

ВИЗНАЧЕННЯ ДОЗВОЛЕНИХ ЧАСТОТ ПОШИРЕННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ У 2D ФОТОННОМУ КРИСТАЛІ МЕТОДОМ ЗВ'ЯЗАНИХ ХВИЛЬ (МЗХ)

В. М. Фітьо¹, Я. В. Бобицький^{1,2}

¹ *Національний університет „Львівська політехніка”
12, вул. С. Бандери, Львів, 79013, Україна*

E-mail: polyana@polynet.lviv.ua

² *Інститут технології Жешувського університету
16, вул. Т. Рейтана, Жешув, 35-959, Польща*

E-mail: bobitski@polynet.lviv.ua

В роботі показано, що методом зв'язаних хвиль (МЗХ), який використовують для аналізу дифракції електромагнітних хвиль на плоских 1D ґратках, при накладанні періодичних граничних умов можна швидко встановити, чи задана частота електромагнітної хвилі є дозволеною для поширення в 2D фотонному кристалі. Проблема зводиться до задачі вищої алгебри на власні значення та власні вектори типу $\mathbf{A}_+ \vec{X} = \rho \mathbf{A}_- \vec{X}$ та перевірки, чи ρ за модулем рівне одиниці. Якщо $|\rho| = 1$, то задана частота дозволена. Розмірність вектора \vec{X} дорівнює подвоєному числу використаних зв'язаних хвиль ($2N$) при розрахунку, і визначається необхідною точністю аналізу. При $N \geq 30$ забезпечується висока точність визначення дозволених частот віток зонної структури, що визначають заборонену зону фотонного кристалу. Завдяки тому, що типові фотонні кристали мають симетричну просторову залежність діелектричної сталості, то використання симетрії в залежності від її виду дозволяє перейти до розмірності вектора \vec{X} $N \pm 1$ чи N без втрати точності аналізу з одночасним зменшенням часу розрахунку приблизно у вісім разів. Рис. 6. Бібліограф.: 20 назв.

Ключові слова: ґратка, фотонний кристал, дифракція, зонна структура, дозволена частота.

Останнім часом проводяться інтенсивні дослідження фотонних кристалів, які стають основою для розробки оптоелектронних приладів нового типу. Причому найбільше робіт присвячено 2D фотонним кристалом [1]. Згідно цієї роботи відносна кількість опублікованих праць, що вивчають 3D фотонні кристали дорівнює 2%, 1D - 15%, і 2D - більше ніж 80%. Такий статистичний розподіл визначається мабуть тим, що 1D фотонні кристали найбільш прості у виготовленні та існують точні методи їх аналізу; вони досить давно використовуються, ще до встановлення терміну фотонні кристали [2, 3], проте не вичерпали своїх потенційних можливостей. 3D фотонні кристали найскладніші для аналізу, не існує надійної технології їх виготовлення з керованими дефектами у просторовій структурі кристалу. З цієї точки зору 2D фотонні кристали займають проміжне становище: існуючий метод плоских хвиль для аналізу фотонної структури [4] забезпечує необхідну точність, хоча вимагає значного часу розрахунку, а також розроблені технології виготовлення таких фотонних кристалів. В теперішній час наукові праці присвячені переважно властивостям 2D фотонних кристалів та розробці пристроїв нового типу на їх основі [5, 6].

Висока зацікавленість фотонними кристалом розпочалася з праць Е. Яблоновича [2, 3]; тоді ж були запроваджені терміни: фотонний кристал та фотонна зонна структура. Ради справедливості слід відзначити, що вперше були запропоновані та вивчалися 3D структури на основі діелектричного середовища з періодичною зміною діелектричною

сталом харківським вченим Хижняком М. А. ще у 1957 році [7]. Вченим такі структури були названі штучними анізотропними діелектриками [7, 8]. Показано [8], що такі структури можуть мати від'ємну ефективну діелектричну сталу (чи від'ємну ефективну магнітну сталу у випадку просторово модульованого магнітодіелектрика) в певному діапазоні частот. В сучасній термінології фотонних кристалів це означає, що цей діапазон частот потрапляє у фотонну заборонену зону. В цих роботах для аналізу властивостей штучних анізотропних діелектриків використовувався метод функцій Гріна, який також застосовують для аналізу фотонних кристалів у теперішній час [10].

Найбільшого поширення аналізу властивостей фотонних кристалів набув метод плоских хвиль [4], в якому електромагнітне поле у кристалі подається у вигляді суми плоских хвиль, а дозволени частоти визначаються як власні значення квадратної матриці розмірністю $2N^d \times 2N^d$, де N - число плоских хвиль, які використовуються для одного напрямку; d - розмірність фотонного кристалу і може приймати значення 1, 2 або 3 [11]. Навіть для 2D фотонного кристалу для досягнення необхідної точності необхідно використати по крайній мірі 529 плоских хвиль ($N = 23$) [12], тобто знаходити власні значення матриці розмірності 1058×1058 . Очевидно, що для 3D фотонних кристалів задача стає ще складнішою, вимагає багато часу для розрахунку і виникає проблема збіжності результатів [13]. Слід також зауважити, що у методі плоских хвиль дозволени

частоти визначаються при заданому хвильовому векторі \vec{k} . На практиці досить часто виникає де-що інша задача: визначити, чи задана частота (наприклад частота генерації лазера) є дозволеною чи забороненою для поширення у $2D$ фотонному кристалі при заданій одній компоненті хвильового вектора. Ця компонента може визначатися кутом падіння плоскої хвилі на фотонний кристал, який просторово обмежений площиною.

Тому для швидкого аналізу $2D$ фотонних кристалів був запропонований МЗХ [11], який зазвичай використовують для аналізу одновимірних дифракційних ґраток. В цьому методі $2D$ фотонний кристал подають у вигляді стосу ґраток числом не менше 12, причому товщина ґратки рівна періоду фотонного кристалу в одному з напрямків, і відповідно діелектрична стала ґратки також змінювалась у цьому напрямку. Така система ґраток розміщувалась в однорідному середовищі. МЗХ розраховувались коефіцієнти пропускання та відбивання від стосу ґраток в залежності від довжини хвилі. За величиною коефіцієнта відбивання (пропускання) можна судити про характер поширення електромагнітної хвилі заданої частоти. Але все рівно цей метод вимагає значного часу розрахунку, оскільки потрібно знайти розв'язок на інтервали більше ніж 10 періодів. Проте порівняння класичного методу [4] розрахунку зонної структури і методу, викладеного в роботі [11], та використання граничних умов у відповідності до терми Флоке дозволяють зробити висновок, що достатньо мати розв'язок МЗХ лише на одному періоді фотонного кристалу, щоб визначити, чи задана частота дозволена чи заборонена. Тобто можна сформулювати метод, яким можна швидко розрахувати зонну структуру фотонного кристалу з високою точністю. Цей метод подано в роботі [14], і який по суті зводиться до задачі матричної алгебри на власні значення та власні вектори типу $\vec{T}\vec{X} = \rho\vec{R}\vec{X}$. Квадратні матриці \vec{T} і \vec{R} визначались МЗХ за стійким числовим алгоритмом [15] на одному періоді, причому розмірність квадратних матриць дорівнює $2N \times 2N$, де N - число врахованих дифракційних порядків. Очевидно, що із збільшенням N зростають точність та час розрахунків.

