

УДК 535.361

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ С ПОМОЩЬЮ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОГО МЕТОДА

К. И. Зайцев¹, В. С. Горелик^{1,2}, Г. М. Катывба¹, С. О. Юрченко¹

С помощью конечно-разностного метода численного решения уравнений Максвелла проанализированы свойства приповерхностных состояний электромагнитного поля в глобулярных фотонных кристаллах. Получены пространственные распределения интенсивности оптического излучения вблизи поверхности фотонного кристалла. Показано существенное перераспределение интенсивности поля в объеме кристалла, сопровождающееся возникновением локальных пиков высокой интенсивности. Установлено, что максимальная локальная интенсивность излучения наблюдается при совпадении длины волны возбуждающего излучения с положением запрещенной зоны кристалла. При этом средняя интенсивность электромагнитной волны быстро спадает от поверхности в глубь фотонного кристалла.

Ключевые слова: фотонный кристалл, поверхностные состояния, FDTD-моделирование, запрещённая зона, дисперсионная кривая.

Введение. В настоящее время все больший интерес вызывает изучение оптических свойств метаматериалов и, в частности, фотонно-кристаллических структур [1–4] – новых физических объектов, характеризующихся периодически изменяющимися в пространстве диэлектрическими свойствами. Наличие пространственно-периодических флуктуаций оптических свойств среды с периодом, сопоставимым с длиной волны оптического излучения, приводит к кардинальной перестройке спектра элементарных опти-

¹ Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 105005 Россия, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1.

² ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: gorelik@sci.lebedev.ru.

ческих возбуждений, в частности, к образованию запрещенных и разрешенных фотонных зон [5, 6]. Примерами трехмерного фотонного кристалла являются искусственные опаловые матрицы, состоящие из плотноупакованных сферических глобул кремнезёма с диаметром в диапазоне 200–500 нм. Общий вид участков глобулярного фотонного кристалла, полученный с помощью атомно-силового микроскопа, приведен на рис. 1((a), (b)). Опаловые фотонно-кристаллические матрицы могут наполняться различными веществами, включая жидкости и нелинейные среды. При этом возможна целенаправленная модификация оптических свойств фотонного кристалла и его дисперсионных кривых.

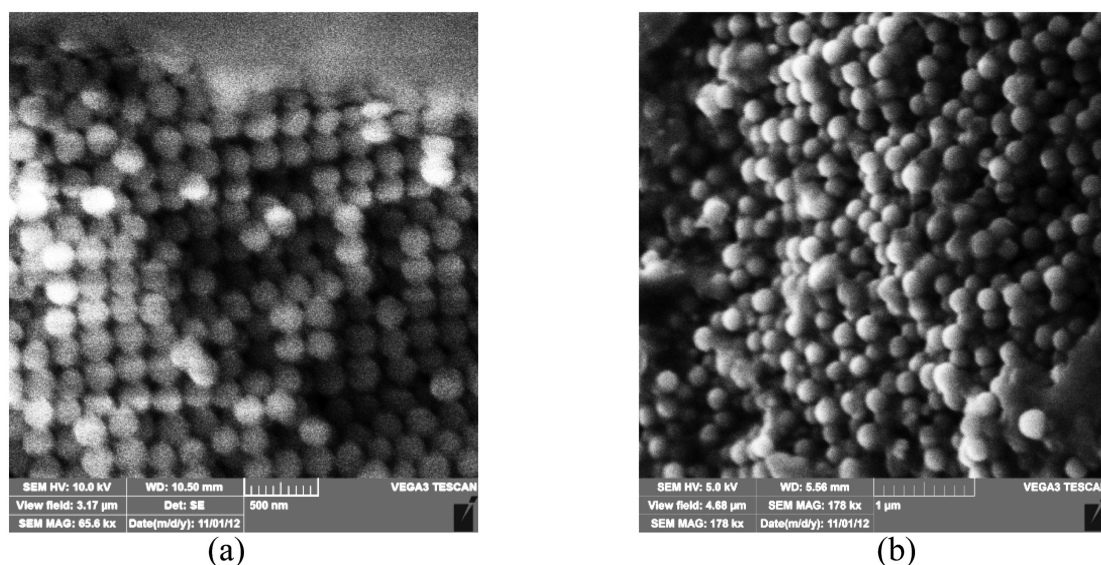


Рис. 1: Изображение глобулярного фотонного кристалла, зарегистрированное с помощью атомно-силового микроскопа: (a) пустая опаловая фотонно-кристаллическая матрица, (b) опаловая фотонно-кристаллическая матрица, заполненная NaNO_2 .

