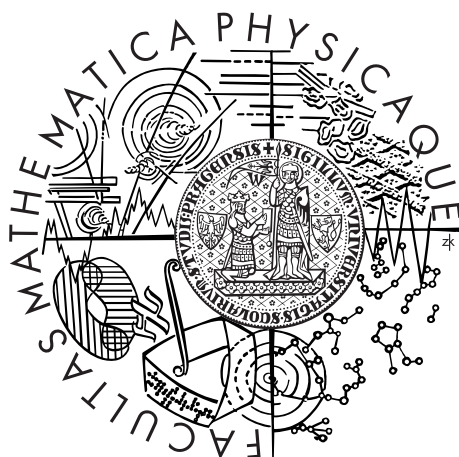


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Vojtěch Vozda

Výpočet optické odezvy fotonických struktur metodou FDTD

Fyzikální ústav UK

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Veis, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2013

Poděkování

Mé největší díky patří vedoucímu této bakalářské práce RNDr. Martinu Veisovi, Ph.D. za čas který věnoval konzultacím se mnou, kdy velice dobře dokázal vysvětlit místy složitou teorii a její implementaci do počítačového kódu, za shánění velkého množství materiálů a za jeho kritiku díky níž bylo možné v práci opravit značné množství chyb. Děkuji mu též za velkou podporu nejen při projektech spojených s touto prací, projektech týkajících se jiných oblastí fyziky, ale také za podporu v osobním životě a věcech netýkajících se přímo studia.

Děkuji také svým rodičům za jejich podporu při celém bakalářském studiu, bez které by tato práce nemohla vzniknout.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Název práce: Výpočet optické odezvy fotonických struktur metodou FDTD

Autor: Vojtěch Vozda

Katedra/Ústav: Fyzikální ústav UK

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Veis, Ph.D., Fyzikální ústav UK

Abstrakt: Metoda FDTD vychází z Maxwellových rovnic a v této práci je popsáno, jak tyto diferenciální rovnice upravit pro numerické řešení známé jako Yee algoritmus. Z důvodu získání stabilního řešení je zkoumána závislost časového kroku na prostorovém. Je definována diskrétní Fourierova transformace pomocí které lze získat frekvenčně závislé transmisní a reflexní koeficienty. Naprogramovaná simulace je testována na analyticky řešitelných strukturách i na mírně složitějších systémech jejichž optická odezva byla spočítána jinou simulací. V závěru jsou zmíněny fotonické krystaly a jejich aplikace jako biosenzory. Jedno konkrétní uspořádání fotonického krystalu je v této práci detailně rozebráno (závislost frekvenčního spektra na prostorovém rozlišení, nepřesnostech v geometrii, odlišných sloučeninách v dírách, změnách v geometrii).

Klíčová slova: FDTD, optické struktury, fotonický krystal, biosenzor

Title: Calculation of optical response of photonic structures by FDTD method

Author: Vojtěch Vozda

Department: Institute of Physics UK

Supervisor: RNDr. Martin Veis, Ph.D., Institute of Physics UK

Abstract: FDTD method is based on Maxwell's equations and this thesis describe how to make these differential equations computer readable for numerical solution known as the Yee algorithm. Time step dependence on spatial step is examined here in order to obtain stable solution. Discrete Fourier transform is defined to obtain frequency dependent transmission and reflection coefficients. Programmed simulation is tested on analytically solvable structures even on slightly more complex systems whose optical response was computed by other type of simulation. Finally photonic crystals and their application as biosensors are discussed. Particular shape of photonic crystal is examined in details (frequency spectrum dependence upon spatial resolution, inaccuracy in geometry, different compounds in holes, geometry modification).

Keywords: FDTD, optical structures, photonic crystal, biosensor

Obsah

Úvod	2
1 Metoda FDTD	3
1.1 Maxwellovy rovnice	3
1.2 Algoritmus FDTD	3
1.3 Vývojové rovnice v 1D	4
1.4 Vývojové rovnice v 2D	6
1.5 Numerická stabilita	7
1.6 Okrajové podmínky	10
2 Metody výpočtu odezvy od fotonických struktur	12
2.1 Diskrétní Fourierova transformace	12
2.2 Tok energie	12
2.3 Zdroje	13
2.4 Transmise	16
2.5 Reflexe	17
3 Otestování simulace na jednoduchých strukturách	18
3.1 Absorpce ve vodivém prostředí	18
3.2 Planparalelní deska	19
3.3 Dvojštěrbina	20
3.4 Zatočený vlnovod	21
3.5 Děrovaný vlnovod	22
4 Fotonické krystaly	27
4.1 Biosenzory	27
4.2 Transmisní spektrum PHC	28
4.3 Nepřesnosti ve výrobě	30
4.4 PHC jako biosenzor	31
4.5 Modifikace PHC	32
Závěr	34
Seznam použité literatury	35
Seznam použitých zkratk	37

Úvod

Chceme-li numericky řešit elektromagnetickou úlohu, pak máme k dispozici celkem velké množství metod. Dnes nejběžněji užívané metody je možné rozdělit do dvou kategorií. Ta první zahrnuje metody založené na integrálních rovnicích, druhá metody založené na rovnicích diferenciálních. Obě tyto metody vychází z Maxwellových rovnic a díky nahrazení integrálů sumami v prvním případě a derivací konečnými diferencemi v případě druhém, nám poskytují pouze aproximační řešení [2].

V této práci se budeme zabývat řešením úlohy pomocí diferenciálních rovnic v časové doméně, konkrétně metodou FDTD (*finite-difference time-domain method*). Ačkoli tuto metodu představil už v roce 1966 Kane Yee, zájem o ni začal být až zhruba o 10 let později, kdy rychlejší počítače s vyšším výpočetním výkonem začaly být dostupnější [3]. Metoda FDTD může řešit složité problémy, ale je obecně výpočetně náročná a řešení požadují velké množství operační paměti a výpočetního času. Pokud jsou objekty malé ve srovnání s vlnovou délkou, pak je lepší a efektivnější použít řešení pomocí kvazistatických aproximací, pokud je naopak vlnová délka vůči objektům hodně malá, je výhodnější použít řešení založené na paprskové optice. [4].

Metoda FDTD se umí jednoduše vypořádat s různými typy materiálů, jakou jsou dielektrika, magnetické, disperzní, nelineární i anizotropní materiály. Ačkoli řešení problému probíhá v časové doméně, můžeme díky Fourierově transformaci obdržet i důležitá frekvenční spektra. Nejen díky tomu se FDTD metoda hojně používá při řešení konstrukce antén, radarů, mikrovlnných obvodů, vláknové optiky, vlnovodů, fotonických krystalů, stínění a mnoha dalších dalších [2].

Ze začátku práce se podíváme přímo na jádro FDTD, tedy na rovnice, z nichž metoda vychází, jakým způsobem zajistíme stabilní numerické řešení, uvedeme si příklad v jedné i ve dvou dimenzích. Poté nastíníme způsob, kterým lze simulovat nekonečný volný prostor i materiály pomocí nastavení okrajových podmínek.

V další kapitole si zavedeme diskrétní Fourierovu transformaci pomocí které vypočítáme závislost Poyntingova vektoru na frekvenci, z něhož pak můžeme určit frekvenční spektra různých zdrojových funkcí a konečně také transmisní a reflexní koeficienty.

Poté se zaměříme na ověření simulace pomocí porovnání získaných výsledků s výsledky teoretickými, či obdrženými z jiné simulace. V jedné dimenzi to bude sledování absorpce vlny ve vodivém prostředí a zjištění transmise planparalelní dielektrické desky. Ve dvou dimenzích se podíváme na jednoduchý rozptyl rovinné vlny na dvojštěrbíně, na průchod světla zatočeným vlnovodem a na transmisí děrovaného vlnovodu.

Na závěr se seznámíme s fotonickými krystaly a jejich použitím jako biosenzorů. Jednu konkrétní konfiguraci fotonického krystalu si pečlivě rozebereme a podíváme se na to, jak lze danou strukturu použít k detekci různých sloučenin a jaké je chování jejího transmisního spektra při různých změnách v geometrii.

1. Metoda FDTD

V této práci se obecně budeme zabývat šířením světla ve fotonických strukturách. Jelikož světlo je harmonická elektromagnetická vlna, pak určitě musí vyhovovat *Maxwellovým rovnicím*.

Pojďme se tedy podívat na numerické řešení těchto diferenciálních rovnic popisujících elektromagnetické vlnění.

1.1 Maxwellovy rovnice

Maxwellovy rovnice jako první zformuloval skotský teoretický fyzik *James Clerk Maxwell* a v diferenciálním tvaru jsou dnes známy v následující podobě:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (\text{Gaussův zákon elektrostatiky}), \quad (1.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{Gaussův zákon pro magnetické pole}), \quad (1.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{Faradayův zákon}), \quad (1.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (\text{Ampérův zákon}), \quad (1.1d)$$

kde \mathbf{E} je intenzita elektrického pole, \mathbf{D} je elektrická indukce, \mathbf{H} magnetická intenzita, \mathbf{B} magnetická indukce, \mathbf{j} hustota elektrického proudu a ρ značí hustotu elektrického náboje [5].

Budeme-li předpokládat šíření signálu pouze v lineárním izotropním a nedisperzním prostředí, materiálové vztahy pak mají tvar

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (1.2a)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (1.2b)$$

kde ε je permitivita a μ permeabilita. Ve volném prostoru pro ně platí

$$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0 = \varepsilon_0 \approx 8,854 \times 10^{-12} \text{F} \cdot \text{m}^{-1},$$

$$\mu = \mu_r \mu_0 = \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{H} \cdot \text{m}^{-1},$$

kde ε_r a μ_r značí relativní permitivitu a permeabilitu jejichž hodnoty jsou ve volném prostoru rovny jedné. V této práci se navíc budeme zabývat šířením elektromagnetických vln převážně na optických frekvencích, na kterých je relativní permeabilita μ_r rovna jedné vždy.

1.2 Algoritmus FDTD

Zkratka FDTD (*finite-difference time-domain*) nám napovídá, že se zde nebudeme zabývat spojitými funkcemi, nýbrž funkcemi diskrétními. Jak již bylo řečeno, algoritmus metody FDTD jako první popsal v roce 1966 Kane Yee a můžeme jej ve zkratce shrnout do následujících pěti kroků [4]:

1. V Ampérově a Faradayově zákoně nahraďte derivace konečnými diferencemi. Diskretizujte prostor a čas, přičemž elektrická a magnetická část pole budou od sebe jak v prostoru, tak i čase odděleny.
2. Vyřešte diferenční rovnice tím způsobem, že obdržíte „vývojové rovnice“, které vyjadřují budoucí, tj. neznámé pole, jako funkci minulých a tedy známých polí.
3. Pomocí vývojových rovnic vypočtete nová magnetická pole.
4. Pomocí vývojových rovnic vypočtete nová elektrická pole.
5. Opakujte předchozí dva kroky, dokud neobdržíte uspokojivé výsledky.

Základní algoritmus tedy máme, zbývá jen vyřešit otázku, co přesně jsou kruhové vývojové rovnice a jakým způsobem je od sebe v prostoru a čase oddělena elektrická a magnetická složka pole.

K převodu derivací na konečné diference je výhodné aproximovat funkci pomocí tzv. centrální diference (více v [2])

$$\frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (1.3)$$

Chyba této aproximace je $\mathcal{O}(\Delta x^2)$, máme tudíž přesnost druhého řádu. Zmenšíme-li tedy Δx desetkrát, přesnost bude zhruba stokrát větší. V případě, kdy v (1.3) půjde Δx k nule, přestane být aproximace aproximací a dostaneme přesný vztah. Pro dosažení větší přesnosti lze uvažovat centrální diference vyšších řádů. Při nich se však bohužel objevují zase jiné problémy.

Použití zmíněné definice derivace povede k tomu, že v prostorové mříži budeme počítat hodnotu derivace pouze ze dvou sousedních bodů. Při diferencích vyšších řádů se ale počítá diference od většího množství bodů. To může vést k tomu, že vlna projde tenkým ideálně elektricky (magneticky) vodivým plátem (PEC a PMC z anglického *perfect electric (magnetic) conductor*), což je nefyzikální.

1.3 Vývojové rovnice v 1D

Předpokládejme nejjednodušší případ, a to šíření vlny pouze ve směru kartézské osy x v lineárním izotropním a nedisperzním prostředí bez proudů. Elektrické pole zvolme tak, že jediná nenulová složka bude pouze E_z . Rovnice (1.1c) za těchto předpokladů přejde na tvar

$$-\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_z \end{vmatrix} = -\hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial E_z}{\partial x}. \quad (1.4)$$

Odtud jednoznačně plyne, že jediná nenulová složka magnetického pole je H_y . Ze vztahu (1.1d) tedy dostaneme

$$\varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & H_y & 0 \end{vmatrix} = \hat{\mathbf{e}}_z \frac{\partial H_y}{\partial x}. \quad (1.5)$$

Z (1.4) a (1.5) dostáváme dvě rovnice

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x}, \quad (1.6a)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x}. \quad (1.6b)$$

Tyto rovnice nám dobře svazují elektrickou a magnetickou složku pole. První z nich využijeme k získání nové hodnoty magnetického pole v čase a druhou k získání hodnoty pole elektrického. Použití centrální diference (1.3) například na rovnici (1.6b) může vypadat následovně

$$\mu \frac{H_y^{q+1}[m] - H_y^{q-1}[m]}{\Delta_t} = \frac{E_z^q[m+1] - E_z^q[m-1]}{\Delta_x}, \quad (1.7)$$

kde jsme zavedli značení

$$E_z(x, t) = E_z(m\Delta_x, q\Delta_t) = E_z^q[m], \quad (1.8a)$$

$$H_y(x, t) = H_y(m\Delta_x, q\Delta_t) = H_y^q[m], \quad (1.8b)$$

přičemž Δ_x je vzdálenost mezi sousedními body v prostorové mřížce a Δ_t je časový krok.

Zde je dobré se pozastavit a pořádně si prohlédnout rovnice (1.6). Doteď jsme uvažovali časoprostorovou mříž, kde byly složky elektrického i magnetického pole umístěny ve stejných bodech. Vzhledem k tomu, že rovnice (1.6a) obsahuje prostorovou derivaci pouze elektrické intenzity a (1.6b) pouze derivaci intenzity magnetické, je možné složky elektrického a magnetického pole od sebe úplně oddělit (to platí i ve dvou a třech dimenzích). Způsob, jakým je to provedeno je demonstrován na obrázku 1.1. Aniž bychom zmenšovali prostorový (Δ_x), nebo časový (Δ_t) krok, dostáváme tímto postupem dvakrát větší přesnost.