Цим методом побудована зонна структура фотонних кристалів з найпростішою елементарною коміркою квадратної форми із квадратними стержнями. Тобто цей метод апробований для найпростіших фотонних кристалів і не показано, як ним користуватись для $2D$ фотонних кристалів, наприклад, тригональної структури з круглими стержнями. Крім цього у методі, викладеному в роботі [14], не врахована просторова симетрія фотонних кристалів [16], хоча МЗХ дозволяє використати просторову симетрію ґратки та дифракції, та зменшити розра-

хунок в чотири-вісім разів без втрати точності [17]. Заодно в роботі [14] використано стійкий числовий алгоритм, який достатньо громіздкий для організації обчислень для $2D$ фотонних кристалів із стержнями не квадратного перерізу.

Отже мета даної роботи полягає у вдосконаленні методу аналізу зонної структури $2D$ фотонних кристалів на основі МЗХ, дослідження особливостей його застосування, та демонстрації, що вдосконалений пропонований метод по своїй універсальності не поступається класичному методу плоских хвиль, проте має перевагу в тому, що в процесі обчислень потрібно оперувати з матрицями із значно меншою кількістю елементів, що неминуче позначається на точності та часу комп'ютерних розрахунків.

1. Метод зв'язаних хвиль. Коротко опишемо МЗХ для обох поляризацій. В наших дослідженнях передбачається, що хвильовий вектор \vec{k} поширюваної хвилі у $2D$ фотонному кристалі лежить в площині, яка перпендикулярна до паралельних осей циліндрів, що формують кристал. Якщо напруженість електричного поля електромагнітної хвилі паралельна осям циліндрів, то маємо справу з хвилями TE поляризації; якщо ж вектор напруженості магнітного поля паралельний осям циліндрів, то такі хвилі назовемо TM поляризованими. На рис. 1 представлено зображення $2D$ фотонного кристалу з елементарною квадратною коміркою розміром $a \times a$ з циліндричними стержнями як нескінченний стос ґраток товщиною a в напрямку осі Oz . ґратки періодичні в напрямку осі Ox з періодом $\Lambda = a$. Відносна діелектрична стала стержнів дорівнює ϵ_a , а матеріалу, що оточує стержні, - ϵ_b .

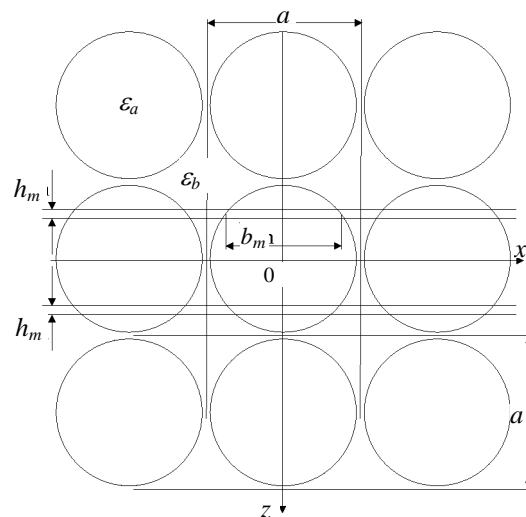


Рис. 1. Модель $2D$ фотонного кристалу як нескінченний стос ґраток

„Виріжмо” із фотонного кристалу одну ґратку товщиною a в напрямку осі Oz двома пло-

щинами $z = -a/2$ і $z = a/2$. В такій ізольованій гратці для аналізу полів можна використати МЗХ, причому напруженість полів при будь-якому z виразимо через поля в площині $z=0$. Система рівнянь, що описує поширення електромагнітної хвилі TE поляризації в такій гратці має вигляд [14, 15, 18]

$$\begin{aligned} \frac{dG_n(z)}{dz} &= -ik_0 F_n(z), \\ \frac{dF_n(z)}{dz} &= i \frac{k_{nx}^2}{k_0} G_n(z) - \\ &- ik_0 \sum_p \|\varepsilon(z)\|_{n-p} G_p(z), \end{aligned} \quad (1)$$

де $G_n(z)$ та $F_n(z)$ - фур'є-компоненти розкладу тангенціальних складових напруженостей електричного та магнітного полів електромагнітної хвилі; $k_0 = 2\pi/\lambda$; $k_{nx} = k_{0x} - 2n\pi/\Lambda$; n - ціле число; k_{0x} - проекція хвильового вектора на вісь Ox нульової фур'є-компоненти; $\|\varepsilon(z)\|_{n-p}$ - матриця Теплиця складена на основі коефіцієнтів розкладу $\varepsilon(x, z)$ в ряд Фур'є як періодичної функції від x .

Електричне та магнітне поля в гратці можна розкласти таким чином [15, 18]:

$$\begin{aligned} \vec{E}(x, z) &= \vec{e}_y \sum_n G_n(z) \exp(-ik_{nx}x), \\ \vec{H}(x, z) &= \sum_n [-\vec{e}_x F_{nx}(z) + \vec{e}_z F_{nz}(z)] \exp(-ik_{nx}x), \end{aligned}$$

де $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ - одиничні вектори, які направлені вздовж трьох осей координат, $F_{nx} = F_n$,

$$F_{nz} = \frac{k_{nx}}{k_0} G_n.$$

Система рівнянь для зв'язаних хвиль TM поляризації має такий вигляд [18, 19]:

$$\begin{aligned} \frac{dG_n(z)}{dz} &= -ik_0 F_n(z) + \\ &+ i \frac{k_{nx}}{k_0} \sum_p \|\varepsilon(z)\|_{n-p}^{-1} k_{px} F_p(z), \\ \frac{dF_n(z)}{dz} &= -ik_0 \sum_p \left\| \frac{1}{\varepsilon(z)} \right\|_{n-p}^{-1} G_p(z). \end{aligned} \quad (2)$$

Електричне та магнітне поля в гратці для цього випадку можна подати таким чином [15, 18]:

$$\begin{aligned} \vec{H}(x, z) &= \vec{e}_y \sum_n F_n(z) \exp(-ik_{nx}x), \\ \vec{E}(x, z) &= \sum_n [\vec{e}_x G_{nx}(z) - \vec{e}_z G_{nz}(z)] \exp(-ik_{nx}x), \end{aligned}$$

де G_{nz} визначається з системи алгебраїчних рівнянь $k_{nx} F_n = k_0 \sum_p \|\varepsilon(z)\|_{n-p} G_{pz}$, а $G_n = G_{nx}$.