Специфика взаимодействия оптического излучения с фотонными кристаллами, наличие разрешенных и запрещенных фотонных зон позволяет использовать их для решения широкого спектра прикладных задач, в том числе: для построения фотонно-кристаллических волноводов [7–9], для создания фотонно-кристаллических волокон [10–12]. Также показана возможность повышения эффективности генерации высших гармоник [13–15], параметрической генерации [16–18] и высокоэффективной накачки активных сред [19–21] на основе использования глобулярного фотонного кристалла, заполненного различными компонентами. Основываясь на существенном замедлении скорости распространения оптического излучения в фотонном кристалле, была пред-

сказана возможность бозе–эйнштейновской конденсации фотонов в подобных средах [22, 23].

Все перечисленные эффекты и их приложения наблюдаются при взаимодействии света с веществом в объеме фотонного кристалла. Однако не менее интересным представляется изучение эффектов взаимодействия оптического излучения с поверхностью фотонного кристалла, в особенности в том случае, когда длина волны электромагнитного излучения попадает в запрещенную зону фотонного кристалла и свет способен проникать в кристалл лишь на очень небольшую глубину. Классический подход к описанию механизма взаимодействия оптического излучения с фотонным кристаллом основан на использовании теории блоховских плоских волн, распространяющихся в периодическом потенциале эквивалентной одномерной фотонно-кристаллической решетки [24–26]. В работах [27–30] показано, что по аналогии с поверхностными электронными состояниями в твердом теле состояния фотона на поверхности фотонного кристалла могут быть описаны в виде таммовских состояний в эквивалентной одномерной кристаллической решетке.

Необходимо отметить, что подходы среднего поля, используемые в работах [24–27] для описания взаимодействия света с фотонным кристаллом как в объеме среды, так и на его поверхности, не в полной мере отражают всю физику взаимодействия света с периодически изменяющимся потенциалом кристаллической решетки. При взаимодействии света с двумерными и трехмерными фотонными кристаллами имеет место когерентное искажение волнового фронта электромагнитной волны и рассеяние света на неоднородностях структуры, что не позволяет описать распространение света через фотонный кристалл в виде взаимодействия плоской электромагнитной волны с эквивалентной одномерной структурой.

В связи с отмеченным представляет интерес изучение поверхностных состояний электромагнитного поля в двумерных и трехмерных фотонных кристаллах. Одним из возможных и наиболее точных путей решения данной задачи является численное моделирование процессов взаимодействия электромагнитного излучения с поверхностью фотонного кристалла. Целью настоящей работы является изучение приповерхностного распределения интенсивности оптического поля в двумерном фотонном кристалле с использованием конечно-разностного метода численного решения уравнений Максвелла (FDTD – finite-difference time-domain) [31–33].

Результаты расчётов методом FDTD. Для проведения вычислительного эксперимента нами было принято допущение о том, что моделируемый фотонный кристалл

является двумерным и состоит из частиц цилиндрической формы. В указанном случае принято обозначать метод конечных разностей в виде 2D-FDTD [34–38]. Для исключения влияния краевых эффектов на результаты вычислительного эксперимента размеры фотонного кристалла во всех направлениях выбирались в соответствии с условиями: $L_x \gg T_x$, $L_y \gg T_y$ или $L_x \gg \lambda$; $L_y \gg \lambda$, где L_x, L_y – размеры кристалла, T_x, T_y – периоды глобулярного фотонного кристалла в направлении осей Ox и Oy соответственно, а λ – длина волны возбуждающего электромагнитного излучения. Фрагмент идеализированной структуры фотонного кристалла представлен на рис.2.