Rovnici (1.7) tedy přepíšeme do mírně odlišného tvaru

$$\mu \frac{H_y^{q+\frac{1}{2}}[m+\frac{1}{2}] - H_y^{q-\frac{1}{2}}[m+\frac{1}{2}]}{\Delta_t} = \frac{E_z^q[m+1] - E_z^q[m]}{\Delta_x} \quad (1.9)$$

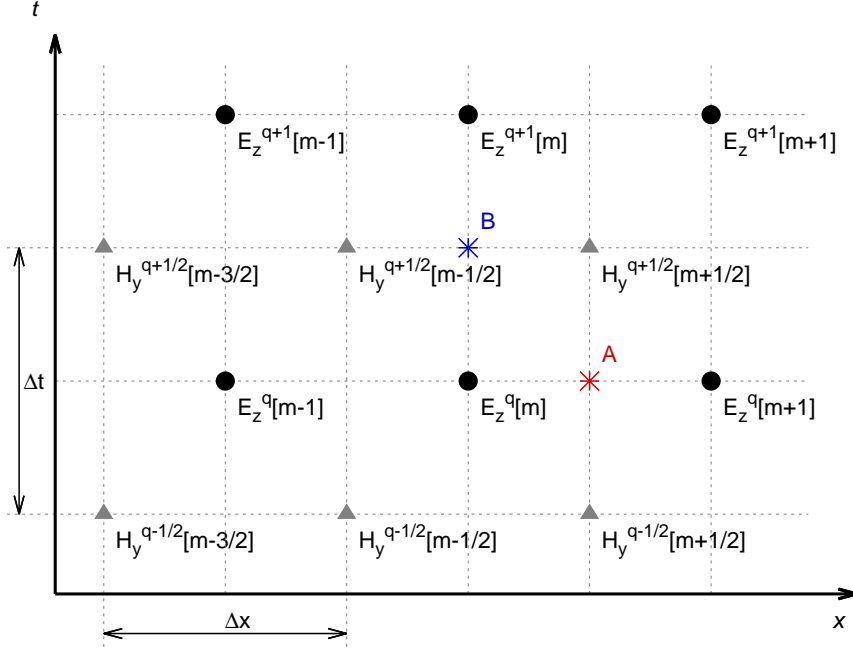
a vyřešíme ve prospěch $H_y^{q+\frac{1}{2}}[m+\frac{1}{2}]$

$$H_y^{q+\frac{1}{2}}\left[m+\frac{1}{2}\right] = H_y^{q-\frac{1}{2}}\left[m+\frac{1}{2}\right] + \frac{\Delta_t}{\mu\Delta_x} (E_z^q[m+1] - E_z^q[m]). \quad (1.10)$$

Tohle je tzv. vývojová rovnice pro H_y . Jednotlivé diference byly vyřešeny vzhledem k bodu A znázorněného na obrázku 1.1. Naprosto analogickým způsobem získáme z rovnice (1.6b) také vývojovou rovnici pro E_z

$$E_z^{q+1}[m] = E_z^q[m] + \frac{\Delta_t}{\varepsilon\Delta_x} \left(H_y^{q+\frac{1}{2}}\left[m+\frac{1}{2}\right] - H_y^{q+\frac{1}{2}}\left[m-\frac{1}{2}\right] \right). \quad (1.11)$$

Tato rovnice se na obrázku 1.1 vztahuje k bodu B . Pokud bychom chtěli provádět simulaci nejen ve volném prostoru, lze pro konkrétní body v mříži nastavit permitivitu ε_r větší než jedna. Celkem jednoduchým způsobem lze do rovnic také zavést vodivost σ a také proudy pomocí hustoty elektrického proudu \mathbf{j} .



Obrázek 1.1: Grafické znázornění oddělení elektrické a magnetické složky pole v čase a prostoru. Elektrická indukce je značena kolečky, magnetická trojúhelníky. Bod A je místo, ke kterému se vztahuje vývojová rovnice pro H_y (1.10), k bodu B pak rovnice pro E_z (1.11).

1.4 Vývojové rovnice v 2D

Vzhledem k tomu, že postup je zde podobný jako v předchozí kapitole, projdeme si tuto část jen stručně.

Veškeré simulace ve dvou dimenzích uvedené v této práci budou probíhat v rovině xy . V těchto simulacích budeme odlišovat dvě různé polarizace elektromagnetického pole. Pro polarizaci TM $_z$ (transverzálně magnetická, též p polarizace) bude nenulová opět pouze komponenta E_z , tentokrát však budeme předpokládat derivace ve dvou různých směrech

$$-\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & E_z \end{vmatrix} = \hat{\mathbf{e}}_x \frac{\partial E_z}{\partial y} - \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial E_z}{\partial x}. \quad (1.12)$$

Odtud dostaneme pro magnetickou část pole

$$\varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ H_x & H_y & 0 \end{vmatrix} = \hat{\mathbf{e}}_z \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \quad (1.13)$$

Z těchto dvou rovnic dostaneme nyní tři rovnice, v nichž je svázána elektrická a magnetická složka pole pomocí časových a prostorových derivací

$$-\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial y}, \quad (1.14a)$$

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x}, \quad (1.14b)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}. \quad (1.14c)$$

Derivace v těchto tři rovnicích opět vyjádříme pomocí diferencí a poté rovnice vyřešíme ve prospěch $H_x^{q+\frac{1}{2}}[m, n+1/2]$, $H_y^{q+\frac{1}{2}}[m+1/2, n]$ a $E_z^q[m, n]$, z čehož obdržíme požadované vývojové rovnice.

Rozeberme si ještě skoro analogický postup pro TEz polarizaci (transverzálně elektrická, též s polarizace). Tentokrát budeme požadovat, aby byla nenulová komponenta magnetického pole H_z .

$$\varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & H_z \end{vmatrix} = \hat{\mathbf{e}}_x \frac{\partial H_z}{\partial y} - \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial H_z}{\partial x}. \quad (1.15)$$

Pro elektrické pole pak dostaneme

$$-\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ E_x & E_y & 0 \end{vmatrix} = \hat{\mathbf{e}}_z \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \quad (1.16)$$

a opět vypočteme rovnice, které posléze převedeme pomocí diferencí na rovnice vývojové potřebné pro algoritmus ve výpočetním programu

$$\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}, \quad (1.17a)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (1.17b)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{\partial H_z}{\partial x}. \quad (1.17c)$$

Rozlišování zmíněných dvou polarizací je, ačkoli se to na první pohled nemusí zdát, velmi důležité. Optická odezva různých fotonických struktur na volbě polarizace totiž značně závisí.

1.5 Numerická stabilita

Vraťme se do jedné dimenze a zaměřme se nyní na volbu Δ_x a Δ_t . Ve vývojových rovnicích (1.11) a (1.10) se tyto konstanty vyskytují ve členech $\Delta_t/\mu\Delta_x$ a $\Delta_t/\varepsilon\Delta_x$. Pokud bychom zvolili příliš velký časový krok Δ_t vůči prostorovému Δ_x pak by při každé interakci H_y a E_z nekontrolovatelně rostlo a řešení by mohlo brzy začít divergovat. Pro stabilní numerické řešení tedy musí platit jistá závislost časového kroku na prostorovém: $\Delta_t = \Delta_t(\Delta_x)$.

Pohybujeme-li se ve volném prostoru, pak je rychlost šíření signálu rovna rychlosti světla $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$. Maximální vzdálenost, kterou může světlo urazit během jednoho časového kroku je $\Delta_x = c\Delta_t$. Zde dostáváme tedy vztah mezi

prostorovým a časovým krokem Δ_x a Δ_t . Obecně pro třírozměrný prostor musí Δ_t splňovat tzv. CLF podmínku (*Courant–Friedrichs–Lewy*) [2]

$$\Delta_t \leq \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{(\Delta_x)^2} + \frac{1}{(\Delta_y)^2} + \frac{1}{(\Delta_z)^2}}}. \quad (1.18)$$

Pro kubickou mříž, kde $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$, se podmínka redukuje na $\Delta_t \leq \Delta_x/c\sqrt{3}$. V jedné dimenzi, kde $\Delta_y \rightarrow \infty$ a $\Delta_z \rightarrow \infty$, na $\Delta_t \leq \Delta_x/c$.

Definujme si ještě *Courantovo číslo* S_c vztahem

$$S_c = \frac{c\Delta_t}{\Delta_x}. \quad (1.19)$$

Je zřejmé, že v jedné dimenzi musí platit $S_c \leq 1$.

Mírně zde odbočme a uvažujme vlnovou rovnici pro jednu dimenzi

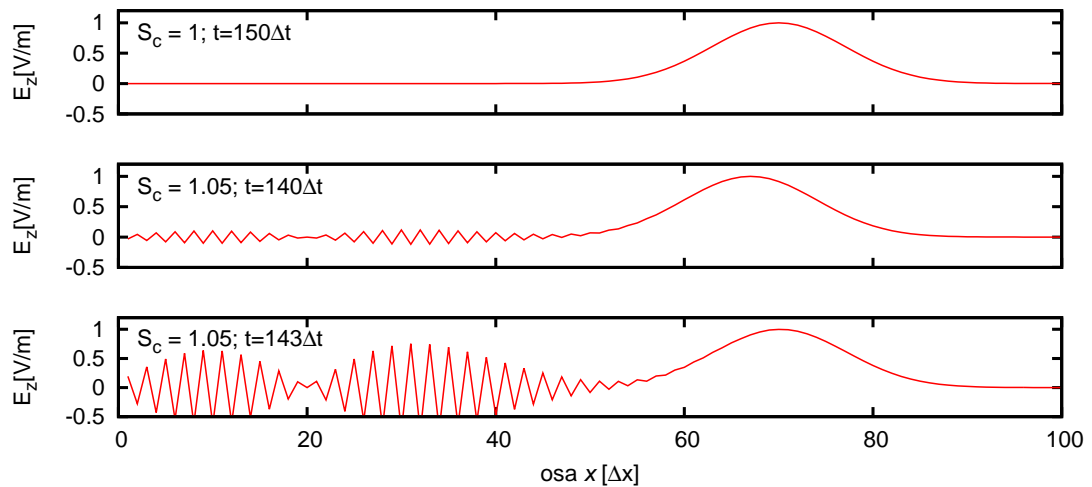
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \quad (1.20)$$

přičemž podobně jako dříve zavedme značení $u(x, t) = u(m\Delta_x, q\Delta_t) = u_m^q$. Místo derivací přepišme vlnovou rovnici pomocí diferencí

$$\frac{u_{m+1}^q - 2u_m^q + u_{m-1}^q}{(\Delta_x)^2} + \mathcal{O}[(\Delta_x)^2] - \frac{1}{c^2} \left(\frac{u_m^{q+1} - 2u_m^q + u_m^{q-1}}{(\Delta_t)^2} + \mathcal{O}[(\Delta_t)^2] \right) = 0. \quad (1.21)$$

Bez matematického důkazu si uvědomme, že chyby $\mathcal{O}[]$ u obou derivací představují díky naprosto stejnému původu dvě úplně identické funkce. Položíme-li $\Delta_t = \Delta_x/c$, rovnice se nám výrazně zjednoduší

$$u_{m+1}^q - 2u_m^q + u_{m-1}^q = u_m^{q+1} - 2u_m^q + u_m^{q-1}. \quad (1.22)$$



Obrázek 1.2: Názorné představení nestabilního řešení pro větší Courantovo číslo S_c , než jaké povoluje *CLF* podmínka (1.18). Na prvním obrázku je přesné řešení pro $S_c = 1$, na dalších dvou nestabilní řešení při volbě $S_c = 1.05$.

Tento výsledek je opravdu krásný, protože chyby $\mathcal{O}[(\Delta_x)^2]$ a $\mathcal{O}[(\Delta_t)^2]$ se nám navzájem vyrušily a místo numerické aproximace jsme dostali v jedné dimenzi přesné řešení vlnové rovnice. V tomto případě je daný časový krok Δ_t označován za „magický“ (*magic time step*). Smutná je však skutečnost, že podobného fenoménu není možné dosáhnout v jakékoli vyšší dimenzi než v jedné.

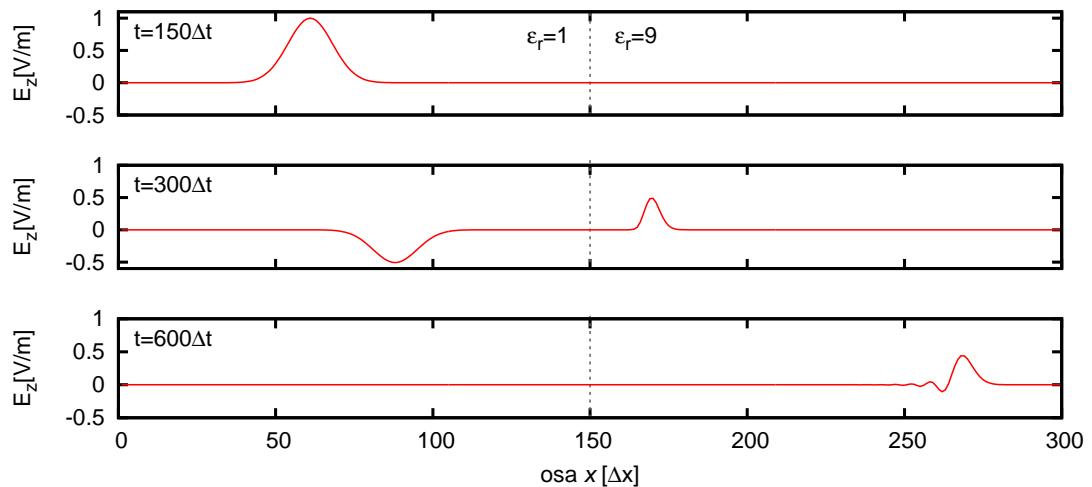
Pro jednu dimenzi je tedy Courantovo číslo S_c rovno jedné, pro dvě dimenze budeme v této práci používat $S_c = \sqrt{2}/2$.

Jak již bylo řečeno, zvolíme-li S_c větší, než jaké nám povoluje *CLF* podmínka, řešení může rychle divergovat. Příklad této nestability je na obrázku 1.2. Jako zdroj byla použita gaussovská vlna (více o zdrojích v kapitole 2.3). Vrchní obrázek ukazuje vývoj přesného řešení pro $S_c = 1$ po 150 časových krocích. Druhé dva obrázky pak nestabilní řešení pro $S_c = 1.05$ po 140 a 143 krocích. V čase $t = 150\Delta_t$ je při $S_c = 1,05$ maximální hodnota E_z už 57V/m.

Uvedený postup pro magický krok uvažoval bohužel konstantní rychlost šíření signálu a proto také konstantní volbu Δ_t . Pokud část naší prostorové výpočetní domény bude tvořena materiálem o relativní permitivitě ε_r větší než jedna, objeví se nám v řešení numerické nepřesnosti.

Příklad šíření vlny v takovémto prostoru je na sérii obrázků 1.3. Mezi body 0-150 je volný prostor a mezi body 150-300 je dielektrikum s $\varepsilon_r = 9$. Na prvním obrázku je puls šířící se ve volném prostoru doprava, směrem k rozhraní. Na druhém obrázku je pak vidět, že část pulsu se s opačnou fází odrazila, druhá část prošla do dielektrika, ve kterém se šíří třetinovou rychlostí. Na posledním obrázku již odražená část pulsu není vidět, jelikož díky okrajovým podmínkám (viz následující kapitola 1.6) prošla bez reflexe levým okrajem. Tvar pulsu v dielektriku se však díky šíření jinou rychlostí značně porušil. Tohoto porušení se částečně můžeme vyvarovat tak, že zvýšíme rozlišení.