Системи рівнянь (1) і (2) можна звести до системи диференціальних рівнянь другого порядку, які в матричному вигляді матимуть вид

$$\frac{d^2 \mathbf{G}}{dz^2} = \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2 \mathbf{G}, \quad (3)$$

$$\frac{d^2 \mathbf{F}}{dz^2} = \mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1 \mathbf{F}, \quad (4)$$

де матриці \mathbf{B}_1 і \mathbf{B}_2 відповідають першій та другій підсистемам систем рівнянь (1) і (2). Системою рівнянь (3) зручніше користуватися для хвиль TE поляризації (з точки зору кількості обчислень), а системою (4) - для хвиль TM поляризації.

Розмірність систем рівнянь (3) і (4) відповідає числу врахованих дифракційних порядків, в даному випадку N . Розділимо інтервали $[0, a/2], [0, -a/2]$ на M шарів. Кожен шар має товщину h_m . Кількість шарів залежить від виду функції $\varepsilon(z, x)$, і будемо вважати, що в межах кожного шару зміною залежності $\varepsilon(z, x)$ від z можна нехтувати, тобто на кожному шарі $\mathbf{B}_1^{(m)} \mathbf{B}_2^{(m)}$ не міняється. Знайшовши власні значення матриці $\mathbf{B}_1^{(m)} \mathbf{B}_2^{(m)}$ для TE поляризації ($\mathbf{B}_2^{(m)} \mathbf{B}_1^{(m)}$ для TM поляризації) на кожному шарі, які дорівнюють $\gamma_{m,n}^2$, і відповідні власні вектори, що формують матрицю \mathbf{U}_m , розв'язок системи (1) на інтервалі $[0, h_m]$ подамо так:

$$G_m(z) = \exp(\mathbf{A}_m z) \vec{C}_1^{(m)} + \exp[-\mathbf{A}_m z] \vec{C}_2^{(m)}; \quad (5)$$

$$\begin{aligned} F_m(z) &= -\mathbf{Q}_m \exp(\mathbf{A}_m z) \vec{C}_1^{(m)} + \\ &+ \mathbf{Q}_m \exp[-\mathbf{A}_m z] \vec{C}_2^{(m)}, \end{aligned} \quad (6)$$

де матриця $\mathbf{A}_m = \mathbf{U}_m \mathbf{\Gamma}_m \mathbf{U}_m^{-1}$, $\mathbf{\Gamma}_m$ - діагональна матриця, яка сформована на основі впорядкованої послідовності власних чисел $\gamma_{m,n} = +\sqrt{\gamma_{m,n}^2}$, відповідно $\exp(-\mathbf{A}_m h_m) = \mathbf{U}_m \exp(-\mathbf{\Gamma}_m h_m) \mathbf{U}_m^{-1}$;

$\mathbf{Q}_m = \frac{i\mathbf{A}_m}{k_0}$; $\vec{C}_1^{(m)}$ і $\vec{C}_2^{(m)}$ - вектори, які визначаються граничними умовами при $z=0$. Для кожного шару z міняється від $z=0$ до $z=h_m$, або від $z=0$ до $z=-h_m$ при від'ємних z , тобто використовується локальна система координат. Для цієї локальної системи координат розв'язок (5) і

(6) при $z = h_m$ можна представити через значення \mathbf{G}_m і \mathbf{F}_m при $z=0$ таким чином [18]:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_m(h_m) &= \mathbf{A}_{11}^{(m)} \mathbf{G}_m(0) + \mathbf{A}_{12}^{(m)} \mathbf{F}_m(0), \\ \mathbf{F}_m(h_m) &= \mathbf{A}_{21}^{(m)} \mathbf{G}_m(0) + \mathbf{A}_{22}^{(m)} \mathbf{F}_m(0), \end{aligned} \quad (7)$$

де матриці в правій частині системи (7) дорівнюють $\mathbf{A}_{11}^{(m)} = \mathbf{A}_{22}^{(m)} =$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} [\exp(\mathbf{A}_m h_m) + \exp(-\mathbf{A}_m h_m)], \\ \mathbf{A}_{12}^{(m)} &= \\ &= \frac{1}{2} [\exp(\mathbf{A}_m h_m) - \exp(-\mathbf{A}_m h_m)] \mathbf{A}_m^{-1} \mathbf{B}_1^{(m)}, \\ \mathbf{A}_{21}^{(m)} &= \\ &= \frac{1}{2} [\exp(\mathbf{A}_m h_m) - \exp(-\mathbf{A}_m h_m)] \mathbf{A}_m (\mathbf{B}_1^{(m)})^{-1}. \end{aligned} \quad (8)$$

Якщо ж z міняється від $z=0$ до $z=-h_m$, то $\mathbf{A}_{11}^{(m)}$ і $\mathbf{A}_{22}^{(m)}$ залишаються без змін, а $\mathbf{A}_{12}^{(m)}$ та $\mathbf{A}_{21}^{(m)}$ міняють знак на протилежний в порівнянні з виразом (8).

Для хвиль TM поляризації справедливі співвідношення (7) та перша підсистема системи (8). Друга та третя підсистеми системи (8) приймуть вид

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{12}^{(m)} &= \frac{1}{2} (\mathbf{B}_2^{(m)})^{-1} \mathbf{A}_m [\exp(\mathbf{A}_m h_m) - \exp(-\mathbf{A}_m h_m)], \\ \mathbf{A}_{21}^{(m)} &= \frac{1}{2} \mathbf{B}_2^{(m)} \mathbf{A}_m^{-1} [\exp(\mathbf{A}_m h_m) - \exp(-\mathbf{A}_m h_m)]. \end{aligned}$$

Таким чином, розв'язок при $z = h_m$ можна подати матричній формі

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(h_m) \\ \mathbf{F}_m(h_m) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11}^{(m)} & \mathbf{A}_{12}^{(m)} \\ \mathbf{A}_{21}^{(m)} & \mathbf{A}_{22}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(0) \\ \mathbf{F}_m(0) \end{pmatrix} = \\ &= \mathbf{A}_+^{(m)} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(0) \\ \mathbf{F}_m(0) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