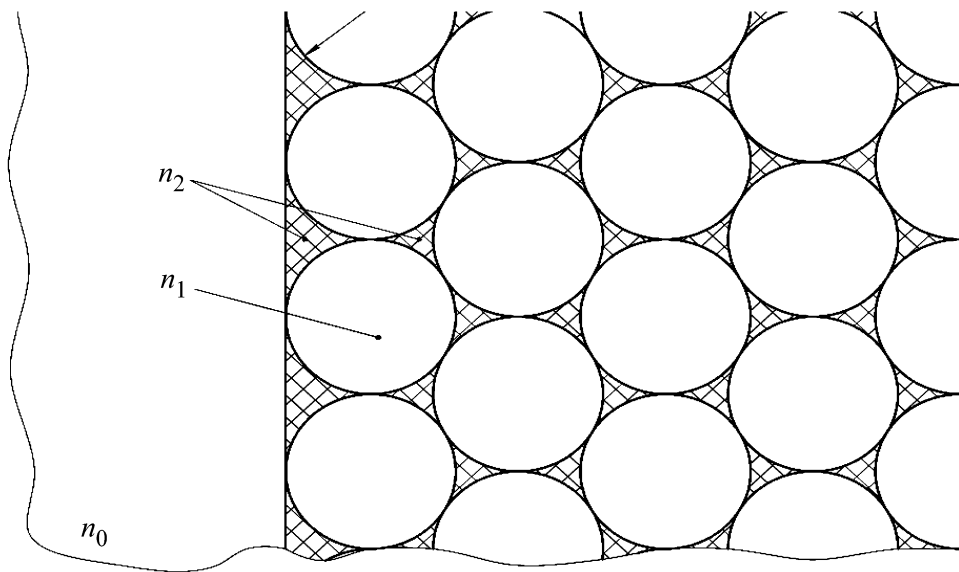


Рис. 2: Схема двумерного фотонного кристалла.

Исследовались два типа кристаллов, один из которых имитировал пустую фотонно-кристаллическую матрицу, а другой – матрицу, наполненную некоторой оптической средой. Обозначим параметры двух модельных сред: диаметр цилиндрических глобул a , показатели преломления воздуха n_0 , глобулы n_1 , и среды-наполнителя n_2 . Соответствующие значения параметров приведены в табл. 1. Полагалось, что все входящие в состав модели среды являются линейными, бездисперсионными и непоглощающими. В табл. 1 приведена также длина волны излучения λ , соответствующая положению первой запрещенной зоны рассматриваемых фотонных кристаллов. Положение запрещенной зоны было рассчитано в соответствии с выражениями для дисперсионных зависимостей эквивалентных одномерных фотонно-кристаллических сред.

Т а б л и ц а 1

Параметры модельных фотонно-кристаллических сред

№ кристалла	a , отн.ед.	n_0	n_1	n_2	λ_g/a , отн.ед.
1	1	1.0	2.0	1.0	1.6
2	1	1.0	2.0	3.0	2.0

В ходе вычислительного эксперимента исследуемый объект облучался монохроматической электромагнитной волной с ТЕМ поляризацией:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_x = 0 \\ E_y = 0 \\ E_z \neq 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{H} = \begin{pmatrix} H_x = 0 \\ H_y \neq 0 \\ H_z = 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

После рассеяния света на двумерной фотонно-кристаллической структуре электромагнитная волна имела ТМ поляризацию:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_x = 0 \\ E_y = 0 \\ E_z \neq 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{H} = \begin{pmatrix} H_x \neq 0 \\ H_y \neq 0 \\ H_z = 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Дискретизация расчетной области выполнялась в соответствии с условием корректности применения конечно-разностной схемы Yee [31] в соответствии с условием:

$$\Delta x = \Delta y \leq \frac{\lambda_{\min}}{50 \cdot n_{\max}} \dots \frac{\lambda_{\min}}{100 \cdot n_{\max}}, \quad (3)$$

где λ_{\min} – минимальная длина волны излучения, n_{\max} – максимальный показатель преломления в моделируемом пространстве. Дискретизация по оси времени определялась в соответствии с условием устойчивости FDTD при моделировании Куранта–Фридрихса–Леви [33]:

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y}\right)^2}} = \frac{\Delta x}{c\sqrt{2}} = \frac{\Delta y}{c\sqrt{2}}, \quad (4)$$

где c – скорость света в вакууме.

