Виталий Пикулев, 2012, 2014

# НАНОФОТОНИКА Nanophotonics

Фотонные кристаллы.

PhC

#### Фотонные кристаллы

Фотонный кристалл – это периодическая по своим оптическим свойствам субмикронная структура (crystal superlattice), которая влияет на распространение в ней фотонов точно так же, как периодическая атомная структура полупроводникового кристалла оказывает влияние на движение в нём электронов. Иными словами, это материал, структура которого характеризуется периодическим изменением показателя преломления в пространственных направлениях.





Фотонные кристаллы встречаются в природе в различных видах (в живой и неживой природе), синтезируются искусственно и изучаются уже на протяжении ста последних лет. Искусственные фотонные кристаллы делают различными методами, чаще всего из обычного оксида кремния (silica). Первый искусственный трёхмерный фотонный кристалл был создан в начале 1990-х годов сотрудником Bell Labs Эли Яблоновичем (Eli Yablonovitch) На фото – живая бабочка Vanessa kershavi с фотонно-2 кристаллическими крыльями

## Фотонные кристаллы



#### ВИДЫ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

- Одномерные (плёночные структуры типа «брэгговского зеркала»), в которых коэффициент преломления периодически изменяется в одном пространственном направлении. Такие фотонные кристаллы состоят из параллельных друг другу слоев различных материалов с разными коэффициентами преломления и могут проявлять свои специфические оптические свойства только в одном пространственном направлении, перпендикулярном слоям.
- Двумерные (планарные структуры), в которых коэффициент преломления периодически изменяется в двух пространственных направлениях.
- Трёхмерные (структуры в виде сверхрешёток), в которых коэффициент преломления периодически изменяется в трёх пространственных направлениях.

Как и электрические среды в зависимости от ширины запрещённых и разрешённых зон, фотонные кристаллы можно разделить на *проводники* (света), *диэлектрики* (зеркала), *полупроводники* (выборочное отражение) и *сверхпроводники*.

#### Одномерные фотонные кристаллы







#### Двумерные фотонные кристаллы

Любые неоднородности в структуре фотонного кристалла представляют собой дефекты, влияющие на распространение электромагнитной волны. В таких областях часто сосредотачивается электромагнитное поле, что используется в микрорезонаторах и волноводах, построенных на основе фотонных кристаллов.





#### ТРЁХМЕРНЫЕ ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ







**Figure 3:** The photonic band structure for the lowest bands of a diamond lattice of air spheres in a high dielectric ( $\varepsilon = 13$ ) material (inset). A complete photonic band gap is shown in yellow. The wave vector varies across the irreducible Brillouin zone between the labelled high-symmetry points; see appendix B for a discussion of the Brillouin zone of an fcc lattice.

#### Опалы

Природный опал представляет собой гидрогель двуокиси кремния SiO<sub>2</sub>·xH<sub>2</sub>O с переменным количество воды. Окраска опалов может быть вызвана примесями железа, никеля, марганца и др. Так называемые «благородные опалы» состоят из однородных по размеру сферических частиц α-SiO<sub>2</sub> диаметром 150-450 нм, которые, в свою очередь, образованы из более мелких глобулярных структур диаметром 5-50 нм. Пустоты упаковки сфер α-SiO<sub>2</sub> заполнены аморфным оксидом кремния. В синтетических опалах сферические частицы диоксида кремния образуют высокоупорядоченные гексагональные плотноупакованные слои перпендикулярно оси роста фотонного кристалла.





#### ФИЗИКА ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Физический механизм образования фотонной запрещённой зоны в кристаллах такой же, как и для электронов в диэлектриках и полупроводниках, и обусловлен распространением волны в среде с периодическим полем. Поэтому теория распространения электромагнитных волн в PhC имеет весьма близкую формальную аналогию с квантовой теорией электронов в кристаллах и позволяет использовать понятия блоховских волн, обратной решетки, зон Бриллюэна.

В случае, когда фотонная запрещённая зона перекрывает электронную запрещенную зону, существенно проявляются квантовые свойства PhC. В этом случае время жизни возбужденного атома находящегося в фотонном кристалле, может быть увеличено в несколько раз.

