

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki

Bartosz Wiecech
nr albumu: 276965

*Modelowanie propagacji światła w nanostrukturach fotonicznych
metodą elementów skończonych*

Praca licencjacka
na kierunku inżynieria nanostruktur
z zakresu fotoniki

Praca wykonana pod kierunkiem
dr hab. Rafała Kotyńskiego
Zakład Optyki Informacyjnej

Warszawa, wrzesień 2014

Oświadczenie kierującego pracą

Oświadczam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i stwierdzam, że spełnia ona warunki do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

Data

Podpis kierującego pracą

Oświadczenie autora pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Oświadczam ponadto, że niniejsza wersja pracy jest identyczna z załączoną wersją elektroniczną.

Data

Podpis autora pracy

Streszczenie

Zastosowano metodę elementów skończonych do modelowania rozchodzenia się światła w periodycznych nanostrukturach fonicznych. Rozwiązywano w tym celu dwuwymiarowe wektorowe równanie falowe. Symulacje wykonano dla kryształów fonicznych o różnej strukturze sieci, do których wprowadzono defekty liniowe. Przedstawiono różnice wynikające z zastosowania fal o różnych częstościach, leżących wewnątrz fonicznej przerwy wzbronionej układu, jak i poza nią. Wykonano symulację prowadzenia modu zlokalizowanego w defekcie liniowym kryształu fonicznego. Badano również transmisję promieniowania elektromagnetycznego przez siatki dyfrakcyjne o podwójnej periodyczności. Modelowanie przeprowadzono dla układów wykonanych ze srebra, złota, chromu oraz idealnego przewodnika, dla długości fali 400 nm.

Słowa kluczowe

Metoda elementów skończonych, modelowanie elektromagnetyczne, PML, światło, wektorowe równanie falowe, kryształ foniczny, foniczna przerwa wzbroniona, siatka podfalowa

Dziedzina pracy (kody wg programu Socrates-Erasmus)

[13.2] Fizyka

Tytuł pracy w języku angielskim

Modeling of light propagation in photonic nanostructures using the finite element method

Spis treści

Rozdział 1. Wstęp.....	8
Rozdział 2. Wprowadzenie teoretyczne.....	9
2.1. Równania Maxwella i dwuwymiarowe wektorowe równanie falowe.....	9
2.2. Metoda elementów skończonych.....	11
2.3. Równanie różniczkowe typu eliptycznego i metoda jego przybliżonego rozwiązywania.....	12
2.4. Warunki brzegowe PML.....	13
2.5. Kryształy fotoniczne.....	15
2.6. Siatki dyfrakcyjne.....	16
Rozdział 3. Wyniki symulacji.....	18
3.1. Propagacja światła w kryształach fotonicznych.....	18
3.2. Elementy dyfrakcyjne o podwójnej periodyczności.....	26
Rozdział 4. Podsumowanie.....	29
Bibliografia.....	30

Rozdział 1. Wstęp

Fotonika jest szybko rozwijającą się dziedziną nauki, łączącą w sobie elementy optyki, fizyki ciała stałego, inżynierii materiałowej, informatyki oraz elektroniki. Niezwykle ważna w dzisiejszych czasach stała się możliwość kontroli nad światłem, m.in. w celu efektywnego przenoszenia informacji, dokładniejszego obrazowania, czy produkcji zaawansowanych filtrów optycznych. Najnowsze odkrycia fizyki materii skondensowanej stały się przyczółkiem do badań nad wykorzystaniem półprzewodników w optyce, co poniosło za sobą nowe, nieznane wcześniej możliwości. Mikro- i nanostruktury dielektryczne, takie jak kryształy fotoniczne, wykorzystywane od milionów lat przez naturę, umożliwiły m.in. selektywne prowadzenie i pułapkowanie światła, zaś układy metaliczno-dielektryczne stały się podstawą rozwoju plazmoniki.

Ze względu na koszty oraz trudne do przewidzenia właściwości złożonych układów fotonicznych, konieczne – w celu otrzymania pożądanych właściwości i ich optymalizacji – jest przeprowadzenie symulacji komputerowych. Dobrze rozwiniętymi metodami badania propagacji światła w nowych materiałach są na przykład FEM (metoda elementów skończonych – ang. *Finite Element Method*) oraz FDTD (metoda różnic skończonych w dziedzinie czasu – ang. *Finite Difference Time Domain*). W celu wyznaczenia struktury pasmowej układów periodycznych można zaś zastosować metodę PWM (metoda fal płaskich – ang. *Plane Wave Method*). Połączenie powyższych metod pozwala uzyskać szeroką gamę informacji na temat rozpatrywanej struktury, co umożliwia wprowadzenie ewentualnych modyfikacji w celu poprawy wydajności, a także znalezienie nowych, potencjalnych zastosowań.

W poniższej pracy bazowano na metodzie elementów skończonych, będącej jedną z metod rozwiązywania równań różniczkowych i niezwykle przydatnym narzędziem pozwalającym na modelowanie zachowania fal elektromagnetycznych w strukturach fotonicznych. Użyto jej do badania propagacji światła w kryształach fotonicznych o różnych typach sieci i różnych rozmiarach. Zastosowano ją także do określania właściwości elementów dyfrakcyjnych o podwójnej periodyczności, w zależności od kierunku oświetlania struktury oraz materiału, z którego są wykonane.

Podsumowując, wykorzystanie modelowania komputerowego w celu projektowania nowych układów nanooptycznych jest istotnym zagadnieniem, umożliwiającym produkcję współczesnych urządzeń fotonicznych. Podstawy symulacji metodą elementów skończonych, uzupełnione metodą różnic skończonych w dziedzinie czasu oraz metodą fal płaskich, są przedstawione w tej pracy.

Rozdział 2. Wprowadzenie teoretyczne

2.1. Równania Maxwella i dwuwymiarowe wektorowe równanie falowe

Pola elektromagnetyczne w próżni jednoznacznie opisywane są czterema równaniami Maxwella, których postać różniczkowa to:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} , \quad (2.1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} , \quad (2.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 , \quad (2.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} . \quad (2.1d)$$

Wektor $\mathbf{E} \equiv \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ oznacza natężenie pola elektrycznego, wektor $\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ nazywany jest indukcją magnetyczną, zaś \mathbf{J} to gęstość prądu elektrycznego. Wielkości ρ , ϵ_0 , μ_0 to kolejno gęstość ładunku elektrycznego, przenikalność magnetyczna próżni, przenikalność elektryczna próżni.

Równania Maxwella przybierają analogiczną postać w ośrodkach materialnych i są przedstawione poniżej.

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{\text{sw}} , \quad (2.2a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} , \quad (2.2b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 , \quad (2.2c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{\text{sw}} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} . \quad (2.2d)$$

Wektor \mathbf{D} to indukcja elektryczna, \mathbf{H} jest natężeniem pola magnetycznego, \mathbf{J}_{sw} – gęstością prądów swobodnych, natomiast ρ_{sw} stanowi gęstość swobodnych ładunków elektrycznych.

Pola \mathbf{D} oraz \mathbf{H} związane są z polami \mathbf{E} i \mathbf{B} poprzez równania materiałowe, zależące od właściwości danej substancji. Dla materiałów optycznie liniowych:

$$\mathbf{D} = \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E} , \quad (2.3)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu \mu_0} \mathbf{B} , \quad (2.4)$$

gdzie ϵ i μ są bezwymiarowymi, względnymi przenikalnościami elektryczną i magnetyczną, zależnymi od materiału, w którym rozwiązywane są równania Maxwella. Ponadto,

$$\mathbf{J}_{\text{sw}} = \sigma \mathbf{E} \quad (2.5)$$

nosi nazwę prawa Ohma, w którym σ to przewodność elektryczna właściwa [1].

Zakładając brak źródeł, liniowość ośrodka, monochromatyczność poszukiwanych fal elektromagnetycznych oraz wprowadzając zapis zespolony ($\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \Re(\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) \cdot e^{i\omega t})$, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \Re(\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) \cdot e^{i\omega t})$, gdzie \Re oznacza część rzeczywistą, zaś ω jest częstotliwością fali), otrzymuje się równania Maxwella w dziedzinie częstotliwości.

$$\nabla \cdot (\epsilon \tilde{\mathbf{E}}) = 0, \quad (2.6a)$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{E}} = -i\omega \tilde{\mathbf{B}}, \quad (2.6b)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{B}} = 0, \quad (2.6c)$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = i\omega \epsilon \epsilon_0 \tilde{\mathbf{E}}. \quad (2.6d)$$

Z powyższych tożsamości można następnie wyodrębnić zależność noszącą nazwę wektorowego równania falowego, gdzie $k_0 = \omega/c$ to liczba falowa, zaś $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ jest prędkością światła w próżni.

$$\nabla \times \epsilon^{-1} \nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = k_0^2 \mu \tilde{\mathbf{H}}. \quad (2.7a)$$

Wektorowe równanie falowe można zapisać także w postaci zawierającej wektor natężenia pola elektrycznego:

$$\nabla \times \mu^{-1} \nabla \times \tilde{\mathbf{E}} = k_0^2 \epsilon \tilde{\mathbf{E}}. \quad (2.7b)$$

Jeśli rozpatrywany ośrodek jest anizotropowy, ϵ i μ przyjmują postać macierzy (tensorów) diagonalnych o współczynnikach określających przenikalności elektryczne i magnetyczne dla wszystkich wyróżnionych kierunków. Ograniczając się do diagonalnej postaci anizotropii mamy,

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_z \end{bmatrix}, \quad (2.8a)$$

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z \end{bmatrix}. \quad (2.8b)$$

Ostatecznie, dla problemów dwuwymiarowych, dla których znikają pochodne cząstkowe natężenia pola elektrycznego, magnetycznego oraz przenikalności elektrycznej i magnetycznej w kierunku z , a które rozpatrywane były podczas przeprowadzania symulacji zamieszczonych w dalszej części tej pracy, otrzymuje się dwa równania. Kolejno dla polaryzacji TE (ang. *Transverse Electric*) oraz TM (ang. *Transverse Magnetic*) mamy:

$$\nabla \cdot (\mu^{-1} \nabla E_z) + k_0^2 \epsilon_z E_z = 0, \quad (2.9)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon^{-1} \nabla H_z) + k_0^2 \mu_z H_z = 0. \quad (2.10)$$

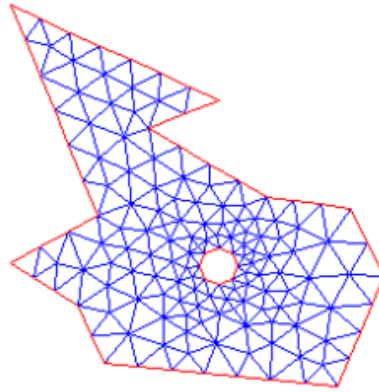
Są to równania różniczkowe typu eliptycznego. W pierwszym przypadku drgania pola

elektrycznego odbywają się prostopadle do płaszczyzny, w której przeprowadzana jest symulacja. W drugim przypadku prostopadle do niej są drgania pola magnetycznego. Warto wspomnieć, iż w literaturze spotykane są przypadki, kiedy nazewnictwo tych polaryzacji jest odwrócone.

