

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра электроники, колебаний и волн

**Разработка методов анализа характеристик двумерных
периодических структур**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 4 курса 4031 группы
направления 03.03.03 «Радиофизика»
Института физики
Князевой Анастасии Владимировны

Научный руководитель
ассистент кафедры электроники,
колебаний и волн

дата, подпись

А. В. Титов

Зав. кафедрой электроники,
колебаний и волн
к. ф.-м. н., доцент

дата, подпись

С. В. Гришин

Саратов 2021 год

Оглавление

Введение	3
Основное содержание работы	5
Заключение	13
Список литературы	14

Введение

Данная работа посвящена разработке методов анализа характеристик двумерных периодических структур и включает литературный обзор второго издания книги «Photonic Crystals. Molding the Flow of Light» от John D. Joannopoulos и др. [1] Целью данной работы является описание теории распространения света в одномерных фотонных кристаллах, а также разработка методов анализа свойств фотонных кристаллов на основе программного пакета Ansys HFSS.

Новое направление в физике твердого тела – создание и исследование искусственных полупроводников, структур с периодом решетки, сопоставимым с длиной электромагнитной волны. Эти структуры, появление которых значительно расширило возможности контроля потока света, называются фотонными кристаллами.

Кристалл – это периодическая структура из атомов или молекул. Кристалл представляет периодический потенциал для электрона, проходящего через него, и как составляющие кристалла, так и геометрия решетки определяют проводящие свойства кристалла.

Теория квантовой механики в периодическом потенциале объясняет, почему в проводящем кристалле электроны распространяются как диффундирующий газ из свободных частиц. Как они избегают рассеяния на компонентах кристаллической решетки? Ответ заключается в том, что электроны распространяются как волны, а волны, которые удовлетворяют определенным критериям, могут преодолевать периодический потенциал без рассеяния (хотя они будут рассеиваться дефектами и примесями).

Металлические волноводы и резонаторы широко используются для управления распространением СВЧ излучения. Стенки металлического резонатора запрещают распространение электромагнитных волн с частотами ниже определенной пороговой, а металлический волновод допускает распространение только вдоль своей оси. Было бы чрезвычайно полезно иметь такие же возможности для электромагнитных волн на частотах вне СВЧ

диапазона, таких как видимый свет. Фотонные кристаллы позволяют обобщать и масштабировать полезные свойства резонаторов и волноводов для охвата более широкого диапазона частот. Можно построить фотонный кристалл заданной геометрии с миллиметровыми размерами для СВЧ управления или с микронными размерами для инфракрасного управления.

Фотонные кристаллы лежат на границе физики твердого тела и электромагнитной теории. Кристаллические структуры относятся к области физики твердого тела, в то время как в теории фотонных кристаллов электроны заменяются электромагнитными волнами. Соответственно, необходимо иметь представление об основных понятиях обоих разделов перед тем, как приступить к анализу фотонных кристаллов.

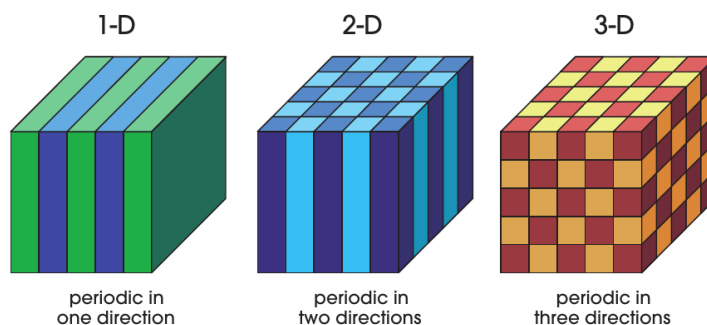


Рис. 1. Простые примеры одно-, двух- и трехмерных фотонных кристаллов. [1].

В наше время исследование свойств фотонных кристаллов является актуальной задачей для теоретической и экспериментальной физики. Особый практический интерес представляют собой волноводы на основе фотонных кристаллов, в которых ЭМ волна проходит практически без рассеяния в любом заранее заданном направлении. Подобные структуры в будущем предполагается использовать в высокопроизводительных компьютерах следующего поколения, но на данный момент практическая реализация элементов с необходимыми свойствами на основе фотонных кристаллов весьма сложная проблема.