#### 1. Слой монодисперсных микросфер из оксида кремния

Метод Штёбера: гидролиз тетраэтилового эфира кремниевой кислоты в растворе этилового спирта в присутствии гидроксида аммония или аммиака

> $SiO_2 - TEOS$  $(Si(OC_2H_5)_4)$

Получаются сферы в диапазоне от 0.1 до 1.6 мкм с отклонением среднего размера не более 5%



#### 2. Седиментация



Естественное осаждение – очень медленный процесс, как правило, требующий нескольких недель или даже месяцев, особенно в том случае, когда диаметр частиц не превышает 300 нм. *Центрифугирование* позволяет значительно ускорить процесс формирования коллоидных кристаллов. Однако, полученные в таких условиях материалы упорядочены хуже, так как при высокой скорости осаждения разделение частиц по размерам не успевает произойти.

Большое распространение получил метод упорядочения коллоидных сфер, связанный с использованием капиллярных сил. Кристаллизация субмикронных частиц на границе мениска между вертикальной подложкой и коллоидной суспензией по мере испарения последней приводит к образованию тонкой, плоской, хорошо упорядоченной структуры.



# Фотонный кристалл полистирола

Изображение с растрового электронного микроскопа



# Фотонный кристалл полистирола

Фурье-образ с изображения атомно-силового микроскопа



#### Инвертированные опалы



16

 $WO_3$ 

 $SiO_2$ 

TiO<sub>2</sub>

#### Моделирование фотонных кристаллов

Для расчётов фотонных кристаллов используют классическую систему уравнений Максвелла, строя алгоритм, позволяющий вычислять распространение электромагнитного поля через периодическую структуру с локально нарушенной периодичностью (нестационарная задача электродинамики, решаемая, обычно, одним из методов конечно-разностной аппроксимации на периодической сетке).

$$7 \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

- наличие локальных электрических токов и изменение электрической индукции в некоторой точке пространства порождают вихревое магнитное поле (ротор  $\vec{H}$ ).

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial B}{\partial t}$$

- связь ротора вектора напряжённости электрического поля  $\vec{E}$  с изменяющимся во времени вектором магнитной индукции  $\vec{B}$  и символизирует факт возникновения вихревого электрического поля при изменении индукции магнитного поля.

$$abla \cdot \vec{D} = 
ho,$$
 $abla \cdot \vec{B} = 0.$ 

Даже при отсутствии зарядов ( $\rho = 0$ ) и токов ( $\vec{j} = 0$ ) эти уравнения имеют отличные от нуля решения, что говорит о возможности самостоятельного существования электромагнитного поля, распространяющегося в виде волны. 17

#### Моделирование фотонных кристаллов

Простейшим случаем электромагнитной волны является плоская монохроматическая волна, вектор напряжённости электрического поля которой в пространстве и во времени описывается уравнением:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

Аналогичное уравнение для синфазного изменения вектора напряжённости магнитного поля не рассматривают, поскольку основные оптические эффекты при взаимодействии света и вещества возникают вследствие изменения электрической составляющей волны.

Материальные уравнения:

$$\vec{D} = \hat{\varepsilon}\varepsilon_0 \vec{E} \vec{B} = \hat{\mu}\mu_0 \vec{H} \vec{j} = \hat{\sigma}\vec{E}$$

В случае оптически изотропных сред тензорные величины будем считать скалярными.

$$n^* = \sqrt{\varepsilon \mu}$$

## FDTD – ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

1) Рассматриваем двумерный фотонный кристалл в виде периодической структуры из стержней квадратного сечения (с длиной стороны l) бесконечной высоты с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$ , пересекающих под прямым углом модельную плоскость xy тела с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1$  (см. рисунок). Периодичность стержней в одном месте может быть нарушена в виде точечного либо линейного дефекта (отсутствия стержней).



2) Предполагаем, что в системе нет токов и нет свободных зарядов, что существенно упрощает решение уравнений Максвелла.