а при $z = -h_m$ розв'язок виразимо так

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(-h_m) \\ \mathbf{F}_m(-h_m) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11}^{(m)} & -\mathbf{A}_{12}^{(m)} \\ -\mathbf{A}_{21}^{(m)} & \mathbf{A}_{22}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(0) \\ \mathbf{F}_m(0) \end{pmatrix} = \\ &= \mathbf{A}_-^{(m)} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(0) \\ \mathbf{F}_m(0) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10)$$

Завдяки симетричності діелектричної сталої відносно площини $z=0$, знайшовши матрицю $\mathbf{A}_+^{(m)}$, ми можемо зразу ж визначити $\mathbf{A}_-^{(m)}$. Таким чином, розв'язок при $z = a/2$ та

$z = -a/2$ з врахуванням виразів (9) та (10) можна подати так

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{G}(a/2) \\ \mathbf{F}(a/2) \end{pmatrix} &= \prod_{m=1}^M \mathbf{A}_+^{(m)} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} = \\ &= \mathbf{A}_+ \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \mathbf{G}(-a/2) \\ \mathbf{F}(-a/2) \end{pmatrix} &= \prod_{m=1}^M \mathbf{A}_-^{(m)} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} = \\ &= \mathbf{A}_- \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

Останні шари h_M і h_{-M} для фотонного кристалу з квадратною коміркою за товщиною дорівнюють

$$h_M = a/2 - \sum_{m=1}^{M-1} h_m \square a/2 - R,$$

де R - радіус циліндра.

Виникає питання, як вибрати товщину шарів h_m , тобто висоту прямокутника та ширину прямокутника b_m , сукупність яких найкраще апроксимувало б коло. На наш погляд досить раціональною апроксимацією є наступна:

$$\begin{aligned} h_m &= R \left[\sin \frac{m\pi}{2M} - \sin \frac{(m-1)\pi}{2M} \right], \\ b_m &= 2R \cos \frac{m\pi}{2M}. \end{aligned} \quad (12)$$

В останніх виразах m міняється від 1 до $M-1$. Застосування виразів (12) для нижнього та верхнього кола дозволяють апроксимувати коло багатокутником, який має центральну симетрію та чотири осі симетрії. На рис. 2 подані апроксимаційні багатокутники при $M=3$ (хрест) та при $M=11$. Очевидно, що зростом M точність апроксимації кола покращується. При $M=2$ маємо квадрат.

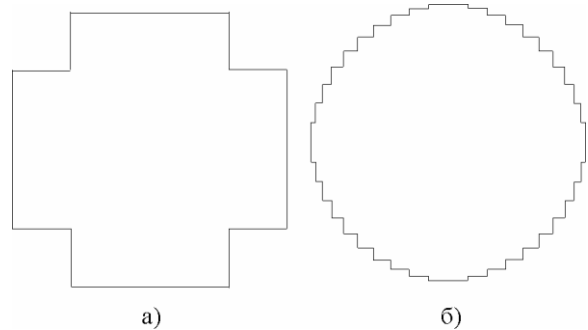


Рис. 2. Апроксимація кола багатокутником при $M=3$ та $M=11$

2. Симетризація рівнянь МЗХ. В роботі [16] подано цілий ряд типів $2D$ фотонних кристалів, які в переважній більшості симетричні за своєю будовою

$$\varepsilon(x, z) = \varepsilon(-x, z) = \varepsilon(x, -z).$$

До добутку матриць $\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2$ в правій частині систем диференціальних рівнянь другого порядку (3), (4) відносно напруженостей електричного і магнітного полів відповідно введемо додаткові індекси e та m . Отже матриці тепер відповідно для хвиль TE і TM матимуть таке позначення: \mathbf{V}_e і \mathbf{V}_m . Матриці \mathbf{V}_e і \mathbf{V}_m будуть мати певну симетрію при таких двох умовах:

$$\begin{cases} \varepsilon_n = \varepsilon_{-n}, \\ k_{0x} = 0, \end{cases} \quad (13)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_n = \varepsilon_{-n}, \\ k_{0x} = \pi / \Lambda. \end{cases} \quad (14)$$

Умова (13) виконується при падінні пучка на ґратку по нормалі. В цьому випадку при розрахунках бажано враховувати $N = 2N_1 + 1$ дифракційних порядків. Той дифракційний порядок, який поширюється по нормалі до ґратки, буде нульовим порядком і має амплітуду $G_0(F_0)$. Відповідно перша і остання компоненти векторів $\vec{G}(z)$ і $\vec{F}(z)$ будуть мати позначення: G_{-N_1}, G_{N_1} і F_{-N_1}, F_{N_1} . Умова (14) виконується при падінні пучка на ґратку під кутом Бреґґа. В цьому випадку при розрахунках доцільно враховувати $2N_1$ дифракційних порядків. Той дифракційний порядок, для якого $k_{0x} = \pi / \Lambda$, буде нульовим порядком і має амплітуду $G_0(F_0)$. Відповідно перша і остання компоненти векторів $\vec{G}(z)$ і $\vec{F}(z)$ будуть мати позначення: G_{-N_1+1}, G_{N_1} і F_{-N_1+1}, F_{N_1} . При такому впорядкуванні векторів $\vec{G}(z)$ і $\vec{F}(z)$ елементи $b_{n,p}$ матриць \mathbf{V}_e і \mathbf{V}_m задовольняють таким умовам симетрії:

$$\begin{cases} b_{n,p} = b_{2N_1+2-n, 2N_1+2-p}, \text{ якщо } k_{0x} = 0, \\ b_{n,p} = b_{2N_1+1-n, 2N_1+1-p}, \text{ якщо } k_{0x} = \pi / \Lambda. \end{cases} \quad (15)$$

Крім умови (15) елементи $b_{n,p}$ матриці \mathbf{V}_e задовольняють ще такій додатковій умові: $b_{n,p} = b_{p,n}$.