На границах расчетной области введены граничные поглотители, которые предотвращают нефизическое отражение электромагнитного поля, выходящего из расчетной области, обратно в моделируемое пространство. В данной работе используются граничные поглотители Мура второго рода [34].

Принятые допущения позволяют решать уравнения Максвелла для ТМ-поляризованного излучения в процессе моделирования:

$$\begin{aligned}\frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \cdot \left[-\frac{\partial E_z}{\partial y} - (M_{\text{source}_x} + \sigma^* H_x) \right], \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \cdot \left[-\frac{\partial E_z}{\partial x} - (M_{\text{source}_y} + \sigma^* H_y) \right], \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \cdot \left[-\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - (J_{\text{source}_z} + \sigma E_z) \right],\end{aligned}\tag{5}$$

где ϵ и μ – диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, соответственно, σ и σ^* – эффективная электрическая и эквивалентная эффективная магнитная проводимости среды, J_{source} и M_{source} – источник электрического поля и эквивалентный источник магнитного поля.

В процессе моделирования регистрировалась временная зависимость напряженности электрического поля $E_z(x, y, t)$ электромагнитной волны во всем моделируемом пространстве. Начиная с момента однократного прохождения волнового фронта через моделируемое пространство, что соответствует времени t' , вычислялось пространственное распределение интенсивности электромагнитного излучения:

$$I(x, y) = \frac{1}{T} \int_{t'}^{t''} |E_z(x, y, t)|^2 dt, \quad t'' - t' \gg \lambda_t,\tag{6}$$

где t' – момент начала интегрирования, t'' – момент окончания интегрирования, а λ_t – временной период электромагнитного поля. Результаты численного моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с модельными фотонными кристаллами (табл. 1) представлены на рис. 3 и 4 для различных длин волн излучения.

На рис. 3 приведены пространственные распределения интенсивности оптического излучения вблизи поверхности фотонного кристалла № 1 (табл. 1) для трех длин волн: (а) $\lambda = 1.2a$, (б) $\lambda = 1.6a$ и (в) $\lambda = 2.0a$, – причем длина волн $\lambda = 1.6a = \lambda_g$ соответствует запрещенной зоне фотонного кристалла. Распределение интенсивности оптического излучения вблизи поверхности фотонного кристалла № 2 приведены на рис. 4 для длин волн электромагнитной волны (а) $\lambda = 1.6a$, (б) $\lambda = 2.0a$ и (в) $\lambda = 2.4a$. Рис. 4(б) соответствует случаю совпадения длины волны излучения с положением запрещенной зоны фотонного кристалла № 2.

