

## FDTD Solutions 入门教程

### 1 Silver Nanowire Tutorial

#### 1.1.1 问题综述

当光波入射到金属纳米粒子上时，光与金属表面附近的电荷密度相互作用产生的表面等离子体极化或者叫表面等离激元（surface plasmon polaritons）扮演着重要角色。本例研究的是一个直径为 50 nm 的银纳米线，我们来确定表面等离子体极化谐振并计算在这个谐振附近作为波长函数的吸收、散射和消光截面积。

#### Solvers FDTD

##### 相关文件

建议读者先下载相关文件。这些文件可以从 Lumerical 的在线帮助网页上得到，也可以在 FDTD Solutions 的安装目录里找到。这些 fsp 文件含有设计参数和模拟运算的所有信息，因此你可以快速地浏览，而不需要重新输入每一个参数。lsf 文件就是用于高级分析的文本程式。

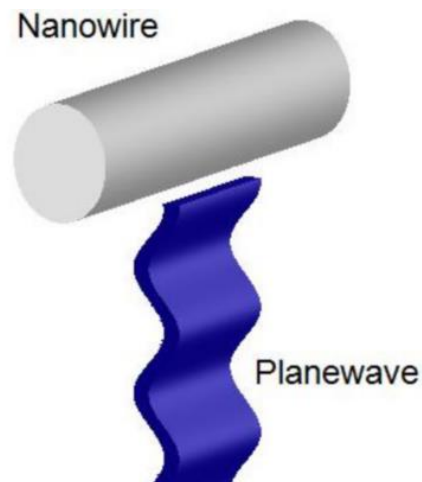
[nanowire.fsp](#)  
[plotcs.lsf](#),  
[nanowire\\_theory.csv](#)

##### 本题目包括

[结果与讨论](#)  
[建模指南](#)

##### 也可以参见

[Surface Plasmons](#)



#### 问题综述：

散射截面积被定义为

$$\sigma_{\text{scat}}(\omega) = \frac{P_{\text{scat}}(\omega)}{I_{\text{source}}(\omega)},$$

这里  $P_{\text{scat}}$  是总散射功率[W]， $I_{\text{inc}}$  是入射强度[W/m<sup>2</sup>]。在二维情况下，功率通常以 [W/m] 描述，因此，散射截面积  $\sigma_{\text{scat}}$  具有长度单位。把散射区的四个功率监视器的功率相加即得到总散射功率。

类似地，吸收截面积定义为

$$\sigma_{\text{abs}}(\omega) = \frac{P_{\text{abs}}(\omega)}{I_{\text{inc}}(\omega)},$$

这里  $P_{abs}$  是由纳米线吸收的总功率。其吸收可以通过计算流入四个位于全场区的监视器的功率来计算。

消光截面积是吸收和散射截面积的总和：

$$\sigma_{ext}(\omega) = \sigma_{abs}(\omega) + \sigma_{scat}(\omega)$$

### 1.1.2 建模指南

本节包含二个独立部分。模拟（仿真）文件可以重新建立（从“模型建立”开始），或下载相关文件，这是可以省略的设置部分，你可以直接进入第二部分。

#### 本题目包括

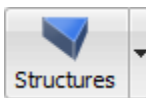
仿真文件的建立和设置

运行仿真文件，图示结果

近场数据作图

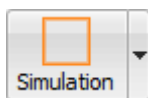
#### 模型建立

• 打开一个空白的仿真文件，请参阅 [FDTD Solutions GUI 页面](#)。



• 按下 **STRUCTURES** 按钮上的箭头 并从下拉菜单中选择 **CIRCLE**。按照下面的参数来设置此圆的特性：

tab	property	value
	name	nanowire
Geometry	x (nm)	0
	y (nm)	0
	radius (nm)	25
Material	material	Ag (Silver) - Palik (0-2um)




• 点击 **SIMULATION** 按钮 产生模拟区。 注意如果您的按钮看起来不象左边的按钮，必须从按钮上的箭头中获得仿真区。按照下面的参数来设置模拟区：

tab	property	value
General	simulation time (fs)	200
	dimension	2D
Geometry	x (nm)	0
	y (nm)	0
	z (nm)	0
	x span (nm)	800
	y span (nm)	800


Mesh Settings	mesh accuracy	4
	mesh refinement	conformal variant 1

•需要注意的是，因为我们使用的是 2D 模拟区域，如“z span”是无关的。在下面的叙述中，这些属性的设置将被省略，并且可以使用的默认值（在  $z = 0$ ）。

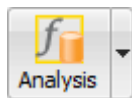
•按下 SIMULATION 按钮上的箭头并从下拉菜单中选择 MESH OVERRIDE 。按照下面的参数来设置网格覆盖区属性：

tab	property	value
General	dx (nm)	1
	dy (nm)	1
Geometry	x (nm)	0
	y (nm)	0
	x span (nm)	110
	y span (nm)	110



按下 SOURCES 按钮上的箭头  并从下拉菜单中选择 TFSF 光源。按照下面的参数来设置光源：

tab	property	value
General	polarization angle	0
Geometry	x (nm)	0
	y (nm)	0
	x span (nm)	100
	y span (nm)	100
Frequency/Wavelength	Wavelength start (nm)	300
	Wavelength stop (nm)	400




•按下 ANALYSIS 按钮上的箭头  并从下拉菜单中选择 OPTICAL POWER，这将打开 物件库 Object Library 分析组窗口。


•加一个 CROSS SECTION 分析组，命名为 "scat"，按照下面的参数来设置：

tab	property	value
	name	scat
Setup à Variables	x (nm)	0
	y (nm)	0
	x span (nm)	110
	y span (nm)	110
	z span (nm)	110*

\* 由于是 2D 仿真，此数值大小不影响仿真。

- 点击  产生一个拷贝，命名为"total"并按照下面的参数来设置该分析组：

tab	property	value
	name	total
Setup à Variables	x (nm)	0
	y (nm)	0
	x span (nm)	90
	y span (nm)	90


