УДК 539.184

Лавриненко А.В., *д.ф.-м.н.,*∗ **Лавриненко Ю.В.** *к.т.н.*
∗Белорусский государственный университет
Одесский государственный экологический университет

ВЫБОР ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ

Статья посвящена обоснованию выбора наиболее оптимальных граничных условий, используемых при моделировании процессов в фотонно-кристаллических волноводах.
Ключевые слова: *алгоритм, граничные условия, диэлектрическая проницаемость, отражение, периодическая структура, плоская волна, поглощение, слой, сходимость, фотонно-кристаллический волновод.*

Введение. Ранее в [1] было показано, что при рассмотрении наиболее существенных проблем моделирования свойств фотонных кристаллов (ФК) и фотонно-кристаллических волноводов (ФКВ) на их основе, численное моделирование в большинстве случаев целесообразно проводить, используя метод конечных разностей во временной области FDTD (finite-difference time-domain).

Алгоритм численного эксперимента с использованием FDTD метода выглядит следующим образом. Первоначально определяются – вид падающей волны и материальную структуру, рассеяние волны на которой нас интересует. Затем поля пересчитываются для последующих моментов времени. Сохраняя поля в определенном наборе точек пространственной сетки во все моменты времени, мы получаем массив значений $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ во временной области. Дальнейшая обработка результатов эволюции полей зависит от постановки задачи. В случае расчета спектров пропускания и отражения, нужно посредством Фурье преобразования совершить переход в частотную область $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \rightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r},\omega)$. Коэффициенты отражения и пропускания определяются, например, через отношение соответствующих компонент вектора Пойнтинга.

Альтернативный вариант, реализующийся в программах, связан с использованием пучка плоских волн всевозможных направлений распространения в каждой точке регистрирующей поверхности. Проецируя полное поле в данной точке на каждую из плоских волн пучка, получается значение амплитуды волны идущей в данном направлении в данной точке. Суммируя квадраты модулей проекций по всем точкам по всевозможным направлениям, можно также определить коэффициенты отражения и пропускания волны, упавшей на интересующую нас структуру.

Одним из главных требований, предъявляемых к современному численному методу, является консервативность: все физические величины, не изменяющиеся в рамках конкретной физической модели должны сохраняться в ходе численной реализации алгоритма на пространственной решетке. Достоинством описанной выше схемы эволюции поля на прямоугольной сетке заключается в том, что сохраняется важнейшая характеристика волнового распространения полей — значения дивергенции полей (их равенство нулю в случае отсутствия зарядов) — по определению. Отметим, что использование уравнений Максвелла, содержащих только операторы ротора, может приводить к появлению различного рода ложных решений, обладающих отличной от нуля дивергенцией. Поэтому контроль за сохранением значений дивергенции полей (потоков через замкнутые сеточные области) является необходимым.

Поскольку программа предназначена для расчетов параметров ФК и ФКВ, имеющих большое число областей с резкими границами перехода между различными материалами, то возникает вопрос, каким образом удовлетворяются многочисленные граничные условия на сетке. В классическом варианте схемы поля направлены по касательной на границах областей и поэтому непрерывны. Следовательно, никаких добавочных условий привлекать не надо.

В рассматриваемой коллокационной схеме на границах раздела будут стыковаться и нормальные компоненты полей, терпящие разрывы на границах. Но как оказалось, схема оказывается достаточно устойчивой и внутренне самосогласованной, чтобы при многократных шагах эволюции автоматически учитывать скачки полей на границах. Итоговые поля обладают теми же самыми значениями потоков через замкнутые поверхности, что и начальные поля. Это означает, что никаких новых источников, которые могли бы появиться именно на резких скачках материальных параметров, в данном FDTD алгоритме не возникает. Объяснение столь замечательной устойчивости схемы, на наш взгляд, лежит в том, что хотя мы используем сеточные функции для векторов $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r})$, на самом деле эти значения $\mathbf{E}(\mathbf{r}_i)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i)$ есть усредненные значения полей на линейных (для вектора $\mathbf{E}_i$) и поверхностных (для вектора $\mathbf{H}_i$) элементах, а не в узлах сетки. Таким образом, согласование полей происходит хотя и локально, но не точечно, удовлетворяя соотношениям непрерывности.