V uvedené simulaci měl puls šířku zhruba 30 bodů, zvětšíme-li ji na dvojnásobek (zdvojnásobíme také velikost výpočetní domény a výpočetní čas), nepůjde na prošlém pulsu porucha skoro vůbec znát. Lepší rozlišení však klade mnohem větší nároky na sílu počítače a při větších simulacích není pak takovéto zvyšování rozlišení příliš reálné.



Obrázek 1.3: Postupné šíření gaussovského pulsu v prostředí, jehož první část tvoří volný prostor a druhou dielektrikum s $\varepsilon_r = 9$. Tvar pulsu šířící se dielektrikem je po jisté době značně porušen.

1.6 Okrajové podmínky

Prozkoumáme-li pečlivě vývojové rovnice (1.10) a (1.11) zjistíme, že pro krajní body elektrické, nebo magnetické složky pole není možné získat novou hodnotu. Ta se totiž počítá pomocí dvou sousedních bodů, z nichž vždy jeden na okraji neexistuje. Tyto krajní body tedy z algoritmu vypustíme a po celou dobu simulace je necháme nulové.

Bude-li kupříkladu na pravém okraji poslední bod E_z , který bude zůstat po celou dobu roven nule, pak vlna šířící se k tomuto okraji zleva bude tento okraj považovat za ideální elektrický vodič a odrazí se od něj s opačnou fází. V praxi chceme ale často simulovat modely umístěné ve volném prostoru. Proto tedy požadujeme, aby vlny, šířící se k okraji výpočetní domény byly odraženy co nejméně, pokud možno vůbec. Tento požadavek splníme pomocí nastavení absorbujících okrajových podmínek ABC (*absorbing boundary condition*).

Pokud uvažujeme $S_c = 1$ (pouze jednu dimenzi), pak lze nastavit ve volném prostoru takové ABC, aby vlna nebyla reflektována vůbec. Pro vyšší dimenze toto opět není možné a je nutné použít pouze aproximativního řešení.

Nejjednodušší ABC v jedné dimenzi může být aplikováno velmi jednoduše přidáním dodatečných kroků do základního algoritmu nastíněného v kapitole 1.2. Uvažujme výpočetní doménu s N_x body, přičemž prvním bodem je v analogii s obrázkem 1.1 bod $H_y^q[\frac{1}{2}]$ a posledním bodem $E_z^q[N_x]$. Za třetí krok v algoritmu přidáme příkaz

$$H_y^q[1/2] = H_y^q[3/2] \quad (1.23)$$

a za čtvrtý

$$E_z^q[N_x] = E_z^q[N_x - 1]. \quad (1.24)$$

Tyto dva jednoduché příkazy zapříčiní skutečnost, že se při simulaci ve volném prostoru v jedné dimenzi odrazí od okraje vlna, jejíž amplituda je zhruba o pět řádů menší, než amplituda vlny původní. Tento malý nenulový odraz je dán pouze kvůli konečné numerické přesnosti počítače. Takovýto výsledek je uspokojivý, bohužel však pro velmi omezené podmínky. Existují i složitější a více sofistikované ABC, které se buď snaží získat budoucí hodnoty pole na okraji mříže z vnitřních a tedy známých hodnot, nebo které se snaží vlnu na okraji s co nejmenší reflexí utlumit.

V roce 1994 představil Jean-Pierre Berenger [6] ABC pod názvem *perfectly matched layer* (PML) a tato metoda se ukázala býti jednou z nejlepších. Myšlenka PML je značně nefyzikální. Spočívá v tom, že například při TMz polarizaci ve 2D se rozdělí elektrická složka pole E_z na složku šířící se ve směru x a y . Dostaneme tedy dvě pole, jejichž součet dává původní $E_z = E_{zx} + E_{zy}$. Kolem okraje se pak zavede speciální materiál s rozdílnými vodivostmi σ_x a σ_y závislými na směru šíření. Pole je pak v tomto materiálu exponenciálně tlumeno a odráží se jen minimum energie.

PML je však značně neefektivní pro evanescentní vlny. Zlepšení lze docílit zesílením speciálního materiálu kolem okrajů, což si však při výpočtech žádá více operační paměti a výpočetního času. Proto byly vyvinuty ABC pod názvem *complex frequency-shifted* PML (CFS-PML) známé jako *convolutional* PML (CPML).

Metoda zavedení CPML do programu je značně složitější, než předchozí příklady a nemá cenu ji zde dlouze popisovat. Pro nás je důležité, že po zavedení CPML se od okrajů domény odráží velmi malá část energie a to ať už ve volném prostoru, tak i v nehomogenních, ztrátových, anizotropních, disperzních i nelineárních materiálech. Pomocí CPML lze tedy simulovat například nekonečně dlouhé vlnovody a rozlehlá dielektrika [2].

2. Metody výpočtu odezvy od fotonických struktur

Cílem této kapitoly bude popsání optické odezvy systému formou transmisních a reflexních koeficientů T a R .

Například pro simulaci v 1D nám metoda FDTD poskytuje v každém časovém kroku rozložení elektrické a magnetické intenzity $E_z(x, t)$ a $H_y(x, t)$ v celém prostoru. Transmisi lze tedy zjistit jednoduše pomocí podílu energie, která do systému vstupuje a energie, která z něj vystupuje. Vzhledem k tomu, že v různých strukturách a materiálech se však světlo o různých vlnových délkách šíří odlišným způsobem, bude nás zajímat závislost transmisního (resp. reflexního) koeficientu na frekvenci ν . Transmisi a reflexi můžeme pomocí monochromatických vln zjistit postupně pro každou frekvenci zvlášť, ale o něco efektivnější a elegantnější cesta vede přes diskrétní Fourierovu transformaci, pomocí které můžeme spočítat celé spektrum najednou.

2.1 Diskrétní Fourierova transformace

Pro integrovatelnou funkci $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ nám matematici definují její Fourierovu transformaci $\hat{f}(x) \equiv F(\xi)$ vztahem

$$F(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi x \xi} dx. \quad (2.1)$$

Metoda FDTD však rozhodně nepracuje se spojitými, natož integrovatelnými funkcemi. Dále také není v silách dnešní výpočetní techniky provést při výpočtech nekonečně mnoho kroků. Díky těmto aspektům musíme definiční vztah (2.1) jistým způsobem aproximovat. Tato aproximace je známá pod pojmem diskrétní Fourierova transformace (DFT). Budeme-li uvažovat diskrétní funkci $f(x)$, pak je její Fourierova transformace $F(\xi)$ dána následovně:

$$F(\xi) \approx \sum_{n=1}^N f(n\Delta_x) e^{-i2\pi n\Delta_x \xi} \Delta_x, \quad (2.2)$$

kde N je počet bodů v integrovaném intervalu a číslo Δ_x zde značí velikost kroku při numerické integraci. Čím je Δ_x menší, tím větší přesnosti dosáhneme.

2.2 Tok energie

Hustota toku energie v čase t místě \mathbf{r} je definována pomocí *Poyntingova vektoru* $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \quad (2.3)$$

Jelikož nás však bude zajímat frekvenční závislost, je nutné spočítat Poyntingův vektor v závislosti na frekvenci $\mathbf{S}(\mathbf{r}, \nu)$ [5]

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, \nu) = \frac{1}{2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \nu) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r}, \nu), \quad (2.4)$$

kde $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \nu)$ a $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \nu)$ jsou Fourierovy obrazy funkcí $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ a $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, které vypočteme pomocí (2.2) následovně:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \nu) = \sum_{n=1}^N \mathbf{E}(\mathbf{r}, n\Delta_t) e^{-i2\pi\nu t\Delta_t} \Delta_t, \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \nu) = \sum_{n=1}^N \mathbf{H}(\mathbf{r}, n\Delta_x) e^{-i2\pi\nu t\Delta_t} \Delta_t. \quad (2.5b)$$

Vzhledem k tomu, že Poyntingův vektor nám udává velikost a směr toku energie pouze v daném místě prostoru \mathbf{r} , definujeme tok energie P_S plochou S

$$P_S(\nu) = \Re \int_S \mathbf{S}(\mathbf{r}, \nu) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS, \quad (2.6)$$

kde $\hat{\mathbf{n}}$ je normálový vektor k ploše S a \Re značí reálnou část.

Z hlediska výpočetní náročnosti by se mohlo zdát výhodné spočítat v každém časovém kroku $P_S(t)$ a poté Fourierovu transformaci $P_S(\nu) = \widehat{P_S}(t)$. Tento postup ale není správný, jelikož my chceme spočítat tok energie $P_S(\nu)$ pomocí Fourierových obrazů elektrické a magnetické intenzity $\widehat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t)$ a $\widehat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t)$ a nikoli Fourierovu transformaci toku energie $\widehat{P_S}(t)$, což díky nelineárnosti není to samé!

Například pro výpočet toku energie ve vlnovodu směřujícím podél osy x dostaneme vztah:

$$P_x(\nu) = \Re \sum_{y_1}^{y_2} S_x(\mathbf{r}, \nu) \Delta_y, \quad (2.7)$$

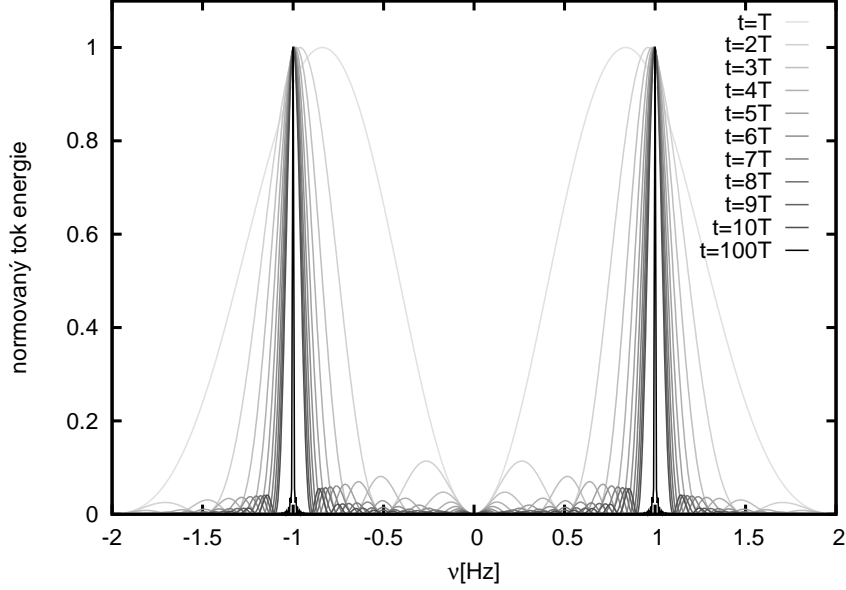
kde y_1 a y_2 značí meze detekované oblasti, v tomto případě spodní a horní stranu vlnovodu.

2.3 Zdroje

Jakým způsobem lze v naší výpočetní doméně definovat různé materiály bylo nastíněno v kapitole 1. Nebylo však ještě řečeno, jakým způsobem elektromagnetické pole excitovat.

Uvážíme-li opět jednu dimenzi je nejjednodušší přidat do algoritmu příkaz $E_z^q[m] = \psi^q$, kde $\psi^q = \psi(q\Delta_t)$ je časově závislá funkce (například funkce sinus, či Gaussova funkce). Zde je nutné si však uvědomit, že m -tým bodem v mříži nebude moci v tomto případě projít žádná vlna. Lepší způsob je tedy započíst do vývojové rovnice (1.11) ještě elektrické proudy. Obdržíme pak

$$E_z^{q+1}[m] = E_z^q[m] + \frac{\Delta_t}{\varepsilon\Delta_x} \left(H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2} \right] - H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m - \frac{1}{2} \right] \right) - \frac{\Delta_t}{\varepsilon} J_z^{q+\frac{1}{2}}[m], \quad (2.8)$$



Obrázek 2.1: Fourierova transformace funkce ψ dle (2.9). Z grafu je zřejmá konvergence k delta funkci pro zvyšující se časový interval, během něhož byla počítána DFT.

kde $J_z^q[m] = \psi^q$. V tomto případě bude moci signál procházet m -tým bodem mříže i když bude zdrojová funkce nulová.

V obou zmíněných případech se však vlna šíří z bodu m doleva i doprava. Budeme-li chtít vyslat vlnu pouze jedním směrem, použijeme metodu TFSF (*total-field/scattered-field*). Této metody se ve vyšších dimenzích využívá například ke generaci rovinné vlny.

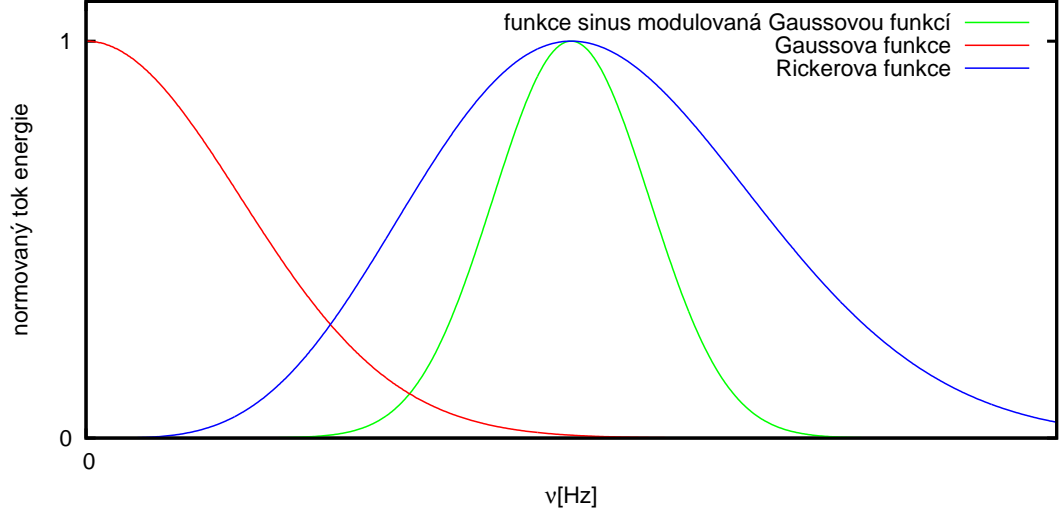
Zaměříme se ještě na tvar funkce $\psi(t)$. V této práci budeme používat tři různé excitační funkce, popřípadě jejich kombinace. Nejjednodušší je funkce sinus

$$\psi^q = \psi_0 \sin \left(\frac{2\pi}{N_\lambda} (S_c q - x_0 \sqrt{\mu_r \epsilon_r}) \right), \quad (2.9)$$

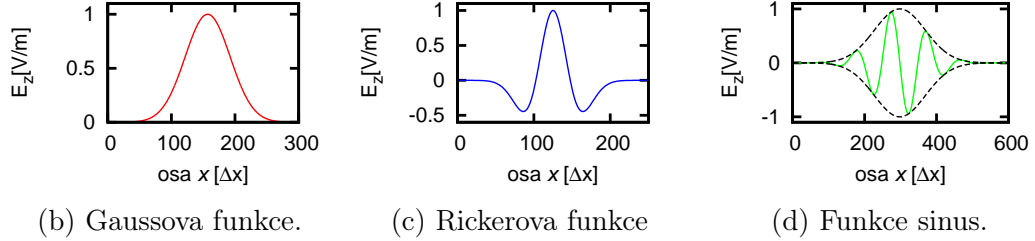
kde ψ_0 je amplituda, N_λ je počet bodů mříže na vlnovou délku ($N_\lambda = \lambda/\Delta_x$) a x_0 udává pouze posun v mříži, většinou o polovinu periody.