Спочатку, використовуючи властивості симетричності (15), перейдемо від систем рівнянь (3) і (4) до рівнозначних у сукупності двох систем диференціальних рівнянь, але вдвічі меншого

порядку. Для утворення першої системи рівнянь додамо перше і останнє рівняння системи (3), друге і передостаннє і так далі. В результуючих рівняннях, кількість яких N_1 , погрупуємо члени і виділимо суми, які позначимо таким чином:

$$\begin{cases} G_{-N_1+1} + G_{N_1} = G_{N_1}^+, \\ G_{-N_1+2} + G_{N_1-1} = G_{N_1-1}^+, \\ \dots = \dots, \\ G_0 + G_1 = G_1^+. \end{cases}$$

В результаті отримаємо лінійну систему диференціальних рівнянь розмірності N_1 відносно нових змінних, причому матричні елементи $b_{n,p}^+$ матриці \mathbf{V}_e^+ зв'язані з елементами $b_{n,p}$ матриці \mathbf{V}_e таким чином:

$$b_{n,p}^+ = b_{N_1+n, N_1+p} + b_{N_1-n+1, N_1+p}. \quad (16)$$

Для утворення другої системи рівнянь від першого віднімемо останнє рівняння системи (3), потім таку саму операцію проведемо з другим і передостаннім і так далі. В результуючих рівняннях, кількість яких N_1 , погрупуємо члени і виділимо різниці, які позначимо таким чином:

$$\begin{cases} G_{-N_1+1} - G_{N_1} = G_{N_1}^-, \\ G_{-N_1+2} - G_{N_1-1} = G_{N_1-1}^-, \\ \dots = \dots, \\ G_0 - G_1 = G_1^-. \end{cases}$$

В результаті отримаємо лінійну систему диференціальних рівнянь розмірності N_1 відносно нових змінних, причому матричні елементи $b_{n,p}^-$ матриці \mathbf{V}_e^- зв'язані з елементами $b_{n,p}$ матриці \mathbf{V}_e таким чином:

$$b_{n,p}^- = b_{N_1+n, N_1+p} - b_{N_1-n+1, N_1+p}. \quad (17)$$

Якщо пучок на ґратку падає по нормалі, і система (3) має $2N_1 + 1$ рівнянь, то ми поступимо аналогічним чином. Але в цьому випадку нульовий порядок дифракції немає пари. Як наслідок отримаємо таку заміну змінних:

$$\begin{cases} G_{-N_1} + G_{N_1} = G_{N_1+1}^+, \\ \dots = \dots, \\ G_{-1} + G_1 = G_2^+, \\ G_0 = G_1^+. \end{cases}$$

Отже, при додаванні отримаємо лінійну систему диференціальних рівнянь відносно нових змінних розмірності $N_1 + 1$, причому матричні

елементи $b_{n,p}^+$ матриці \mathbf{V}_e^+ зв'язані з елементами $b_{n,p}$ матриці \mathbf{V}_e таким чином

$$\begin{cases} b_{n,p}^+ = b_{N_1+1,2N_1+2-p}/2 + b_{N_1+1,2N_1+2-p}/2, n=1, \\ b_{n,p}^+ = b_{N_1+2-n,N_1+2-p} + b_{N_1+2-n,N_1+p}, n \neq 1. \end{cases} \quad (18)$$

Для отримання додаткової системи диференціальних рівнянь відносно різниці змінних, віднімаємо відповідні рівняння системи (3). Отримаємо таку заміну змінних:

$$\begin{cases} G_{-N_1} - G_{N_1} = G_{N_1+1}^+, \\ \dots = \dots, \\ G_{-1} - G_1 = G_2^+. \end{cases}$$

В цьому випадку матричні елементи матриці $b_{n,p}^-$ матриці \mathbf{V}_e^- зв'язані з елементами $b_{n,p}$ матриці \mathbf{V}_e так

$$\begin{cases} b_{n,p}^- = b_{N_1+1,2N_1+2-p}/2 - b_{N_1+1,2N_1+2-p}/2, n=1, \\ b_{n,p}^- = b_{N_1+2-n,N_1+2-p} - b_{N_1+2-n,N_1+p}, n \neq 1. \end{cases} \quad (19)$$

З (19) випливає, що елементи першого рядка і першого стовпця матриці \mathbf{V}_e^- дорівнюють нулю. Звідси можна зробити висновок, що додаткова система рівнянь має в своєму складі N_1 рівнянь. Отже, в результаті симетризації маємо чотири випадки, і елементи симетризованих матриць \mathbf{V}_e^\pm (\mathbf{V}_m^\pm) визначаються через елементи вихідних матриць $\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2$ системи рівнянь (3) ($\mathbf{V}_2, \mathbf{V}_1$ системи рівнянь (4)) за виразами (16) - (19). Ці випадки реалізуються при дослідженні зонної структури фотонних кристалів МЗХ, при цьому переходимо від системи рівнянь розмірності $2N_1$ чи $2N_1 + 1$ до систем розмірності N_1 чи $N_1 + 1$ і N_1 , тим самим можна очікувати істотне скорочення часу комп'ютерного розрахунку, приблизно у 2^3 разів [20].

3. Числовий аналіз 2D фотонних кристалів МЗХ. З теорії фотонних кристалів [4] виходить, що справедливе таке співвідношення:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}(a_z/2) \\ \mathbf{F}(a_z/2) \end{pmatrix} = \exp(ik_z a_z) \begin{pmatrix} \mathbf{G}(-a_z/2) \\ \mathbf{F}(-a_z/2) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Врахувавши вираз (11), формулу (20) можна переписати таким чином:

$$\mathbf{A}_+ \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} = \exp(ik_z a_z) \mathbf{A}_- \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix}.$$

Знову маємо задачу на власні числа та власні вектори такого типу:

$$\mathbf{A}_+ \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} = \rho \mathbf{A}_- \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Щоб електромагнітна хвиля вільно поширювалась по кристалу без затухання, необхідно щоб k_z було дійсною величиною, тобто власне значення ρ задачі (21) за модулем дорівнювало б одиниці. Звідси можна розрахувати k_z за таким виразом

$$k_z = \arg(\rho)/a_z. \quad (22)$$

Для фотонного кристалу з елементарною квадратною коміркою $a_z = a_x = a$ або $a_z = a_x = \sqrt{2}a$; якщо ж елементарна комірка тригональна, то $a_z = a, a_x = \sqrt{3}a$ або $a_x = a, a_z = \sqrt{3}a$. В наших викладках $a_x = \Lambda$, тобто завжди дорівнює періоду дифракційної ґратки, на які розкладається фотонний кристал. В процесі розрахунку ми задаємо частоту, яка дорівнює $\omega a / 2\pi c = a / \lambda$, $k_x = k_{0x}$, і який може при наших розрахунках приймати два значення у відповідності до виразів (13) і (14). Потім шукаємо матриці \mathbf{A}_+ і \mathbf{A}_- та ті власні числа ρ задачі (21), які за модулем дорівнюють 1. Якщо такі числа існують, а їх завжди повинно бути парна кількість, тоді визначаємо k_z по формулі (22); відповідна частота дозволена. Послідовно змінюючи частоту ми можемо побудувати зонну структуру фотонного кристалу. На основі власних векторів, ми можемо розрахувати електромагнітне поле дозованих мод. На рис. 3 подана зонна структура фотонного кристалу квадратної комірки з такими характеристиками: $\varepsilon_a = 8,9$; $\varepsilon_b = 1$; $R = 0,38a$.