3) Введём прямоугольную сетку с постоянным шагом по осям координат и по времени:  $x_i = i \cdot \Delta x, i = 0 \dots N_x; y_j = j \cdot \Delta y, j = 0 \dots N_y; t_n = n \cdot \Delta t, n = 0 \dots n_{max}.$ 

## FDTD – СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

Общий вид системы пространственных уравнений без учёта токов и зарядов:

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left[ \vec{\nabla} \times \vec{E} \right]$$
$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \left[ \vec{\nabla} \times \vec{H} \right]$$

Здесь є, µ - относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости.

Распишем уравнения по каждой из трёх координатных компонент для  $\overrightarrow{H}$  и  $\overrightarrow{E}$ :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \qquad \qquad \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right] \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right] \qquad \qquad \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] \\ \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right] \qquad \qquad \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial y} \right]$$

#### FDTD – УПРОЩАЕМ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО СЛУЧАЯ

Сведём задачу к двумерному случаю, предполагая, что моделируемая структура простирается в бесконечность по оси z, не изменяя своих свойств, заданных в плоскости xy. В этом случае падающая волна также однородна в z-направлении, т.е. все частные производные по координате z (но не по времени!) должны быть равны нулю.

| $\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{-1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y}$   | $\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y}$  |
|--|--|
| $\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x}$  | $\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{-1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x}$   |
| $\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right]$ | $\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right]$ |

Набор синих уравнений имеет аббревиатуру  $TM_z$  (transversemagnetic mode - вектор  $\vec{E}$  находится в плоскости, перпендикулярной оси z), а набор красных уравнений соответственно  $TE_z$  (transverseelectric mode - вектор  $\vec{E}$  параллелен оси z). Эти два режима не имеют общих компонент и могут быть рассчитаны независимо один от другого.

# FDTD – THE FINITE-DIFFERENCE TIME-DOMAIN METHOD

Пространственная ячейка Yee (общий случай):



### FDTD – ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННАЯ ДИАГРАММА АЛГОРИТМА YEE



#### FDTD — РАЗНОСТНЫЕ УРАВНЕНИЯ ( $TE_Z$ )





$$\frac{H_{z_{i,j+1}}^{n+1} - H_{z_{i,j+1}}^{n}}{\Delta t} = \frac{1}{\mu_{i,j+1}} \left( \frac{E_{x_{i,j+\frac{3}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - E_{x_{i,j+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{E_{y_{i+\frac{1}{2},j+1}}^{n+\frac{1}{2}} - E_{y_{i-\frac{1}{2},j+1}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right)$$

# FDTD — РАСЧЁТНЫЕ ФОРМУЛЫ ( $TE_Z$ )

$$E_{x_{i,j+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} = E_{x_{i,j+\frac{1}{2}}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}} \cdot \frac{H_{z_{i,j+1}}^{n} - H_{z_{i,j}}^{n}}{\Delta y}$$

$$E_{y_{i-\frac{1}{2},j+1}}^{n+\frac{1}{2}} = E_{y_{i-\frac{1}{2},j+1}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i-\frac{1}{2},j+1}} \cdot \frac{H_{z_{i,j+1}}^{n} - H_{z_{i-1,j+1}}^{n}}{\Delta x}$$

$$H_{z_{i,j+1}^{n+1}} = H_{z_{i,j+1}^{n}} + \frac{\Delta t}{\mu_{i,j+1}} \left( \frac{E_{x_{i,j+\frac{3}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - E_{x_{i,j+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{E_{y_{i+\frac{1}{2},j+1}}^{n+\frac{1}{2}} - E_{y_{i-\frac{1}{2},j+1}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right)$$

 $\mathbf{25}$ 

# $FDTD - РАСЧЁТЫ ДЛЯ (<math>TM_Z$ ) И ПО ВРЕМЕНИ

Разностные уравнения и расчётные формулы для случая *TM*<sub>z</sub> выводятся аналогичным образом.

В итоге получим три уравнения для трёх неизвестных на одной временной точке с итерационным расчётом по времени: для вычисления значений на текущем шаге используются значения на предыдущем.