2.2. Metoda elementów skończonych

Metoda elementów skończonych (ang. FEM – *Finite Element Method*) jest szeroko stosowaną w fizyce metodą rozwiązywania równań różniczkowych, m.in. dla układów, w których jednocześnie zachodzi kilka procesów fizycznych.

Metoda oparta jest na dyskretyzacji obszaru, w którym szukane jest rozwiązanie, na proste elementy, o w ogólności nieregularnym kształcie. W przypadku problemów dwuwymiarowych najczęściej spotykana jest siatka trójkątna, jak pokazano na Rys. 2.1.



Rys. 2.1. Przykładowy obszar symulacji podzielony nieregularną siatką trójkątną.

Rozwiązanie równania różniczkowego jest sumą przybliżonych rozwiązań znalezionych dla wszystkich elementów siatki [2].

$$f(x, y) = \sum_{i=1}^n f_i(x, y) . \quad (2.11)$$

W najprostszym przypadku funkcje $f_i(x, y)$ mają postać wielomianów pierwszego stopnia dwóch zmiennych przestrzennych:

$$f_i(x, y) = a + bx + cy . \quad (2.12)$$

Znalezienie współczynników a, b, c wymaga rozwiązania układu trzech równań liniowych z trzema niewiadomymi, których współczynnikami są kombinacje położeń (x_{iw}, y_{iw}) poszczególnych punktów węzłowych elementu oraz rozwiązań zadanego równania różniczkowego w tych punktach. Postać macierzową układu równań przedstawiono poniżej.

$$\begin{bmatrix} f_{1w} \\ f_{2w} \\ f_{3w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1w} & y_{1w} \\ 1 & x_{2w} & y_{2w} \\ 1 & x_{3w} & y_{3w} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} . \quad (2.13)$$

Tym samym macierz współczynników a, b, c dana jest jako

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1w} & y_{1w} \\ 1 & x_{2w} & y_{2w} \\ 1 & x_{3w} & y_{3w} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_{1w} \\ f_{2w} \\ f_{3w} \end{bmatrix} . \quad (2.14)$$

Metody numerycznego szukania wartości f_1, f_2, f_3 ściśle zależą od typu rozwiązywanego równania różniczkowego.

2.3. Równanie różniczkowe typu eliptycznego i metoda jego przybliżonego rozwiązywania

Postać równania różniczkowego typu eliptycznego opisuje równanie (2.15), gdzie f to funkcja szukana na obszarze Ω , zaś a, b i c są współczynnikami równania.

$$-\nabla \cdot (c \nabla f) + a f = b . \quad (2.15)$$

Wartość f na brzegu obszaru Ω (dalej: $\partial\Omega$) określają warunki typu (2.16a) Dirichleta lub (2.16b) Neumana.

$$h f = r , \quad (2.16a)$$

$$\mathbf{n} (c \nabla f) + q f = g . \quad (2.16b)$$

Wielkości h, r i q to kolejne współczynniki równań, zaś \mathbf{n} to wektor normalny do $\partial\Omega$. W przypadku dwuwymiarowego wektorowego równania falowego, warunki brzegowe dobierane są tak, by możliwie jak najlepiej uniknąć powstawania odbić na granicy obszaru symulacji. Tego problemu w znacznej mierze można uniknąć stosując PML (idealnie dopasowana warstwa, ang. *Perfectly Matched Layer*), o czym traktuje rozdział 2.4.

Równanie (2.15) mnoży się przez funkcję próbkującą v i całkuje stronami na obszarze Ω , otrzymując równanie (2.17), a następnie całkuje przez części, doprowadzając je do postaci przedstawionej w (2.18) [3,4].

$$\int_{\Omega} (-\nabla \cdot c \nabla f) v + a u f) dx = \int_{\Omega} b v dx , \quad (2.17)$$

$$\int_{\Omega} ((c \nabla f) \cdot \nabla v + a f v) dx - \int_{\partial\Omega} (-q f + g) v ds = \int_{\Omega} b v dx . \quad (2.18)$$

W dalszej kolejności, powyższe równanie zapisuje się w tzw. postaci słabej, zaś jego rozwiązanie nosi nazwę rozwiązania słabego. Szukane są funkcje f spełniające (2.19) dla wszystkich v .

$$\int_{\Omega} ((c \nabla f) \cdot \nabla v + a f v - b v) dx - \int_{\partial\Omega} (-q f + g) v ds = 0 . \quad (2.19)$$

Funkcje f i v należą do tej samej przestrzeni \mathbf{V} . Należy wybrać skończeniowymiarową podprzestrzeń $\mathbf{V}' \subset \mathbf{V}$, której wymiar $\dim \mathbf{V}'$ określa liczbę punktów węzłowych, do której należy będzie zbiór funkcji próbkujących v_i , tworzących bazę. Wymiar \mathbf{V}' stanowi o dokładności wyniku obliczeń. Poszukiwane rozwiązanie problemu jest elementem podprzestrzeni leżącym najbliżej wyniku rozwiązania słabego w sensie normy $\|r\|$, której postać podana jest poniżej.

$$\|r\| = \int_{\Omega} (c |f|^2 + a f^2) dx + \int_{\partial\Omega} q f^2 ds . \quad (2.20)$$

$f(x)$ można następnie rozwinąć w szereg, otrzymując przybliżone rozwiązanie

$$f(x) \approx \sum_{j=1}^{dim \mathbf{V}'} F_j v_j(x) . \quad (2.21)$$

Wstawienie powyższego wzoru do zdyskretyzowanego równania (2.18) daje poniższy układ równań:

$$\sum_{j=1}^{dim \mathbf{V}'} \left(\int_{\Omega} ((c \nabla v_j) \cdot \nabla v_j + a v_j v_i) dx + \int_{\partial \Omega} q v_j v_i ds \right) F_j = \int_{\Omega} b v_i dx + \int_{\partial \Omega} g v_i ds . \quad (2.22)$$

$$i = 1, \dots, dim \mathbf{V}'$$

Wielkość (2.23a) określana jest mianem macierzy sztywności, zaś wielkość (2.23b) – macierzy masy. Nazwy te wynikają ze stosowalności powyższej metody do rozwiązywania problemów z dziedziny statyki.

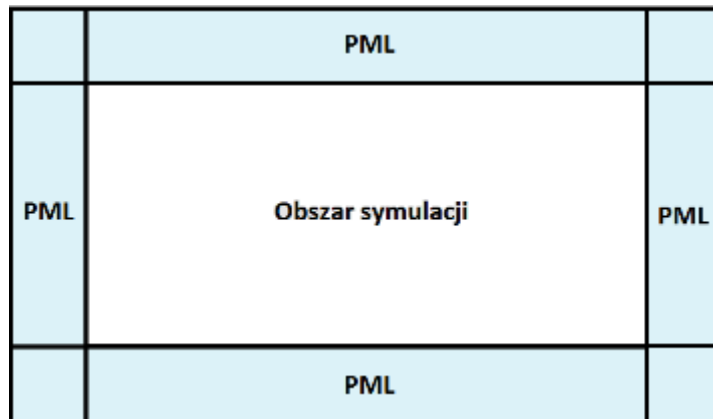
$$K_{i,j} = \int_{\Omega} (c \nabla v_j) \cdot \nabla v_i dx , \quad (2.23a)$$

$$M_{i,j} = \int_{\Omega} a v_j v_i dx . \quad (2.23b)$$

Otrzymany układ równań postaci $\mathbf{A}\mathbf{F} = \mathbf{B}$ daje rozwiązania równania różniczkowego typu eliptycznego dla wszystkich punktów węzłowych siatki. Szersze informacje na temat sposobu przybliżonego znajdowania rozwiązań równań różniczkowych przedstawione są w [3,4].

2.4. Warunki brzegowe PML

Poważnym problemem napotykanym podczas wykonywania symulacji elektromagnetycznych są odbicia propagujących się fal od brzegów obszaru symulacji, wynikające z niedoskonałości zastosowanych warunków brzegowych. Wynikiem bywa poważne zaburzenie otrzymanych rezultatów. W celu uniknięcia tego problemu, wprowadza się nieodbijającą i stratną warstwę, noszącą nazwę PML (idealnie dopasowana warstwa, ang. *Perfectly Matched Layer*) [5].



Rys. 2.2. Schemat układu otoczonego warstwą PML.

Dla fali padającej prostopadle, warunkiem braku odbić na granicy ośrodków jest równość impedancji $\eta = \sqrt{\mu/\epsilon}$.

$$\sqrt{\frac{\mu_0 \mu_1}{\epsilon_0 \epsilon_1}} = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu_2}{\epsilon_0 \epsilon_2}}. \quad (2.24)$$

Uogólnieniem tego warunku na przypadek padania ukośnego jest sztucznie wprowadzony obszar o specjalnie dobranych, anizotropowych przenikalnościach ϵ i μ . PML nie należy do obszaru rozpatrywanego zagadnienia i jest niefizyczny. Materiały o właściwościach zbliżonych do idealnie dopasowanej warstwy można jednakże uzyskać w postaci struktur wielowarstwowych [6]. Ostatecznie, wprowadzając macierz

$$S = \begin{bmatrix} s^{-1} & 0 \\ 0 & s \end{bmatrix}, \quad (2.25)$$

$s = 1 + ai$, gdzie a jest dowolnie wybraną liczbą rzeczywistą, dwuwymiarowe wektorowe równania falowe dla materiałów niemagnetycznych w obszarach PML dla polaryzacji TE i TM na granicy poziomej obszaru symulacji będą miały postać kolejno (2.26a) i (2.26b), zaś w obszarach na granicy pionowej (2.27a) i (2.27b).

$$-\nabla \cdot (S \nabla E_z) - s k_0^2 \epsilon_z E_z = 0, \quad (2.26a)$$

$$-\nabla \cdot (S \epsilon^{-1} \nabla H_z) - s k_0^2 H_z = 0, \quad (2.26b)$$

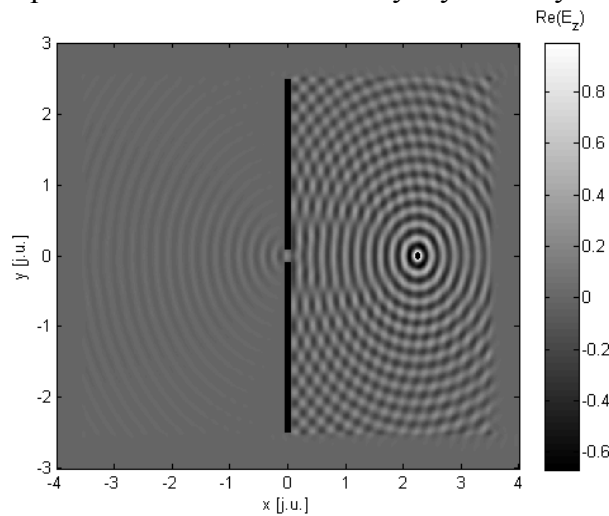
$$-\nabla \cdot (S^{-1} \nabla E_z) - s k_0^2 \epsilon_z E_z = 0, \quad (2.27a)$$

$$-\nabla \cdot (S^{-1} \epsilon^{-1} \nabla H_z) - s k_0^2 H_z = 0, \quad (2.27b)$$

gdzie operator ∇ ograniczony jest do dwóch wymiarów.