- 按下 MONITORS 按钮上的箭头  并从下拉菜单中选择 GLOBAL PROPERTIES。将 FREQUENCY POINTS 设置为 100。


- 按下 MONITORS 按钮上的箭头并从下拉菜单中选择 FIELD TIME。按照下面的参数来设置监视器：


tab	property	value
	name	time
Geometry	x (nm)	28
	y (nm)	26


海基科技 研发埠

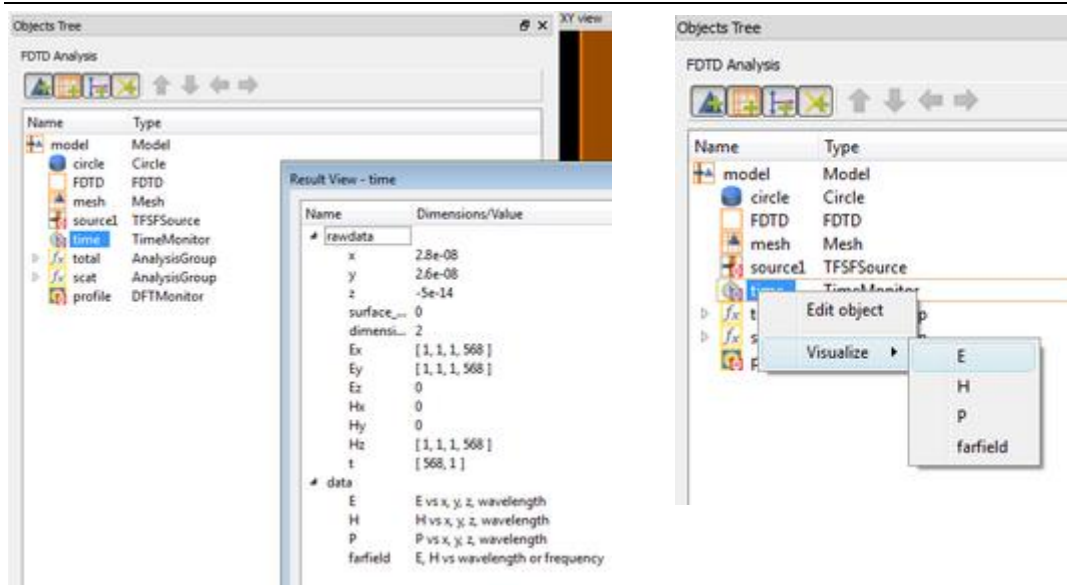
仿真运行，截面积绘图

- 点击 CHECK 按钮  打开 MATERIAL EXPLORER。点击 FIT AND PLOT 按钮画出折射率作为波长函数的图形。

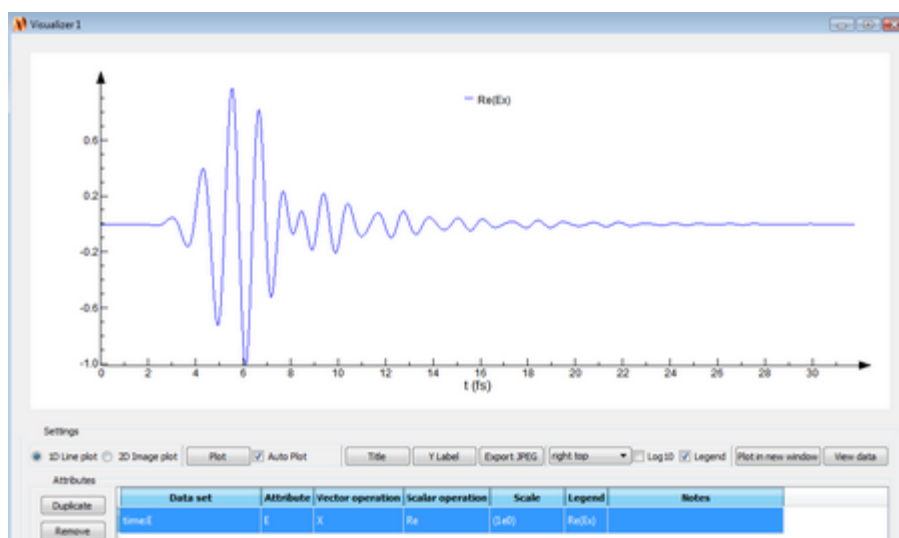
- 点击 CHECK  按钮选择 "Check simulation and memory requirements" 查看仿真所需的内存。

- 点击左侧工具栏 VIEW SIMULATION MESH 按钮  (和 ZOOM 按钮) 检查仿真时所用的网格尺寸是否足够细。如需有关如何使用这些工具的信息，请参考 [Layout editor section of the reference guide](#)。

- 点击 RUN 按钮  运行仿真文件。
- 一旦运行完成后，所有的监视器和分析组将存有数据。Results View 窗口将显示所选物件（下图时间监视器名为 time）的所有参数和数据变量，右键点击这个 time 监视器，选择 Visualize -> E，可以画电场的时间特性。



•然后，您可以在 Visualizer 选择要绘制的 E 场的数据。下面的屏幕截图显示了电场 X 分量的实部。

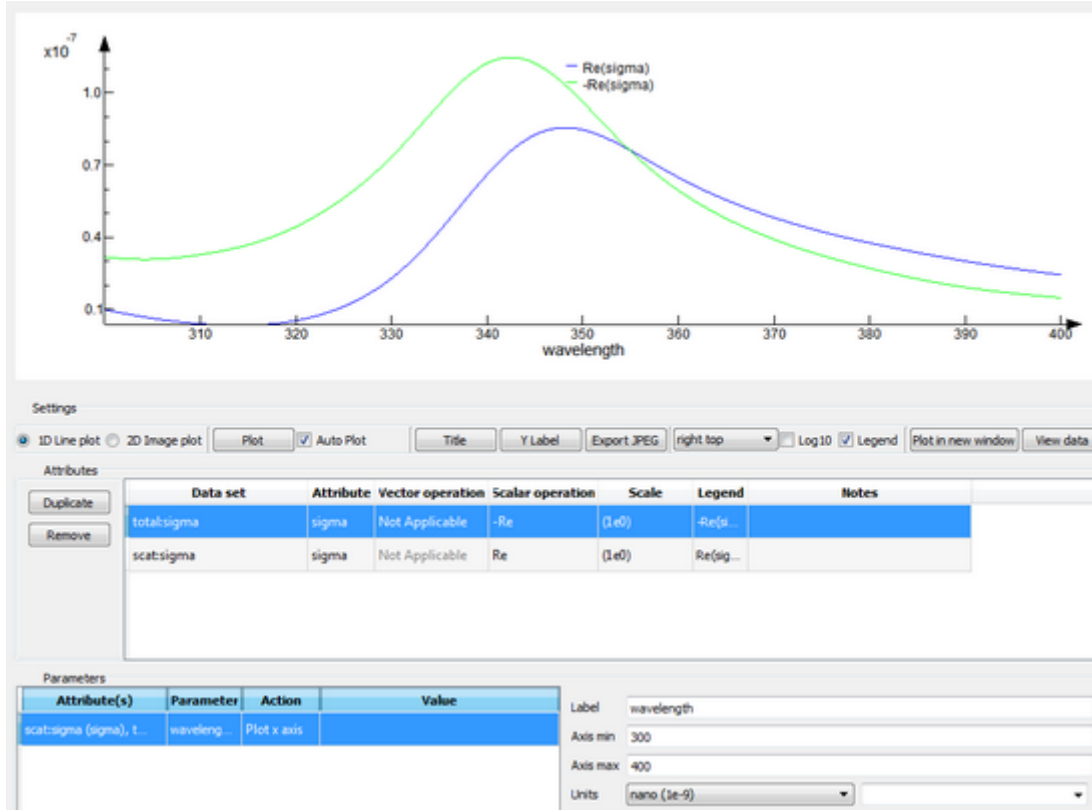


•要绘制横截面结果，用鼠标右键单击“scat”和“total”分析组，并选择“Run analysis”。这将运行分析组的脚本来计算横截面结果。

•再次右键单击“scat”分析组，你会看到一个选项， Visualize->sigma，这将在 Visualizer 里绘制散射截面与频率的函数关系。要绘制作为波长的函数，只需将“Parameter”选项中“f”变为“lambda”（在 “Parameter”下面）。您还可以将“Parameter”中的 Units”部分改为纳米单位。


•不关闭 Visualizer，再点击“total”并选择 add visualize1->sigma，这将在同一 Visualizer 中同时显示 2 个横截面结果。


•注意“total”吸收截面是负的，因为我们要的功率是流入这个区的，而不是流出的。您可以在 “Scalar operation”选-Re 来添加一个负号，此时两个结果都是正的。




## 与理论结果比较

- 尽管我们用 Visualizer 可以绘制图形结果，但是要与理论计算结果比较时，我们需要通过脚本。
- 打开文本编辑器 SCRIPT FILE EDITOR (请参考以下说明 [Introduction section of the Getting Started examples](#))。
- 从本章第一页下载 “plots.lsf” 脚本文件。

- 在 Script 窗口点击 OPEN SCRIPT 按钮  浏览并打开 “plots.lsf” 脚本文件。

- 点击 RUN SCRIPT 按钮  运行脚本文件。此文件将自动产生如上图所示的吸收、散射和消光截面积。

## 近场绘图

- 点击 SWITCH 按钮  切换回编辑模式 (layout mode)。
- 编辑 mesh，设置  $dx = dy = 0.5\text{nm}$ 。
- 按下 MONITORS 按钮上的箭头并从下拉菜单中选择 FREQUENCY DOMAIN FIELD PROFILE。按照下面的参数来设置监视器：

tab	property	value
	name	profile
General	override global monitor settings	check

	use source limits	unchecked
	frequency points	1
	wavelength center (nm)	345
Geometry	monitor type	2D Z-normal
	x (nm)	0
	y (nm)	0
	x span (nm)	90
	y span (nm)	90

• 点击 RUN 按钮运行。

• 一旦仿真运行完毕，在 Visualizer 绘制场分布：右键点击这个 Profile 监视器，-> Visualize -> E，按 "Plot in new window" 可以获得独立于 Visualizer 的图形。注意选择 Ey 和  $abs^2$  以获得 Y 分量的强度。

• 在图中的 SETTINGS 菜单设置 colorbar limits。将 colorbar min 设置为 0, colorbar max 设置为 5 将绘制出指定频率的场分布图，参见前面“讨论与结果”一节。