Podívejme se na Fourierovu transformaci této funkce. Díky matematické analýze lze očekávat, že Fourierova transformace funkce ψ^q (2.9) bude v podobě dvou delta funkcí lokalizovaných v $\pm\nu$. Vzhledem k tomu, že měříme velikost toku energie, očekáváme pouze kladné hodnoty. Zdrojovou funkcí na obrázku 2.1 byla právě funkce dle předpisu (2.9) s frekvencí $\nu = 1$ Hz. Jednotlivé křivky odpovídají různě dlouhým časovým intervalům, přes které byla DFT počítána, a T značí periodu funkce. Výsledky na obrázku tedy odpovídají našim matematickým předpokladům. Fyzikálně pro nás záporné frekvence nemají valný význam, matematicky je to však správně.

Mohli bychom samozřejmě zavést komplexní analytický signál, kde by byla zdrojová funkce nejdříve převedena do frekvenční domény, tam bychom odstranili záporné frekvence a funkci převedli zpět do časové závislosti. Pro naše potřeby bude nicméně stačit i funkce, která má ve frekvenční doméně nenulové hodnoty vyskytující se i na záporné části osy.



(a) Fourierovy obrazy Gaussovy, Rickerovy funkce a sinu modulovaného Gaussovou funkcí.



(b) Gaussova funkce.

(c) Rickerova funkce

(d) Funkce sinus.

Obrázek 2.2: Zdrojové funkce a jejich Fourierovy obrazy.

Kromě funkce sinus budeme však často chtít vyslat pouze krátký puls, definujeme tedy Gaussovou funkci

$$\psi^q = \psi_0 e^{-\left(\frac{q-d-x_0\sqrt{\mu_r\epsilon_r}}{w}\right)^2}, \quad (2.10)$$

kde d je časová prodleva a w šířka pulsu.

Jiným pulsem je tzv. Rickerova vlna (*Ricker wavelet*). Tu můžeme zapsat v podobě

$$\psi^q = \psi_0 \left(1 - 2 \left(\pi \frac{q-d-x_0\sqrt{\mu_r\epsilon_r}}{N_\lambda} - 1\right)^2\right) e^{-\left(\pi \frac{q-d-x_0\sqrt{\mu_r\epsilon_r}}{N_\lambda} - 1\right)^2}. \quad (2.11)$$

V sérii obrázků 2.2 jsou Fourierovy obrazy (a) různých zdrojových funkcí (b),(c),(d). Je zřejmé, že samotná Gaussova funkce není nejlepší pro zjišťování transmisního či reflexního spektra, protože jsou v ní nejvíce zastoupeny malé frekvence. Nejlepší způsob, jak lokalizovat střed jejího Fourierova obrazu na konkrétní frekvenci, je vynásobit Gaussovou funkci (2.10) sinem s danou frekvencí (2.9). Další možností je také zmiňovaná Rickerova vlna, u níž můžeme frekvenční maximum také dobře lokalizovat a která má dostatečně široké spektrum. V simulacích budeme ke zjišťování spekter používat převážně Rickerovu vlnu, která má oproti modulovanému sinu rovnoměrnější zastoupení frekvencí. Nicméně získané transmisní či reflexní spektrum na volbě zdrojové vlny víceméně nezávisí.

2.4 Transmise

Pro výpočet transmisního koeficientu T je tedy nutné nejprve zjistit energii do systému vstupující $P^i(\nu)$ (*incident*), též tzv. normalizační tok energie, a energii prošou $P^t(\nu)$ (*transmitted*). Samotný transmisní koeficient $T(\nu)$ pak již vypočteme jednoduše

$$T(\nu) = \frac{P^t(\nu)}{P^i(\nu)}. \quad (2.12)$$

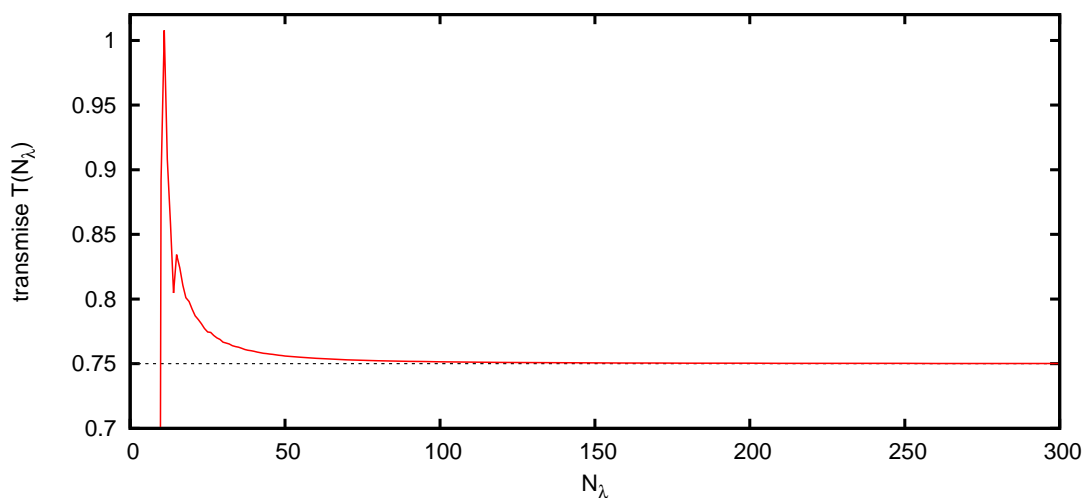
Pokud bychom například chtěli zjistit transmisí při průchodu rozhraním vakuum/dielektrikum, pak můžeme umístit detektor pro zjištění $P^i(\nu)$ před dielektrikum a detektor pro $P^t(\nu)$ někam dovnitř, za rozhraní. Toto uspořádání je však špatné, jelikož detektor před dielektrikem by naměřil jak přicházející vlnu, tak i vlnu od dielektrika odraženou. Proto musíme simulaci provést nadvakrát. Poprvé v prázdném prostoru, kdy naměříme $P^i(\nu)$ a podruhé s dielektrikem, kdy naměříme $P^t(\nu)$. Dosadíme-li hodnoty $n_1 = 1$ a $n_2 = 3$ do známého vzorce pro transmisí při kolmém dopadu

$$T = \frac{4n_1n_2}{(n_1 + n_2)^2}, \quad (2.13)$$

zjistíme, že transmisní koeficient by měl být $T = 0.75$. Pomocí uspořádání popsaného výše obdržíme při dostatečném rozlišení tuto hodnotu koeficientu pro všechny frekvence.

Zajímavější věc, než závislost transmisního koeficientu na frekvenci $T(\nu)$, je podívat se na závislost transmisního koeficientu T při různém rozlišení, tedy při různém N_λ . Transmisní koeficient v této fázi nechceme závislý na frekvenci a tok energie P můžeme počítat tedy pouze pro jednu, nejlépe pro nejvíce zastoupenou frekvenci. Výsledky tohoto měření jsou zobrazeny na obrázku 2.3.

Co z obrázku 2.3 plyne? Je zřejmé, že pokud je $N_\lambda < 20$, pak nám simulace pravděpodobně nebude poskytovat uspokojivé výsledky. Z toho důvodu se nastá-



Obrázek 2.3: Závislost transmisního koeficientu T na rozlišení, tedy na počtu bodů připadajících na vlnovou délku N_λ . V ideálním případě je $T = 0.75$.

vují takové podmínky, aby hodnota N_λ byla alespoň 50. Ideální je samozřejmě i větší, ne vždy si však můžeme kvůli dlouhému výpočetnímu času dovolit příliš velké rozlišení.

Jak bylo zmíněno v úvodu, toto je například jeden z důvodů, proč není vhodné používat FDTD při výpočtech, kde je vlnová délka světla ve srovnání s objekty příliš malá. Například při relativně malé velikosti domény ve dvou dimenzích $1\text{cm} \times 1\text{cm}$, volbě $N_\lambda = 50$ a světle o vlnové délce $\lambda = 1\mu\text{m}$ ($\Delta_x = 20\text{nm}$) dostaneme rozměry mříže $5 \cdot 10^5 \times 5 \cdot 10^5$ bodů. V kapitole 4 se podíváme na simulaci fotonického krystalu, kde byly rozměry mříže cca 700×600 a simulace trvala na standardním počítači zhruba 2,5 hodiny, s počítáním DFT a tedy transmisního spektra až 8 hodin. Například pro výpočet šíření světla dalekohledem je tedy metoda FDTD nepříliš použitelná.

2.5 Reflexe

Reflexní koeficient $R(\nu)$ získáme v principu stejně jako transmisní $T(\nu)$. Tentokrát ale měříme energii vstupující do systému $P^i(\nu)$ a energii systémem odraženou $P^r(\nu)$ (*reflected*):

$$R(\nu) = \frac{P^r(\nu)}{P^i(\nu)}. \quad (2.14)$$

Simulaci opět provádíme většinou nadvakrát, jak bylo popsáno výše.

3. Otestování simulace na jednoduchých strukturách

V této kapitole se pokusíme pomocí jednodušších struktur ověřit správnost simulace naprogramované v prostředí *MATLAB* dle teorie popsané v předchozí kapitole.

Jedním z problémů, se kterými se zde budeme potýkat je skutečnost, že ve složitějších strukturách, nebo ale i v obyčejné planparalelní desce je světlo částečně „uvězněno“ a trvá dlouho, než se všechna energie rozptýlí. Jedná se většinou o tzv. rezonanční módy jimž přísluší pouze úzký pás frekvencí a tedy peak v transmisním spektru. Vzhledem k časovým důvodům neběžela simulace vždy dostatečně dlouho, což ve výsledku ovlivnilo velikosti těchto rezonančních peaků.

3.1 Absorpce ve vodivém prostředí

Jak bylo zmíněno, do vývojových rovnic (1.10) a (1.11) lze zahrnout také elektrickou vodivost σ , s jejíž pomocí pak můžeme simulovat chování světla ve vodivých materiálech jako jsou například kovy.

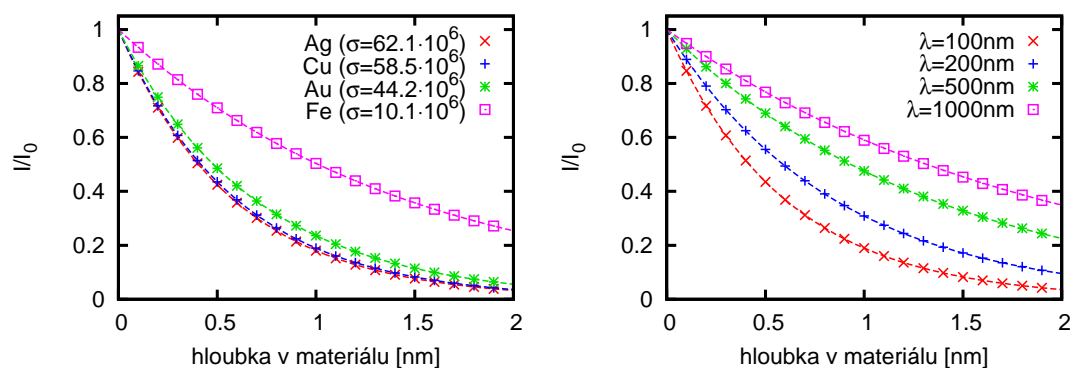
Intenzita vlny šířící se v prostředí s nenulovou vodivostí je exponenciálně tlumena, což popisuje *Lambert-Beerův zákon*

$$I = I_0 e^{-ax}, \tag{3.1}$$

kde I_0 je intenzita vstupujícího světla a a je absorpční koeficient, pro který platí

$$a = 2k_I = k\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\epsilon\omega}\right)^2} - 1}. \tag{3.2}$$

Zde k_I značí imaginární část vlnového vektoru, $k = \omega/c$ a $\omega = 2\pi\nu$ je úhlová frekvence. Dosazením (3.2) do (3.1) dostaneme závislost intenzity světla na hloubce vniku při zadané vodivosti σ a frekvenci ν [5].



(a) Absorpce v různých materiálech. (b) Absorpce v mědi pro různé vlnové délky

Obrázek 3.1: Ověření simulace pomocí absorpce ve vodivém materiálu.

Následující simulace probíhala pouze v jedné dimenzi s vlnovou délkou světla $\lambda = 100\text{cm}$ při dobrém rozlišení $\Delta_x = 0.1\text{nm}$. Ve vodivém materiálu bylo rozmístěno několik detektorů měřících tok energie, přičemž první z nich byl brán jako referenční a určoval intenzitu I_0 . Další pak měřily pokles intenzity v materiálu v závislosti na hloubce. V grafech na obrázku 3.1 jsou vyneseny křivky dle teoretické závislosti (3.1) a body, které byly získány pomocí simulace. Jde vidět, že v tomto případě simulované výsledky velmi dobře odpovídají teoretické závislosti.

3.2 Planparalelní deska

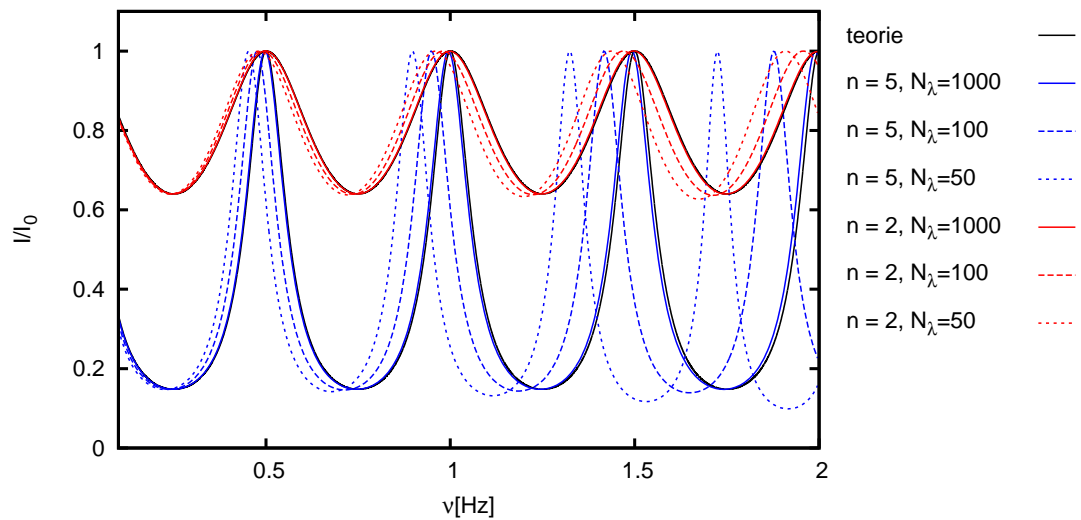
Další jednoduchou strukturou, která může být simulovaná v jedné dimenzi je dielektrická planparalelní deska. Teoreticky se propustnost této desky počítá pomocí mnohosvazkové interference, přičemž se nejedná prakticky o nic jiného, než o sečtení nekonečné řady skládající se z Fresnelových vzorců. Pro prošlou intenzitu I_t dielektrickou planparalelní deskou o indexu lomu n a tloušťce d lze odvodit vztah známý pod názvem *Airyho funkce*

$$I_t = I_0 \frac{1}{1 + \frac{4R}{(1-R)^2} \sin^2 \frac{\delta}{2}}; \quad \delta = \frac{4\pi}{c} n \nu d, \quad (3.3)$$

přičemž δ je fázový posun a R značí intenzitní reflexní koeficient daný známým výrazem

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_1 + n_2} \right)^2. \quad (3.4)$$

V našem případě je $n_1 = 1$ a $n_2 = n$ index lomu desky. V grafu 3.2 je porovnání Airyho funkcí (3.3) s výsledky získanými simulací pro dvě různé hodnoty indexu lomu ($n = 2$ a $n = 5$) a pro tři různá rozlišení, tedy tři různé hodnoty N_λ .



