

# Итерационный подход на основе FDTD-метода к расчету металл-диэлектрических фотонно- кристаллических элементов

П.В. Мокшин  
Самарский национальный  
исследовательский университет им.  
академика С.П. Королева  
Самара, Россия  
mokshinfabio@gmail.com

Д.Л. Головашкин  
Институт систем обработки  
изображений – филиал ФНИЦ  
«Кристаллография и фотоника»  
РАН  
Самара, Россия  
golovashkin2010@yandex.ru

В.С. Павельев  
Самарский национальный  
исследовательский университет им.  
академика С.П. Королева  
Самара, Россия  
pavelyev10@mail.com

**Аннотация**—Предлагается подход к расчету фотонно-кристаллических элементов, отличающийся от известных методов оптимизации общего назначения (например, генетического алгоритма или градиентных процедур) использованием информации о дифракционных картинах на разных частотах при оптимизации элемента, предназначенного для работы на одной выбранной длине волны.

**Ключевые слова**— фотонно-кристаллический элемент, FDTD-метод, итерационный подход.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Фотонно-кристаллические структуры с успехом применяются для создания волноводов, сенсоров, логических элементов и других устройств современной фотоники [1]. Весьма актуальным представляется расчет таких структур для терагерцового диапазона, использование которого характеризуется определенной новизной [2]. В известной авторам настоящей работы литературе [1-4] основное внимание уделяется анализу фотонно-кристаллических структур, связанному с определением их свойств на разных частотах. Вместе с тем безусловный интерес представляет обратная задача – расчет структур с ожидаемыми характеристиками (например, волноводов) под определенную длину волны (пусть заданную монохроматическим источником излучения).

Моделируя распространение электромагнитного излучения через фотонные кристаллы принято использовать численные методы решения уравнений Максвелла, относящиеся к инструментарию строгой теории дифракции: FEM (Finite Element Method) [2,4] и FDTD (Finite-Difference Time-Domain) [3], каждый из которых характеризуется известными достоинствами и недостатками. Учитывая особенность далее излагаемого подхода, в рамках которого предполагается работа с набором широкополосных импульсов (при том, что результирующая фотонно-кристаллическая структура оптимизируется под фиксированную длину волны), наиболее естественным представляется применение FDTD-метода, изначально предназначенного для моделирования таких полей: когда в ходе одного вычислительного эксперимента получаются результаты для заданного набора частот. В качестве программного обеспечения для моделирования был выбран соответствующий пакет софта Ansys Lumerical 2022 R1 (набор Ansys Lumerical FDTD Simulation of Photonic Components).

## 2. ИТЕРАЦИОННЫЙ ПОДХОД НА ОСНОВЕ FDTD-МЕТОДА

Задавая любой итерационный подход, традиционно говорят о выборе начального приближения, переходе от текущего приближения к следующему и критерии останова. Здесь под начальным приближением будет пониматься фотонно-кристаллическая структура, наиболее подходящая по мнению исследователя (основанному на практическом опыте, расчете в рамках менее строгой теории, публикации и т.п.) для такой роли.

Переход к следующему  $k$ -ому приближению сопровождается проведением моделирования (по FDTD-методу) распространения широкополосного импульса через структуру, полученную в ходе предыдущего приближения. По итогам такого моделирования выделяется длина волны  $\lambda'$ , для которой результирующая дифракционная картина признается наилучшей среди остальных картин (для других длин волн) в соответствии с заданным критерием эффективности фотонно-кристаллического элемента (например, под эффективностью  $\delta$  можно понимать отношение энергии вышедшего из волновода излучения к энергии вошедшего на выбранной длине волны). В конце текущей итерации геометрические параметры элемента пересчитываются с сохранением отношения  $d^{k-1}/\lambda' = d^k/\lambda_0$ , где  $\lambda_0$  – основная длина волны (под которую рассчитывается элемент),  $d^{k-1}$  и  $d^k$  – периоды фотонно-кристаллических структур, рассчитанные в конце предыдущей и текущей итераций соответственно. Т.е.  $d^k = d^{k-1}\lambda_0/\lambda'$ . При этом все пропорции неоднородностей внутри фотонного кристалла (например,  $\gamma$  – отношение периода к радиусу цилиндра) сохраняются и геометрические размеры упомянутых неоднородностей пересчитываются в соответствии с этими пропорциями.