Równania te zmodyfikować można także dla obszarów narożnych, jednakże zastosowanie jednego z powyższych również daje zadowalające rezultaty.

Przykład zastosowania idealnie dopasowanej warstwy przedstawiono na Rys. 2.3. Rozważono dyfrakcję fali elektromagnetycznej o polaryzacji TE na cienkiej szczelinie wyciętej w materiale będącym idealnym przewodnikiem. Dzięki zastosowaniu warunków brzegowych PML, można zaobserwować brak powstawania odbić. Poniższy wynik otrzymano używając metody FEM.

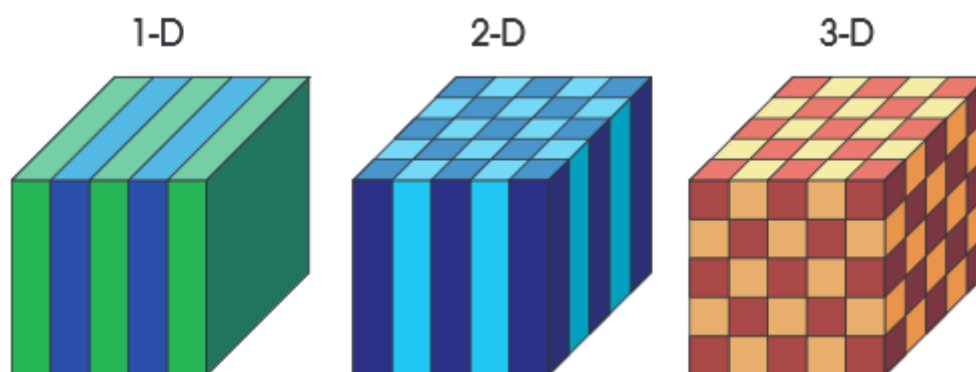


Rys. 2.3. Dyfrakcja fali elektromagnetycznej na cienkiej szczelinie.

2.5. Kryształy fotoniczne

Kryształem nazywa się periodyczną strukturę, złożoną z atomów bądź molekuł. Sposób rozmieszczenia tych komponentów definiuje rodzaj sieci krystalicznej układu. Charakterystyczną właściwością kryształów jest możliwość występowania tzw. przerwy wzbronionej. Oznacza to, iż dla pewnych wartości energii i pędu, elektron nie może poruszać się w takiej strukturze. W przypadku, kiedy w określonym zakresie energii propagacja nie jest możliwa w żadnym kierunku, przerwę nazywa się całkowitą, w przeciwnym razie nazywana jest częściową. Przykładem występowania całkowitej przerwy wzbronionej jest struktura pasmowa półprzewodników, w których rozdziela ona pasmo walencyjne od pasma przewodnictwa.

Analogiczną strukturą w optyce jest kryształ fotoniczny. Jest to periodyczna struktura złożona z materiałów dielektrycznych, różniących się między sobą przenikalnością elektryczną. Okres takiego układu jest porównywalny z długością fali, dla której ma on spełniać swoje funkcje. Ze względu na kierunki okresowości, wyróżnia się kryształy jedno-, dwu- i trójwymiarowe.



Rys. 2.4. Schemat jedno-, dwu- i trójwymiarowego kryształu fotonicznego. Różnice w kolorach symbolizują materiały o różnych wartościach przenikalności elektrycznej [7].

Podobnie jak w zwykłych kryształach (czy generalnie – ośrodkach periodycznych), tryby kryształów fotonicznych mają postać fal Blocha. Zdarza się również, iż promieniowanie elektromagnetyczne o określonych częstościach nie może rozchodzić się w strukturze. Mówi się wtedy o fotonicznej przerwie wzbronionej. Jeśli, dla danego zakresu częstości, przerwa występuje dla wszystkich polaryzacji i kierunków propagacji, nazywa się ją całkowitą, w przeciwnym zaś wypadku – częściową.

Możliwość selektywnej propagacji światła pozwala na tworzenie struktur o ciekawych właściwościach optycznych, jak np. zwierciadła odbijające promieniowanie elektromagnetyczne o określonym zakresie długości fali, materiały o prawie zerowej prędkości grupowej („spowalnianie” światła), przeciwnych wartościach prędkości grupowej i fazowej (wsteczna propagacja), czy materiały, na granicy których występuje ujemne załamanie. Inną możliwością jest tworzenie falowodów opartych na kryształach fotonicznych. Do struktury wprowadzany jest defekt liniowy, tworzony poprzez usunięcie rzędu lub kilku rzędów dielektrycznych słupków umieszczonych w homogenicznej matrycy. W zakresie fotonicznej przerwy wzbronionej pojawia się tryb defektowy, pozwalający na propagację promieniowania elektromagnetycznego wzdłuż powstałego falowodu. Zaletą takiej struktury jest znacznie niższa stratność np. w zakresie światła widzialnego, w porównaniu do falowodów metalicznych.

2.6. Siatki dyfrakcyjne

Siatka dyfrakcyjna jest to periodyczny układ szczelin (apertur) bądź przeszkód, powodujący zmiany natężenia, fazy (lub obydwu jednocześnie) fali przechodzącej lub odbitej. Wyróżnia się dwa podstawowe typy siatek: amplitudowe oraz fazowe. W pierwszym przypadku światło napotyka naprzemiennie na przezroczyste i nieprzezroczyste obszary, przez co następuje modulacja amplitudy. W drugim przypadku różnica dróg optycznych, wynikająca z karbowania przezroczystych elementów, powoduje modulację fazy. Jeżeli karbowana siatka dyfrakcyjna nie jest miejscami całkowicie przezroczysta, mamy do czynienia z modulacją zarówno amplitudową, jak i fazową.

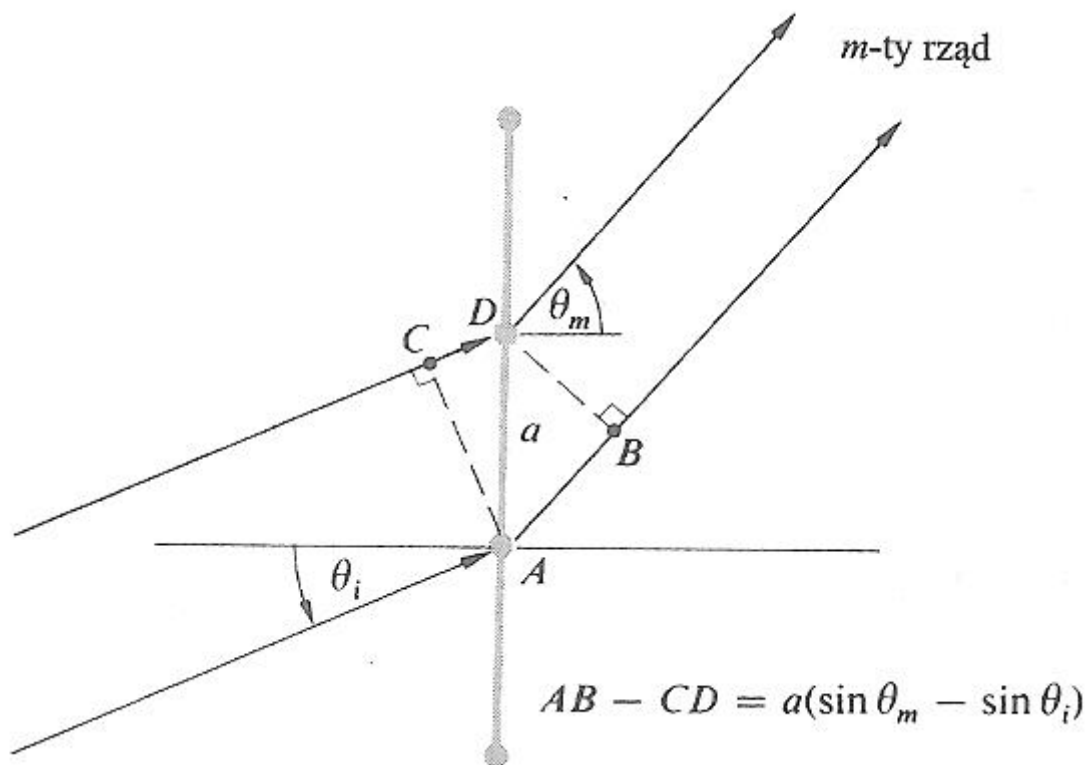
Dla fali padającej prostopadłe na siatkę transmisyjną, wprowadzić można równanie

$$A \sin \theta = m \lambda \quad (2.28)$$

wiążące okres siatki A , kąt θ , pod jakim obserwuje się maksima natężeń oraz długość fali λ . m jest liczbą całkowitą, indeksującą rząd ugięcia. Powyższe równanie uogólnić można dla padania skośnego [8]:

$$A (\sin \theta_m - \sin \theta_i) = m \lambda \quad (2.29)$$

θ_i jest kątem, pod jakim fala pada na strukturę, zaś θ_m to kąt, pod jakim obserwuje się m -ty rząd ugięcia.



Rys. 2.5. Schemat skośnego padania promieniowania elektromagnetycznego na transmisyjną siatkę dyfrakcyjną [8].