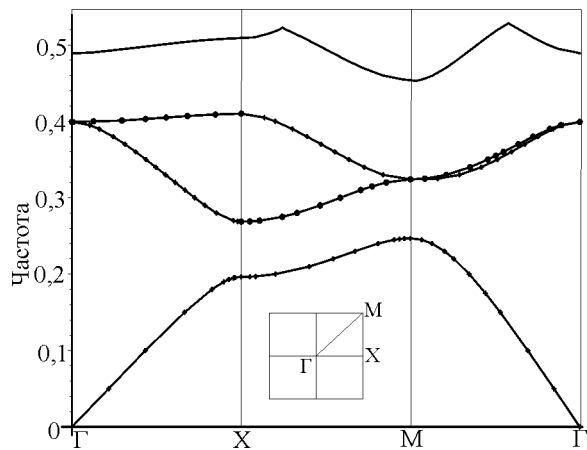


Рис. 3. Зонна структура фотонного кристалу з квадратною коміркою

Точки Г, X і М називаються точками високої симетрії. На шляху від точки Г до точки X $k_x = 0$, а k_z змінюється від 0 до π/a . Отже еле-

менти симетризованої матриці можемо визначати за виразами (18) або (19). На шляху від точки X до точки M $k_x = \pi/a$, а k_z міняється від 0 до π/a . Тобто маємо інший вид симетрії, а елементи симетризованої матриці визначаються за виразами (16) та (17). На шляху від точки M до точки Γ $k_x = k_z$ і синхронно міняються від π/a до нуля. Щоб розрахувати зонну структуру на цьому інтервалі розвернемо систему координат xOz на $\pi/4$, а її початок сумістимо з центром циліндра. В новій системі координат виділимо знову елементарну комірку, але її розміри будуть вже іншими: $a_x = a_z = \sqrt{2}a$, при цьому в новій системі координат $k_x = 0$, а k_z змінюється від $\sqrt{2}\pi/a$ до нуля, тобто елементи симетризованої матриці визначаються за виразами (18) або (19). На рис. 3 на нижні вітки зонної структури нанесені хрести, тобто використані формули (16) або (18), і круги - використані формули (17) і (19), відповідні моди є симетричними або антисиметричними, проте в точках високої симетрії для одної і тої ж частоти одночасно можуть існувати дві моди, які називаються виродженими [4]. Слід зауважити, що зонна структура, що наведена на рис. 3, якісно і кількісно співпадає з рис. 13 розд. 5 монографії [4].

На рис. 4, а наведена зонна структура 2D фотонного кристалу тригональної структури при таких параметрах: $\epsilon_a = 13$; $\epsilon_b = 1$; $R = 0,24a$, а на рис. 4, б - мінімальна частота верхньої вітки (крива 2) та максимальна частота нижньої вітки (крива 1), які визначають ширину забороненої зони в залежності від радіусів циліндрів.

Від точки Γ до точки M розрахунок проводиться при $a_x = a$, $a_z = \sqrt{3}a$, при цьому $k_x = 0$, а k_z мінявся від нуля до $2\pi/\sqrt{3}a$. Для побудови віток зонної структури від точки M до точки Γ (проміжна точка K) необхідно розвернути осі координат на $\pi/2$, при цьому в новій системі координат $a_x = \sqrt{3}a$, $a_z = a$, $k_x = 0$, k_z змінюється від $2\pi/a$ до 0. Між точками M і K k_z змінюється від $2\pi/a$ до $4\pi/3a$, відповідно між точками K і Γ - від $4\pi/3a$ до 0. Тобто для побудови зонної структури фотонного кристалу тригональної структури достатньо використовувати при симетризації правила згідно виразів (18) і (19).

На рис. 5, а наведені залежності k_z від N (квадратики, $M=50$) та від M (кола, $N=29$) при таких умовах: $k_x = 0$; $R = 0,48a$; $\epsilon_a = 1$; $\epsilon_b = 13$ при частотах $\omega a/2\pi c$, які відповідно дорівнюють 0,3 (точки 1) і 0,58 (точки 2). На рис. 5, б відображено залежність часу розрахунку у віднос-

них одиницях від N (хрести) при $M=87$ та від M (кола) при $N=29$. Інші умови такі: $k_x = 0$; $\epsilon_a = 13$; $\epsilon_b = 1$; $R = 0,24a$; $\omega a/2\pi c = 0,2$. Час t_{\max} - час розрахунку k_z , який необхідний з використанням симетризації при $M=87$ та $N=29$.

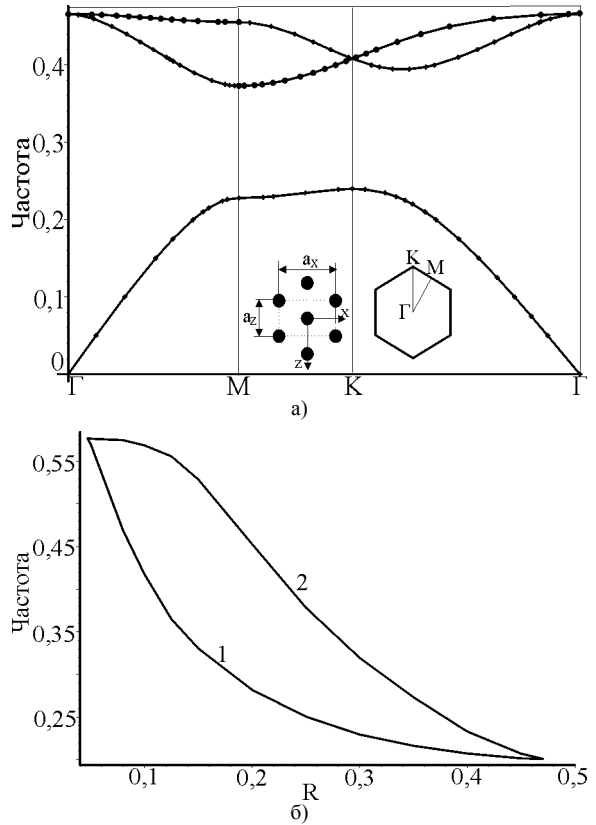


Рис. 4. Зонна структура 2D фотонного кристалу тригональної структури (циліндри в повітрі)

З рис. 5, а випливає, що для сукупності точок 1, тобто для частоти 0,3 отримуються стабільні результати вже при $N=10$ та при $M=10$, в той же час для частоти 0,58 розрахунки потрібно приводити при N більших 20 та при M більших 50. Тому наші розрахунки зонної структури приводились при $N \geq 25$ та $M \geq 50$. На рис. 5, б відношення t/t_{\max} стосується залежності часу розрахунку від M . Бачимо, що ця залежність (позначена \circ) практично лінійна, тому збільшення M не приводить до кардинального збільшення часу розрахунку. Проте час в залежності від N різко, зростає при збільшенні N , приблизно у вісім разів при збільшенні N в два рази, про що свідчить сукупність точок ($\sqrt[3]{t/t_{\max}}$) позначених $+$, які асимптотично лягають на пряму лінію.