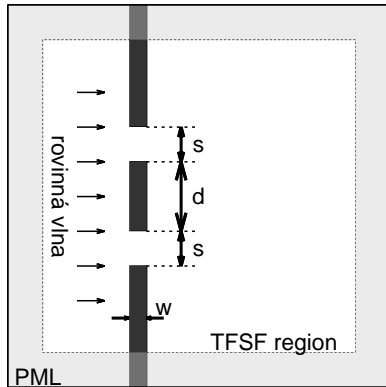
Obrázek 3.2: Prošlá intenzita planparalelní dielektrickou deskou pro dvě různé hodnoty indexu lomu při třech různých rozlišeních. Teoretická závislost je vypočtená dle (3.3).

Aby nebyly funkce vzájemně posunuty, byla tloušťka desky vždy volena stejně velká jako vlnová délka světla o frekvenci $\nu = 1\text{Hz}$ šířícího se v dielektriku o daném indexu lomu, tedy $d = c/n\nu$. Jak jde vidět, při velkém rozlišení ($N_\lambda = 1000$) dostaneme naprostou shodu s teorií, pro horší rozlišení je odchylka však už dost viditelná. Odchylka je navíc tím větší, čím větší je index lomu a tedy menší rychlost šíření signálu.

3.3 Dvojštěrbina

Podívejme se nyní na jeden z nejjednodušších příkladů ve dvou dimenzích, na dvojštěrbinu. Předpokládejme jednoduchou strukturu popsanou na obrázku 3.3, přičemž relativní velikosti parametrů jsou $s = 1$, $d = 2$ a $w = 1/2$. Celá struktura je umístěna v TFSF regionu, pomocí kterého je generována rovinná vlna o vlnové délce $\lambda = 1$, jež dopadá zleva na dvojštěrbinu. Ta je tvořena ideálním elektrickým vodičem (PEC), tedy materiálem s velice vysokou vodivostí σ .

Simulace probíhala při TMz polarizaci, přičemž zdrojovou vlnou byl sinus modulovaný dlouhým gaussovským pulsem. K dosažení interference v této struktuře potřebujeme totiž jak prostorově, tak i časově koherentní světlo. Prostorová koherence vzhledem k použité rovinné vlně nebyla problém, kvůli časové koherenci však nelze použít příliš krátký puls.



Obrázek 3.3: Geometrie dvojštěrbiny. Na překážku z PEC dopadá rovinná vlna generovaná pomocí TFSF, která částečně prochází dvěma otvory a následně v pravé části tvoří interferenční maxima a minima (obr. 3.4).

V tomto příkladu se spokojíme pouze s grafickým výstupem, jak je na obrázku 3.4. Namísto zobrazení intenzity elektrického pole v jistém konkrétním čase byla v tomto případě přes celou dobu trvání simulace zaznamenávána intenzita elektromagnetického pole I , vypočtená jako

$$I(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N |\mathbf{E}(\mathbf{r}, n\Delta t)|^2, \quad (3.5)$$

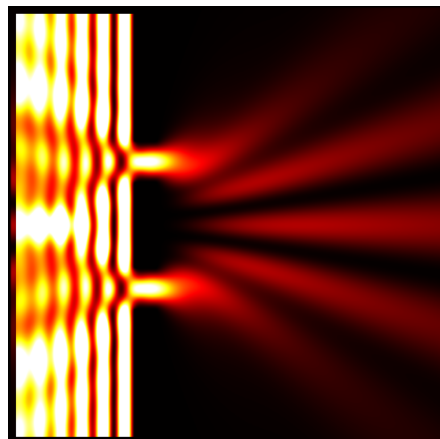
kde N je celkový počet časových kroků. Na obrázku lze velice dobře vidět dopadající vlnu generovanou v TFSF regionu a také interferenční maxima za štěrbinou. Vzhledem k tomu, že vlna dvojštěrbinou nejen prošla, ale také se odrazila, není nalevo od příčky pouze jednodílná plocha, ale pruhy, které vznikly při interferenci dopadající a odražené vlny.

Pokud bychom chtěli dále zjistit velikost a směr interferenčních maxim, musíme použít více sofistikované metody, než které byly zatím popsány k výpočtu

transmisních či reflexních koeficientů. Chceme-li totiž spočítat, jak pole za dvojštěrbinou vypadá a jakými směry se šíří, pak je v korespondenci s obrázkem 3.4 nesmyslné detekovat pole hned za překážkou - tam totiž žádná interferenční maxima nejsou. K řešení tohoto problému se používá transformace blízkého pole do pole dalekého NF-FF (*near-field to far-field transformation*).

Jedná se o to, že naši výpočetní oblast si ohraničíme virtuální uzavřenou plochou, na jejímž povrchu spočteme pomocí diskrétní Fourierovy transformace plošné proudy \mathbf{J} a \mathbf{M} v závislosti na frekvenci odpovídající elektromagnetickému poli uvnitř myšlené plochy, z nichž dále vypočteme složky \mathbf{E} a \mathbf{H} odpovídající pozorování v dalekém poli.

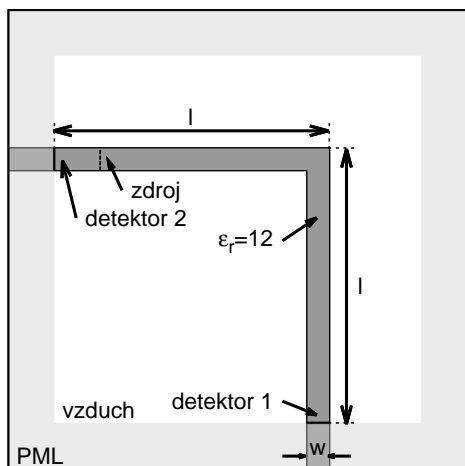
Tato metoda je často využívána při konturce antén či rozptylových center. Více v [2].



Obrázek 3.4: Intenzita světla při rozptylu rovinné vlny na dvojštěrbině.

3.4 Zatočený vlnovod

Geometrie této struktury je snad ještě jednodušší, než geometrie dvojštěrbiny, zaměříme se zde však opět i na transmisi a reflexi. Jedná se o vlnovod tvořený z materiálu s relativní permitivitou $\epsilon_r = 12$ zatočený do pravého úhlu, geometrie uspořádání je na obrázku 3.5, navržena podle [7] na MIT, přičemž získané výsledky jsou srovnány s výsledky spočtenými softwarem MEEP, které lze také nalézt na [7].

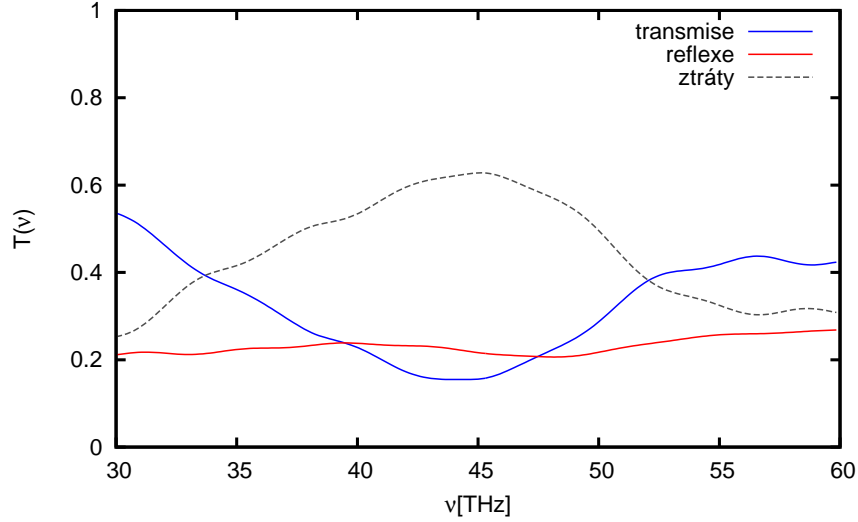


Obrázek 3.5: Geometrické uspořádání zatočeného vlnovodu.

spektra reflexního.

Zdroj vlny umístěný uprostřed vlnovodu není příliš jednoduché udělat tak, aby vyzářil veškerou energii pouze jedním směrem. Část energie je totiž vyzářena i na druhou stranu, což by v tomto případě ovlivnilo transmisní spektrum. Detektor 2 je tedy nutné „zapnout“ o chvíli později, až tato parazitní vlna šířící se doprava vymizí a detekovat pouze vlnu odraženou.

Šířka vlnovodu je $w = 1\mu\text{m}$ a délka každého ramena $l = 12\mu\text{m}$, k výpočtům bylo použito pole v polarizaci TMz. Puls měl podobu Rickerovy vlny s frekvenčním maximem na 45THz. Frekvence byla zvolena tak, aby vlnová délka světla ve vlnovodu odpovídala dvojnásobku jeho šířky, tedy $2w$. Velikost prostorového kroku byla $\Delta_x = 10\text{nm}$. Je vhodné provést opět dvě simulace, přičemž při té první uvažujeme pouze rovný vlnovod na jehož konci změříme frekvenčně závislý tok energie, který pak porovnáme s toku energie zjištěnými při simulaci druhé, tedy se zatočeným vlnovodem. Detektor 1 na obrázku 3.5 byl použit k detekci výpočtu transmisního spektra a detektor 2 k výpočtu



Obrázek 3.6: Transmisní i reflexní spektrum a ztráty zatočeného vlnovodu.

Kromě transmise a reflexe nás může zajímat také energie, která se při takovémto zatočení vlnovodu ztrácí. Tu můžeme vypočítat snadno, jelikož víme, že součtem transmise T , reflexe R a ztrátového koeficientu L musíme obdržet 1, tedy

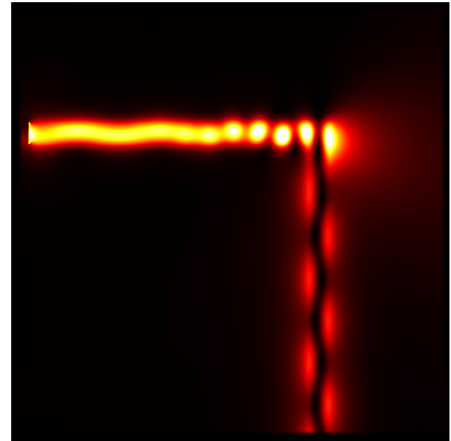
$$L(\nu) = 1 - T(\nu) - R(\nu). \quad (3.6)$$

Frekvenční spektra jsou znázorněna v grafu 3.6.

V simulaci dle [7] byl použit sinový zdroj právě na vlnové délce $2\mu\text{m}$ modulovaný Gaussovou funkcí. Z grafu lze jednoznačně říci, že pro tuto frekvenci dané uspořádání není příliš dobré, jelikož ztráty jsou opravdu značné a nad transmisí převažují.

Vypočtená spektra velice dobře korespondují s výsledky získanými softwarem MEEP a malé odchylky lze připisovat mírně jiné geometrii uspořádání či jinému zdroji světla.

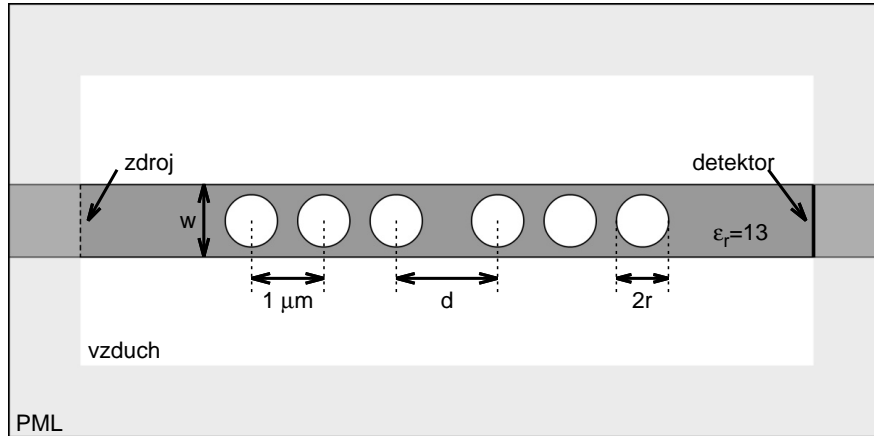
Pro zajímavost pohledme ještě na obrázek 3.7 ukazující intenzitu světla spočtenou opět dle (3.5). I z tohoto obrázku lze vyčíst, že vlnovodem projde pouze malá část energie.



Obrázek 3.7: Rozložení intenzity v zatočeném vlnovodu

3.5 Děrovaný vlnovod

Tato struktura je již mírně složitější a budeme ji počítat v TE_z polarizaci. Parametry struktury a srovnávací výsledky jsou přebrány z [8], opět získány softwarem MEEP pocházející z Massachusettského technického institutu. Jedná se o krátký vlnovod šířky $w = 1.2\mu\text{m}$ z materiálu o relativní permitivitě $\epsilon_r = 13$ se šesti kruhovými dírami poloměru $r = 0.36\mu\text{m}$, které mají mezi sebou vzdálenost $1\mu\text{m}$, přičemž třetí a čtvrtá vzdálenost větší a to $d = 1.4\mu\text{m}$. Přehledněji je struktura znázorněna na obrázku 3.8.



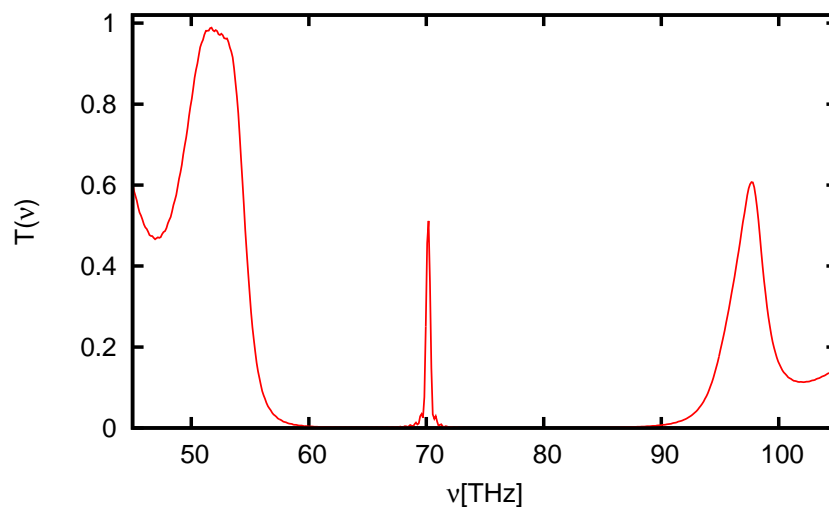
Obrázek 3.8: Uspořádání struktury děrovaného vlnovodu.