Всё вышесказанное позволяет считать тему выполненной работы актуальной.

Основное содержание работы

Многослойная пленка. Простейший фотонный кристалл, показанный на Рис. 2, состоит из чередующихся слоев материала с различными диэлектрическими проницаемостями: многослойная пленка. В 1887 году Джон Уильям Стретт (лорд Рэлей) опубликовал один из первых анализов оптических свойств многослойных пленок. В этой главе будет использован анализ зонных структур, который легко обобщается на более сложные двух- и трехмерные фотонные кристаллы [2].

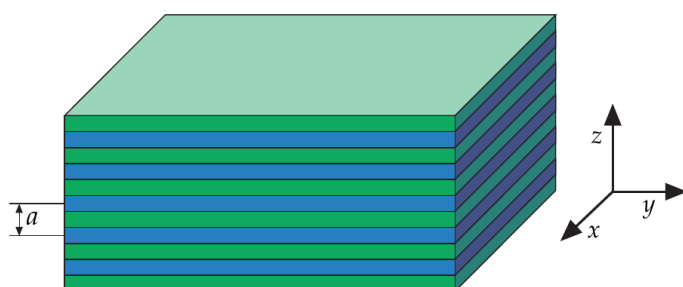


Рис. 2. Многослойная пленка, одномерный фотонный кристалл.

Материал является периодическим в направлении z и однородным в плоскости xy . Это позволяет классифицировать моды, используя $k_{||}$, k_z и n : волновой вектор в плоскости, волновой вектор в направлении z и номер зоны. Волновые векторы определяют, как мода преобразуется при воздействии операторами трансляции, и число полос пропускания увеличивается с частотой. Можно записать режимы в блоховской форме [3, 4]:

$$H_{n,k_z,k_{||}}(\mathbf{r}) = e^{ik_{||}\rho} e^{ik_z z} \mathbf{u}_{n,k_z,k_{||}}(z) \quad (1.1)$$

Функция $u(z)$ является периодической, то есть $u(z) = u(z + R)$ всякий раз, когда R является целым кратным пространственного периода a . Поскольку кристалл имеет непрерывную трансляционную симметрию в плоскости xy , волновой вектор k может принимать любое значение. Однако волновой вектор k_z может быть ограничен конечным интервалом, одномерной зоной Бриллюэна, потому что кристалл имеет дискретную трансляционную симметрию в направлении z .

На Рис. 3 приведен график $\omega(k)$ для трех различных многослойных пленок. Левый график представляет собой систему, в которой все слои имеют одинаковую диэлектрическую постоянную. Центральный график для структуры с переменными диэлектрическими постоянными 13 и 12, а правый - для структуры с намного большей разницей диэлектрических постоянных 13 и 1.

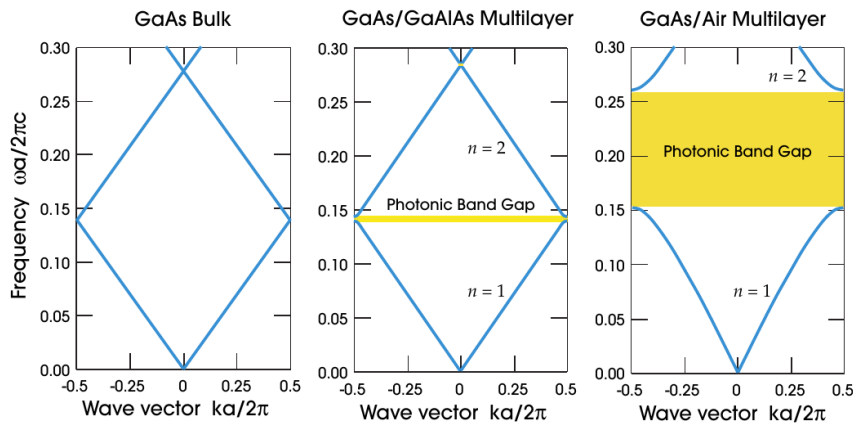


Рис. 3. Структуры фотонных зон для осевого распространения, рассчитанные для трех различных многослойных пленок. [1].

Левый график соответствует однородной диэлектрической среде, для которой произвольно установили период a .