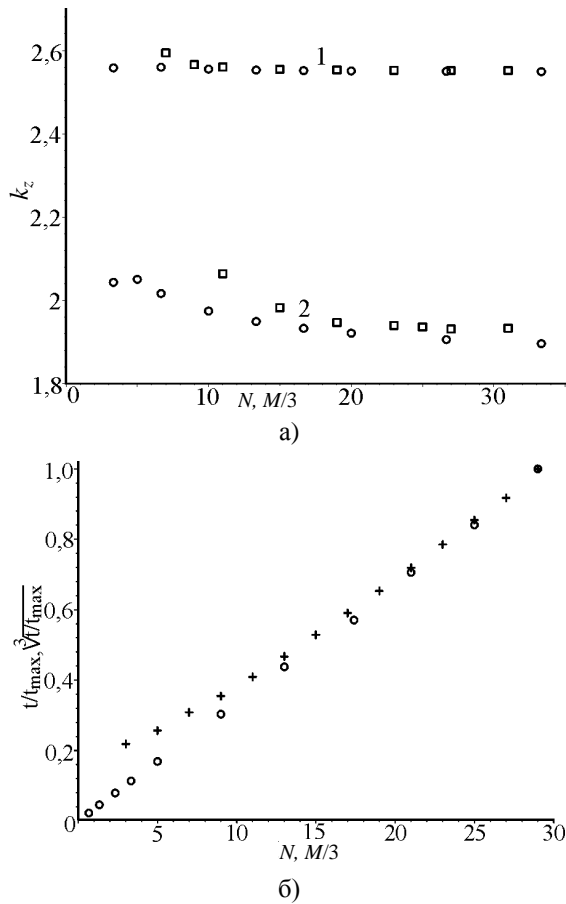


Рис. 5. Залежності k_z та відносного часу розрахунку від N та M

Нами також розрахована методом, що пропонується, зонна структура фотонного кристалу з тригональною коміркою при таких її параметрах: $R = 0,48a$; $\epsilon_a = 1$; $\epsilon_b = 13$. Ця зонна структура відображена на рис. 6, а. На рис. 6, б наведені мінімальна частота верхньої вітки (крива 2) та максимальна частота нижньої вітки (відповідно крива 1), які визначають ширину забороненої зони в залежності від ϵ_b .

Можна переконатись, що залежність подана на рис. 6, а не лише якісно, а й кількісно співпадає з графіками, поданими в книзі [4] (рис. 10, розд. 5). Згідно наших розрахунків при $\epsilon_b = 13$ відношення ширини забороненої зони до середньої частоти зони складає 0,189, що добре узгоджується з даними роботи [4], в якій відповідне співвідношення становить 0,186. Також рис. 6, б добре корелює з даними рис. 5 статті [12].

Висновки. Розвинуто метод аналізу зонної структури 2D фотонних кристалів МЗХ, який запропоновано в роботі [14]. Накладання періодичних умов приводить до розв'язку задачі на власні значення типу $\mathbf{A}_+ \vec{X} = \rho \mathbf{A}_- \vec{X}$ та пере-

вірки, чи ρ за модулем дорівнює одиниці. Якщо $|\rho| = 1$, то задана частота дозволена.

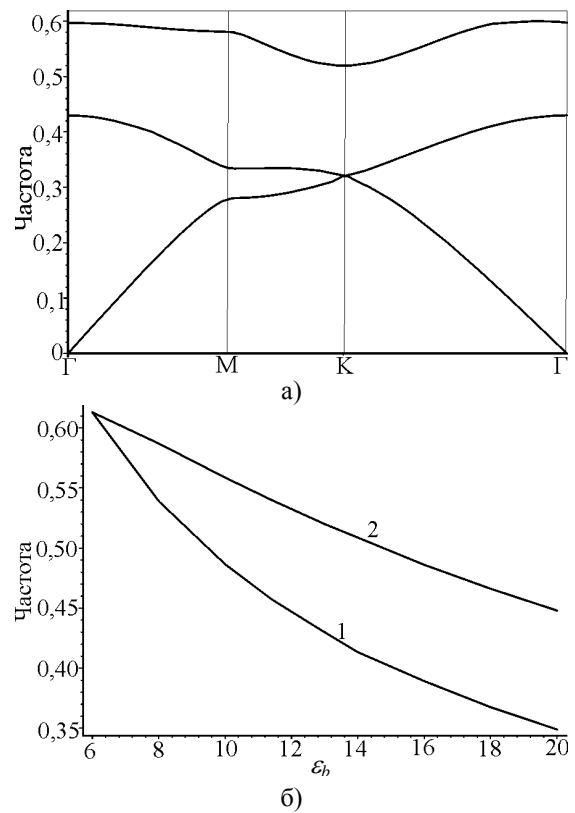


Рис. 6. Зонна структура фотонного кристалу з тригональною коміркою

Розмірність вектора \vec{X} дорівнює подвоєному числу зв'язаних хвиль $2N$, які використовуються при аналізі, і визначається необхідною точністю розрахунку дозволених частот. Завдяки просторовій симетричності залежності діелектричної сталої можна перейти до розмірності вектора \vec{X} $N \pm 1$ чи N без втрати точності аналізу з одночасним зменшенням часу розрахунку приблизно у вісім разів.

Точність розрахунку визначається кількістю врахованих дифракційних порядків в N та числом M , яке визначає кількість прямокутників, якими апроксимується переріз циліндра. З ростом частоти хвиль, що поширюються у фотонному кристалі необхідно збільшувати як N так і M . При $N \geq 30$ забезпечується висока точність розрахунку дозволених частот віток зонної структури.

Час розрахунку досить точно зростає за лінійним законом від M та у третьому степені від N . Пропонований алгоритм простий в реалізації у вигляді програмного продукту, проте в загальному випадку чисельно нестійкий, хоча в даній роботі актуальність проблеми стійкості суттєво зменшена

за рахунок більш загальної задачі на власні значення типу $\mathbf{A}_+ \vec{X} = \rho \mathbf{A}_- \vec{X}$. Метод, що пропонується реалізовано для фотонних кристалів з квадратною та тригональною елементарними комірками з круглими циліндричними стержнями.