Powyższe zależności mówią o tym, iż dla danej długości fali i określonego okresu siatki dyfrakcyjnej, istnieje skończona liczba rzeczywistych rzędów ugięcia. Wiadomo, iż w dwóch wymiarach zachodzi zależność

$$k_x^2 + k_y^2 = k_0^2 n^2, \quad (2.30)$$

gdzie n jest współczynnikiem załamania ośrodka zewnętrznego. Jednocześnie, dla fali ugiętej na układzie o periodyczności w kierunku x , wektor k_x zachowany jest z dokładnością do wielokrotności $\frac{2\pi}{\Lambda}$:

$$k_x^{(0)} = k_x^{(i)} + \frac{2\pi m}{\Lambda}, \quad (2.31)$$

gdzie indeks (i) odpowiada fali padającej, zaś (0) opuszczającej siatkę.

Tym samym, dla dużych m , $|k_x^{(0)}| > k_0 n$, toteż $k_y^{(0)} = \sqrt{k_0^2 n^2 - (k_x^{(0)})^2}$ przyjmuje wartości urojone.

Mamy wówczas do czynienia z ewanescentnymi, zanikającymi wykładniczo, rzędami ugięcia.

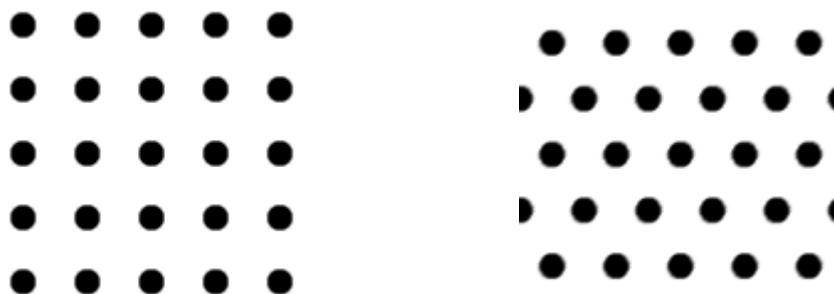
W przypadku siatek dyfrakcyjnych złożonych z kilku układów elementów o różnym okresie periodyczności, liczba rzeczywistych rzędów ugięcia będzie zależeć od kierunku, z którego taka struktura jest oświetlana. Zostało to pokazane w symulacjach, których wyniki zamieszczono w podrozdziale 3.2.

Rozdział 3. Wyniki symulacji

W tym rozdziale zaprezentowano samodzielnie przeprowadzone symulacje. Wykorzystano metodę elementów skończonych (pakiet „PDE Toolbox” firmy MathWorks), której wyniki porównano z wybranymi rezultatami otrzymanymi metodą różnic skończonych w dziedzinie czasu [9] (program MEEP [10]). W celu znalezienia struktury pasmowej kryształów fotonicznych, użyto programu MPB – MIT Photonic Bands [11], bazującego na metodzie fal płaskich.

3.1. Propagacja światła w kryształach fotonicznych

Rozpatrywano dwuwymiarowe kryształy fotoniczne o dwóch typach sieci: kwadratowej oraz trójkątnej.

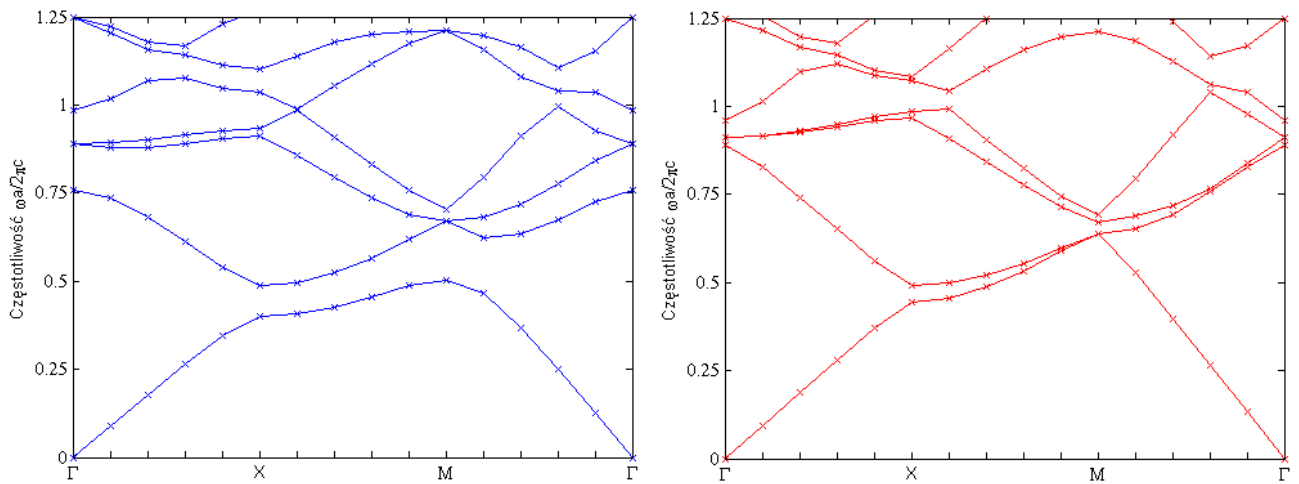


Rys. 3.1. Schematy dwuwymiarowych sieci krystalicznych: kwadratowej (z lewej) oraz trójkątnej (z prawej).

Każdy z czarnych elementów na powyższym rysunku jest dielektrycznym słupkiem o promieniu $0,2a$ (gdzie a jest okresem sieci) i $n_1 = 1,7865$, co jest współczynnikiem załamania szafiru (Al_2O_3) dla fali elektromagnetycznej o długości 400 nm [12]. Umieszczono je w materiale o $n_2 = 1$, co z dobrą dokładnością można uznać za współczynnik załamania powietrza (w istocie jest to współczynnik załamania próżni).

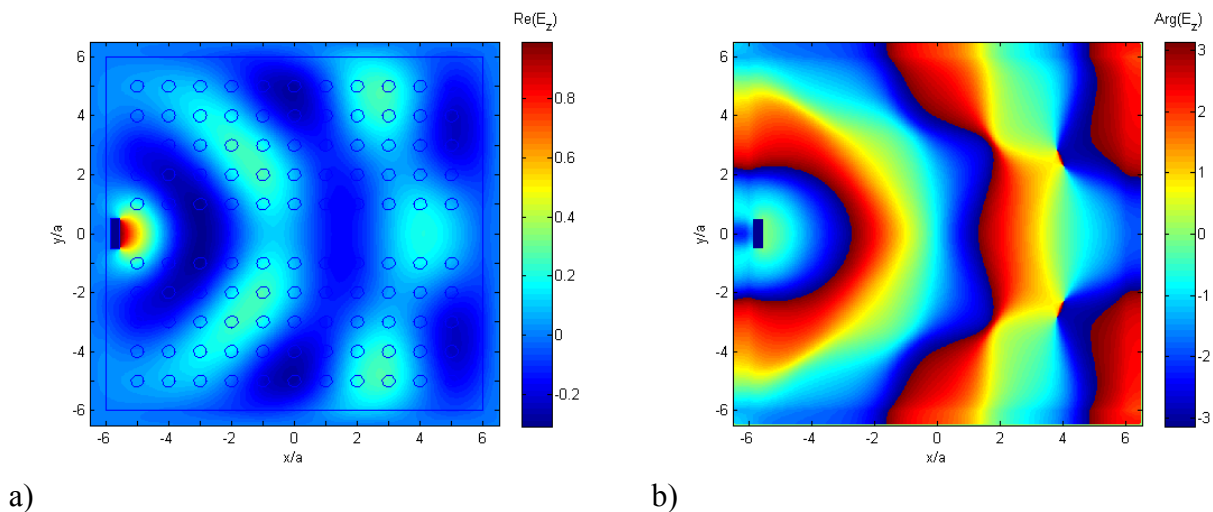
Struktury pasmowe wyznaczone były dla określonego, uprzednio zdefiniowanego, współczynnika załamania. Jednakże, ze względu na dyspersję, faktycznie zmienia się on wraz ze zmianą długości fali [13]. W związku z tym, modelowanie przeprowadzano dla uprzednio wspomnianej fali o długości 400 nanometrów, zaś zmiany w częstotliwości (wyrażonej w bezwymiarowych jednostkach $2\pi c/a$) wprowadzano poprzez modyfikację rozmiarów kryształu, a w szczególności wartości a .

Na Rys 3.2. pokazano wykres pasmowy, otrzymany dla światła o polaryzacji TE oraz TM w kryształach fotonicznych o kwadratowym typie sieci. Dla żadnej z wymienionych polaryzacji nie obserwuje się fotonicznej przerwy wzbronionej. Oznacza to, iż promieniowanie elektromagnetyczne może propagować się w takiej strukturze dla wszystkich częstotliwości, dla których określono strukturę pasmową. Poprzez wycięcie jednego rzędu dielektrycznych słupków, otrzymano fałowod, a następnie, metodą elementów skończonych, zasymulowano rozchodzenie się w nim światła.

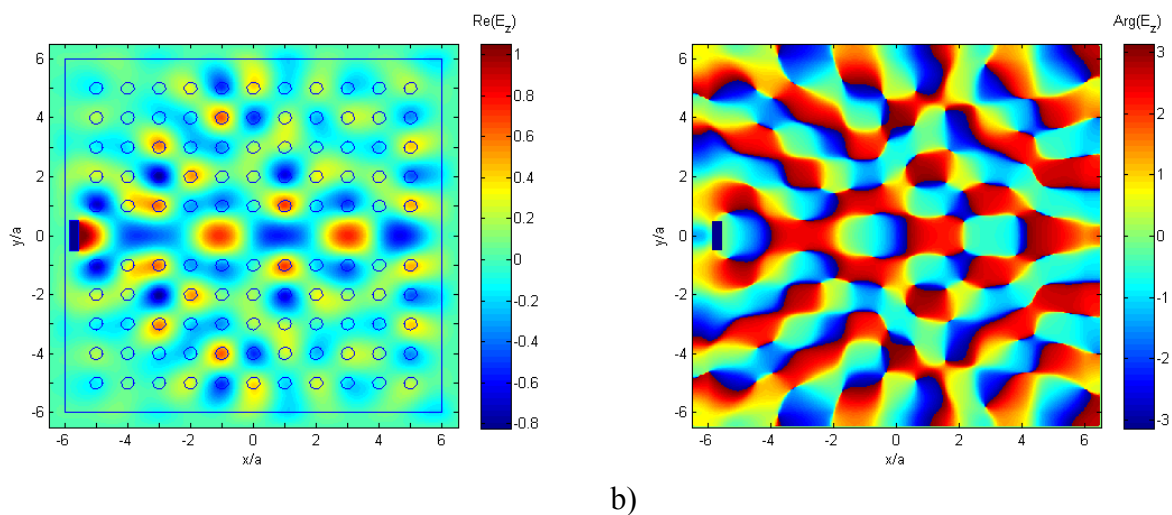


Rys. 3.2. Struktura pasmowa kryształu o sieci kwadratowej, polaryzacja TE (lewy wykres), polaryzacja TM (prawy wykres).