### 1.1.3 结果与讨论

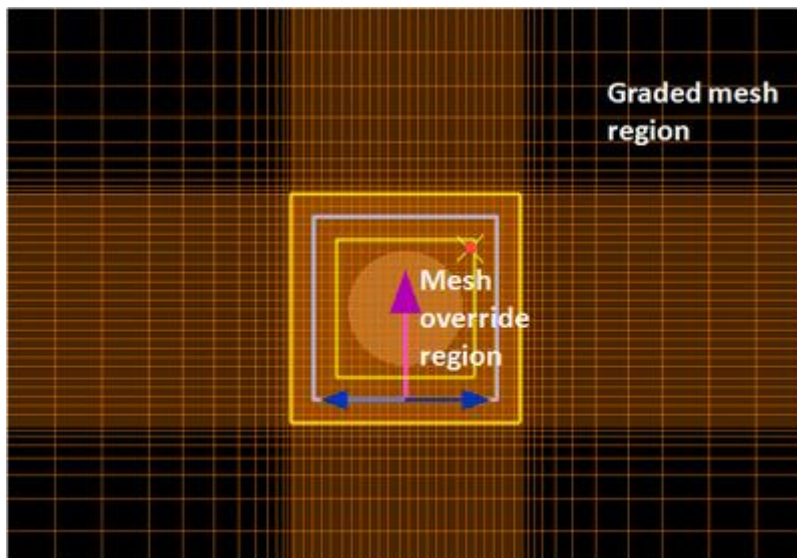
#### 建模

建模（见下面一页）完成后就可以看到如下的图形（纳米线是模拟区中心的圆形）。围绕纳米线的两个黄色框是监视器，在两个监视器之间的灰线形成的第三个框显示 TFSF 光源。

总场-散射场（TFSF）光源是平面波，光源的传播方向（k vector）显示为紫红色箭头而电场的偏振方向（E field vector）由蓝色的双箭头表示。此光源把模拟区分为两个：内部区是全场，包含入射的平面波和粒子的散射场；外部区只计算散射场，因为入射的平面波被减去。您可以在用户指南中的光源部分找到更多关于 TFSF 光源的介绍。

由于我们使用的光源是 TFSF 光源，纳米线的散射功率可以从流出光源外（散射场部区）的监视器透射率算出。纳米线吸收功率可以通过流入四个位于全场区的监视器的功率来计算。

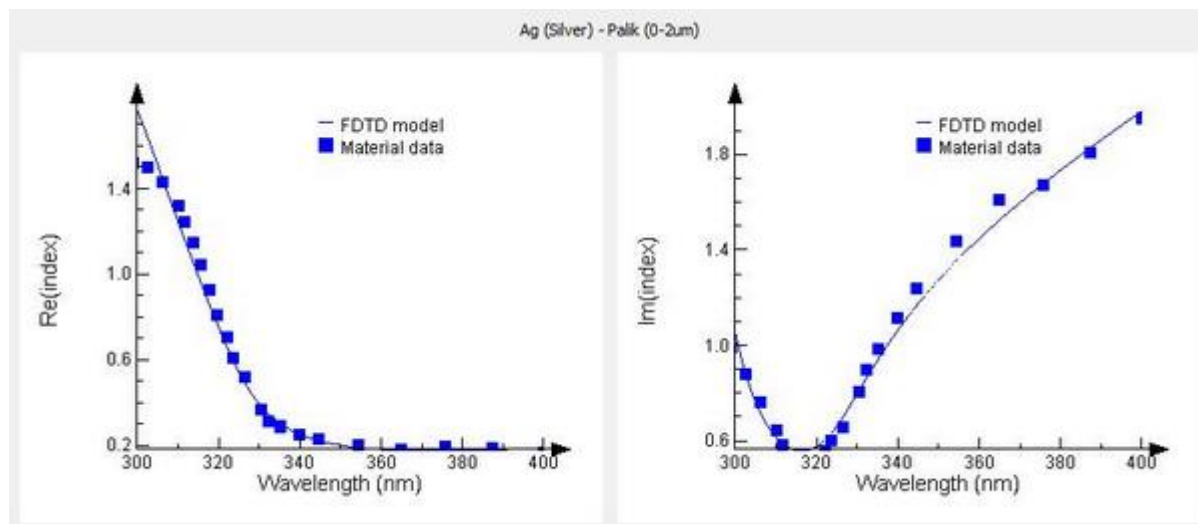




在用户界面 (CAD) 中, 橘黄色的线显示 FDTD 的计算网格。FDTD Solutions 含有两种不同的网格区域: 一个渐变网格区域 (自适应网格、自动网格) 和网格覆盖区 (mesh override region)。当使用自动网格时, 网格尺寸基于折射率来决定, 折射率越高的材料需要越细的网格 (网格尺寸和折射率成反比)。当材料有复折射率时, 实部和虚部都会被包括在自动网格算法里。然而, 当特征尺寸小, 特别是当材料的折射率差比较大或有弧形或斜界面时, 必须使用更小的网格。这时可以使用网格覆盖区来定义网格细分, 比如在本例中所用。

以上的屏幕截图并没有显示整个模拟区域。虽然我们不需要在最大的黄色监视器框之外的任何数据, 模拟跨度的设置必须足够大。这是因为边界的 PML 不只会吸收入射光源, 也会吸收速失场 (evanescent field)。因此, PML 应放在离结构足够远的地方才不会影响速失场。在这个例子中, PML 边界和结构有一波长左右的距离。

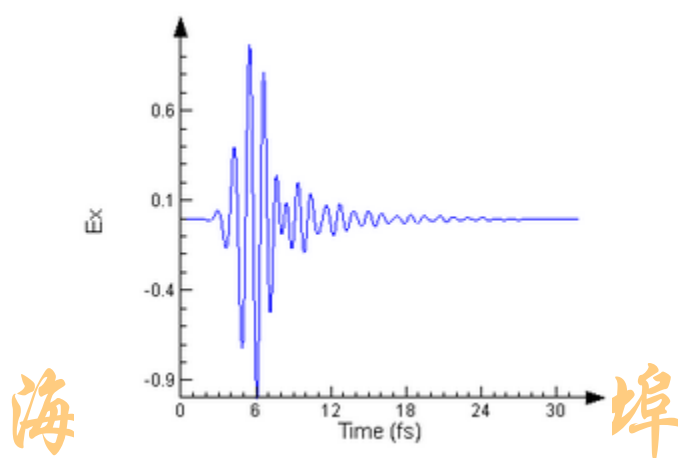
纳米线使用的银 (Ag) 材料来源于实验数据, 而不是解析模型。FDTD Solutions 会自动利用实验折射率数据拟合宽带中的材料色散曲线。我们可以在运行模拟之前从 Material explorer 里检查材料色散模型和实验数据的拟合效果。材料色散模型 (图标中的 FDTD model) 可以通过改变 Material explorer 里的最大系数 (Max coefficients) 和允差 (tolerance) 参数而调整。





我们可以从以上图中看出该材料的数据和背景折射率(1)是同一量级。同时,我们也能够使用比 1nm 还小的网格尺寸。因此,我们可以从 mesh refinement option 里选择“conformal variant 1”来充分利用共形网格技术的功能。请注意“conformal variant 1”通常只适合在低折射率对比的情况下(此例)使用,并不一定适合所有的金属材料(缺省的共形算法 default conformal mesh 在界面有金属材料 and PEC 时会还原成 staircase 算法)。请参考 [Mesh refinement and Conformal mesh](#) 的详细内容。

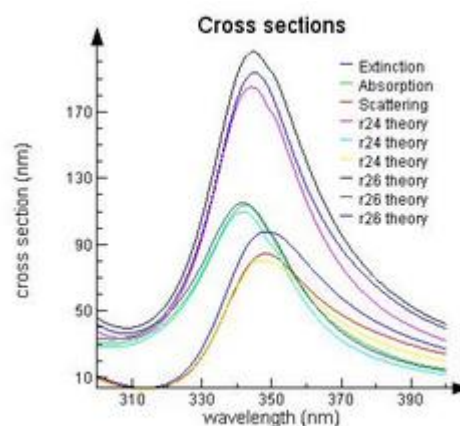
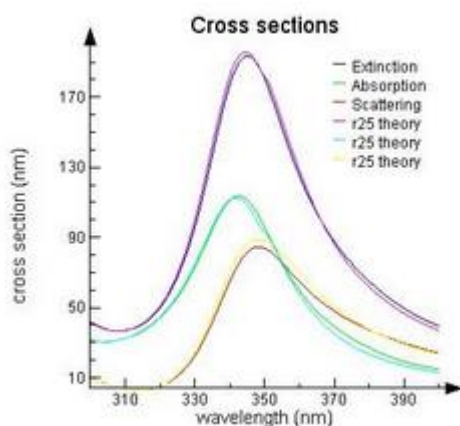
请注意此页第一图中的黄十字时域监视器。时域监视器在 FDTD 模拟中通常是用来检查场衰减现象。若电磁场没有衰减到适当程度,模拟结果可能会受影响。FDTD Solutions 缺省设置的模拟时间是 1000fs,而模拟会在场衰减到小于用户定义的电场强度时(缺省设置是  $1E-5$ )自动结束。以下图中 Ex 在 32fs 自动结束之前已几乎下降到零。