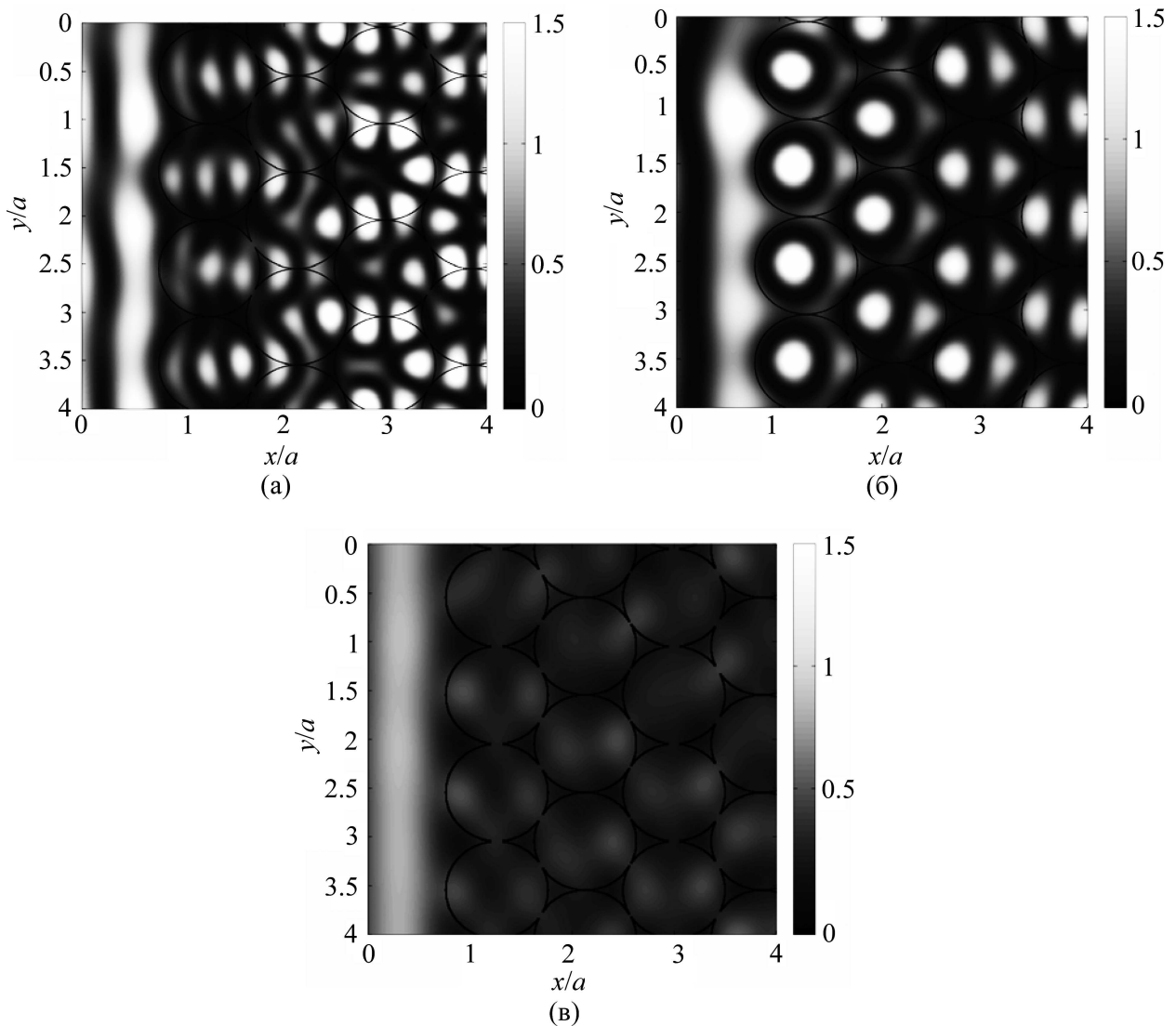


Рис. 3: Пространственное распределение интенсивности оптического излучения $I(x, y)$ с длиной волны (а) $\lambda = 1.2a$, (б) $\lambda = 1.6a = \lambda_g$ и (в) $\lambda = 2.0a$ вблизи поверхности глобулярного фотонного кристалла № 1. Цветовая шкала интенсивности справа – в относительных единицах.

Пространственные распределения $I(x, y)$, приведенные на рис. 3(а) и 4(а), соответствуют случаю, когда длина волны излучения меньше длины волны запрещенной зоны λ_g . В согласии с теоремой Блоха [24, 39], функция $I(x, y)$ является периодической во всех направлениях периодического изменения оптических характеристик фотонно-кристаллической матрицы и содержит резкие пики интенсивности. В зависимости от