Рассмотренные алгоритмы FDTD метода успешно реализуются на современных персональных компьютерах., хотя и требуют больших объемов памяти. При разработке приложений алгоритмов FDTD, кроме непосредственно алгоритмизации схемы решения уравнений Максвелла, следует обращать особое внимание на вопросы применения эффективных поглощающих граничных условий (ПГУ), позволяющих моделировать системы с существенным рассеянием излучения за собственные пределы.

Важнейшая черта любого численного метода, работающего в реальном пространстве является наличие эффективного способа ограничения пространства для вычислений. Другими словами, это наличие граничных условий (ГУ). В качестве граничных условий в задачах закрытого типа, например, в расчетах металлического резонатора, используются идеальные электрические или магнитные проводники, а в случае невозможности разделения полей по поляризации — просто идеальные проводники. При этом, на граничной поверхности полагаются равными нулю те компоненты полей, которые обладают свойством непрерывности. В случае идеального проводника все компоненты полевых векторов приравниваются к нулю на границе.

Таким образом, в данной статье основное внимание уделяется вопросу выбора граничных условий, позволяющих с одной стороны корректно построить модель ФКВ, а с другой стороны – получить приемлемые требования к характеристикам вычислительных средств. Результаты реализации модели, с использованием выбранных в данной статье граничных условий, авторы планируют поместить в другой статье, так как они потребуют достаточно объемных пояснений, выходящих за рамки данной работы.

Требования к граничным условиям моделей ФКВ

При моделировании процессов, протекающих в фотонно-кристаллических волноводах, которые характеризуются наличием трансляционной периодичности в одном или нескольких измерениях, вычислительное пространство закономерно прерывается периодическими или блоховскими ГУ. При этом появляется возможность кардинального сокращения размеров области вычислений. Например, в случае идеальной трехмерной периодической решетки, для расчета зонной структуры можно ограничиться одной элементарной ячейкой в реальном пространстве или неприводимой частью зоны Бриллюэна. На границах вдоль каждого направления периодичности мы вправе применить условия

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}+\mathbf{Q}_i)=\mathbf{E}(\mathbf{r})\cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{Q}_i}\ ,\quad \mathbf{H}(\mathbf{r}+\mathbf{Q}_i)=\mathbf{H}(\mathbf{r})\cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{Q}_i} \qquad (1)$$

где **k** – блоховский вектор решетки данного ФКВ;

Q_i, i = 1,2,3 – размеры элементарной ячейки вдоль соответствующих осей решетки.

Сложнее обстоит дело в случае расчета открытых систем, включая системы, обладающие нарушенной трансляционной периодичностью в одном или нескольких направлений. К таким системам относятся реальные ФКВ в диэлектрических или полупроводниковых многослойных структурах. Их размеры конечны по всем направлениям, что позволяет говорить о частичной или нарушенной периодичности полагая, что периодичность возможна только в бесконечно повторяющейся системе, поэтому любая реальная система обладает тем или иным ее нарушением.

Энергия теряется в ФКВ за счет связывания дефектных волноводных мод кристалла с радиационными модами, а также за счет возбуждения вытекающих мод. Любое ограничение численного пространства ФКВ ГУ типа блоховских или идеального проводника приводит к сильным отражениям энергетических потоков назад в расчетную зону, что, в свою очередь, весьма быстро приводит к потере устойчивости и стабильности FDTD метода, численному переполнению и последующей блокировки всей расчетной процедуры.

Поглощающие граничные условия

Специально для подавления паразитного отражения вытекающей энергии назад в систему при ограничении численного пространства относительно недавно были предложены так называемые поглощающие граничные условия – ПГУ. Классическими можно считать ПГУ типа Лиао, Энквиста или Мура, основанные на экстраполяционных схемах различного порядка с применением полиномов Ньютона. Они достаточно подробно описаны в книге [2]. Хотя они и помогают ограничить паразитное отражение, однако не являются универсальными, также их эффективность недостаточно высока. Например, ПГУ Мура обеспечивает требуемое подавление отражения только при малых углах падения. Поэтому их приходится располагать на достаточно большом расстоянии от исследуемой системы, чтобы уменьшить углы падения вытекающих волн. Поведение ПГУ Лиао в зависимости от угла падения более благоприятно. Как показано в работе [3], паразитное отражение для схемы 4-го порядка не превышает 0,01 для углов падения до 73^0. Другие варианты ПГУ включают использование наборов аналитически выведенных функций Грина или распределенного брегговского отражателя, однако они не приобрели особой популярности в численном моделировании.