Центральный график, предназначенный для почти однородной среды, выглядит как однородный случай с одним важным отличием: между верхней и нижней ветвями линий имеется частотный разрыв. Такой зазор называется фотонной запрещенной зоной. Правый график показывает, что разрыв значительно расширяется при увеличении диэлектрического контраста.

Почему возникает фотонная запрещенная зона? Физическое происхождение этой щели можно понять, рассматривая профили мод электрического поля для состояний, находящихся непосредственно выше и ниже этой щели. Зазор между полосами $n = 1$ и $n = 2$ возникает на краю зоны Бриллюэна при $k = \pi / a$.

Низкочастотные моды концентрируют свою энергию в областях с высоким ϵ , а высокочастотные моды имеют большую долю своих энергий (хотя не обязательно большинство) в регионах с низким ϵ . Имея это в виду,

понятно, почему существует разница в частотах между этими двумя случаями. Мода, находящаяся под зазором, концентрирует энергию в областях $\epsilon = 13$, что дает ей более низкую частоту, чем в следующей полосе, большая часть энергии которой находится в областях $\epsilon = 12$.

В одном измерении, как правило, возникает щель между каждым набором полос, либо на краю зоны Бриллюэна, либо в ее центре. Запрещенные зоны всегда появляются в одномерном фотонном кристалле для любого диэлектрического контраста. Чем меньше контраст, тем меньше щели, но щели открываются, как только $\epsilon_1 / \epsilon_2 \neq 1$.

В данной главе кратко рассмотрена теория одномерных фотонных кристаллов в виде многослойных пленок. В следующей главе уделено внимание теории двумерных фотонных кристаллов.

Двумерные фотонные кристаллы. Двумерный фотонный кристалл является периодическим вдоль двух своих осей и однородным вдоль третьей оси. Типичный образец, состоящий из квадратной решетки диэлектрических стержней, показан на Рис. 4 (стержни бесконечной длины). Для некоторых значений расстояния между стержнями этот кристалл может иметь запрещенную зону в плоскости xy . В отличие от многослойной пленки, этот двумерный фотонный кристалл может препятствовать распространению света в любом направлении внутри плоскости.

Можно использовать симметрию кристалла для характеристики его электромагнитных мод. Поскольку система является однородной в направлении z , моды должны быть колебательными в этом направлении, без каких-либо ограничений для волнового вектора k_z . Кроме того, система обладает дискретной трансляционной симметрией в плоскости xy . В частности, $\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, до тех пор, пока $\mathbf{R}$ – любая линейная комбинация базовых векторов решетки $\hat{a}_x$ и $\hat{a}_y$. Применяя теорему Блоха, стоит сосредоточить внимание на значениях $k_{||}$, которые находятся в зоне Бриллюэна. Как и прежде, используется индекс n (номер полосы) для обозначения мод в порядке увеличения частоты.

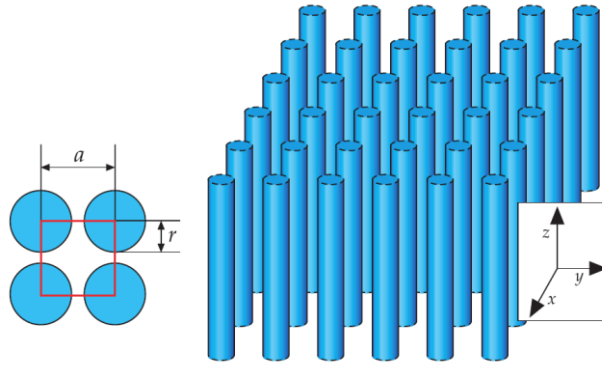


Рис. 4 Двумерный фотонный кристалл.

Индексируя моды кристалла по k_z , $k_{||}$ и n , они принимают знакомую форму блоховских состояний:

$$H_{n,k_z,k_{||}}(\mathbf{r}) = e^{ik_{||}\rho} e^{ik_z z} \mathbf{u}_{n,k_z,k_{||}}(\rho). \quad (2.1)$$

В этом уравнении ρ - проекция $\mathbf{r}$ на плоскость xy , а $\mathbf{u}(\rho)$ - периодическая функция, $\mathbf{u}(\rho) = \mathbf{u}(\rho + \mathbf{R})$, для всех векторов решетки $\mathbf{R}$. Ключевое отличие состоит в том, что в данном случае $k_{||}$ ограничено зоной Бриллюэна, а k_z неограниченно. В многослойной пленке роли этих двух волновых векторов поменялись местами. Кроме того, теперь $\mathbf{u}$ периодичен в плоскости, а не в направлении z , как раньше.