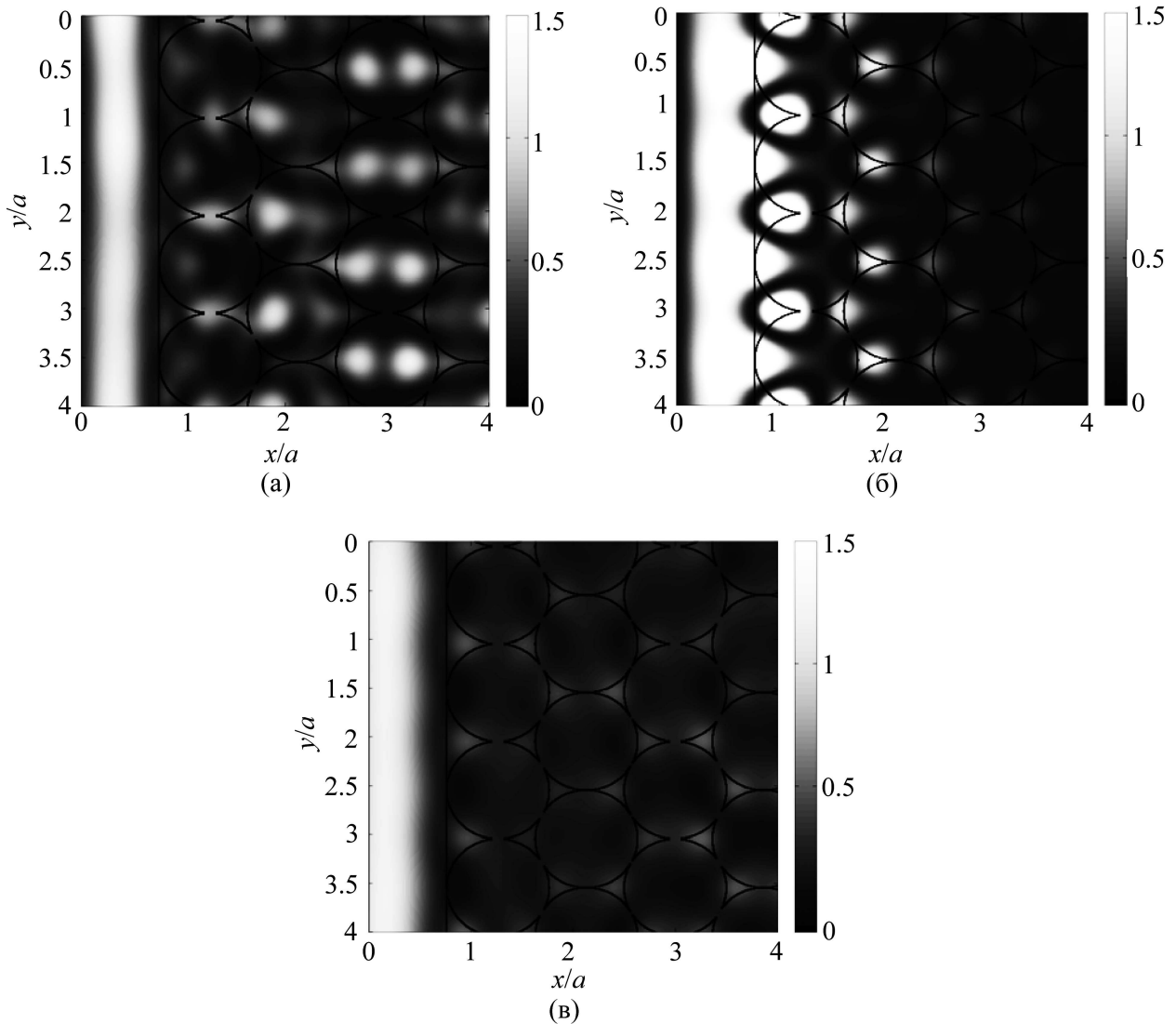


Рис. 4: Пространственное распределение интенсивности оптического излучения $I(x, y)$ с длиной волны (а) $\lambda = 1.6a$, (б) $\lambda = 2.0a = \lambda_g$ и (в) $\lambda = 2.4a$ вблизи поверхности глобулярного фотонного кристалла № 2.

соотношения между длиной волны излучения и положением запрещенной зоны фотонного кристалла количество, положение и величина пиков интенсивности оптического излучения может варьироваться.

В случае, если длина волны оптического излучения превосходит длину волны первой запрещенной зоны λ_g фотонного кристалла (рис. 3(в) и 4(в)), пространственное распределение интенсивности оптического излучения $I(x, y)$ не имеет характерных особенно-

стей. Волна распространяется сквозь среду, практически не рассеиваясь на оптических неоднородностях решетки.