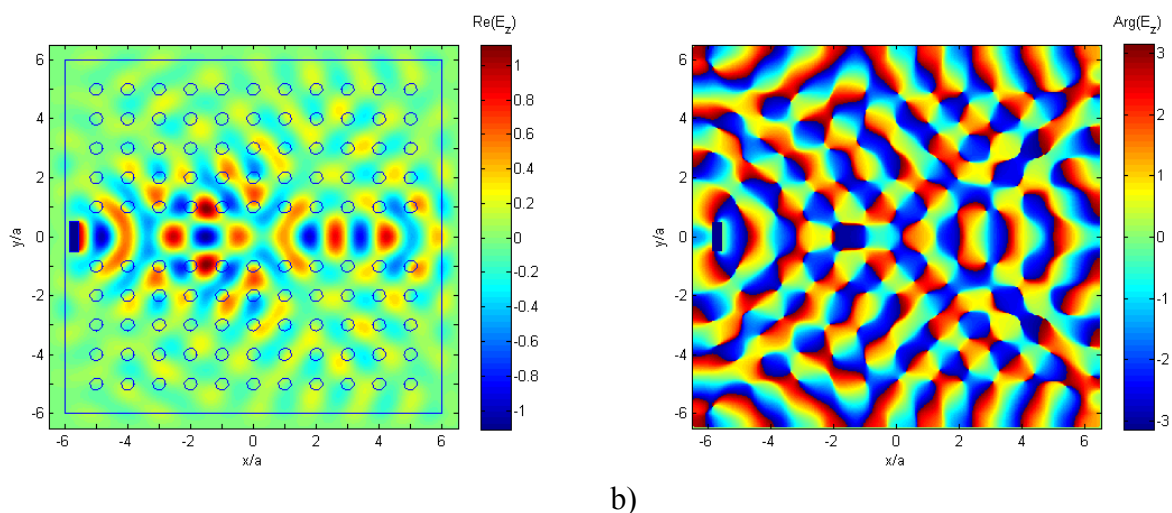
Rys. 3.3.-3.5. obrazują wyniki symulacji uzyskane dla powyższego przypadku dla trzech różnych częstotliwości promieniowania. W każdym przypadku, pole elektromagnetyczne wprowadzono do układu dzięki zastosowaniu źródła sztywnego, znajdującego się w pobliżu rozpatrywanej struktury. Symulacje przeprowadzono dla polaryzacji TE. Przedstawiono zarówno część rzeczywistą pola E_z fali, jak i jego fazę. Podobnie, jak zilustrowano to schematycznie na Rys. 2.2, zewnętrzny obszar symulacji stanowi PML. Wszystkie symulacje propagacji promieniowania elektromagnetycznego zostały przeprowadzone przy użyciu metody FEM, chyba, że w podpisie zaznaczono inaczej.



Rys. 3.3. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci kwadratowej z defektem liniowym. a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,20 \ 2\pi c/a$.



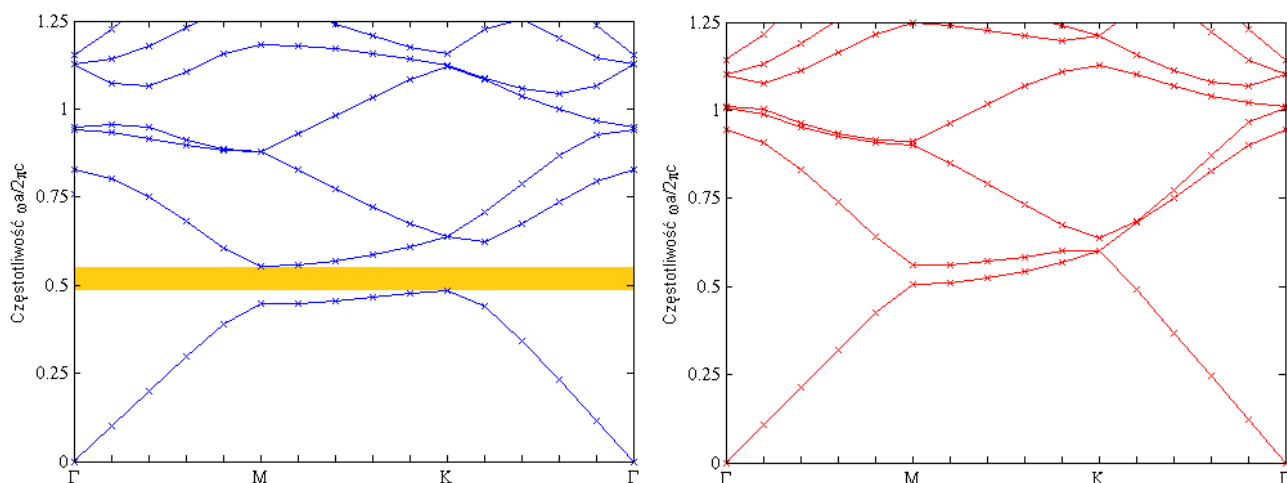
Rys. 3.4. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci kwadratowej z defektem liniowym. a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,45 \cdot 2\pi c/a$.



Rys. 3.5. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci kwadratowej z defektem liniowym. a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,70 \cdot 2\pi c/a$.

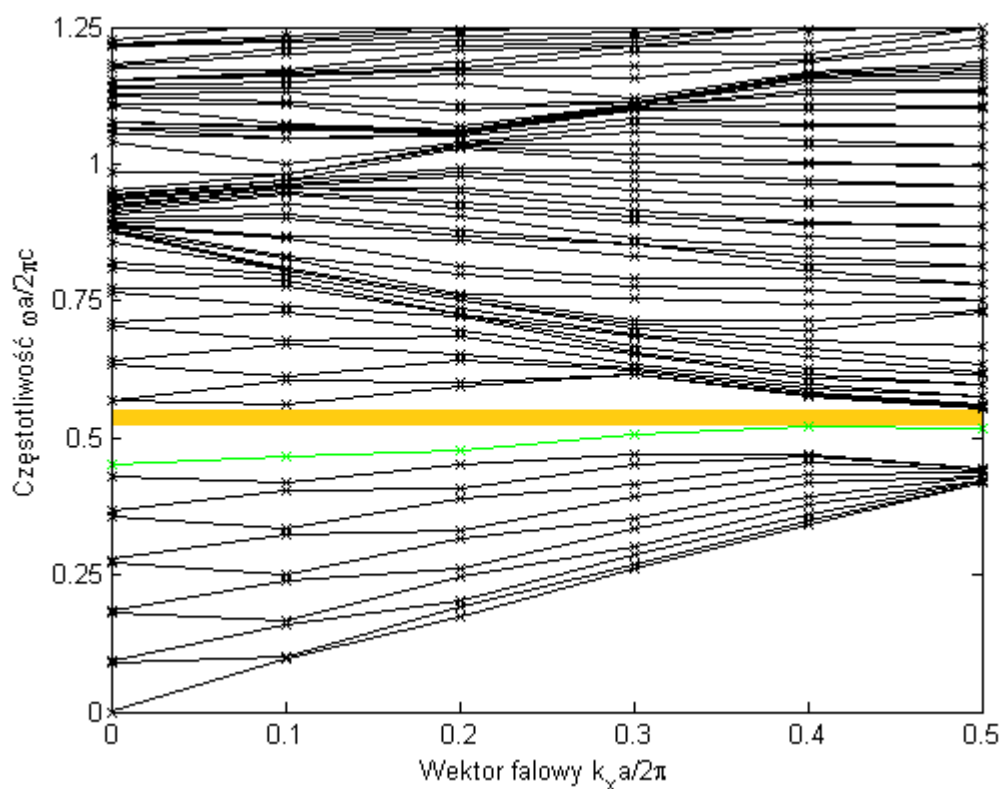
Powyższe symulacje potwierdzają, iż dla wybranych częstotliwości, światło propaguje się w rozpatrywanej strukturze.

Analogicznie, wyznaczono strukturę pasmową kryształu fotonicznego o sieci trójkątnej i zobrazowano ją na Rys. 3.9. Dla polaryzacji TE, obserwuje się przerwę wzbronioną w zakresie częstotliwości $\omega a/2\pi c$ od ok. 0,48 do ok. 0,55. Została ona zaznaczona kolorem żółtym. W przypadku polaryzacji TM, przerwy nie zaobserwowano. W związku z tym, podobnie jak dla sieci kwadratowej, przeprowadzając symulacje skupiono się jedynie na pierwszej z tych polaryzacji.



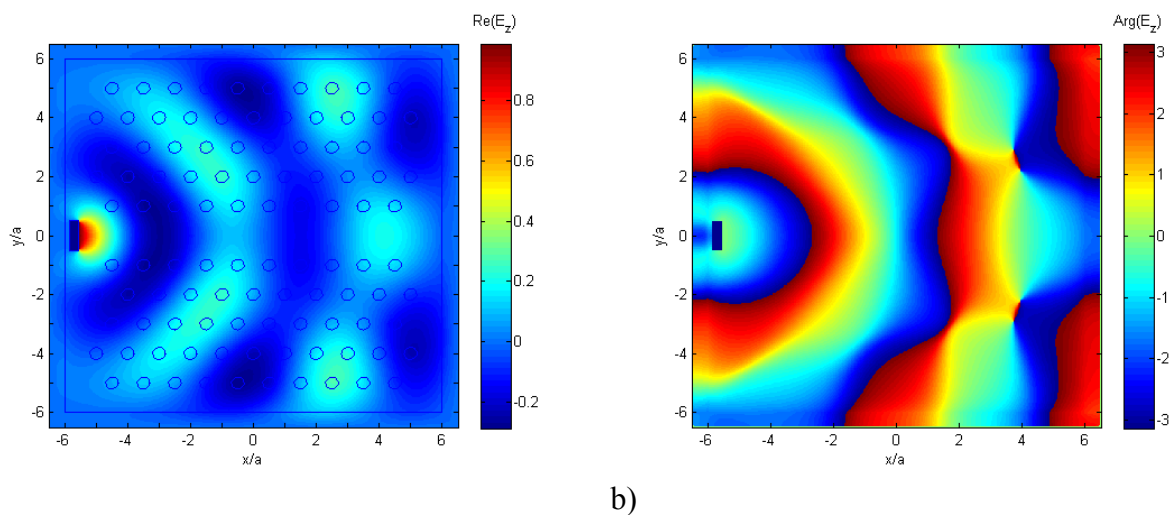
Rys. 3.6. Struktura pasmowa kryształu o sieci trójkątnej, polaryzacja TE (lewy wykres), polaryzacja TM (prawy wykres).

