы. Таким образом, при рассмотрении наиболее существенных проблем моделирования свойств фотонных кристаллов численное моделирование в большинстве случаев целесообразно проводить используя FDTD алгоритмы реализуемые на современных персональных компьютерах. При разработке приложений алгоритмов FDTD, кроме непосредственно алгоритмизации схемы решения уравнений Максвелла, следует обращать внимание на вопросы применения эффективных ПГУ, позволяющих моделировать системы с существенным рассеянием излучения за собственные пределы.

Метод PWE эффективно используется при решении отдельных задач, в частности, является сейчас основным методом для расчета зонного спектра ФК, дисперсионных кривых ФКВ, построения картины полей на тех или иных участках исследуемого устройства.

Список литературы

1. *Joannopoulos J. D., Meade R.D., Winn J.N.,* Photonic Crystals: Molding the flow of light.- Princeton Univ. Press, 1995.
2. *Meade R.D., Rappe A.M., Brommer K.D., Joannopoulos J.D., Alerhand O.L.* Accurate theoretical analysis of photonic band gap materials//Phys. Rev. B -1993.-V.48, No11.- P. 8434- 8437.
3. *Yee K.S.* Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media//IEEE Trans. Antennas Propag.-1966.-V.14,No10.-P.302-307.
4. *Munz C.-D., Ommes P., Schneider R.* A three-dimensional finite-volume solver for the Maxwell equations with divergence cleaning on unstructured meshes//Comp. Phys. Commun.-2000.-V.130.-P.83-117.
5. *Berenger J.* A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves// J. Comput. Phys.-1994.-V.114,No7.-P.185-200.
6. *Hwang K.-P., Cangellaris A.C.* Effective permittivities for second-order accurate FDTD equations at dielectric interfaces//IEEE Microw. and Wireless Compon. Lett. - 2001.-V.11, No.4.-P.158-160.
7. *Chan C.T., Yu Q.L., Ho K.M.* Order-N spectral method for electromagnetic waves//Phys. Rev. B.-1995.-V.51, No23.-P.16635-16642.
8. *Mekis A., Chen J.C., Kurland I. Fan S., Villeneuve P.R., Joanopoulos J.D.*High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides// Phys. Rev. Lett.-1996.-V.77, No18.-P.3787 – 3790 .

Вибір численних методів для моделювання хвилеводів на фотонних кристалах .

Лавріненко А.В., Лавріненко Ю.В., Черненко Д.С.

Стаття присвячена обґрунтуванню найбільш оптимальних методів численного моделювання, які використовуються при аналізі пристроїв на основі фотонних кристалів.

Ключові слова: *алгоритм, збіжність, кінцева різниця, пласкі хвилі, ряд Фурье, рівняння Максвелла, фотонний кристал.*

Choosing Numerical Methods For Modeling Photonic Crystal Waveguides H.

Lavrinenko A.V., Lavrinenko Y.V., Chernenko D.S.

The paper discusses optimal methods for numerical modeling of components made on the base of photonic crystals.

Keywords*: algorithm, finite difference, plane wave, Fourier series, convergence, Maxwell's equations, photonic crystal.*