Ситуация изменилась кардинальным образом с введением в 1994 г. так называемого идеально согласующегося слоя (ИСС) или на языке оригинала PML - perfect matched layer [4]. Основная идея ИСС заключается в медленном градиентном изменении свойств некоторой искусственной среды вдоль определенного направления, например оси z для уменьшения и подавления отражения. Естественно, что эта среда при дискретизации становится плоскослоистой. Первый слой, граничащий с моделируемой структурой, ничем по своим оптическим свойствам от нее не отличается. Это означает отсутствие отражение на первой границе раздела или идеальное сочетание электромагнитных свойств двух сред. С каждым последующим слоем мнимая часть диэлектрической проницаемости, ответственная за поглощение, монотонно увеличивается, при этом вещественная часть не изменяется

$$\varepsilon(z)=\varepsilon_0\left(\varepsilon\pm i\frac{\sigma(z)}{\omega\varepsilon_0}\right),\ \sigma(z)=\sigma_{\max}\left(z/d\right)^n, \qquad (2)$$

где ε (z) – диэлектрическая проницаемость z –го слоя

d – толщина всего ИСС,

n – некоторое натуральное число,

$\sigma_{\max}$ - максимальная проводимость.

Знак перед мнимой частью выбирается из условия затухания волны при движении вглубь ИСС. Обычно степень n выбирается равной 2, 3 или 4.

Таким образом, отражения на границах слоев весьма малы, в то же время как поглощение излучения, проникающего вглубь ИСС возрастает. Коэффициент отражение полного ИСС в случае падения плоской волны равен [5]

$$R = \exp\left\{-2\sigma_{\max} k_z d / \left[\omega\varepsilon_0 \varepsilon (n+1)\right]\right\}. \tag{3}$$

Вообще говоря, увеличение параметра $\sigma_{\max}$ приводит к увеличению поглощения. Однако, при определенном росте $\sigma_{\max}$ начинают сказываться ошибки дискретизации и ошибки округления, поэтому дальнейшее наращивание $\sigma_{\max}$ теряет смысл. Считается, что в каждом конкретном случае существует свое оптимальное значение этого параметра. Условие минимизации отражения дает следующее значение максимальной проводимости $\sigma_{\max}$ [6]

$$\sigma_{\max} \approx \frac{n+1}{150\pi\,\Delta z\sqrt{\varepsilon}}, \tag{4}$$

где Δz – шаг дискретизации вдоль оси z (в рассматриваемом случае $\Delta z = Q_3$).

Проведенные вычисления с использование ИСС показало превосходный результат в подавлении искусственного отражения на границах вычислительной области вплоть до –100 дБ. Таким образом, можно считать, что на сегодняшний день, ИСС представляет собой наиболее эффективную модель ПГУ для исследования оптических процессов в волноводах на фотонных кристаллах, отражение на границе которой слабо зависит от угла, частоты и поляризации световых волн. К недостаткам ИСС можно отнести увеличение размеров области, отводимой для ПГУ, по сравнению с моделями, использующими разностные схемы высших порядков. Исследования эффективности различных моделей ИСС проводились в [7].

В модели Беренджера поле в пределах ИСС разбивалось на две соответствующие компоненты, например, в случае ориентации слоев ортогонально оси z - на E_x и E_y и аналогично для магнитного вектора. Это разбиение носит искусственный характер и его непосредственное обобщение на случай диссипативных сред или неструктурированной пространственной решетки совсем не очевидно. К тому же поля в пределах ИСС немаксвелловы и их физическая интерпретация затруднена (В работе [8] было доказано, что уравнения Беренджера можно получить из обобщенной формы уравнений Максвелла в растянутых координатах). Эти недостатки были преодолены в анизотропной модели ИСС, предложенной для частотной области в работах [9] и для временной - в статье [10]. Каждому слою ИСС приписываются свойства некоторой анизотропной среды, обладающей поглощением. Такая среда хотя и обладает специфическими свойствами, однако, описывает среду, поля в которой удовлетворяют уравнениям Максвелла. А это означает, что мы используем максвелловы поля как в физической области сеточного пространства, так и во вспомогательной численной. По оценкам, проведенным в [11], экономия машинного времени и памяти при использовании анизотропного ИСС по сравнению со схемой Беренджера достигает 25%. Эффективность применения анизотропного ИСС подтверждается работами [12,13], где на его основе решаются различные задачи оптоэлектроники.