Wyznaczenie struktury pasmowej dla falowodu, powstałego przez usunięcie jednego rzędu słupków, wskazuje na powstanie modu przewodzonego (wyszczególnionego kolorem zielonym), leżącego wewnątrz przerwy wzbronionej kryształu, co widać na rysunku poniżej.

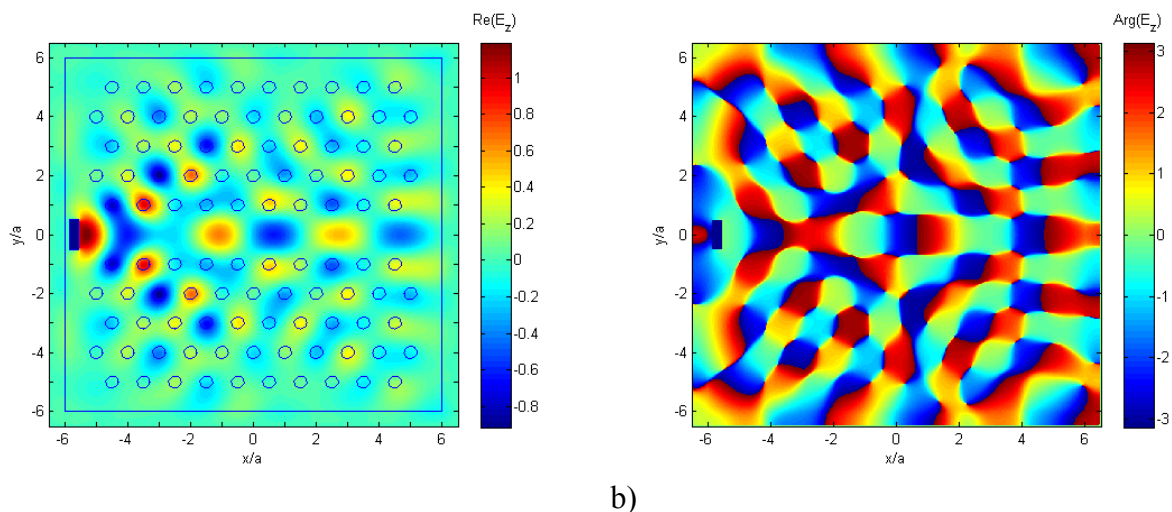


Rys. 3.7. Struktura pasmowa kryształu o sieci trójkątnej z defektem liniowym.

Rys. 3.8.-3.10. obrazują rozchodzenie się w takim falowodzie promieniowania o częstościach $\omega a/2\pi c$ kolejno: 0,20; 0,45 oraz 0,75. Nie leżą one w zakresie przerwy wzbronionej, mają natomiast zobrazować różnice pomiędzy wynikami otrzymanymi dla sieci kwadratowej oraz trójkątnej.

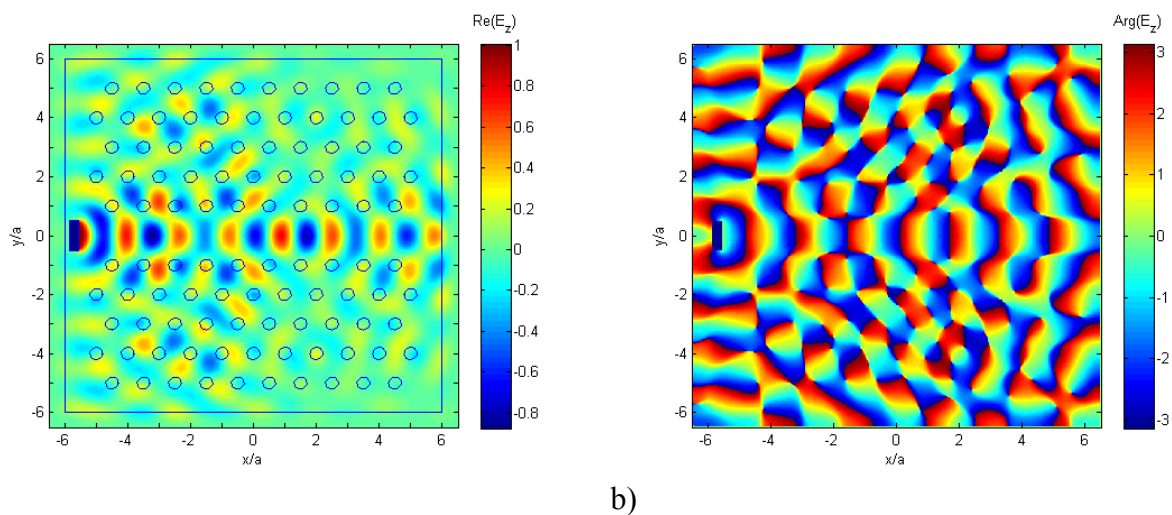


Rys. 3.8. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci trójkątnej z defektem liniowym. a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,20 \cdot 2\pi c/a$.



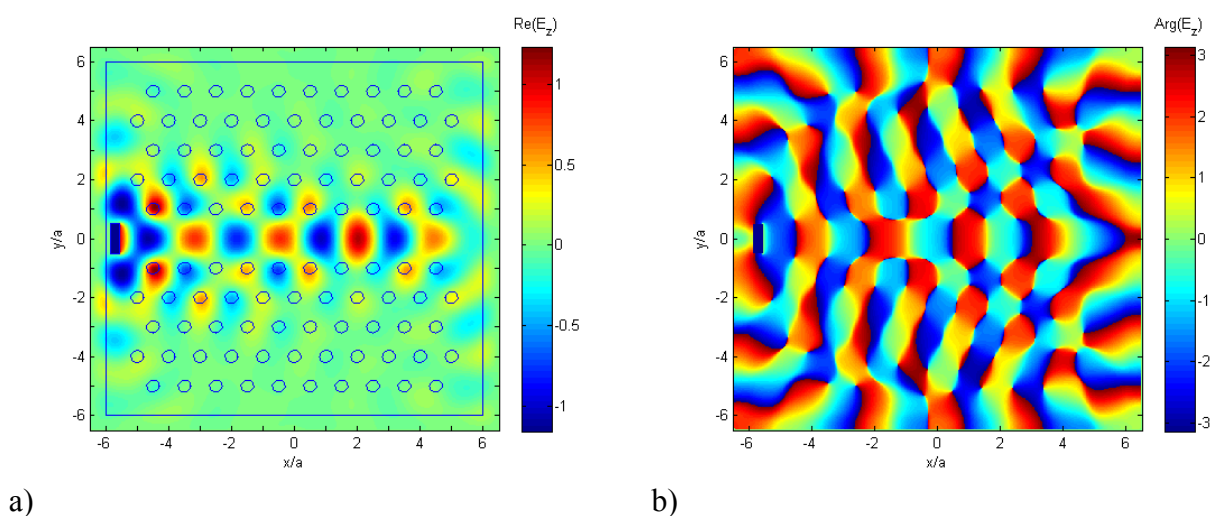
Rys. 3.9. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci trójkątnej z defektem liniowym. a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,45 \cdot 2\pi c/a$.

Rys. 3.8, otrzymany dla niskiej częstotliwości, czyli dużej długości fali, jest zbliżony z rezultatem otrzymanym dla takiej samej fali wejściowej podczas rozpatrywania układu o sieci kwadratowej. Można wysnuć wniosek, iż w tym wypadku struktura kryształu nie wpływa na sposób rozchodzenia się światła. Jest to potwierdzeniem faktu, iż stała sieci kryształu fotonicznego powinna być porównywalna z długością fali, z którą kryształ ten ma oddziaływać, o czym wspomniano w podrozdziale 2.5. Dopiero dla wyższych częstotliwości różnice w propagacji zaczynają być zauważalne. W niniejszej pracy nie modelowano jednakże propagacji światła dla bardzo wysokich częstotliwości, czyli dla fal o długościach o wiele mniejszych, niż stała sieci kryształu fotonicznego.



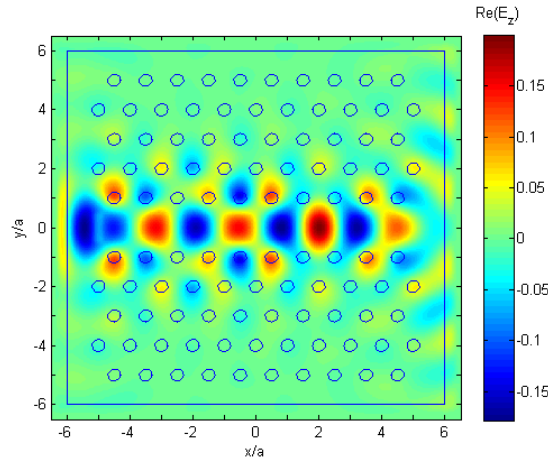
Rys. 3.10 Propagacja fali EM w kryształie fotonicznym o sieci trójkątnej z defektem liniowym.
a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,70 \cdot 2\pi c/a$.

W dalszej kolejności, wykonano modelowanie dla fali elektromagnetycznej o częstotliwości z zakresu modu prowadzonego. Łatwo zauważyć, iż światło propaguje się głównie wzdłuż defektu liniowego, zaś w zasadzie nie obserwuje się rozchodzenia się w innych kierunkach. Zostało to zobrazowane poniżej.