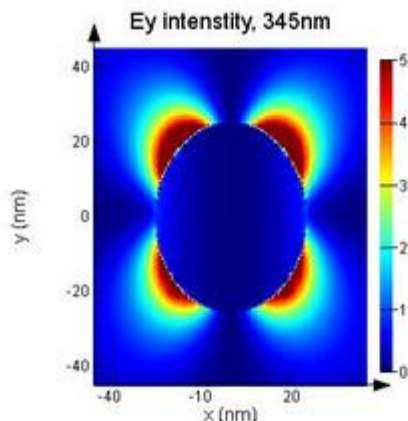
## 仿真结果

纳米线的散射,吸收和消光截面积可以从理论上求出,我们已将解析计算的结果存在数据文件“nanowire\_theory.csv”里,可以在本节第一页找到。

左下图显示的 FDTD Solutions 和解析计算的吸收,散射和消光截面积。很明显,它们非常一致。右下图显示同样的 FDTD 的计算结果,但解析结果是半径为 24 和 26 纳米。因为模拟计算的网格用的是 1 纳米,有理由期望的 FDTD 的结果在此范围内。正如图所示,事实的确如此。



从以上的图中可以看出消光截面积在波长 345nm 时是最高值。下图显示  $E_y$  在此波长的强度稳态（单色）分布（以 0.5nm 网格尺寸计算）。



## 2 光子晶体微腔

### 2.2.1 问题综述

本例将介绍如何使用 FDTD Solutions 来分析光子晶体谐振腔，并得到谐振频率(resonant frequency)、品质因子(Quality factor)、谐振腔的模式分布。学习如何找寻感兴趣的模式以及量测品质因子 (Q 值) 后，我们将会使用 PSO (particle swarm optimization) 优化算法去找寻最大品质因子的孔半径。

注意：本例图片为 FDTD Solutions Mac 版，与 Windows 和 Linux 使用界面有些不同。

#### Solvers

#### FDTD

#### 相关文件

建议读者先下载相关文件。这些文件可以从 Lumerical 的知识库网页上得到，也可以在 FDTD Solutions 的安装目录里找到。这些文件含有设计参数和模拟运算的所有信息，因此你可以快速地浏览，而不需要重新输入每个参数。Isf 文件就是用于高级分析的文本程式。

[ppc\\_cavity.fsp](#)

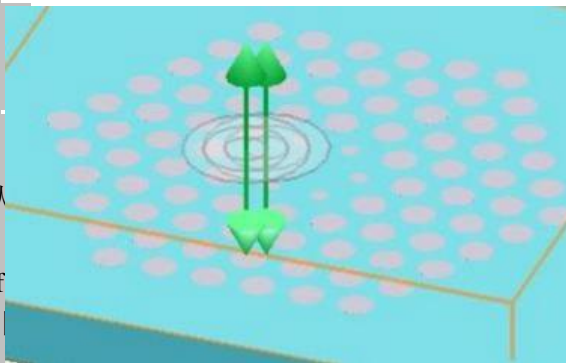
#### 本题目包括

建立仿真模型

仿真结果

高级分析: 对称性

高级分析: 优化内孔半径



## 2.2.2 建模指南

本页包含四个独立部分。第一部分描述设置谐振腔结构与 FDTD 模拟区，第二部分描述光源与监视器设置以及初始分析设置，第三部分提供使用对称性边界条件的进一步信息，第四部分描述如何使用 FDTD Solutions 优化功能。

### 本题目包括

创建光子晶体与检查材料折射率

添加光源与监视器,运行仿真与获得数据

对称性

优化内孔半径

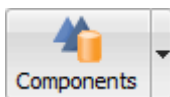
### 创建光子晶体与查验材料折射率

• 打开一个空白文件，详细介绍请参看 [Layout Editor](#) 一节。



• 点击 STRUCTURES 箭头 接着选择下拉选单中的 RECTANGLE，根据下表设置形状特性

tab	property	value
Geometry	x ( $\mu\text{m}$ )	0
	y ( $\mu\text{m}$ )	0
	z ( $\mu\text{m}$ )	0
	x span ( $\mu\text{m}$ )	10
	y span ( $\mu\text{m}$ )	10
	z span ( $\mu\text{m}$ )	1
Material	index	2.0995



• 点击 COMPONENTS 箭头 并自下拉选单中选择 PHOTONIC CRYSTALS，这将打开物件库窗口。

• 自清单中选择 HEXAGONAL LATTICE PC H-CAVITY 并点选 INSERT。

• 根据下表设置光子晶体腔特性。


tab	property	value
Setup à Variables	x ( $\mu\text{m}$ )	0
	y ( $\mu\text{m}$ )	0
	z ( $\mu\text{m}$ )	0
	material	etch
	H number	2
	z span ( $\mu\text{m}$ )	1

	n side	6
	a (μm)	.575
	radius (μm)	.194

• 点击 DUPLICATE  来复制，并根据下表编辑特性。

tab	property	value
	name	inner
Setup à Variables	x (μm)	0
	y (μm)	0
	z (μm)	0
	H number	1
	n side	2
	radius (μm)	.100



• 点击 SIMULATION  来添加模拟区。注意，如果你看到的图案与左图不同，你将需要点击箭头下拉菜单中点击真正的按钮，并根据下表设置特性。


tab	property	value
General	simulation time (fs)	1500
Geometry	x (μm)	0
	y (μm)	0
	z (μm)	0
	x span (μm)	12 * .575
	y span (μm)	12 * .575 * sqrt(3) / 2
	z span (μm)	3
Boundary conditions	z min bc	Symmetric
Advanced options	force symmetric x mesh	check
	force symmetric y mesh	check
	force symmetric z mesh	check

注意：强制某方向网格使用对称，例如 force symmetric x mesh，可确保网格线位于  $x=0$ ，因而当我们将 x min 边界条件从 PML 改变为 symmetric 或 anti-symmetric 时，网格将不受影响。严格说来，在这个例子中我们并不需要这个选项，因为在此例中，我们已经设置好了网格参数，故网格线将总是位于  $x=0$ 。

• 点击 SIMULATION 按钮的箭头并选择下拉选单中的 MESH OVERRIDE，并根据下表设置特性。

tab	property	value
General	dx (μm)	.575 / 8
	dy (μm)	.575 * sqrt(3) / 2 / 8
	override z mesh	unchecked
Geometry	x (μm)	0
	y (μm)	0
	z (μm)	0
	x span (μm)	10
	y span (μm)	10
	z span (μm)	1



• 点击 MONITORS 箭头  并选择下拉选单中的 INDEX 监视器，根据下表设置特性。


tab	property	value
	name	index
Geometry	x (μm)	0
	y (μm)	0
	x span (μm)	10
	y span (μm)	10

海基科技 研发埠

• 获得 INDEX 监视器数据：注意，目前情况下不需要运行仿真就可以得到 - INDEX 监视器数据在添加后自动计算获得数据，你可以直接从 Visualizer 里查看，选 Visualize->index 。


加入光源及监视器，运行模拟及取得数据，加入光源和 Q 值分析物件(Q analysis)

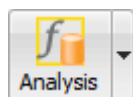


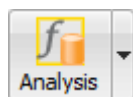
• 点击 SOURCES 按钮  的箭头及自下拉选单中选择 DIPOLE 光源，根据下表设置特性。

tab	property	value
	name	dipole1
General	dipole type	Magnetic dipole
Geometry	x (μm)	.1
	y (μm)	.2
Frequency/Wavelength	frequency start (THz)	160
	frequency stop (THz)	250



• 当 DIPOLE 依然被选取的状态下点选工具栏的 DUPLICATE 按钮  (或是使用键盘上的快捷键 D)，设定其名称为 dipole2 并将 x 位置设为 0.3 microns。