Любые моды с $k_z = 0$ (т.е. распространяющиеся строго параллельно плоскости xy) инвариантны относительно отражений через плоскость xy . Эта зеркальная симметрия позволяет классифицировать моды, разделив их на две различные поляризации. Поперечные электрические (ТЕ) моды имеют $\mathbf{H}$, нормаль к плоскости, $\mathbf{H} = H(\rho) \hat{\mathbf{z}}$ и $\mathbf{E}$ на плоскости, $\mathbf{E}(\rho) \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$. Поперечно-магнитные (ТМ) моды имеют обратное значение: $\mathbf{E} = E(\rho) \hat{\mathbf{z}}$ и $\mathbf{H}(\rho) \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$.

Зонные структуры для ТЕ-мод и ТМ могут быть совершенно разными. Например, возможно, что для одной поляризации существуют фотонные запрещенные зоны, но не существуют для другой поляризации.

Зонная структура для кристалла, состоящего из стержней из оксида алюминия ($\epsilon=8,9$) в воздухе, с радиусом $r/a = 0,2$, приведена на Рис. 5. Приведены кривые для ТЕ и ТМ мод. На горизонтальной оси показано

значение волнового вектора $k_{||}$ в плоскости. По мере движения слева направо, $k_{||}$ движется по краям треугольника, соответствующего неприводимой зоне Бриллюэна, от Γ до X и M, как показано на вставке к Рис. 5.

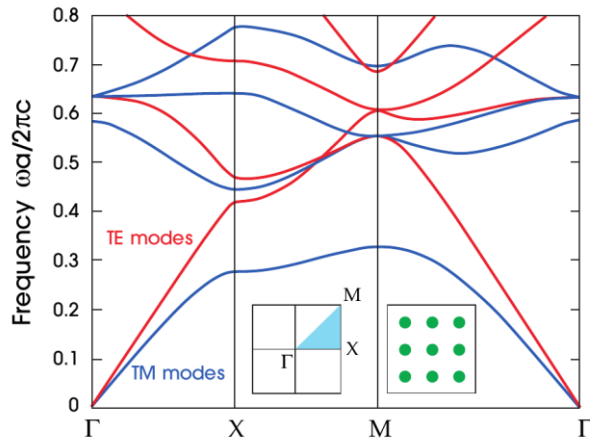


Рис. 5 Структура для квадратного массива диэлектрических стержней с $r = 0,2a$. [1]

Причина, по которой $k_{||}$ был построен только вдоль края зоны Бриллюэна состоит в том, что минимумы и максимумы данной зоны (которые определяют ширину запрещенной зоны) почти всегда перекрывают края зоны и часто находятся в углу. Это справедливо для большинства случаев.

Массив стержней имеет квадратную зону Бриллюэна, которая показана на вставке Рис. 5. Зона непропускания Бриллюэна представляет собой треугольный клин в верхнем правом углу; остальная часть зоны Бриллюэна может быть связана с этим клином вращательной симметрией. Три специальные точки Γ , X и M соответствуют $\mathbf{k}_{||} = 0$, $\mathbf{k}_{||} = \pi / a \hat{x}$ и $\mathbf{k}_{||} = \pi / a \hat{x} + \pi / a \hat{y}$.

Первая полоса имеет большую часть своей энергии в диэлектрических областях и имеет низкую частоту; вторая должна иметь узловую плоскость, чтобы быть ортогональной первой, и, следовательно, иметь большую часть своей энергии в воздушной области с соответственно более высокой частотой.