Transmisní spektrum popsaného vlnovodu je v grafu (3.9). Je na něm velice dobře vidět pás zakázaných frekvencí, které struktura nepropouští, v jehož středu je rezonanční peak. Střed tohoto peaku je zhruba na frekvenci $\nu = 70.2\text{THz}$, přičemž výsledky z [8] udávají střed na $\nu = 70.5\text{THz}$. Poloha rezonančního módu je silně závislá na uspořádání struktury.

Zde je dobré si uvědomit, že ne všechny složky pole E_x , E_y a H_z jsou centrovány přesně do bodů mříže ve které máme zadané geometrické uspořádání. Uvažujeme-li krajní body děr, zjistíme, že zastoupení materiálů je pro tyto krajní body různé. Představme si čtvercovou síť v níž je nakreslená kružnice, pak čtverce na okraji kružnice budou rozděleny na dvě části o dvou různých plochách S_1 a S_2 . Plocha S_1 necht' představuje část vlnovodu s ϵ_{r1} a plocha S_2 díru s ϵ_{r2} . Hodnotu ϵ_r v těchto krajních čtvercích je možné zjistit pomocí váženého průměru

$$\epsilon_r = \frac{S_1\epsilon_{r1} + S_2\epsilon_{r2}}{S_1 + S_2}. \quad (3.7)$$

My se zde však omezíme na jednodušší řešení a to takové, že v krajních bodech vypočteme průměrnou hodnotu pouze jako



Obrázek 3.9: Transmisní spektrum děrovaného vlnovodu.

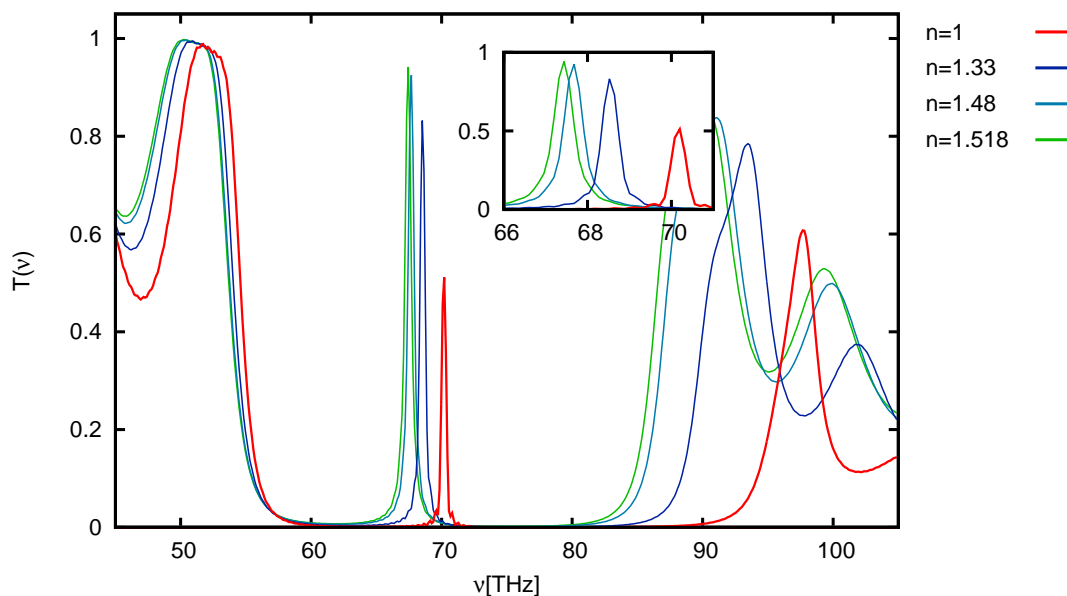
$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon_{r1} + \varepsilon_{r2}}{2}. \quad (3.8)$$

Podrobným rozebráním mříže s oddělenými složkami pole zjistíme (viz [2]), že $\varepsilon_{rx}(i, j)$ ve vývojové rovnici pro E_x v bodě mříže (i, j) můžeme vypočítat jako průměr dvou hodnot $\varepsilon_{rx}(i, j - 1)$ a $\varepsilon_{rx}(i, j)$. Obdobně $\varepsilon_{ry}(i, j)$ jako průměr z $\varepsilon_{ry}(i - 1, j)$ a $\varepsilon_{ry}(i, j)$. Tímto způsobem tedy dosáhneme čtyřikrát větší přesnosti geometrického uspořádání, aniž bychom zvyšovali výpočetní čas či výkon.

Jestliže toto průměrování neprovedeme, hodnota středu rezonančního peaku přejde na 69.2THz.

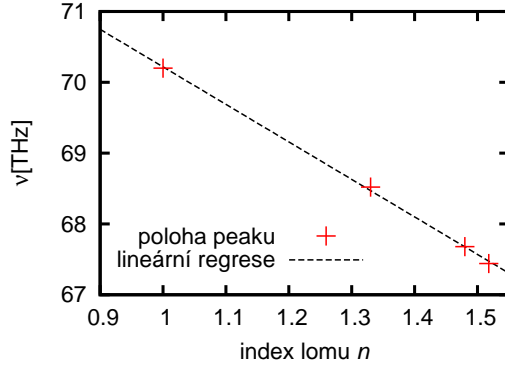
Zajímavé je zaměřit se ještě na prostorové rozlišení charakterizováno prostorovým krokem Δ_x . Ve výsledcích výše bylo $\Delta_x = 10\text{nm}$, pokud jej však zvětšíme na $\Delta_x = 25\text{nm}$ dostaneme hodnotu rezonančního peaku $\nu = 68.8\text{THz}$. Považujeme-li výsledek z [8] za správný, pak je zřejmé, že pro dobré výsledky je nutné mít dostatečně velké rozlišení a průměrování vlastností materiálů na rozhraní výsledek ještě dálelepší.

Zastavme se u této struktury ještě o chvíli déle a v korespondenci s kapitolou 4 o fotonických krystalech zkoumejme transmisní spektrum v závislosti na změně indexu lomu materiálu v dírách.



Obrázek 3.10: Změna transmisních spekter pro různé materiály v dírách vlnovodu. Hodnoty indexů lomu byly v korespondenci s kapitolou 4 o fotonických krystalech přebrány z [9] a odpovídají postupně vzduchu, vodě a dvěma různým imerzním olejům.

V grafu 3.10 je vidět, že posun rezonančního peaku je při změně indexu lomu celkem znatelný a takto upravený vlnovod by bylo určitě možné použít jako biosenzor založený na detekci změny indexu lomu. Ve slibované kapitole 4 se budeme dále zabývat změnou struktury aby byla změna v detekovaném spektru při malé změně indexu lomu materiálu v dírách co největší. Maxima peaků zobrazených v grafu 3.10 se zvyšujícím se indexem lomu rostou. To je způsobeno tím, že simulace



Obrázek 3.11: Závislost polohy peaku na indexu lomu materiálu v dírách.

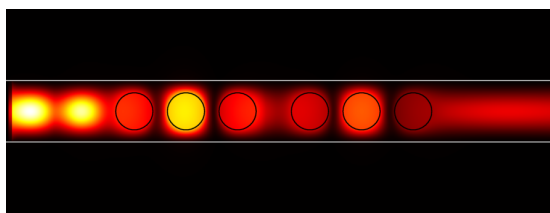
vždy probíhala po stejnou dobu a čím byl rozdíl indexu lomu vlnovodu a materiálu v dírách větší, tím mezi nimi pole oscilovalo více a při ukončení simulace zůstalo ve struktuře více energie.

Určitě je ještě zajímavé podívat se přímo na závislost polohy peaku vs. index lomu n , jak je znázorněno v grafu 3.11. Pro zkoumané látky v dírách a k nim příslušející indexy lomu je vidět v grafu pěkná lineární závislost polohy peaku na indexu lomu. Zda-li je však tato závislost lineární i pro větší indexy lomu by bylo nutné ověřit dalšími výpočty.

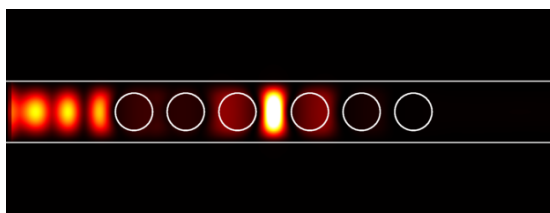
Pro zajímavost uveďme ještě rozložení magnetické složky světla v prostoru. I v tomto případě by samozřejmě bylo možné podívat se opět na celkovou intenzitu světla, nicméně složky E_x a E_y leží ve stejné rovině jako vlnovod a nejsou tedy na rozhraní spojitě. Pro názornost šíření pole při TEz polarizaci jsme zvolili zobrazení kvadrátu celkové magnetické intenzity $H_{tot}(\mathbf{r})$, vypočteného jako

$$H_{tot}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N |\mathbf{H}(\mathbf{r}, n\Delta t)|^2. \quad (3.9)$$

Jako výsledek si uveďme hned dva obrázky (obr. 3.12a a 3.12b) pro dvě různé frekvence. Je mezi nimi jednoznačný rozdíl a to v pravé části vlnovodu. Na obráz-



(a) Sinus o vlnové délce 1400nm modulovaný gaussovskou funkcí.



(b) Sinus o vlnové délce 1740nm modulovaný gaussovskou funkcí.

Obrázek 3.12: Rozložení kvadrátu celkové magnetické intenzity světla v děrovaném vlnovodu pro frekvenci ležící mimo zakázaný pás frekvencí (a) a pro frekvenci ležící v zakázaném pásu (b). Na druhém obrázku jde vidět mezi dírami jasnou oblast s velkou celkovou magnetickou intenzitou. Světlo je zde jakoby uvězněno a velice dlouho po rozptýlení hlavního světelného svazku tato oblast pulsuje. Z časových důvodů byla simulace zastavena dříve, než se veškerá energie rozptýlila, pokud bychom však počkali déle, velikost intenzity v této oblasti by i nadále rostla a s ní i rezonanční peak.

ku 3.12a je zobrazena celková magnetická intenzita pro světlo na frekvenci 52THz a v korespondenci s grafem 3.9 je zde vidět, že část světla je odražena (opět dostáváme v levé části interferenci dopadající a odražené vlny) a část světla prochází dál. Na obrázku 3.12b je světlo na frekvenci 75THz, která leží v zakázaném pásu. Jak jde vidět, všechna energie je buď odražena, nebo rozptýlena do okolí.

4. Fotonické krystaly

Co si máme představit, řekne-li někdo fotonický krystal? „Fotonické krystaly (PhC - *photonic crystal*) jsou optické nanostruktury, které ovlivňují pohyb fotonů stejným způsobem, jakým ovlivňují polovodiče pohyb elektronů.“ Tolik nám alespoň poradí Wikipedie [10]. Jedná se tedy o periodickou strukturu, která nepodporuje šíření elektromagnetických vln daných frekvencí nacházejících se v tzv. zakázaném pásu (také *band-gap*).

Už v roce 1887 ukázal Lord Rayleigh, že vícevrstevnatá dielektrika, tedy jednodimenzionální struktury, mají zakázaný pás. Takovéto struktury mají dnes uplatnění v mnoha aplikacích jako jsou například tenké filmy na optických přístrojích ke zvýšení propustnosti, či zrcadla s vysokou odrazivostí užívaná v laserových rezonátorech.

Významný milník v historii fotonických krystalů tvoří roku 1987 dva články o vícedimenzionálních optických strukturách, které publikovali Yablonovitch a John. Od tohoto roku začal počet publikací na téma fotonických krystalů exponenciálně růst.

Vzhledem k tomu, že periodicitu krystalu se musí pohybovat někde kolem poloviny vlnové délky vedených elektromagnetických vln, byly kvůli jednodušší výrobě nejdříve vyvíjeny krystaly pro mikrovlnnou oblast. Až v roce 1996 demonstroval T. Krauss dvoudimenzionální fotonický krystal pro oblast viditelného světla.

První komerční produkt využívající těchto optických periodických struktur byla vlákna z dvoudimenzionálních fotonických krystalů, které jako první vyvinul P. Russell roku 1998. Jedná se o vlákna, ve kterých je na rozdíl od klasických optických vláken světlo vedeno pomocí různých změn ve struktuře a nejen díky rozdílným hodnotám indexu lomu.

Je samozřejmě také snaha vytvářet i třidimenzionální fotonické krystaly, nicméně výroba těchto struktur je značně složitá a v současné době ještě hodně vzdálena od komerčního využití. V budoucnu však mohou nabídnout specifické vlastnosti potřebné ke konstrukci optických počítačů [10].

4.1 Biosenzory

Během posledních 20 let bylo mnoho metod přizpůsobeno k detekci biochemických reakcí, jako například elipsometry, interferometry, či povrchová plasmonová rezonance. Biodetektory mohou dobře posloužit k objevu nových léků, detekci nemocí a proteinů, k analýze DNA. Jejich kritickými vlastnostmi je kompaktnost, vysoká citlivost, jednoduchá výroba a kompatibilita s ostatními optickými či elektrickými prvky.

Zmíněné metody však často zahrnují větší přístroje, jejichž cena může být hodně vysoká. Jako biodetektoru založeném na změnách indexu lomu může být ale použit i fotonický krystal, který je možné vyrobit díky kvalitním polovodičovým technologiím a cena jejich výroby je značně menší. Citlivost PhC je navíc větší, než citlivost jakéhokoli komerčně dostupného biodetektoru [11].

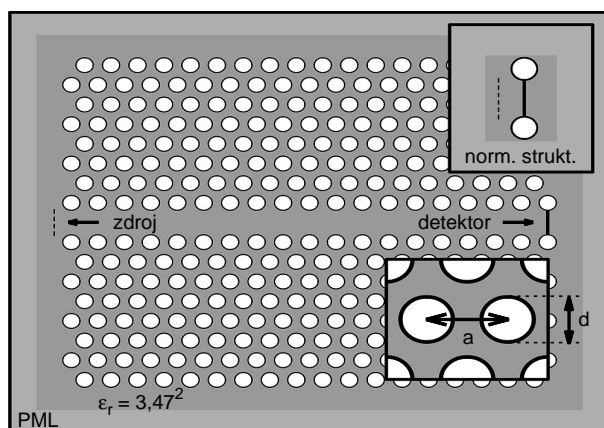
Biodetektor v podobě PhC se vyrábí z křemíkové vrstvy v níž jsou do hexagonální mřížky periodicky umístěny kruhové díry. Ty se naplní sloučeninou, která má

daný index lomu, což zapříčiní změny v detekovaném transmisním spektru. Cílem pak je vyrobit takový fotonický krystal, který vykazuje velké změny v transmisním spektru při malé změně indexu lomu v dírách. Z toho důvodu se vytváří různé modifikace PhC, kde se do nich přidávají například dutiny (odstraněním některých děr), ve kterých vzniká tzv. pomalé světlo, tj. světlo s velice malou grupovou rychlostí, jehož šíření je silně závislé právě na změnách indexu lomu [12].