• 点击 ANALYSIS 钮  箭头，自下拉选单中选择 RESONATORS，这将打开物件库 (Object Library) 分析组窗口。

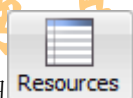
• 插入 Q ANALYSIS 组，设置监视器位置为  $x = 0.4 \mu\text{m}$ ,  $y = 0.2 \mu\text{m}$ ,  $z = 0 \mu\text{m}$ 。

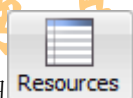
• 编辑此分析组，在 in setup->variables 中按下表改变参数

tab	property	value
	nx	1
	ny	1
	nz	1
	x span	0
	y span	0
	z span	0

由于我们知道哪里光最强，因此仅设置一个时间监视器。对于你自己的仿真，需要多次测试。例如首先找到谐振频率，然后通过 Profile 监视器找到光场最强的地方，将单个时间监视器放置在那里，然后再次运行，以得到最高的可能的 Q 值。


模拟运行与取得数据：得到 Q analysis 数据

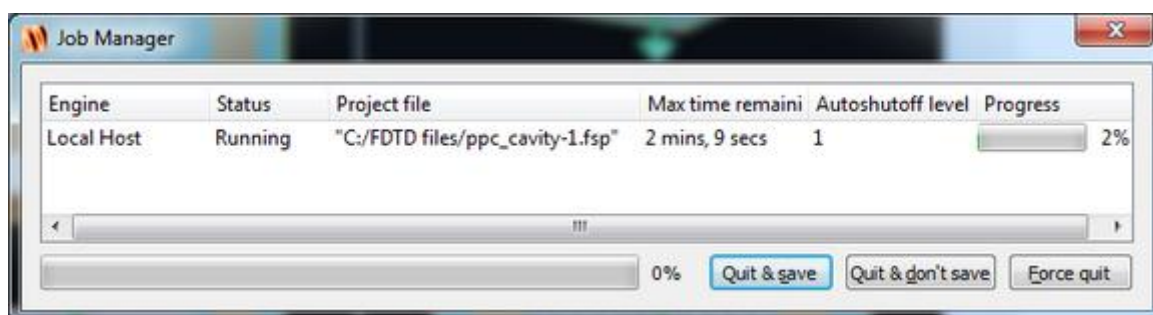


• 点按“Resources”按钮 ，并检查所需要的本地计算机进程数（核数）。如果网络内其它计算机安装有 FDTD 或额外的计算引擎许可证，你可以将它们添加到资源列表。单击“添加”，设置相应的属性。不过现在并不需要这些额外的引擎许可证。

• 按“Run Tests”按钮，以确保正确的仿真引擎资源配置。当您第一次运行这个测试，它可能会失败，请您登记正确的帐户用户名和密码，然后选择“OK”，并重新运行测试。如果有任何错误或警告，它们将出现在“结果”栏位。



• 点击 RUN 钮 ，即出现进程管理器并开始进行初始化及网格划分，你可以在进程窗口(如下图)中点选 Quit & save 来停止运行模拟并保存数据。一般可以等待仿真自动结束。




有关并行运算的信息，可以点击阅读[这个网页](#)。




•获得腔体的 Q 值：运行结束后，右键点击 Q analysis 组，进入 Analysis -> Variables，修改 number of resonance 为 2；点击 Script，点选右下角 RUN ANALYSIS 钮运行程式。

加入 profile 监视器(现在已知此结构的谐振频率)



•切换为编辑状态 ，如果需要修改，可以参考[这个网页](#)



•点击 MONITORS 钮 ，并自下拉选单中选择 FREQUENCY DOMAIN FIELD PROFILE 监视器，根据下表设置特性。

tab	property	value
	name	profile
General	override global monitor settings	check
	use source limits	uncheck
	frequency points	2
	minimum frequency (THz)	201
	maximum frequency (THz)	209.5
Geometry	x (μm)	0
	y (μm)	0
	x span (μm)	10
	y span (μm)	10
Spectral averaging and apodization	apodization	Full
	apodization center (fs)	1000
	apodization time width (fs)	250

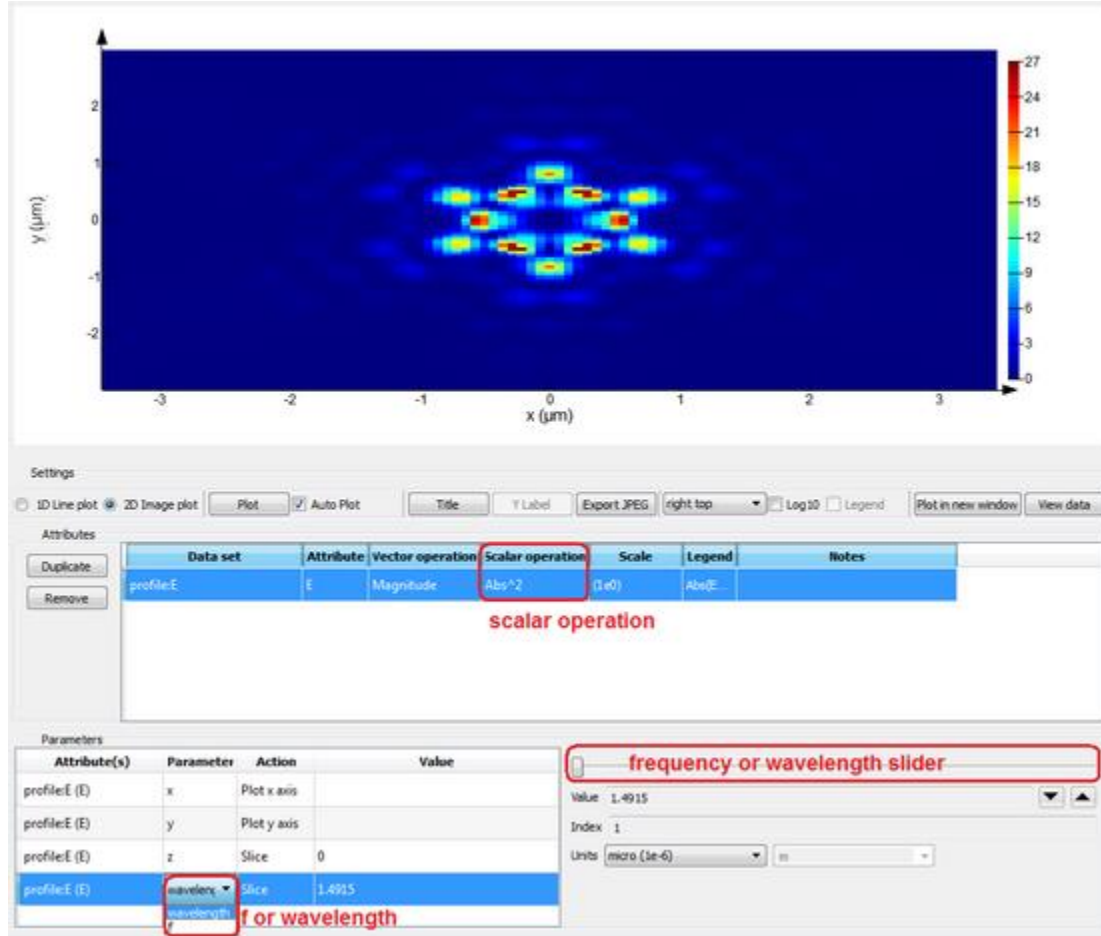
运行模拟与取得数据：得到 profile 监视器数据



•点击 RUN 钮 。

•运行结束后，右键点击 Profile 监视器，选择 Visualize->E。在 scalar operation 选 "Abs^2" 获得强度。

•下图显示第一个频率点的强度。如需要查看其它频率点，只需要简单地滑动频率标尺，或点按上下箭头即可。



- 如需要画  $E_y$  实部  $\text{real}(E_y)$ ，在 Vector operation 选"Y"，在 Scalar operation 选"Re"。

### 对称边界条件设置



- 点击 SWITCH TO LAYOUT 钮

- 编辑 FDTD 模拟区，在 BOUNDARY CONDITIONS 处，设置 x min bc 为 Anti-Symmetric、y min bc 为 Symmetric。此时是希望计算拥有这种对称性的模式。