Векторная природа электромагнитного поля и, в частности, его разрывные граничные условия на материальных границах, является центральной для этого явления. Когда идет переход через диэлектрическую границу от высокого диэлектрика ϵ_1 к некоторому меньшему $\epsilon_2 < \epsilon_1$, плотность

энергии $\epsilon|E|^2$ будет дискретно уменьшаться на ϵ_2/ϵ_1 , если E параллельна границе раздела (поскольку E непрерывна), и будет возрастать дискретно на ϵ_1/ϵ_2 , если E перпендикулярно границе раздела (поскольку $\epsilon E_\perp$ непрерывно). В случае ТМ E параллельна всем диэлектрическим интерфейсам, поэтому возможен большой коэффициент концентрации.

В данной главе кратко приведена теория двумерных фотонных кристаллов и описаны принципы формирования зон Бриллюэна для массива из диэлектрических стержней. В следующей Главе описана методика получения диаграмм Бриллюэна для двумерных периодических структур в программном пакете Ansys HFSS.

Моделирование. *ANSYS Electronics Suite* (далее *ANSYS*) – один из мощнейших программных продуктов, предназначенных для анализа электродинамических характеристик трёхмерных объектов. Диаграмма Бриллюэна это графическое изображение дисперсионного уравнения для периодических структур. В точках пересечения дисперсионных характеристик образуются зоны непропускания, а области пропускания называются зонами Бриллюэна

Сложные объекты в *ANSYS* создаются с помощью множества примитивных объектов (примерами примитивных объектов являются параллелепипеды и цилиндры), и различных операций над этими фигурами.

Простейшим примером двумерных фотонных кристаллов являются бесконечно длинные диэлектрические колонны, расположенные в воздухе. Так как структура периодическая, для упрощения вычислений строится один сегмент решетки, что можно увидеть на рисунке. На первом этапе строится базовая 3D модель согласно параметрам $a=10\text{мкм}$, $r=2\text{мкм}$ (где a - длина параллелепипеда и r - радиус цилиндра). Задаются свойства материалов, граничные условия, параметры решения, свипирование и создается графический отчет как на Рис. 7.

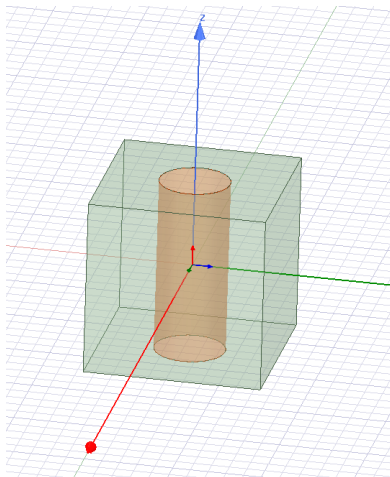


Рис. 6 Стержни бесконечных размеров

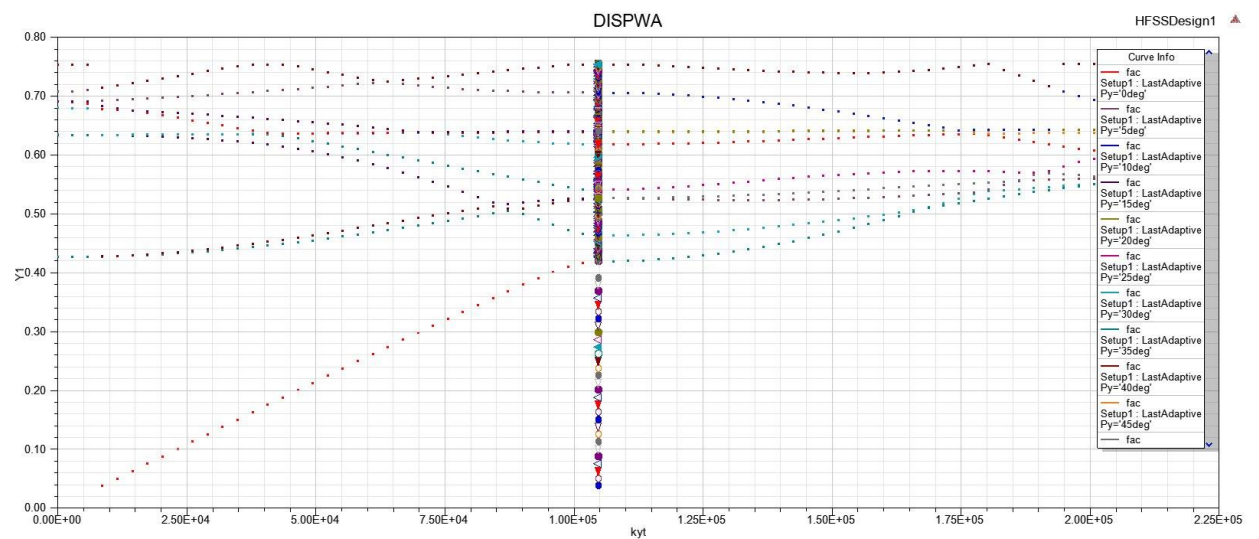


Рис. 7 Диаграмма Бриллюэна для структуры из стержней бесконечной длины в воздухе.