Для случаев совпадения спектрального положения запрещенной зоны фотонного кристалла λ_g и длины волны оптического излучения (рис. 3(б) и 4(б)) характерен резкий спад интенсивности оптического излучения по мере углубления в фотонный кристалл, а также наличие наиболее резких пиков в пространственном распределении интенсивности оптического излучения. Пики высокой интенсивности локализованы внутри глобул фотонного кристалла в случае моделирования взаимодействия света с пустой фотонно-кристаллической матрицей, и в области наполнителя в случае исследования наполненного фотонного кристалла. Величина пиков может в несколько раз превышать интенсивность оптического излучения, характерную для случаев несовпадения длины волны с положением запрещенной зоны (рис. 3(а), 3(в), 4(а) и 4(в)), а также на порядок превосходит интенсивность излучения в однородной оптической среде при равной мощности падающей на среду электромагнитной волны.

Столь высокая интенсивность оптического излучения, локализованная в малом объеме фотонного кристалла, не может быть предсказана с позиции теории блоховских волн, и не может быть описана в виде поверхностных таммовских состояний фотона [27–30] в фотонном кристалле, так как рост интенсивности оптического излучения обусловлен не только замедлением скорости распространения излучения сквозь среду, но и эффектом когерентного искажения волнового фронта при его прохождении сквозь среду, эффектом внутренней структурной фокусировки света глобулярным фотонным кристаллом. Отметим, что характерный размер резких интенсивных пиков интенсивности оптического излучения существенно меньше длины волны оптического излучения λ . Данное обстоятельство обусловлено тем, что пики формируются вследствие интерференции множества волн, приходящих в данную точку со всевозможных направлений в пределах полного телесного угла, то есть данная фокусировка не ограничивается апертурой пучка.

Очевидно большое число возможных приложений зарегистрированного эффекта, связанных с высокоэффективным взаимодействием света и вещества при определенных условиях. В частности, открывается возможность для высокоэффективного воздействия как на материал глобул фотонного кристалла (см. рис. 3(б)), так и на введенное в фотонный кристалл вещество (см. рис. 4(б)). Это может быть использовано в задачах накачки активных сред, для повышения эффективности нелинейных оптических эффектов, а также для высокочувствительного спектроскопического исследования

наноразмерных частиц, введенных в области между глобулами глобулярного фотонного кристалла.

С помощью конечно-разностного метода численного решения уравнений Максвелла (FDTD) проанализированы свойства приповерхностных состояний электромагнитного поля в глобулярном фотонном кристалле. Получены пространственные распределения интенсивности оптического излучения вблизи поверхности фотонного кристалла. Показано существенное перераспределение интенсивности оптического поля как вблизи поверхности, так и в объеме фотонного кристалла, а также возникновение локальных пиков высокой интенсивности оптического поля. При совпадении длины волны электромагнитного излучения с положением запрещенной зоны фотонного кристалла наблюдается максимальная интенсивность пиков оптического излучения в совокупности с быстрым затуханием интенсивности поля по мере углубления в фотонный кристалл. При этом интенсивность пиков более чем на порядок превышает интенсивность излучения в однородной оптической среде. Положение пиков высокой интенсивности существенно зависит от структуры и диэлектрического контраста фотонного кристалла. Обнаруженный эффект “структурной фокусировки” оптического поля в глобулярном фотонном кристалле может быть полезен для решения широкого спектра задач, связанных с высокоэффективной накачкой активных сред, эффективной нелинейной конверсией оптического излучения, спектроскопией.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 14-02-00256, 12-02-00491, 13-02-00449, 13-02-90420, 14-02-00190).

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] В. П. Быков, ЖЭТФ **35**(2), 269 (1972).
- [2] В. С. Горелик, Квантовая электроника **37**(5), 409 (2007).
- [3] К. М. Ho, С. Т. Chan, and С. М. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990).
- [4] E. Yablonovitch and T. J. Gmitter, Phys. Rev. Lett. **67**, 2295 (1991).
- [5] R. M. Hornreich and S. Shtrikman, Phys. Rev. B **49**, 10914 (1994).
- [6] J. Sajeev, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
- [7] M. Soljacic and J. D. Joannopoulos, Nature Materials **3**, 211 (2004).
- [8] S. Fan, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, et al., Journal of the Optical Society of America B **18**, 162 (2001).