- 点击 RUN 按钮再次运行模拟。


- 使用 Visualizer 绘出  $\text{real}(E_y)$ 。

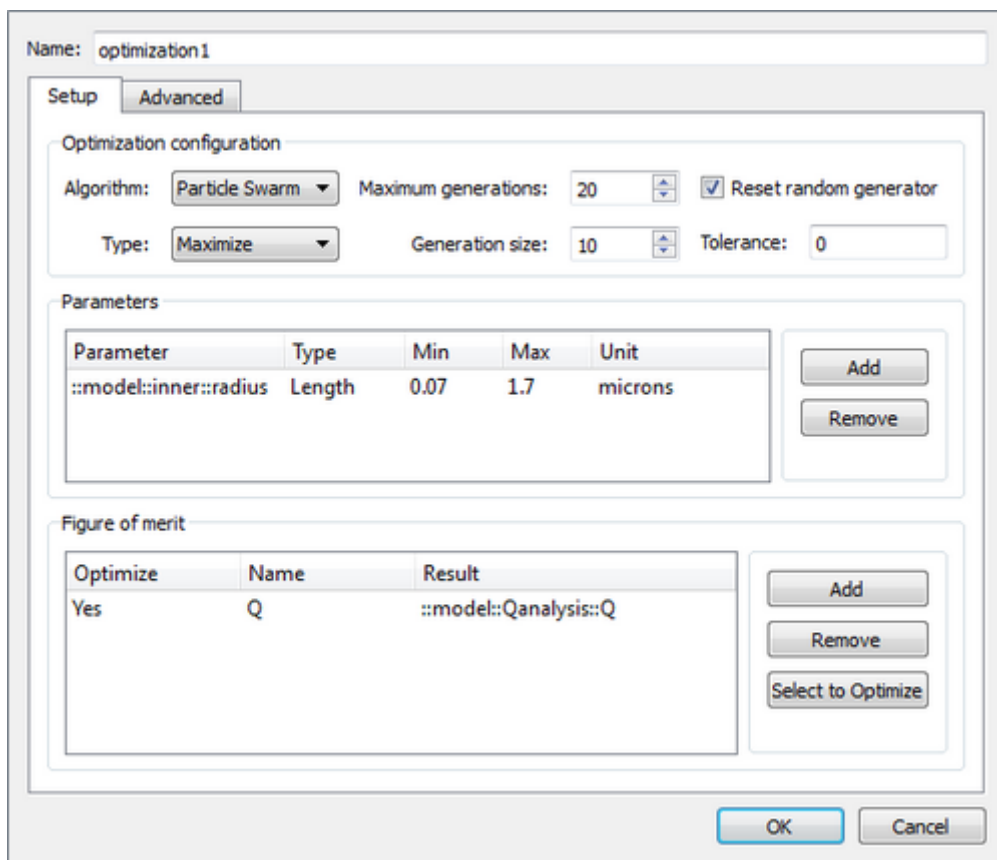
更多有关对称性边界的设置以及如何判断模式的对称性，请见 [Simulation - Symmetry boundaries](#)。

### 优化内孔半径

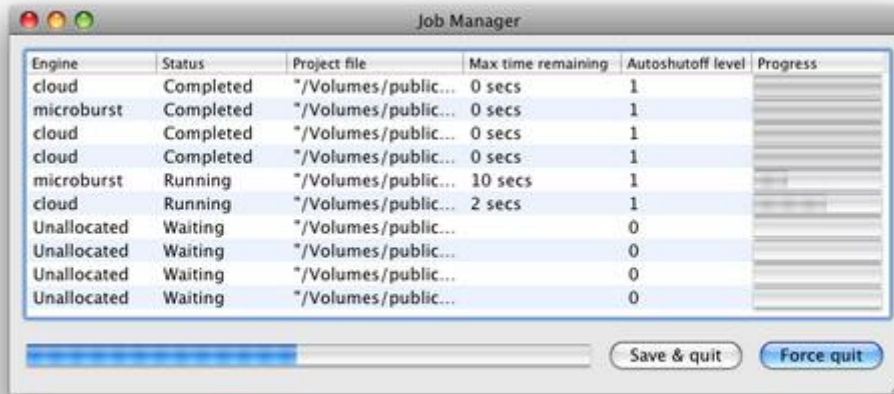
- 切换至编辑窗口窗口
- 在 Q analysis 组中设置下面参数:

tab	property	value
Setup à Variables	make_plots	0
	number_resonances	1

- 打开 optimization and parameter sweep 窗口。
- 点击 CREATE NEW OPTIMIZATION 按钮 ，参照下图作优化设置。注意：这些设置将运行 200 次模拟 (Maximum Generations\*Generation size = 20\*10 = 200)，您可以减少 Maximum Generation Size 来减少模拟次数，并得到更快的结果。将 make\_plots 设为零是为了避免优化过程中出现几百幅图。



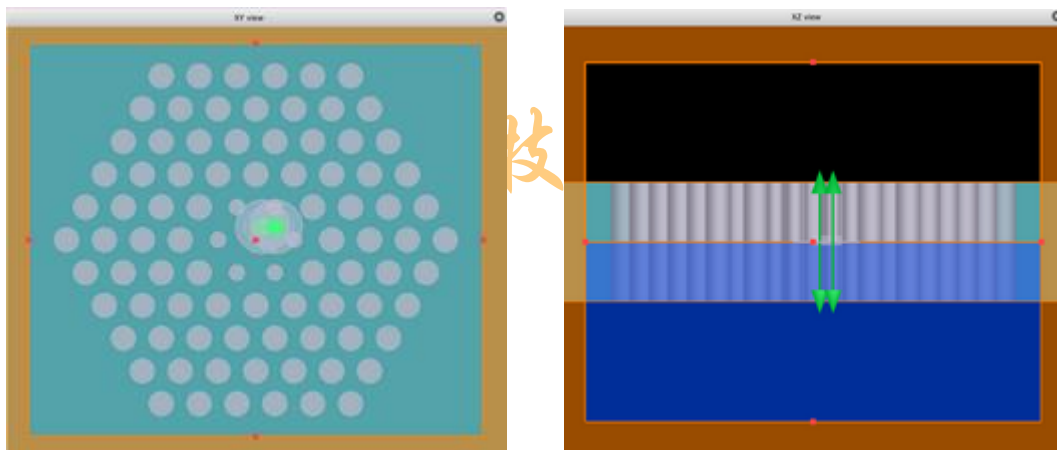
- 每一代优化将创建一套临时的模拟文件，并替换上一代文件。作业管理器会显示每个模拟文件的进程。在下面的截图中，仿真同时使用本地主机和笔记本电脑并发式并行运行。请注意，在分配仿真文件时，fsp 源文件必须保存在公共网络上，所有参与的计算资源均能访问。



### 2.2.3 结果与讨论

#### 仿真建模

谐振腔结构为一包含排列成六角晶格孔的 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 平板 (折射率为 2.0995), 晶格常数 (lattice constant) 为 575 nm, 孔半径为 194 nm, 并藉由移除中心孔而形成谐振腔, 最内圈孔半径为 100 nm, 如下图。



当我们用 FDTD Solutions 建立此结构时, 首先建立一矩形平板, 接着加入圆孔结构。在平板与圆孔重叠的位置, 为使圆孔取代平板, 我们使用 mesh order, 使 FDTD Solutions 用圆孔的折射率, 而不是平板的折射率。更多有关 mesh order 的细节, 请参照 Reference Guide 中的 mesh。

两个磁偶极子光源(绿色箭头代表磁场方向) 被用于激发共振模式。偶极子不能置于光子晶体结构中心, 这是为了减少光源处在模式零点(谐振节点)的机会。光源将入射能量注入模拟区, 部分辐射将被耦合至谐振腔模式中并缓慢地衰减, 无法耦合进入谐振腔模式的辐射将迅速地散射并离开模拟区。

在 FDTD Solutions 模拟中, 频域监视器 (frequency domain monitors) 采用了时域讯号(time domain data) 的离散傅立叶转换来计算模式分布。显然, 我们并不想要包含初始的那部分时间讯号, 因为它包含没有激发的模式辐射, 我们只对后部分的时间讯号有兴趣, 因为这些讯号的能量保留共振腔的模式。您可在下页 (构建说明) 看到, 我们可使用监视器中的切趾