Прделаем те же операции с оставшимися двумя моделями.

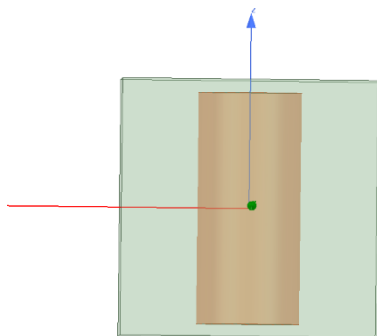


Рис. 8 Стержни конечных размеров.

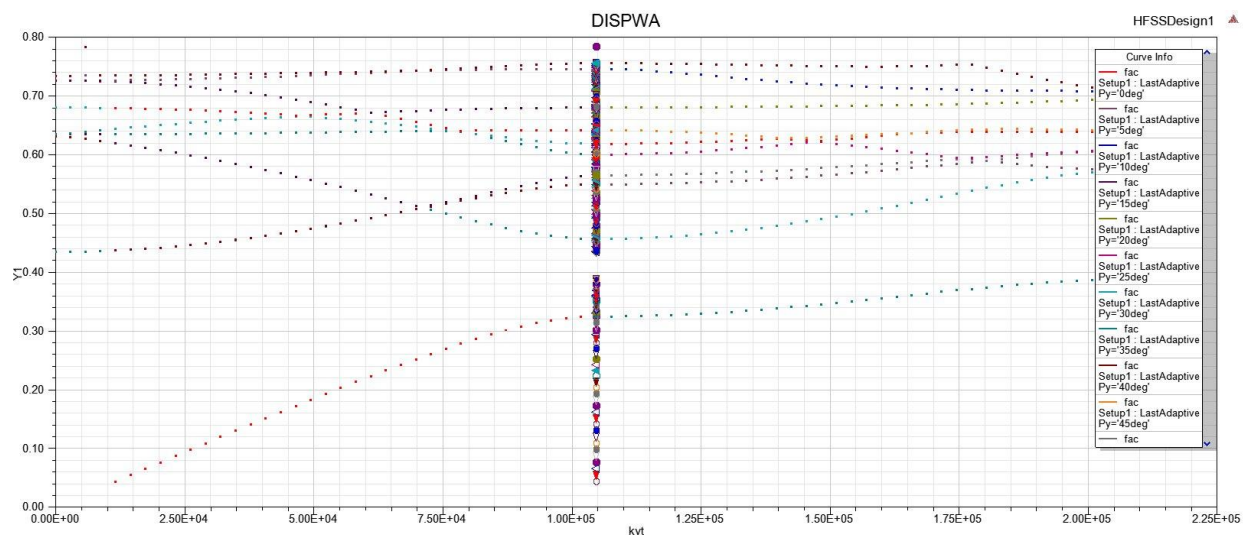


Рис. 9 Диаграмма Бриллюэна для стержней конечного размера в воздухе.

Возьмем модель с размерами и свойствами, предложенными научным руководителем.

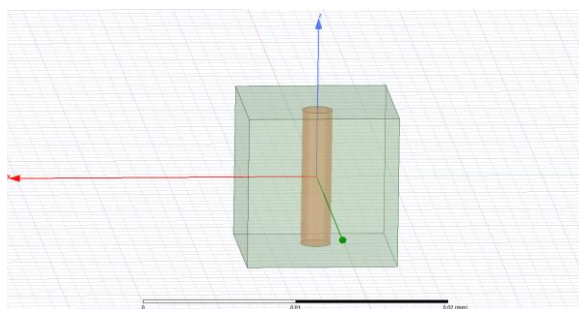


Рис. 10 Стержень конечных размеров с длиной 9мкм, радиусом 1мкм и диэлектрической проницаемостью 4.4.