Наступний розвиток цього методу полягатиме в розробці чисельно стійкого алгоритму для 2D фотонних довільної структури та в створенні аналогічного методу для 3D фотонних кристалів на основі МЗХ для 2D ґраток. Там також передбачається суттєвий виграш в часі та в точності розрахунку.

1. Karachevceva I. A. Two-dimensional photonic crystals as perspective materials of modern nanoelectronics // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. - 2004. - 7, N4. - P.430-435.
2. Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics // Phys. Rev. Lett. - 1997. - 58, N17. - P.2059-2065.
3. Yablonovitch E., Gmitter T. J., Leung K. M. Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing non spherical atoms // Phys. Rev. Lett. - 1991. - 67, N17. - P.2295-2298.
4. Joannopoulos J. D., Meade R. D., Winn J. N., Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. - Princeton: University Press, 1995. - 137 p.
5. Foteinopoulou S., Soukoulis C. M. Negative refraction and left-hand behavior in two-dimensional photonic crystals // arXiv:cond-mat / 0212434. - 18 dec, 2002. - 5 p.
6. Xu U., Wang J., He Q., Cao L., Su P., Jin G. Optical filter based on contra-directional waveguide coupling in 2D photonic crystal with square lattice of dielectric rods // Optics Express. - 2005. - 13, N15. - P.5608-5613.
7. Хиженяк Н. А. Искусственная анизотропия диэлектриков // Журн. техн. физики. - 1957. - 27, №9. - С.2006-2033.
8. Скурта Е. А., Хиженяк Н. А. Дисперсионные свойства искусственных анизотропных диэлектриков. - Харьков: Издание ИРЭ АН УССР, 1982. - 39 с.
9. Хиженяк Н. А. Интегральные уравнения макроскопической электродинамики. - Киев: Наук. думка, 1986. - 280 с.
10. Seydon F., Ramahi O. M., Duraiswami R., Seppanen T. Numerical computation of the Green's function for two-dimensional finite-size photonic crystals of infinite length // Optics Express. - 2006. - 14, N23. - P.11362-11371.
11. Dansas P., N. Paraire N. Fast modeling of photonic bandgap structures by use of diffraction-grating approach // J. Opt.Soc. Am. A. - 1998. - 15, N6. - P.1586-1597.
12. Glushko A. E., Glushko E. Ya., Karachevceva I. A. Theory of two-dimensional photonic crystals with lamellar cylindrical pores // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. - 2005. - 8, No1. - P.64-71.
13. Söziyer H. S., Haus J. W., Inguva R. Photonic bands: Convergence problems with the plane-wave method // Phys. Rev. B. - 1992-II. - 45, N24. - P.13962-13073.
14. Фітьо В. М., Бобицький Я. В., Лаба Г. П. Аналіз зонної структури 1D і 2D фотонних кристалів методом зв'язаних хвиль // Радиофизика и электроника.- Харьков: Ин-т радиофизики и электрон. НАН Украины. - 2005. - 10, №1. - С.123 - 131.
15. Moharam M. G., Gram E. B., Pommet D. A., Gaylord T. K., Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary grating // J. Opt. Soc. Am. A. - 1995. - 12, N5. - P.1068-1076.
16. Luan Pi-G., Ye Zh. Two dimensional photonic crystals // ArXiv: cond-mat/0105428 1. - 22 may 2001. - 15 p.
17. Фітьо В. М., Бобицький Я. В. Аналіз планарних ґраток з симетрийними властивостями (МЗХ) // Вісник Національного університету „Львівська політехніка”. - “Електроніка”. - 2004. - № 513. - С.203-213.
18. Fittio V. M., Bobitski Y. V. Diffraction analysis by periodic structures using a method of coupled waves // OPTOELECTRONICS REVIEW. - 2005. - 13, N4. - P.331-339.

19. Li L. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures // J. Opt. Soc. Am. A. - 1995. - 12, N5. - P.1870-1876.
20. Li L. Note on the S-matrix propagation algorithm // J. Opt. Soc. Am. A. - 2003. - 20, - N4. - P.655-660.

DETERMINATION OF THE ALLOWED FREQUENCIES OF DISTRIBUTION OF ELECTROMAGNETIC WAVES IN 2D PHOTONIC CRYSTAL BY THE COUPLED WAVES METHOD (CWM)

V. M. Fityo, Ya. V. Bobitski

It is shown in work, that at imposition of a periodic boundary conditions it is possible quickly to define there is this frequency of allowed for distribution in 2D photonic crystal by the coupled waves method (CWM), which use for the analysis of diffraction of electromagnetic waves in plane 1D grating. A problem is reduced to the task of higher algebra on the eigenvalues and eigenvectors of type $\mathbf{A}_+ \vec{X} = \rho \mathbf{A}_- \vec{X}$ and verification on equality of the module ρ to unit. If $|\rho|=1$, the intended frequency is allowed. The dimension of vector \vec{X} is equal to the doubled number of the used coupled waves ($2N$) at a calculation, and is determined by the required accuracy of analysis. High accuracy of determination of the allowed frequencies of branches of band structure at $N \geq 30$, which determine the band gap of photonic crystal, is provided. The use of symmetry gives possibility to pass on to the dimension of \vec{X} vector $N \pm 1$ or N without the loss of accuracy with the simultaneous diminishing of time of calculation approximately in 8 times.

Key words: grating, photonic crystal, diffraction, band structure, allowed frequency.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗРЕШЕННЫХ ЧАСТОТ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В 2D ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ МЕТОДОМ СВЯЗАННЫХ ВОЛН (МСВ)

В. М. Фитьо, Я. В. Бобицкий

Показано, что методом связанных волн (МСВ), который используют для анализа дифракции электромагнитных волн на плоских 1D решетках, при наложении периодических граничных условий можно быстро определить, является ли данная частота разрешенной для распространения в 2D фотонном кристалле. Проблема сводится к задаче высшей алгебры на собственные значения и собственные векторы типа $\mathbf{A}_+ \vec{X} = \rho \mathbf{A}_- \vec{X}$ и проверки на равенство модуля ρ единице. Если $|\rho|=1$, то заданная частота разрешена. Размерность вектора \vec{X} равна удвоенному числу использованных связанных волн ($2N$) при расчете и определяется требуемой точностью анализа. При $N \geq 30$ обеспечивается высокая точность определения разрешенных частот веток зонной структуры, которые определяют запрещенную зону фотонного кристалла. Использование симметрии предоставляет возможность перейти к размерности вектора \vec{X} $N \pm 1$ или N без потери точности с одновременным уменьшением времени расчета примерно в восемь раз.

Ключевые слова: решетка, фотонный кристалл, дифракция, зонная структура, разрешенная частота.

Рукопись поступила 5 мая 2007 г.