(apodization) 功能来选择我们想要的时间讯号。更深入有关监视器 apodization 的讨论可在 [Apodization](#) 中找到。

本节将继续讨论重要的模拟设置，即边界条件设置、网格设置与模拟时间。

## 边界条件

上面的截图中，橙色的边界为 Perfectly Matched Layer (PML) 边界。PML 边界吸收入射辐射，其目的是吸收所有离开谐振腔的辐射。因此，相当重要的是谐振腔与 PML 边界须维持一段距离，如果边界过于靠近腔体，就可能吸收存在于腔内的非传播局部速失场 (non-propagating local evanescent fields)。一个简单实用的规则是，在结构以上和以下保留至少半个波长的距离。

接下来，请注意模拟区下半部的蓝色阴影 ( $Z < 0$ )，这是因为我们在  $z_{\min}$  的边界上使用了对称边界条件，目的是减少计算时间。使用对称边界条件的缺点在于某些模态无法在结果中显现 (因为用对称边界只能激发对称的模态)。在这个光子晶体谐振腔中，有一个通过薄板中心的对称平面 ( $z=0$ )，使用在这个平面上的对称性边界条件，结果将只显现准 TE (TE-like) 的模态而准 TM 的模态将消失。

注意，dipole 位于  $z=0$  的原因是因为这是光源理想的位置。磁偶极子在  $z=0$  平面有电场分量，蓝色对称性边界条件是特意的，它表示，电场应该位于沿着 (平行) 此边界。在 FDTD Solutions 中，大部分的光源包含蓝色箭头 (表示电场方向)，它应该总是要位于蓝色边界上 (平行于对称面)。

## 网格

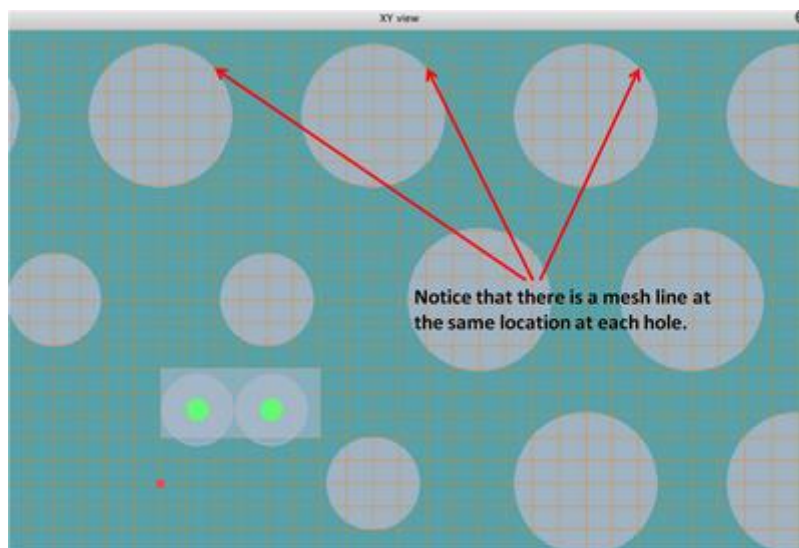
海基科技 研发埠

为使谐振腔模拟得到最好的结果，很重要的一点是在两个方向上晶格常数为网格尺寸 (mesh cell) 的整数倍。材料中的波长为  $\lambda = c / f / n = 3e8 / 160e12 / 2.0995 = 890 \text{ nm}$ ，我们预期  $\lambda/10$  的网格会有较可靠的精确度，而  $x$  方向每个周期有八个网格，我们可以得到网格大小  $575\text{nm} / 8 = 71.875\text{nm} (< \lambda/10)$ 。因为  $y$  方向的晶格常数是  $575 \cdot \sin(60)\text{nm}$ ，故  $y$  方向网格会小于  $x$  方向。如此设定，可得到较为可靠的精确度。

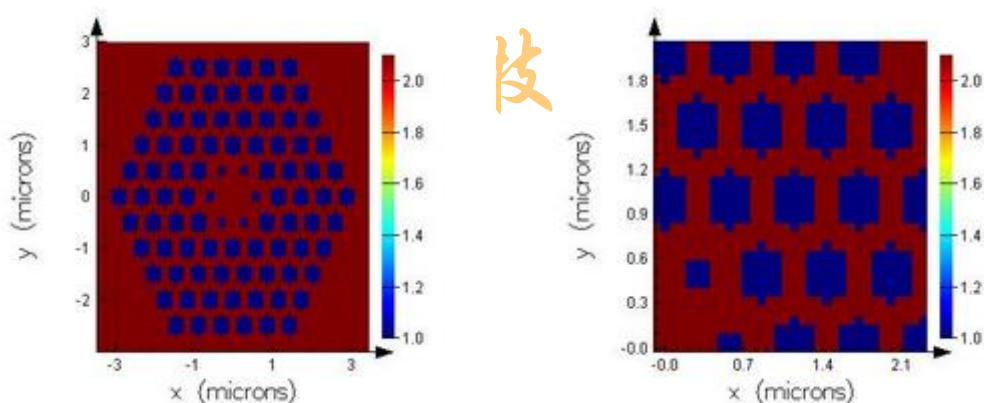
为了确认晶格常数为网格尺寸的整数倍，模拟区 (FDTD) 也必须是晶格常数的整数倍。因此，我们设定 FDTD 范围的  $x \text{ span}$  为  $575 \cdot 12 \text{ nm}$ ， $y \text{ span}$  为  $575 \cdot \sin(60 \cdot \pi / 180) \cdot 12 \text{ nm}$ 。

在下图中 (你可以在 FDTD Solutions 中点击 View mesh 观察计算网格，即橙色线)，能够看到在每一个圆孔的网格都切在相同的位置上。这点相当重要，因为 FDTD 需要在每一个孔上切出相同的网格。如果网格线落在不同的位置上，每一个圆孔将有细微的形状及大小不同。





在模拟周期结构前，比较好的方式是使用折射率监视器 (index monitor) 来确认网格的结构实际上是否呈现周期，下图折射率监视器的结果显现出每一个像是十字形的圆孔，这是因为使用了较为粗糙的网格。请注意，每一个十字形(除了内圈的六个圆孔)形状都是相同的，假设我们想要得到一个好的结果，确认每个被分成网格的圆孔形状是十分重要的。在下页的模型说明中，包含了如何创建折射率监视器并查看折射率分布的每一个详细步骤。



## 模拟时间的设置

为了获得准确的频域数据，一般仿真需等到时域场衰减至零。不过，幸运的是，高品质因子 (High quality factor) 谐振腔仿真是一个例外，因为 High Q mode 衰减非常慢，要等场完全衰减将需要很长的时间。

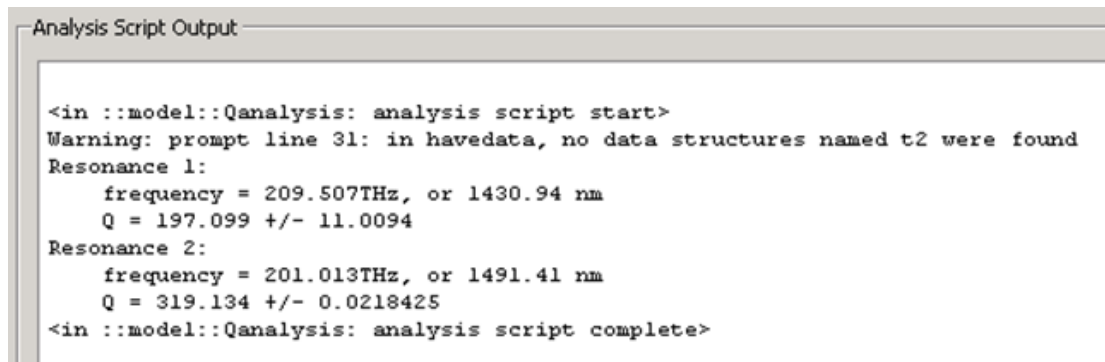
时域分析与频域切趾 (apodization) 的结合，使我们能够不需要等到时域场完全衰减，即可准确地计算品质因子 (quality factor) 与谐振腔模态 (cavity modes)。然而，使用此方法仍需谨慎，当模拟提早结束时，其它量测结果如 power transmission 和 field amplitudes 不一定正确。