4.2 Transmisní spektrum PhC

V této a následujících sekcích si podrobně rozebereme jeden konkrétní fotonický krystal, jehož parametry jsou přebrány z [9]. Ve zmíněném článku však byla simulace provedena ve třech dimenzích, díky čemuž jsou výsledky transmisního spektra odlišné (je celé posunuté a trochu se liší i tvarem).

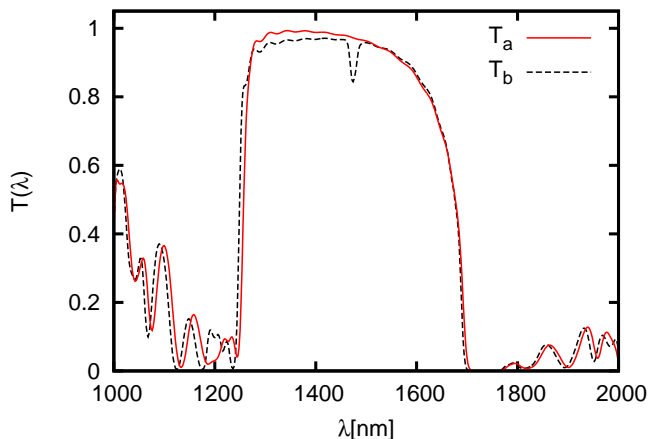
Uspořádání fotonického krystalu je na obrázku 4.1. Jedná se o periodickou strukturu s hexagonální mříží, jejíž perioda je $a = 370\text{nm}$. Celý krystal je tvořen křemíkem s indexem lomu $n = 3,74$ a jsou do něj vyvrtány díry poloměru $r = 120\text{nm}$, které jsou naplněny vzduchem, popřípadě jiným materiálem s daným indexem lomu. Struktura má délku celkem $19a$ a na výšku má 17 řádků děr z nichž prostřední je vynechán a vzniklý pruh slouží k vedení světla. Simulace probíhala ve dvou dimenzích při TE_z polarizaci, přičemž prostorový krok Δ_x byl vždy 10nm, tedy 37 mřížových bodů na periodu. Zdrojovým pulsem byla Rickerova vlna, nicméně pokud krystal excitujeme gaussovsky modulovaným sinem, který má dostatečně široké spektrum a je tedy krátký, získáme v podstatě stejné výsledky.



Obrázek 4.1: Geometrie fotonického krystalu. Jedná se o vzduchové díry poloměru $d = 240\text{nm}$, které jsou vyvrtány do křemíku o indexu lomu $n = 3,47$ v hexagonální mříži s periodou $a = 370\text{nm}$. Vpravo nahoře je geometrie pro změření normalizačního toku energie.

Měření transmisního spektra můžeme provést hned několika způsoby, přičemž výsledky se mírně liší. První možnost je uvažovat dlouhý vlnovod na který je uprostřed napojený fotonický krystal, přičemž normalizační tok energie měříme na jednom konci vlnovodu a tok energie odpovídající prošlému světlu na konci druhém. Jiná možnost, která byla použita zde také z důvodu menší časové i výkonové náročnosti při následujících měřeních, je uvažovat opět dvě struktury (jak je také ukázáno na obr. 4.1), na první změřit normalizační tok a na druhé transmisi. Bohužel není možné provádět oboje měření na jedné struktuře, protože se od fotonického krystalu část energie odráží a normalizační tok by nebyl přesný.

Získané spektrum z popsané struktury je v grafu 4.2 (červená čára). Je vidět, že struktura velice dobře vede vlnové délky zhruba od 1250nm do 1700nm [13].

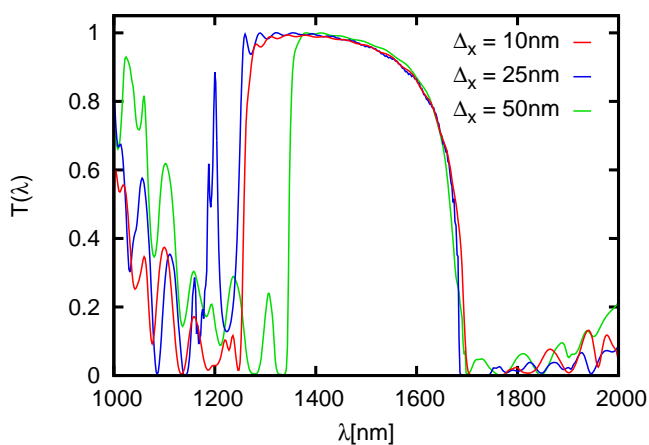


Obrázek 4.2: Transmisní spektrum fotonického krystalu popsaného na obrázku 4.1. Hodnota vlnové délky odpovídá detekci ve vakuu, nikoli přímo v krystalu (zde v křemíku).

Mezi 1700nm až 1800nm je dobře viditelná oblast s nulovou transmisí. Vlnové délky v této oblasti fotonický krystal nepropouští vůbec.

Při měření bylo použito průměrování vlastností materiálů zmíněné v kapitole 3.5. Zajímavé je všimnout si v grafu 4.2 také druhé křivky, která reprezentuje transmisní spektrum pro strukturu, ve které nebyly hodnoty materiálů na rozhraní zprůměrovány. Spektra se od sebe liší hlavně v oblasti kolem 1500nm, kde se při vynechání průměrování objeví malý pokles propustnosti. Tento artefakt je zmíněn také v [9], kde jej autoři s odvoláním považují za numerickou chybu v simulaci, což je v souladu se zde získanými výsledky.

Jak bylo zmíněno výše, simulace probíhala při prostorovém rozlišení $\Delta_x = 10\text{nm}$. Podívejme se, jak hodně se spektrum změní, budeme-li počítat při horším rozlišení a to při $\Delta_x = 25\text{nm}$ a $\Delta_x = 50\text{nm}$. Při rozlišení $\Delta_x = 10\text{nm}$ měly díry v průměru 24 bodů, při rozlišení $\Delta_x = 25\text{nm}$ 10 bodů a při rozlišení $\Delta_x = 50\text{nm}$ už pouze 5 bodů (přesněji 4, 8). Výsledky jsou v grafu 4.3. Hlavní část spektra se při zmenšení na $\Delta_x = 25\text{nm}$, tedy o něco více než na polovinu, příliš nezmění. Pokud však rozlišení zmenšíme ještě jednou na polovinu, dostaneme už celkem odlišné výsledky.



Obrázek 4.3: Transmisní spektra fotonického krystalu při různých prostorových rozlišeních.

Nicméně, vlak který by měl kola poskládaný zhruba z 20 stejných kostiček by nám na kolejích pěkně drcal. Zkrátka útvary vzniklé při rozlišení $\Delta_x = 50\text{nm}$ se za kružnice již příliš považovat nedají a uvážíme-li navíc, že číslo 5 se od 4.8

liší o čtyři procenta (tedy kromě tvaru není ani velikost děr přesná), lze snad i výsledky pro rozlišení při $\Delta_x = 50\text{nm}$ považovat za přijatelné.

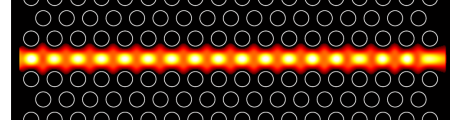
O změně spekter při změně rozlišení pojednává též [14], kde bylo zjištěno, že při zvětšování rozlišení se spektrum částečně vyhlazuje, mizí z něj spektrální struktury. To by mohlo být v korespondenci s objevením peaku na 1200nm při rozlišení $\Delta_x = 25\text{nm}$.

Na odlehčení se podíváme na šíření pole ve fotonickém krystalu v podobě kvadrátu celkové magnetické intenzity, jak bylo již popsáno dříve.

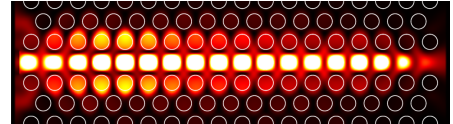
Série obrázků 4.4 zobrazuje šíření světla pro 3 různé pulsy. Na prvním obrázku 4.4a je sinus o vlnové délce 1400nm modulovaný gaussovskou funkcí. Dle spektra v grafu 4.2 očekáváme, že tento signál by se měl víceméně šířit bez rozptylu do okolí a bez reflexe. Tomuto odpovídá i znázornění pole na obrázku.

Obrázek druhý, obr. 4.4b, zobrazuje rozložení celkové magnetické intenzity opět pro sinus modulovaný gaussovskou funkcí, ale při vlnové délce 1740nm, která leží v zakázaném pásu. Obrázek však ukazuje, že jistá část energie se šíří dál. Je to částečně kvůli barevné škále na obrázku (prošla energie je opravdu malá), ale také díky tomu, že pokud uvažujeme kratší sinusový puls, nedostáváme ve frekvenci a tudíž ani ve vlnové délce δ -funkci, nýbrž trochu roztažený peak. V tomto případě zasahuje část peaku i mimo zakázaný pás a jistá část energie tedy může projít.

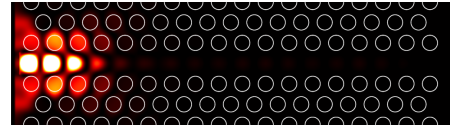
Budeme-li tedy uvažovat pouze sinus s $\lambda = 1740\text{nm}$ a počkáme-li chvíli až se fotonický krystal excituje, zjistíme, že světlo se ním opravdu nešíří a je rozptýleno či odraženo, jak ukazuje obrázek 4.4c.



(a) Sinus o vlnové délce 1400nm modulovaný gaussovskou funkcí.



(b) Sinus o vlnové délce 1740nm modulovaný gaussovskou funkcí.



(c) Sinus o vlnové délce 1740nm.

Obrázek 4.4

4.3 Nepřesnosti ve výrobě

Pojďme se na fotonický krystal podívat také z výrobního hlediska. Je zřejmé, že ačkoli je polovodičová výroba dnes již velmi přesná, tak se ve vytvořené struktuře mohou vytvořit různé nepřesnosti a to ať už ve tvaru děr, velikosti tak i v jejich poloze.

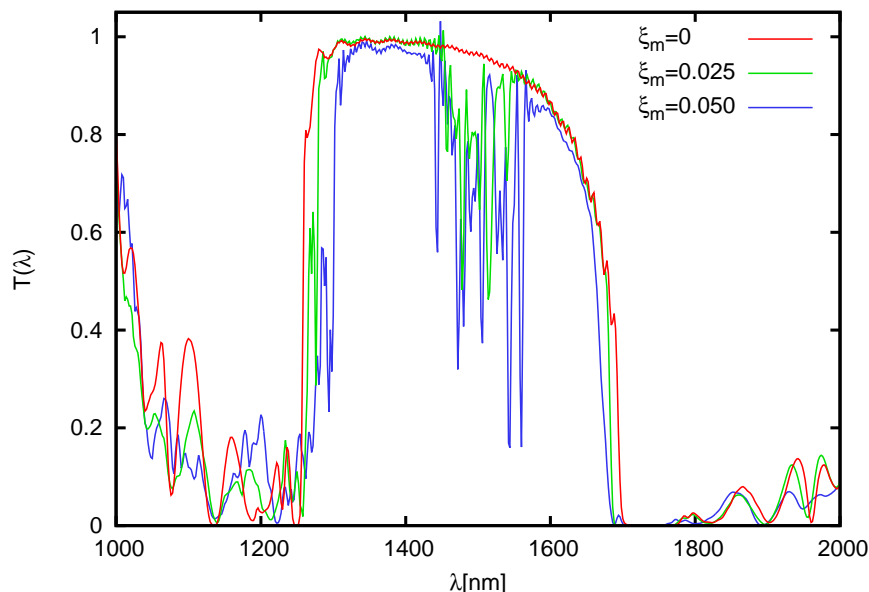
Označme díru písmenem H a přiřadíme jí parametry r_0 pro poloměr a \mathbf{x}_0 pro polohu odpovídající přesným hodnotám. Náhodnost do polohy a velikosti děr můžeme zavést následovně

$$H(r, x) = H[r_0(1 + \xi), \mathbf{x}_0(1 + \xi)], \quad (4.1)$$

kde ξ je náhodné číslo náležející do intervalu $(-\xi_m, \xi_m)$, kde ξ_m je maximální odchylka od přesného parametru. Hodnota $\xi_m \cdot 100\%$ nám tedy udává maximální procentuální odchylku.

V grafu 4.5 je porovnání spektra pro neporušenou strukturu ($\xi_m = 0$) a pro struktury s 2, 5% a 5% nepřesností. Pro 10% nepřesnost bylo spektrum už hodně deformované a graf se stal nepřehledným. Díky porušení periodicity v krystalu došlo k deformaci zakázaného pásu a tím také k zašumnění oblasti, kde jsme detekovali změny i při neprůměrování materiálových vlastností na rozhraní.

V předchozím grafu, grafu 4.2, byla křivka odpovídající spektru mírně vyhlazená. V grafu 4.5 je původní spektrum nevyhlazené, aby bylo srovnání spekter pro přesné a nepřesné struktury názornější.



Obrázek 4.5: Transmisní spektra fotonického krystalu při nepřesném uspořádání a odlišné velikosti děr specifikovaných pomocí parametru ξ_m dle vztahu (4.1).

4.4 PHC jako biosenzor

Chceme-li použít fotonický krystal jako biosenzor, měříme jeho transmisní spektrum pro různé sloučeniny aplikované do děr. PhC chceme navíc konstruovat takovým způsobem, aby v jeho spektru nastávaly v jistých oblastech co největší změny při malých změnách indexu lomu v dírách. Tím dosáhneme větší citlivosti a výsledný výrobek půjde na trhu více na odbyt.

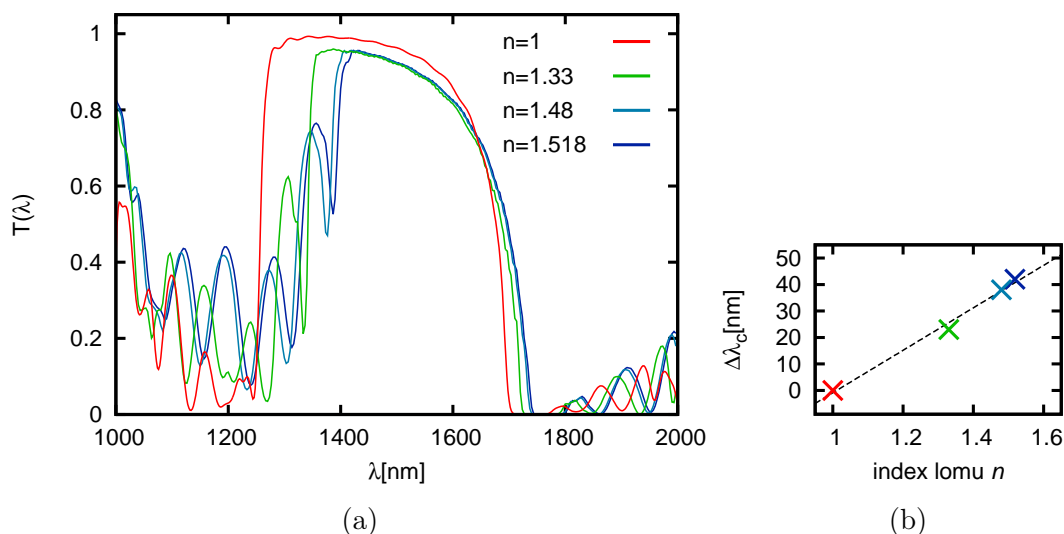
Transmisní spektrum zde bylo změřeno pro tři různé sloučeniny a k nim příslušející hodnoty indexu lomu převzaté z [9]. Výsledky jsou v grafu 4.6a. Index lomu odpovídá vodě ($n = 1,33$) a dvěma různým imerzním olejům ($n = 1,48$, $n = 1,518$).