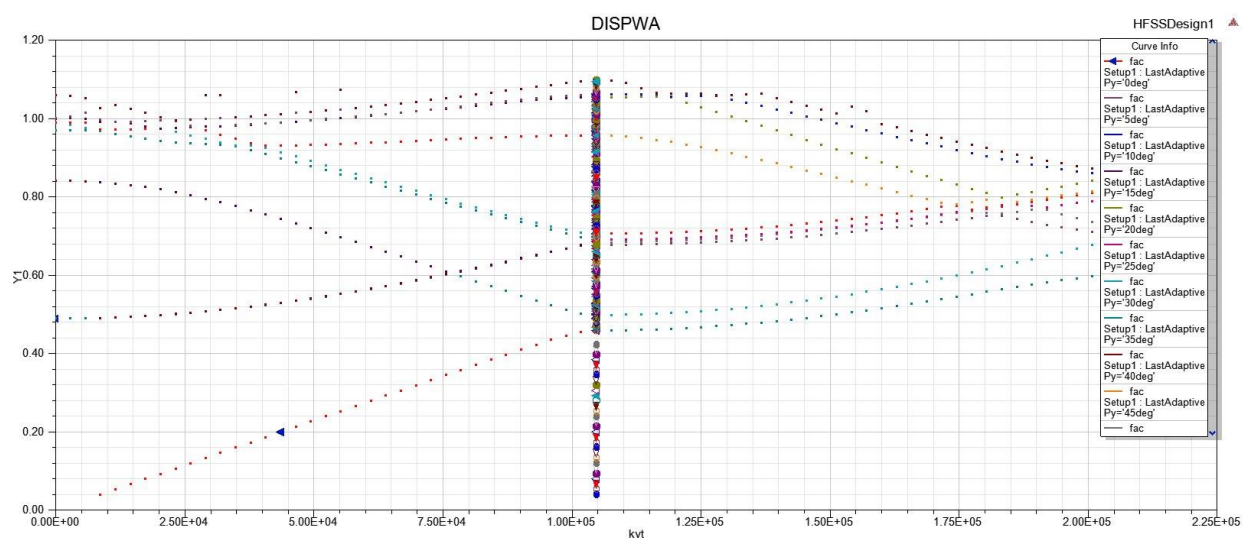


Рис. 11 Диаграмма Бриллюэна для модели, предложенной научным руководителем

Заключение

Данная работа посвящена исследованию свойств периодических структур, интерес к которым в последние десятилетия значительно возрос. Работа включает в себя краткий обзор книги, посвященной физике фотонных кристаллов. Проведенный обзор является чрезвычайно важным для понимания физики процессов, возникающих при распространении электромагнитных волн в средах с периодическими структурами. Полученные данные могут быть полезны не только для проектирования оптических периодических систем, но также могут сыграть важную роль при проектировании передающих линий в коротковолновой области СВЧ диапазона, а также при создании метаматериалов с заданными свойствами.

В ходе работы изучен большой объем материала, связанного с физическими основами существования запрещенных зон в фотонных кристаллах. На основе этих материалов в программном пакете Ansys HFSS создана методика исследования дисперсионных характеристик тонких пленок с внедренными двумерными периодическими структурами. В ходе проведенного исследования получена серия диаграмм Бриллюэна для различных случаев периодических структур. Разработанная методика представлена впервые.

Проведенная работа может быть использована для создания курса по моделированию фотонных кристаллов, различных типов метаматериалов и прочих двумерных периодических структур для учащихся СГУ.

Список литературы

-
- 1 – J. Joannopoulos, S. Johnson, J. Winn, and R. Meade. Photonic Crystals. Molding the Flow of Light Princeton University Press, 2 edition, (2008).
 - 2 Yablonovitch, E., and T. J. Gmitter. 1989. “Photonic band structure: The face-centered-cubic case.” Phys. Rev. Lett. 63:1950–1953.
 - 3 – Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 5-е. — М.: Физматлит, 2002. 808 с. — («Теоретическая физика», том III).
 - 4 – Ляпунов А.М. Общая задача об устойчивости движения. - М.: Изд-во АН СССР, 1948.