Поскольку начальные значения компонент  $\vec{E}$  либо  $\vec{H}$  известны во всех узлах сетки для t = 0, промежуточные значения на полушаге по пространственной сетке могут быть рассчитаны линейной аппроксимацией вида

$$H_{y_{i,j}+\frac{1}{2}}^{0} = \frac{1}{2} \left( H_{y_{i,j+1}}^{0} + H_{y_{i,j}}^{0} \right)$$

# FDTD – УСЛОВИЕ УСТОЙЧИВОСТИ

Условие устойчивости для явной конечно-разностной схемы

$$\Delta t \le \left( v \sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2}} \right)^{-1}$$

где *v* – максимальная скорость распространения электромагнитных волн в рассчитываемом материале.

При численном решении данной системы уравнений значения  $\mu$ и  $\varepsilon$  берутся в каждой точке сетки и, в принципе, могут быть различными для различных компонент векторов напряжённости, поэтому моделируемое вещество может быть оптически неоднородным и / или анизотропным.

## РМL – СУТЬ ПРОБЛЕМЫ

При численном моделировании открытых систем, для которых решается волновое постановка уравнение, правильных граничных условий чрезвычайно важна. *«Perfectly* Граничные условия типа Matched Layer Absorbing Boundary *Conditions*» используются часто ЛЛЯ устранения некорректностей при расчёте электромагнитной поведения волны вблизи границ рассчитываемого пространства. В общем случае каждая электромагнитного компонента ПОЛЯ разделяется на две части. В декартовых координатах 6  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$  компонент поля на 6 подкомпонент заменяются ЛЛЯ каждого из векторов, в частности для напряжённости электрического поля:



Обычно толщина PML-слоя составляет 10% от размеров области

 $E_{xy}, E_{xz}, E_{yx}, E_{yz}, E_{zx}, E_{zy}.$ 

#### PML – ИЗМЕНЕНИЕ БАЗОВОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

#### Случай ТЕ<sub>z</sub>

Случай ТМ<sub>z</sub>

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_y E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y}$$
$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_x E_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x}$$
$$\frac{\partial H_{zx}}{\partial t} = -\frac{\partial H_z}{\partial x}$$

$$\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} + \sigma_y^* H_x = -\frac{\partial E_z}{\partial y}$$

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma_x^* H_y = -\frac{\partial E_z}{\partial x}$$

$$\mu \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x^* H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{zx}}{\partial t} + \sigma_x E_{zx} = \frac{\partial H_y}{\partial x}$$

Здесь 
$$H_z = H_{zx} + H_{zy}, E_z = E_{zx} + E_{zy};$$
  
 $\sigma^* = \sigma \frac{\mu}{\varepsilon}$  ("магнитная проводимость").

### PML – ПОСТАНОВКА УСЛОВИЙ

1. 
$$x_1 \le x < x_2; \ y_1 \le y < y_2$$
  
 $\rightarrow \sigma_x = 0; \ \sigma_y = 0;$   
2, 3.  $0 \le x < x_1; \ x_2 \le x < x_{max};$   
 $y_1 \le y < y_2 \rightarrow \sigma_y = 0;$   
4, 5.  $x_1 \le x < x_2;$   
 $0 \le y < y_1; \ y_2 \le y < y_{max} \rightarrow \sigma_x = 0;$ 

Для областей 6-9 обнуления величин электрической и магнитной проводимости не происходит.

На внешней границе  $E_z = 0$ .

Вариант постановки условий на  $\sigma_x$  (аналогично для  $\sigma_y$ ):

Константа *С* может выбираться эмпирически в диапазоне от 10 до 10<sup>5</sup>.



## Возбуждение поля в РнС

Наиболее простой случай – плоская волна, падающая под углом  $0^{\circ} \leq \varphi \leq 90^{\circ}$ , определяемая вектором  $\vec{k}_{inc}$ 



## Возбуждение поля в РнС

В более сложном случае рассматривают падание волнового пакета на фотонный кристалл (для расчёта дисперсионных кривых), вводимое, например, как движение зарядов вдоль оси *х*:

$$j(x,t) = f(t)\sin\left(\pi\frac{x}{a}\right)$$

$$f(t) = exp\left(-\left(\frac{t-t_0}{2\Delta f}\right)^2\right) \cdot \sin \omega t$$

Необходимые константы, в том числе и частотная область  $\Delta f$ , задаются априори.