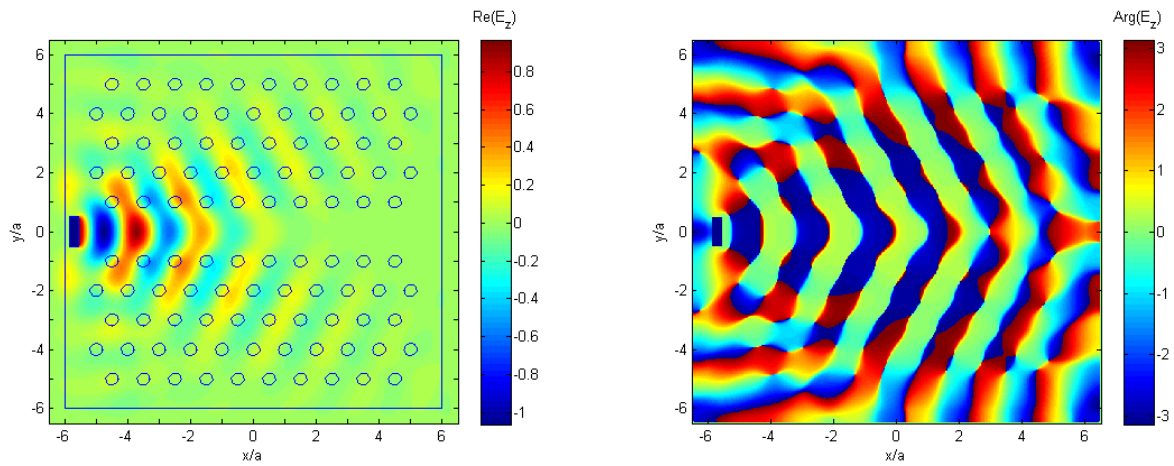
Rys. 3.11 Propagacja fali EM w kryształie fotonicznym o sieci trójkątnej z defektem liniowym.
a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,50 \cdot 2\pi c/a$.

W celach porównawczych, symulację powtórzono metodą różnic skończonych w dziedzinie czasu. Otrzymano porównywalny rezultat. Niewielkie różnice mogą wynikać z faktu, iż wynikiem obliczeń jest pole chwilowe, jak również z faktu, iż w programie MEEP zastosowano inny typ źródła, niebędący źródłem sztywnym, jak również inną amplitudę wejściową. Nie ma jednakże wątpliwości, iż rezultaty otrzymane metodami FEM i FDTD są zgodne.



Rys. 3.12. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci trójkątnej z defektem liniowym. Pole chwilowe E_z dla $\omega = 0,50 \cdot 2\pi c/a$. Symulacja wykonana metodą FDTD.

Wreszcie, dla częstotliwości leżącej wewnątrz przerwy wzbronionej (wybrano wartość $\omega = 0,538 \cdot \omega a/2\pi c$), obserwuje się zanik amplitudy fali wraz ze wzrostem odległości od źródła. Wyniki symulacji przeprowadzonych metodą elementów skończonych są więc zbieżne z zakresami fotonicznej przerwy wzbronionej i modu prowadzonego, wyznaczonymi programem MPB.

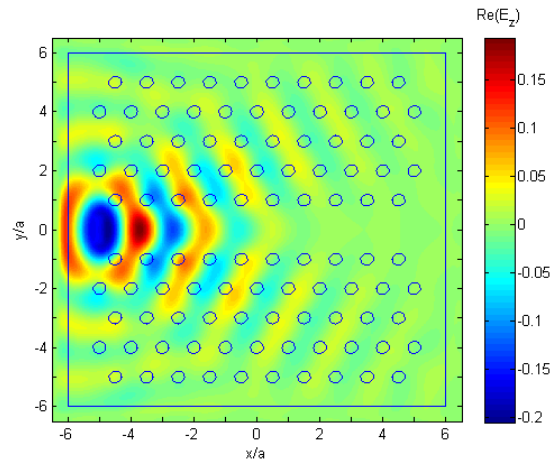


a)

b)

Rys. 3.13. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci trójkątnej z defektem liniowym. a) Pole chwilowe E_z , b) faza pola E_z dla $\omega = 0,538 \cdot 2\pi c/a$.

Podobnie jak w przypadku symulacji przeprowadzonych dla prowadzenia światła w zlokalizowanym modzie defektowym, metoda różnic skończonych w dziedzinie czasu daje niemal identyczne rezultaty, co metoda elementów skończonych, dla częstotliwości leżącej wewnątrz fotonicznej przerwy wzbronionej.

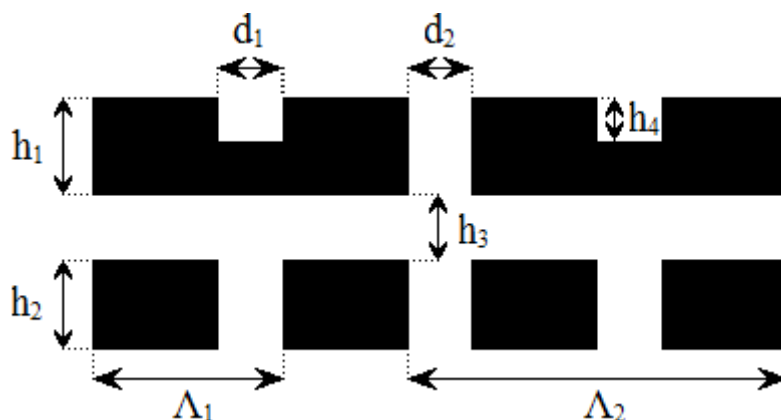


Rys. 3.14. Propagacja fali EM w kryształach fotonicznych o sieci trójkątnej z defektem liniowym. Pole chwilowe E_z dla $\omega = 0,538 \ 2\pi c/a$. Symulacja wykonana metodą FDTD.

3.2. Elementy dyfrakcyjne o podwójnej periodyczności

Elementy dyfrakcyjne o podwójnej periodyczności są to układy zbudowane z dwóch siatek podfalowych o różnych okresach. Zgodnie z tym, co przedstawiono w rozdziale 2.6, liczba rzeczywistych rzędów ugięcia zależy od kierunku, z jakiego światło pada na tak skonstruowaną strukturę. Jednocześnie, możliwe jest zaobserwowanie niesymetrycznej transmisji promieniowania elektromagnetycznego oraz usunięcie zerowego rzędu ugięcia [14].

W symulacjach przeprowadzonych na potrzeby tego rozdziału, rozpatrzono układy zbudowane kolejno z idealnego przewodnika, chromu, złota oraz srebra. Ich schemat przedstawiono na poniższym rysunku.



Rys. 3.15. Schemat siatki dyfrakcyjnej o podwójnej periodyczności.

Zastosowano wymiary kolejno: $2\Lambda_1 = \Lambda_2 = 533$ nm; $d_1 = d_2 = 89$ nm; $h_1 = h_2 = 127$ nm; $h_3 = 89$ nm; $h_4 = 63,5$ nm.

Poniższe symulacje zostały przeprowadzone metodą FEM dla fali elektromagnetycznej o długości 400 nm. Zastosowano polaryzację TM. Wartości przenikalności elektrycznych dla rozważanych metali zestawiono w tabeli.

Tabela 3.1 Przenikalności elektryczne wybranych metali dla fal o długości 400 nm [15].

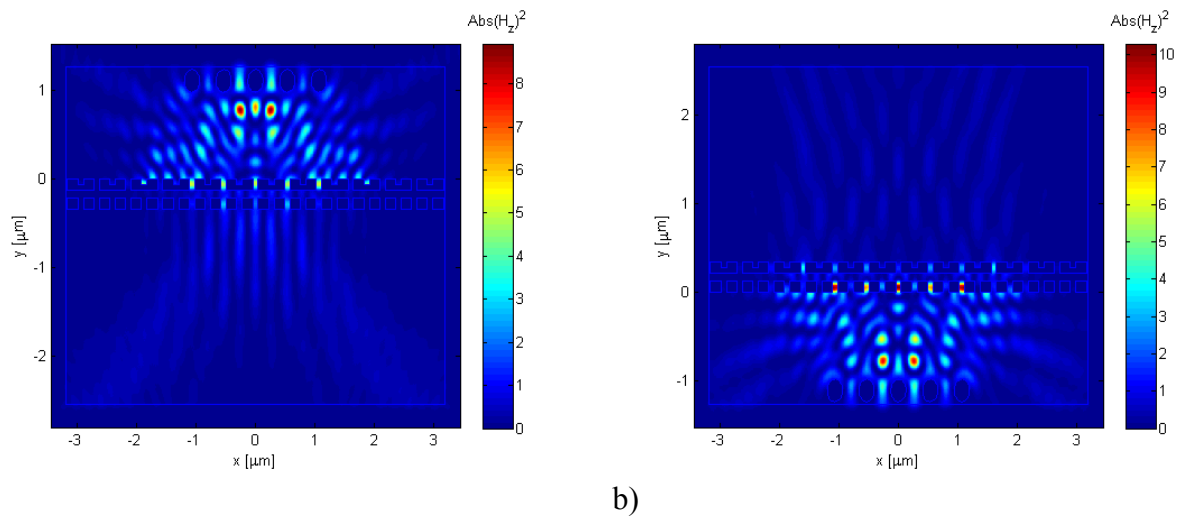
	ϵ_1	ϵ_2
Srebro	-4,422	0,210
Złoto	-1,658	5,735
Chrom	-4,055	11,480

Przenikalności ϵ_1 oraz ϵ_2 wnoszą wkład w zespoloną przenikalność elektryczną

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (3.1)$$

Do emisji fal kulistych użyto pięciu źródeł sztywnych, których centra znajdowały się nad szczelinami siatki.

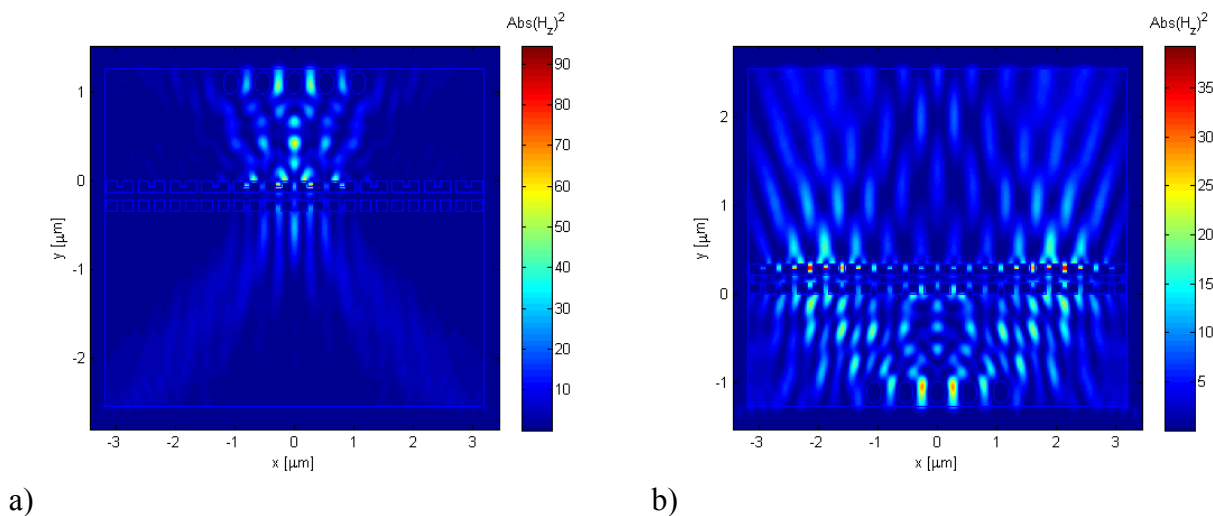
Rys. 3.16. obrazuje transmisję światła przez strukturę, w której siatka dyfrakcyjna zbudowana jest z idealnego przewodnika. Dla fali elektromagnetycznej padającej z góry widać dwa rzędy ugięcia: -1 i 1. W przypadku padania z drugiej strony, obserwuje się jedynie zerowy rząd ugięcia, co jest to zgodne z teorią przedstawioną w podrozdziale 2.6.