Выводы. Таким образом, при рассмотрении наиболее существенных проблем моделирования свойств фотонно-кристаллических волноводов проводимых используя FDTD следует обращать особое внимание на вопросы применения эффективных ПГУ, позволяющих моделировать системы с существенным рассеянием излучения за собственные пределы.

Список литературы

1. *Лавриненко А.В., ЛавриненкоЮ.В., Черненко Д.С.* Выбор численных методов для моделирования волноводов на фотонных кристаллах // Вісник Одеського державного екологічного університету. – 2011.-Вып.11.- С. 234-242.
2. *Taflove A. and Hagness S.C.* Computational electrodynamics: The finite-difference time-domain method. Artech House, Boston, 2000.
3. *Wang T., Tripp A.C.* FDTD simulation of EM wave propagation in 3-D media // Geophysics.-1996.-V.61,No.1.-P.110-120.
4. *Berenger J. A* perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // J. Comput.Phys.-1994.-V.114,No.2.-P.185-200.
5. *Wallace J.W., Jensen M.A.* Analysis of optical waveguide structures by use of a combined finite-difference/finite-difference time-domain method // J.Opt.Soc. Amer.A.-2002.-V.19,No.3.-P.610-619.
6. *Hwu R.J., Wang X., Ren J.* FDTD technique in gigahertz, terahertz and optoelectronic circuits // Proceed.SPIE.-1999.-V.3795.-P.662-667.
7. *Vay J.-L.* A new absorbing layer boundary condition for the wave equation // J.Comput.Phys.-2000.-V.165,No.1.-P.511-521.
8. *Chew W.C., Weedon W.H.* A 3-D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates // Microw. Opt.Technol.Lett.-1994.-V.7,No.9.-P.599-604.
9. *Wu Jo-Yu, Kingsland D.M., Lee J.-F., Lee R.* A comparison of anisotropic PML to Berenger's PML and its application to the finite-element method for EM scattering // IEEE Trans.Anten.Prop.-1997.-V.45,No.1.-P.40-50.
10. *Gedney S.D.* An anisotropic perfectly matched layer – absorbing medium for the truncation of FDTD lattices // IEEE Trans.Ant.Prop.-1996.-V.44,No.12.-P.1630-1639.
11. *Petropoulos P.G., Zhao Li, Cangellaris A.C.* A reflectionless sponge layer absorbing boundary condition for the solution of Maxwell's equations with high-order staggered finite difference schemes // J.Comput.Phys.-1998.-V.139,No.3.-P.184-208.
12. *Koshiba M., Tsuji Y., Sasaki S.* High-performance absorbing boundary conditions for photonic crystal waveguide simulations // IEEE Microw. Wireless Compon.Lett.-2001.-V.11,No.4.-P.152-154.
13. *Derudder H., Olyslager F., De Zutter D., Van den Berghe S.* Efficient mode-matching analysis of discontinuities in finite planar substrates using perfectly matched layers // IEEE Trans.Anten.Propag.-2001.-V.49,No.2.-P.185-195.

Вибір граничних умов при побудові моделей фотоно-кристалічних хвилеводів. Лавріненко А.В., Лавріненко Ю.В.

Стаття присвячена обґрунтуванню вибору найбільш оптимальних граничних умов, які використовуються при модульованих процесах в фотоно-кристалічних хвилеводах.

Ключові слова: *алгоритм, граничні умови, діелектрична проникність, відображення, періодична структура, плоска хвиля, поглинання, шар, сходимість, фотоно-кристалічний хвилевод.*

Choice of boundary conditions for developing photonic crystal waveguides models. Lavrinenko A.V., Lavrinenko Y.V.

The paper discusses optimal methods for formulation of absorbing boundary conditions applied in simulations of light propagation in photonic crystal waveguides

***Keywords**: algorithm, boundary conditions, dielectric permittivity, reflection, periodic structure, plane wave, absorption, layer, convergence, photonic crystal waveguide*