# ЧТО ВАС ЖДЁТ?

Практика:

Моделирование энергетических и оптических свойств фотонных кристаллов на основе разработок Joannopoulos Research Group (MIT).



Поскольку базовые алгоритмы метода FDTD разработаны достаточно давно, в настоящее время существует несколько популярных реализаций таких алгоритмов, которыми можно воспользоваться для моделирования структуры фотонного кристалла с дефектами. Наиболее известными являются разработки группы Массачусетского технологического института (MIT) под руководством проф. J. Joannopoulos – это программные продукты *MEEP* и *MPB*, распространяемые по GNU GPL.

http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep

# МЕЕР И МРВ

Программа MEEP является трёхмерным FDTD-симулятором с постановкой PML-условий с возможностью проведения параллельных (кластерных) вычислений. Результатом работы программы являются пространственно-временные карты распространения электромагнитной волны в исследуемой среде (которые особенно хорошо визуализируются для случая двумерного фотонного кристалла) и расчёты энергетического спектра волнового пакета в выбранной точке пространства.

Программа MPB используется для расчёта фотонной запрещённой зоны в исследуемых пространственных периодических диэлектрических структурах.

# MEEP: волновод с поворотом на 90°



В представленной модели используется структура неинвертированного фотонного кристалла, в которой среда имеет диэлектрическую проницаемость равную единице, а стержни – 12. Волновод создаётся «заменой вещества» с є=6 для двух рядов пор, определяющих путь распространения электромагнитной волны.

Источник излучения находился вне фотонного кристалла (на рисунке-слева).

# МЕЕР: ПЕРЕБРАСЫВАЮЩИЙ ФИЛЬТР



Верхний и нижний волноводы реализованы заменой стержней с  $\varepsilon$ = 13 на стержни с  $\varepsilon$  = 7. Область резонатора реализована на трёх вертикальных рядах стержней заменой на материал с  $\varepsilon$  = 5.5 в шахматном порядке. Созданные условия не позволяют направить свет во втором волноводе в каком-либо одном направлении, поэтому свет распространяется от области резонанса в противоположные стороны с равной интенсивностью.

# МЕЕР: ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВОЛНОВОДЫ



#### ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

#### 1. Дырчатые волноводы.

Кристалл состоит из спечённых стеклянных нитей, центральная из которых – пустотелая. Такое волокно в поперечном сечении является двумерным кристаллом с зонной структурой фотонного изолятора. При этом в продольном направлении волокно является идеальным проводником.





#### ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Жидкокристаллические композиты на основе 2. фотонных кристаллов.

Создание PhC-структур на основе жидких кристаллов или с включением ЖК в качестве дефектов структуры для эффективного управления оптическими свойствами фотонных кристаллов. Перестраиваемость спонтанного излучения, волноводных эффектов и локализации света может значительно увеличить технологическую ценность композитных жидкокристаллических материалов с фотонной запрещенной зоной.

Одно из больших преимуществ PhC-материалов в том, что большинство из них состоит из пор. Эти поры могут быть пропитаны другими электрооптически-активными материалами, которые ПОЗВОЛЯЮТ перестраивать зонную структуру PhC глобально или локально. Модификация спектра PhC может быть реализована посредством управления анизотропией таких материалов, к представителям которых относятся различные жидкие кристаллы.

# РНС НА ОСНОВЕ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ



Полимерный фильтр с микропорами, заполненный нематическим жидким кристаллом с положительной диэлектрической анизотропией

#### ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Искусственно созданный фотонный кристалл теоретически может заменить любую оптическую систему, и, приближаясь к фантастическим перспективам, сделать то, что современные системы линейной или нелинейной оптики сделать не в состоянии – например, локализовать группу фотонов в некоторой области пространства либо сформировать материал с отрицательным показателем преломления.

- о Создание световедущих каналов любого профиля
- Спектральное разделение каналов и кросс световых потоков
- Зеркала для избирательного отражения света (оптические фильтры)
- Изготовление ювелирных украшений
- Создание сверхмалых лазеров
- Фотонные ИС и устройства оперативной памяти
- Оптические каналы связи без потерь

# aspire invent achieve