На каждой итерации моделирование сопровождается распространением через новую структуру одного и того же импульса с центральной длиной волны  $\lambda_0$  (или импульсов, содержащих  $\lambda_0$ ). Критерием останова итерационного процесса будет достижение наперед заданного значения эффективности на центральной длине волны.

## 3. ПРИМЕР РАСЧЕТА МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОЛНОВОДА

Отметим, что для расчета диэлектрических структур довольно одной итерации при искусственном допущении об отсутствии дисперсии материала (такое допущение

хоть и не физично, но позволяет быстро получить результат). Учет дисперсии обязателен для численной устойчивости FDTD-метода при работе с металл-диэлектрическими структурами, что обуславливает итерационный характер предлагаемого подхода к расчету таких фотонно-кристаллических элементов. Упомянутый учет является отличительной особенностью пакета Ansys Lumerical 2022 R1 FDTD, используемого авторами настоящей работы при постановке вычислительных экспериментов. Так, вкладка «Materials» в графическом интерфейсе Ansys Lumerical FDTD связана с возможностью автоматически учитывать дисперсию известных материалов. Кроме того, допускается задание дисперсионных характеристик собственной среды.

ТАБЛИЦА 1. ХАРАКТЕРИСТИКИ ИТЕРАЦИОННОГО ПРОЦЕССА

<b>k</b>	<i>Длина волны <math>\lambda'</math> (мкм)</i>	<i>Диаметр <math>d^{k-1}</math> (мкм)</i>	<i>Эффективность <math>\delta</math> (%)</i>
1	60,8	40	91,4
2	62,6	41,2	95,9
3	67	43,7	96,7
4	59	49,5	97,2

Проиллюстрируем изложенное на примере расчета фотонно-кристаллического волновода из [4], где рассматривается двумерный кристалл, задаваемый решеткой из медных стержней кругового сечения ( $\gamma = 2,62$ ). Линейный дефект (часть стержней вдоль выбранного направления удалена) обуславливает

каналирование терагерцового излучения на длине волны  $\lambda_0 = 59$  мкм.

Итерационный процесс (таблица 1) сходится к решетке с периодом  $d = 50$  мкм из [4], что подтверждает работоспособность предложенного подхода.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обоснован и формализован подход на основе FDTD-метода к синтезу металл-диэлектрических фотонно-кристаллических структур. На выбранном примере двумерного кристалла, задаваемого решеткой медных стержней кругового сечения, демонстрируется работоспособность предложенного подхода. Его развитие авторы связывают с расчетом более сложных фотонно-кристаллических структур и строгим математическим обоснованием сходимости итерационного процесса.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Kumar, N. Advances in Photonic Crystals and Devices / N. Kumar, B. Suthar. – London: CRC Press, 2020. – 358 p.
- [2] Hossain, M.S. Design of a chemical sensing circular photonic crystal fiber with high relative sensitivity and low confinement loss for terahertz (THz) regime / M.S. Hossain, S. Shuvo, M.M. Hossain // Optik – Int. J. Light Electron Optics.– 2020. – Vol. 222. – P. 165359.
- [3] Johnson, S.G. Advances in FDTD Computational Electrodynamics Photonics and Nanotechnology / S.G. Johnson, A. Oskooi, A. Taflove. – London: Artech House, 2013. – 670 p.
- [4] Degirmenci, E. THz waveguide and bends based on metallic photonic crystals / E. Degirmenci, F. Surre, P. Landais // Terahertz and Mid Infrared Radiation. – Dordrecht: Springer, 2011. – P. 23-27.