- [9] E. Chow, S. Y. Lin, J. R. Wendt, et al., *Optics Letters* **26**, 286 (2001).
- [10] J. C. Knight, T. A. Birks, P. St. J. Russell, and D. M. Atkin, *Optics Letters* **21**(19), 1547 (1996).
- [11] J. C. Knight, J. Broeng, T. A. Birks, and P. St. J. Russell, *Science* **282**(5393), 1476 (1998).
- [12] F. Benabid, F. Couny, J. C. Knight, et al., *Nature* **434**(7032), 488 (2005).
- [13] V. Berger, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4136 (1998).
- [14] A. V. Balakin, V. A. Bushuev, N. I. Koroteev, et al., *Optics Letters* **24**(12), 793 (1999).
- [15] A. A. Fedyanina, O. A. Aktsipetrov, D. A. Kurdyukov, et al., *Appl. Phys. Lett.* **87**, 151111 (2005).
- [16] A. V. Balakin, V. A. Bushuev, B. I. Mantsyzov, et al., *Phys. Rev. E* **63**(4 II), 466091 (2001).
- [17] A. V. Andreev, A. V. Balakin, A. B. Kozlov, et al., *Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics* **19**(8), 1865 (2002).
- [18] A. V. Andreev, A. V. Balakin, A. B. Kozlov, et al., *Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics* **19**(9), 2083 (2002).
- [19] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987).
- [20] N. A. R. Bhat and J. E. Sipe, *Phys. Rev. E* **64**, 056604 (2001).
- [21] K. Rivoire, S. Buckley, Y. Song, et al., *Phys. Rev. B* **85**, 045319 (2012).
- [22] D. N. Sob'yanin, *Phys. Rev. E* **88**, 022132 (2013).
- [23] J. Klaers, J. Schmitt, F. Vewinger, and M. Weitz, *Nature* **468**, 545 (2010).
- [24] N. F. Bunkin, V. S. Gorelik, and V. V. Filatov, *Physics of Wave Phenomena* **18**(2), 90 (2010).
- [25] E. L. Ivchenko and A. N. Poddubny, *Phys. of the Solid State* **55**(5), 905 (2013).
- [26] В. В. Филатов, В. С. Горелик, *Краткие сообщения по физике ФИАН* **37**(2), 42 (2010).
- [27] А. П. Виноградов, А. В. Дорофеенко, А. М. Мерзликин, А. А. Лисянский, *УФН* **53**(3), 243 (2010).
- [28] J. Kłos, *Phys. Rev. B* **76**, 165125 (2007).
- [29] N. Malkova and C. Z. Ning, *Phys. Rev. B* **73**, 113113 (2006).
- [30] N. Malkova and C. Z. Ning, *Phys. Rev. B* **76**, 045305 (2007).
- [31] K. Yee, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **14**(3), 302 (1966).

- [32] Allen Taflove and Susan C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, Third Edition (Artech House, London, 2005).
- [33] Y. Hao and R. Mittra, *FDTD Modeling of Metamaterials Theory and Applications* (Artech House, London, 2009).
- [34] J. B. Schneider, *Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method* (On-Line Book: <http://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/>).
- [35] К. И. Зайцев, В. Е. Карасик, И. Н. Фокина, С. А. Королева, Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер., “Приборостроение” **4**, 114 (2012).
- [36] К. И. Zaytsev, G. M. Katyba, E. V. Yakovlev, et al., *J. Appl. Phys.* **115**, 213505 (2014).
- [37] К. И. Zaytsev, V. E. Karasik, I. N. Fokina and V. I. Alekhovich, *Optical Engineering* **52**(6), 068203 (2013).
- [38] I. N. Fokina, K. I. Zaytsev, V. E. Karasik and K. P. Tsapenko, *Proc. of the SPIE* **8846**, 88460A (2013).
- [39] A. Yariv and P. Yeh, *Optical Waves in Crystals: Propagation and Control of Laser Radiation* (Wiley, N.Y., 1984).

Поступила в редакцию 13 февраля 2014 г.