Rys. 3.16. Siatka z idealnego przewodnika, a) padanie z góry, b) padanie z dołu.

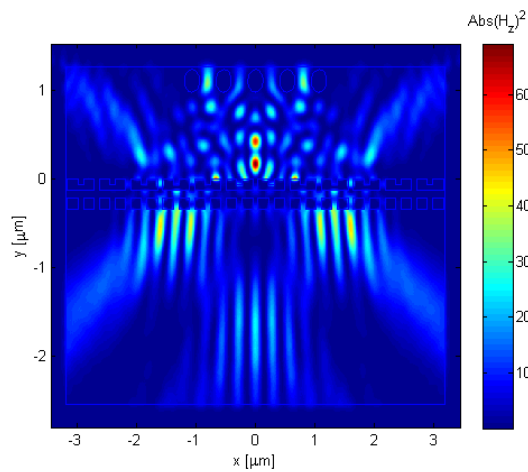
Zastosowanie fal kulistych spowodowało, iż w zerowym rzędzie ugięcia obserwuje się delikatne odchylenie od kąta 0° w stosunku do normalnej względem kierunku periodyczności struktury. Wynika to ze wzoru 2.29.

Porównywalne rezultaty otrzymano w przypadku symulacji przeprowadzonych dla chromu. Obserwuje się zwiększoną transmisję w porównaniu z idealnym przewodnikiem, jednakże można wysnuć wniosek, iż z trzech rozpatrywanych metali, ten jest do niego najbardziej podobny.

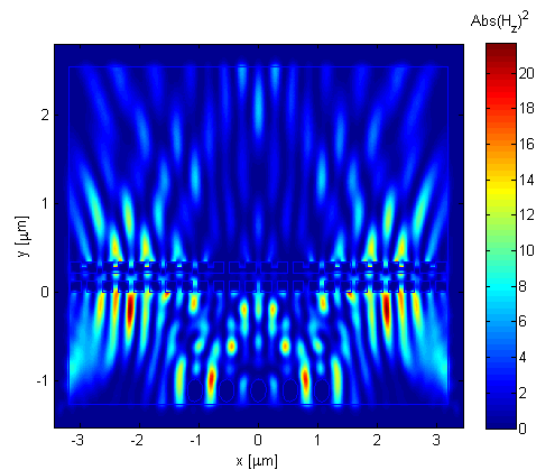


Rys. 3.17. Siatka z chromu, a) padanie z góry, b) padanie z dołu.

W przypadku zastosowania złota, obserwuje się wzmożoną transmisję przez strukturę. Można zauważyć wnikanie światła w elementy układu. Dla symulacji, w której fala elektromagnetyczna padała z góry, wyraźnie można dostrzec trzy rzędy ugięcia.



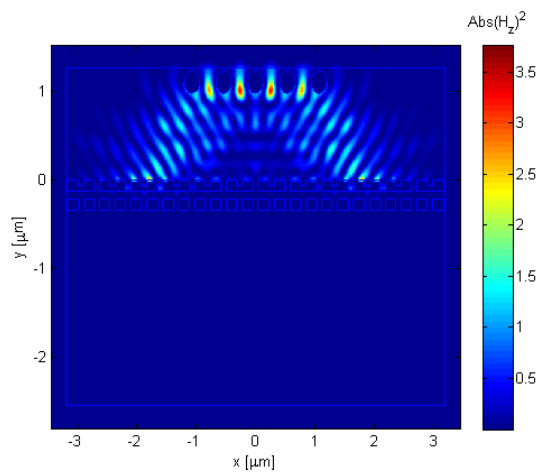
a)



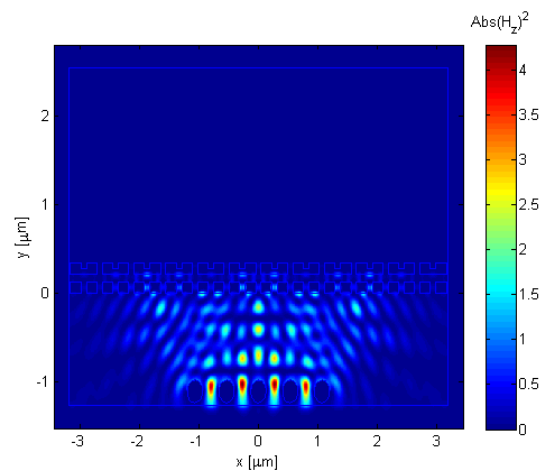
b)

Rys. 3.18. Siatka ze złota, a) padanie z góry, b) padanie z dołu.

Ciekawe rezultaty otrzymano dla układu zbudowanego ze srebra, dla którego transmisja promieniowania elektromagnetycznego okazała się szczątkowa bez względu na kierunek jego padania.



a)



b)

Rys. 3.19. Siatka ze srebra, a) padanie z góry, b) padanie z dołu.

Rozdział 4. Podsumowanie

Na potrzeby niniejszej pracy, przeprowadzono szereg symulacji dotyczących propagacji światła w kryształach fotonicznych oraz elementach dyfrakcyjnych o podwójnej periodyczności. Bazowano na metodzie elementów skończonych.

W przypadku kryształów fotonicznych, zaczęto od wyznaczenia ich struktury pasmowej, co było możliwe dzięki posilkowaniu się metodą fal płaskich, mającą zastosowanie w optycznych układach periodycznych. Rozpatrzono dwa rodzaje sieci: kwadratową i trójkątną. Zachowanie światła o określonej długości fali modelowano poprzez zmianę rozmiarów kryształu fotonicznego. Sprawdzono, iż w niektórych tego typu strukturach, dla pewnych polaryzacji fali, w określonym zakresie częstości, występuje fotoniczna przerwa wzbroniona. Pokazano również, iż poprzez wprowadzenie defektów, możliwe staje się efektywne prowadzenie światła o częstości leżącej wewnątrz takiej przerwy dzięki powstawaniu modu defektowego. Wybrane wyniki porównano następnie z symulacjami przeprowadzonymi metodą różnic skończonych w dziedzinie czasu.

Dla elementów dyfrakcyjnych o podwójnej periodyczności wykazano, iż ilość obserwowanych rzeczywistych rzędów ugięcia zależna jest w ogólności od kierunku oświetlania struktury. Udowodniono też, iż znaczny wpływ na sposób działania układu ma materiał, z którego jest on wykonany. W tym celu modelowanie przeprowadzono dla idealnego przewodnika, chromu, złota oraz srebra. Dla idealnego przewodnika i chromu zauważono wiele podobieństw, w przypadku złota obserwowano wzmożoną transmisję promieniowania elektromagnetycznego, zaś w przypadku srebra – nie obserwowano jej prawie w ogóle.

Pokazano, iż metoda elementów skończonych jest przydatnym narzędziem, mogącym służyć do projektowania układów optycznych o charakterystycznych właściwościach. Pomocnicze użycie narzędzi takich, jak metoda fal płaskich, znacząco ułatwiło zasymulowanie różnic w zachowaniu się światła w zależności od rozmiarów struktury, czy materiału, z jakiego jest wykonana. Udowodniono, iż niezwykle ważne w efektywnym projektowaniu nowych materiałów jest połączenie kilku technik pozwalających określić właściwości struktury. Daje to możliwość łatwej optymalizacji elementów optycznych, a także szansę na efektywne projektowanie nowych, bardziej złożonych układów.

Bibliografia

- [1] D. J. Griffiths, *Podstawy elektrodynamiki*, wyd. 2, Wydawnictwo Naukowe PWN (2005), str. 354-366
- [2] M. N. O. Sadiku, *Numerical Techniques in Electromagnetics*, wyd. 2, CRC Press (2000), rozdział 6
- [3] C. Johnson, *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*, Cambridge University Press (1987)
- [4] R. E. Bank, *PLTMG A Software Package for Solving Elliptic Partial Differential Equations, User's Guide 6.0*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA (1990)
- [5] J.P. Berenger, *Perfectly Matched Layer (PML) for Computational Electromagnetics*. Morgan and Claypool, Los Altos (2007)
- [6] A. Pastuszczyk, M. Stolarek, T. J. Antosiewicz i R. Kotyński, *Multilayer metamaterial absorbers inspired by perfectly matched layers*, Optical and Quantum Electronics, DOI 10.1007/s11082-014-9986-z (2014)
- [7] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn i R. D. Meade, *Photonic Crystals, Molding the Flow of Light*, wyd. 2, Princeton University Press (2008), str. 4
- [8] E. Hecht, *Optyka*, wyd. 1, Wydawnictwo Naukowe PWN (2005), str. 479-482
- [9] A. Taflov, S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, wyd. 3, Artech House (2005)
- [10] A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos i S. G. Johnson, *MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method*, Computer Physics Communications **181**, str. 687–702 (2010)
- [11] S. G. Johnson i J. D. Joannopoulos, *Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis*, Optics Express **8**, str. 173-190 (2001)
- [12] I. H. Malitson i M. J. Dodge. *Refractive Index and Birefringence of Synthetic Sapphire*, J. Opt. Soc. Am. **62**, 1405 (1972)
- [13] B. E. A. Saleh i M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics*, wyd. 2, Wiley-Interscience (2007), str. 173-174
- [14] M. Stolarek, D. Yavorskiy, R. Kotyński, C. J. Zapata Rodríguez, J. Łusakowski i T. Szoplik, *Asymmetric transmission of terahertz radiation through a double grating*, Optics Letters **38**, str. 839-841 (2013)
- [15] P. B. Johnson i R. W. Christy. *Optical Constants of the Noble Metals*, Physical Review B **6**, str. 4370-4379 (1972)