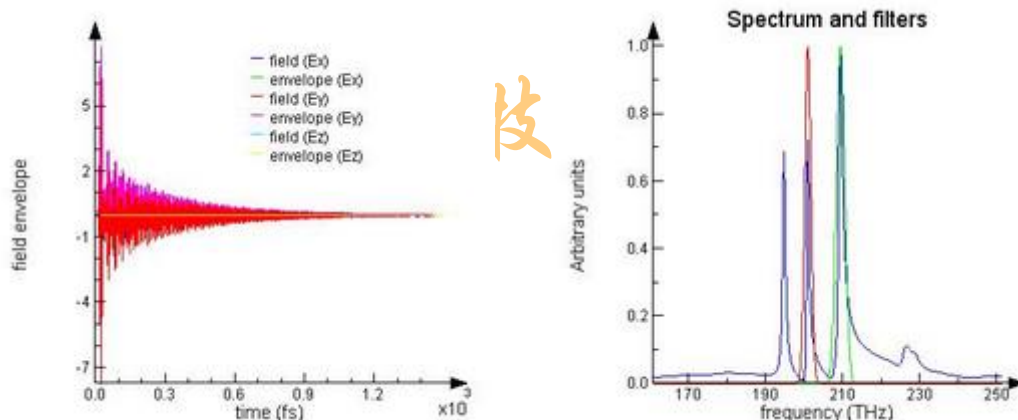
## 仿真结果

仿真文件包含 Q analysis 组，其中包含计算谐振腔模式中的谐振峰值与品质因子的脚本。Q analysis 组包含 time 监视器且未放置于模拟中心，其原因是与 dipoles 未置于中心是一样的。

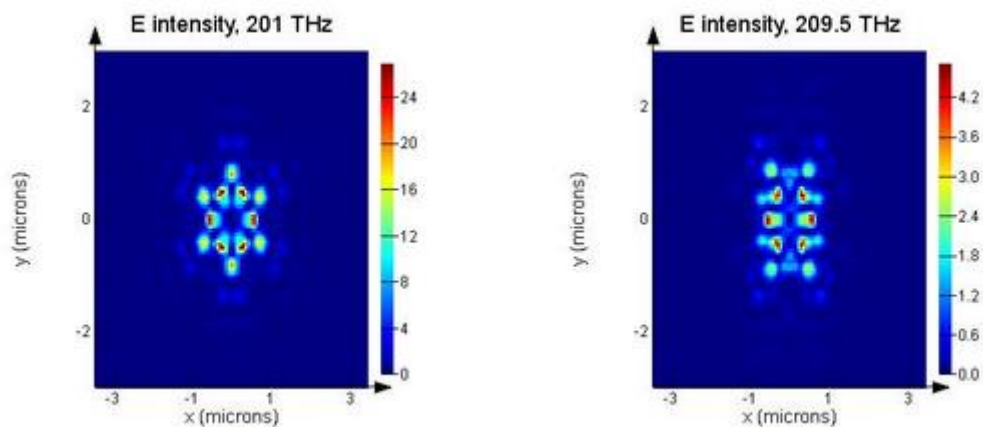
我们可以使用脚本在光源的频带中得到最大的两个谐振峰值与品质因子。要获到更多谐振峰值也很简单：只需修改 Q analysis→Analysis->Variables 中的 number\_resonances 参数即可。



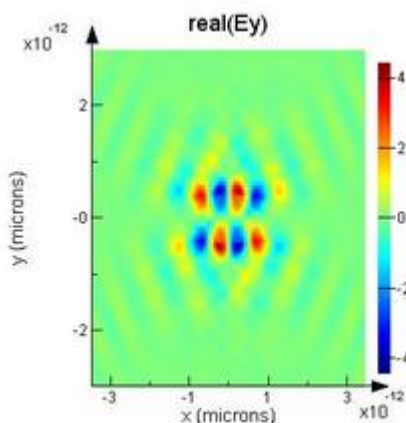
将 make\_plot 设为 1，我们也可得到电场对时间函数的输出曲线（左下图）及谐振峰值（右下图），品质因子的计算将在知识库中的 [Cavities and Resonators](#) 章节仔细讨论。



一旦得到准确的谐振频率,对应的电场模式分布图就可以画出来了:



下图为 201 THz 频率的  $\text{real}(E_y)$ 。

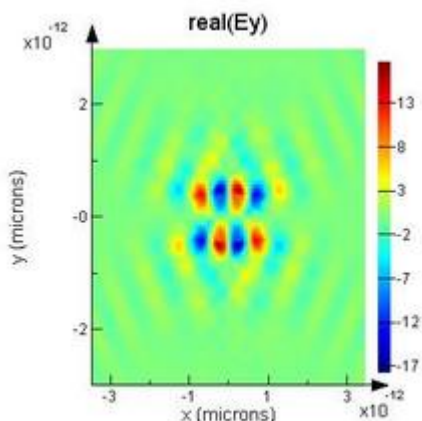


### 高级分析：对称性边界条件

为了在 201THz 得到最大品质因子  $Q$  对应的内孔半径，我们将需要相当多的仿真。由于模式拥有  $x$  轴和  $y$  轴的对称性，我们可以使用 anti-symmetric/symmetric 的边界条件，额外减少 4 倍模拟时间。

从上面的图像和这个网页 [Choosing between symmetric and anti-symmetric BCs](#) 中的图例比较，我们可看到，感兴趣模式的电场在  $x=0$  平面上具反对称性， $y=0$  上具对称性。

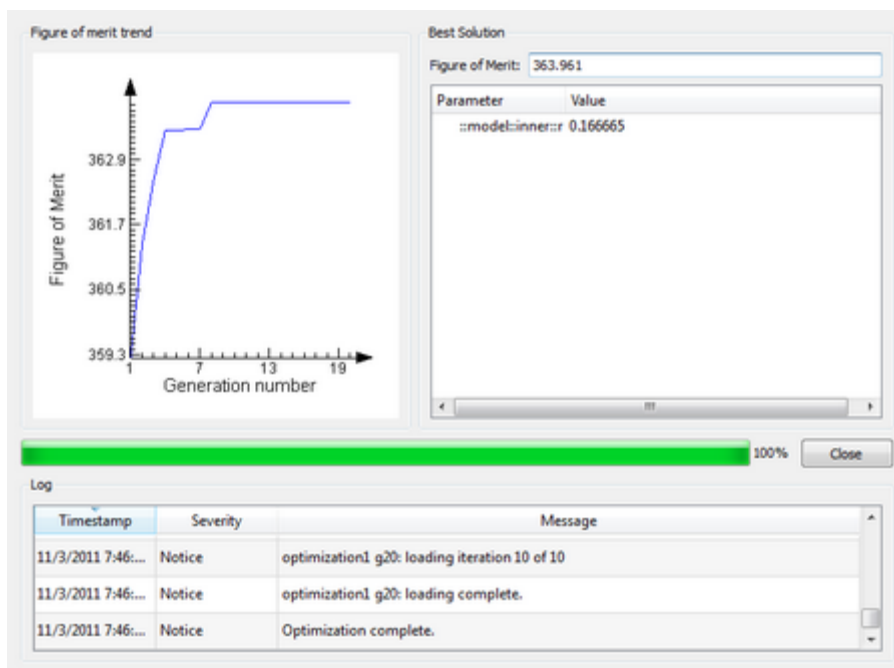
无论何时，模拟区域中心具有电磁场的对称平面通过，使用对称性边界条件将能够得到相同的结果。下图为分别设置  $x$  min 与  $y$  min 为 anti-symmetric / symmetric 边界条件所得到的结果。除了强度外与上图结果几乎相同，而造成强度改变的原因，是由于光源被镜像。因全模拟区仅含两个光源，而使用对称性边界条件模拟将包含有八个光源。



### 高级分析：内孔半径优化

FDTD Solutions 内建优化功能，我们选择使用 PSO (Particle Swarm Optimization) 粒子群优化算法，使用者也能够自定义其它算法。更多有关算法的细节，详见知识库中的 [Running Simulations and Analysis -> Optimization](#)。

在这个例子中，我们试着使用光子晶体谐振腔六个内孔的半径来优化品质因子，下图可见优化后的半径结果为  $0.167 \times 0.575 \text{ um} = 96 \text{ nm}$



联系方式: 海基科技 研发埠

联系人: 赵海军

邮箱: [zhaohj@yanfabu.com](mailto:zhaohj@yanfabu.com)

电话: 13641664322

QQ 群: 278300738

FDTD Solutions 在线视频: <http://edu.yanfabu.com/course/277>