V transmisním spektru byly po zavedení jiných materiálů do děr detekovány stejné změny jako v citovaném článku. Se zvyšujícím se indexem lomu v dírách se celé spektrum posouvá doprava a maximální transmise klesá. Nejdůležitější věc, která stojí za povšimnutí, je změna spektra kolem zakázaného pásu, tj. mezi 1700nm a 1800nm. Pokud je v dírách vzduch ($n=1$), struktura vůbec nepropouští světlo s vlnovou délkou 1700nm a větší (až do 1770nm), označme ji λ_c (c od slova *cutoff*). Bude-li však v dírách voda ($n = 1,33$), bude krystal propouštět světlo až do 1723nm, podobně pro imerzní oleje 1738nm a 1742nm.

Posun zakázaného pásu a tedy změna vlnové délky λ_c je velmi významná vlastnost senzoru z hlediska měření. Díky ní je totiž možná detekce sloučenin s dobrou přesností i při více zašuměném spektru, podrobněji v [9].

Označme si $\Delta\lambda_c$ jako rozdíl λ_c pro vzduch a pro jiné sloučeniny. Závislost $\Delta\lambda_c$ na indexu lomu n je v grafu 4.6b proložena přímkou. Pro přesnější závislost by však bylo lepší vypočítat opět více bodů.

Pohlédneme-li zpět, na graf 4.5, tak při podrobnější analýze zjistíme, že hranice nepropustného pásu se při nepřesné výrobě posunula zhruba o 10nm doleva. V korespondenci s právě rozebranými změnami spektra v závislosti na indexu lomu je zřejmé, že i 2,5% nepřesnost výrazně sníží výslednou citlivost.



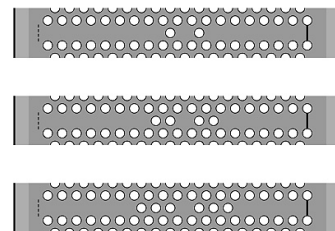
Obrázek 4.6: (a) Transmise fotonického krystalu pro různé hodnoty indexu lomu v dírách a (b) závislost změny vlnové délky, která je hranicí mezi zakázaným pásem a dobře propustnou oblastí, na indexu lomu n .

4.5 Modifikace PHC

Po celkem podrobném rozebrání fotonického krystalu jak je uveden na obrázku 4.1 nastává teď otázka, jakým způsobem by jej šlo modifikovat abychom obdrželi větší změny v transmisním spektru a to nejlépe v oblasti pásu obsahujícím vlnové délky, pro něž je transmise nepřípustná.

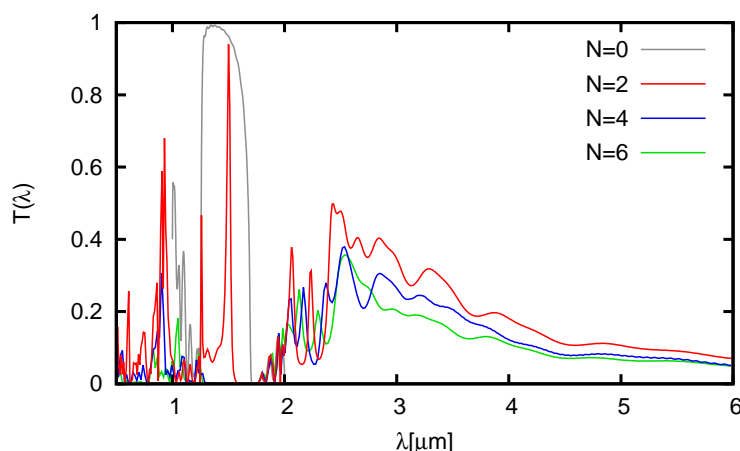
Zkusme zkonstruovat něco na způsob děrovaného vlnovodu popsaného v kapitole 3.5. Dosáhneme toho jednoduchým způsobem a to tak, že ve středu fotonického krystalu nebudeme uvažovat úplně prázdný pruh, ale necháme v něm N děr, jak je ukázáno na obrázku 4.7, kde $N = 2, 4, 6$.

Zaměříme se nejprve na transmisní spektrum pro širší oblast vlnových délek, graf 4.8. V grafu je pro názornost vykreslena i křivka odpovídající původnímu spektru ($N = 0$). Je vcelku zřejmé, že nejzajímavější oblast je opět mezi 1 a 2



Obrázek 4.7: Modifikace ve struktuře.

mikrometry, která obsahuje zakázaný pás, a také že nás bude zajímat pouze případ pro $N = 2$, jelikož při větším počtu děr již transmise napříč celým spektrem výrazně klesá.

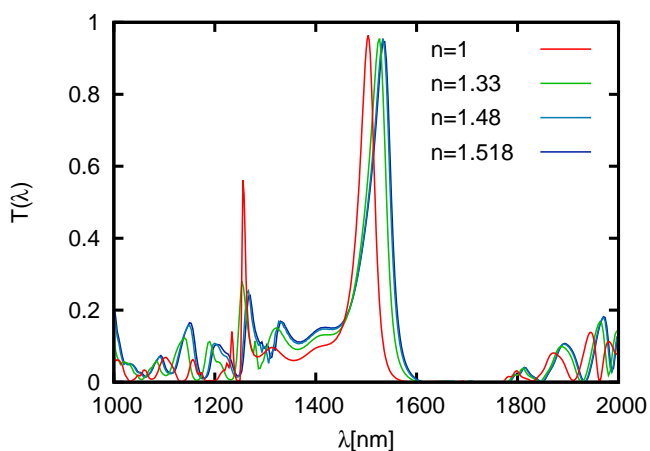


Obrázek 4.8: Transmisní spektra pro mírně upravenou geometrii PhC dle obrázku 4.7.

Vezměme si tedy užší spektrum, aplikujme do děr postupně stejné sloučeniny jako v předchozí kapitole a sledujme při tom transmisní spektrum. Výsledek je zobrazen v grafu 4.9.

Zakázaný pás se rozšířil na dvojnásobek, posun jeho levého okraje je hodně podobný posunu při původní geometrii, nicméně okraj zakázaného pásu už není tak ostrý jako v předchozím případě. Poloha peaku vyskytujícího se kolem 1500nm se v závislosti na indexu lomu mění o 25nm pro $n = 1,518$, což je skoro dvakrát méně než změna okraje zakázaného pásu při původní geometrii, která je navíc lépe detekovatelná.

Z výše řečeného rozboru lze usoudit, že tato modifikace nebyla příliš přínosná a k detekci je pravděpodobně lepší použít původní geometrii. Je samozřejmě možné dále uvažovat různé poloměry děr umístěných ve vlnovodu, nebo také změnu jejich polohy. Vstupujících parametrů je zde zkrátka opravdu hodně.



Obrázek 4.9: Transmise pro upravený fotonický krystal, kde ve středu vlnovodu byly ponechány dvě díry vzdáleny od sebe $2a$, pro různé hodnoty indexu lomu v dírách.

Závěr

Na začátku práce jsme vycházeli z diferenciální podoby Maxwellových rovnic, které byly pomocí centrálních diferencí aproximovány na rovnice použitelné pro numerické řešení v počítači. Tímto způsobem jsme obdrželi tzv. vývojové rovnice konkrétně pro jednu dimenzi a pro dvě různé polarizace ve dvou dimenzích.

Stabilita numerického řešení je zajištěna pomocí správné volby časového kroku na prostorovém rozlišení, jak bylo odvozeno z podmínky konečné rychlosti šíření signálu. V jedné dimenzi lze navíc dosáhnout při volbě tzv. magického časového kroku nejen aproximativního, ale dokonce přesného řešení vlnové rovnice.

Částečně jsme také zmínili, jakým způsobem je nutné nastavit okrajové podmínky, aby bylo možné simulovat nejen volný prostor, ale i nekonečně rozlehlé materiály. K nastavení takovýchto okrajových podmínek se používají různé nefyzikální materiály a další vcelku sofistikované metody, proto bylo toto téma zmíněno jen okrajově.

Za účelem získání transmisního a reflexního spektra jsme definovali diskrétní Fourierovu transformaci, z níž jsme pomocí Poyntingova vektoru a toku energie následně schopni vypočítat transmisní či reflexní koeficient závislý na frekvenci.

Simulace byla dále podrobena zkoušce na strukturách, jejichž optickou odezvu buď umíme vypočítat analyticky, nebo které byly simulovány pomocí jiné simulace, jejíž výsledky lze považovat za správné. V jedné dimenzi jsme zkoumali absorpci ve vodivém prostředí, kde je elektromagnetická vlna exponenciálně tlumena, a planparalelní dielektrickou desku, k níž přísluší Airyho funkce.

Ve dvou dimenzích to pak byla jednoduchá dvojštěrbina, kde jsme se spokojili s výsledkem rozložení celkové intenzity světla v prostoru, na kterém jdou dobře vidět interferenční maxima. Pokračovali jsme výpočtem zatočeného vlnovodu a vlnovodu, ve kterém byly vyvrtány díry. U něj jsme zkoumali posun rezonančního peaku při změnách indexu lomu v dírách. Bylo zde též nastíněno jak se vypořádat s rozhraním mezi materiály s odlišnými vlastnostmi.

V poslední kapitole jsme se věnovali fotonickým krystalům nejdříve obecně a poté jsme jednu konkrétní strukturu podrobili detailní analýze, kde jsme zkoumali změny ve spektru při různém rozlišení, při nepřesnostech ve výrobě, při různých sloučeninách aplikovaných do děr fotonického krystalu a také při malé modifikaci geometrického uspořádání.

Seznam použité literatury

- [1] LAMPORT, Leslie. *TEX: A Document Preparation System*. 2. vydání. Massachusetts: Addison Wesley, 1994. ISBN 0-201-52983-1.
- [2] ELSHERBENI, Atef and DEMIR, Veysel. *The Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetics with MATLAB Simulations*. Raleigh: Scitech Publishing, 2009. ISBN 9781891121715.
- [3] CHU, S. T. and CHAUDHURI, S. K. Finite-difference time-domain method for optical waveguide analysis. *Progress In Electromagnetics Research* [online]. Vol. 11, 1995, **255**(45) [cit. 30.4.2013]. ISSN 1070-4698. Dostupné z: <http://www.jpier.org/PIER/pier.php?volume=11>
- [4] SCHNEIDER, John B. *Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method* [online]. September 10, 2012, [cit. 13.5.2013]. Dostupné z: <http://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/index.php>
- [5] MALÝ, Petr. *Optika*. Univerzita Karlova v Praze: Nakladatelství Karolinum, 2008. ISBN 978-80-246-1342-0.
- [6] BERENGER, Jean-Pierre. A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves. *Journal of computational physics* [online]. Academic Press Inc., Vol. 114, Issue 2, October 1994. **185**(15) [cit. 25.4.2013]. ISSN 10902716, 00219991. Dostupné z: doi:10.1006/jcph.1994.1159s
- [7] JOHNSON, Steven G., JOANNOPOULOS, John D., SOLJAČIĆ, Martin. *Nanostructures and Computation Wiki* [online]. Meep Tutorial. Massachusetts Institute of Technology. Poslední změna 05:19, 29.10. 2012 [cit. 11.5.2013]. Dostupné z: http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep_Tutorial
- [8] JOHNSON, Steven G., JOANNOPOULOS, John D., SOLJAČIĆ, Martin. *Nanostructures and Computation Wiki* [online]. Meep Tutorial/Band diagram, resonant modes, and transmission in a holey waveguide Massachusetts Institute of Technology. Poslední změna 00:04, 18.5. 2010 [cit. 12.5.2013]. Dostupné z: http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep_Tutorial/Band_diagram%2C_resonant_modes%2C_and_transmission_in_a_holey_waveguide
- [9] SKIVESEN, Nina, TÊTU, Amélie, KRISTENSEN, Martin, KJEMS, Jørgen, FRANDBSEN, Lars H., BOREL, Peter I. Photonic-crystal waveguide biosensor. *Optics Express* [online]. Purdue University, Vol. 15, Issue 6, 2007, **3169**(7) [cit. 13.5.2013]. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OE.15.003169
- [10] *Wikipedia: Photonic crystal* [online]. Poslední změna 9.5. 2013 23:29. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Photonic_crystal
- [11] CUNNINGHAM, Brian T. Photonic Crystal Biosensors. *Conference Papers* [online]. Information Photonics, Charlotte, North Carolina, 6.5. 2005 [cit. 10.12.2012]. Dostupné z: <http://www.opticsinfobase.org/abstract.cfm?uri=IP-2005-ITuC1>

- [12] HOSSEINIBALAM, F., HASSANZADEH, S., EBNALI-HEIDARI, A., KARNUTSCH, C. Design of an optofluidic biosensor using the slow-light effect in photonic crystal structures. *Applied Optics* [online]. US Army Research Laboratory, Vol. 51, Issue 5, 2012, **568**(8) [cit. 13.5.2013]. ISSN 1559-128X. Dostupné z: doi:10.1364/AO.51.000568
- [13] ANTOS, R., VOZDA, V., VEIS, M. Plane Wave Expansion Method Using Complex Fourier Factorization in Modeling Photonic Crystal Sensors. *Sensors*. ISSN 1424-8220. (v recenzním řízení)
- [14] LAVRINENKO, A., BOREL P.I., FRANDBSEN L.H., THORHAUGE, M., HARPØTH, A., KRISTENSEN, M., NIEMI, T., CHONG, H.M.H. Comprehensive FDTD modelling of photonic crystal waveguide components. *Optics Express* [online]. Purdue University, Vol. 12, Issue 2, 2004, **234**(12) [cit. 13.5.2013]. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OPEX.12.000234

Seznam použitých zkratek

FDTD	finite-difference time-domain	název metody
PEC	perfect electric conductor	ideální elektrický vodič
PMC	perfect magnetic conductor	ideální magnetický vodič
CLF	Courant–Friedrichs–Lewy (condition)	podmínka stability
ABC	absorbing boundary condition	absorbující okrajové podmínky
PML	perfectly matched layer	perfektně absorbující vrstva
CPML	convolutional perfectly matched layer	konvoluční perfektně absorbující vrstva
DFT	discrete Fourier transform	diskrétní Fourierova transformace
TFSF	total-field/scattered-field (region)	označení oblasti, kde je generována rovinná vlna
NF-FF	near-field to far-field (transformation)	transformace blízkého pole do dalekého
PhC	photonic crystal	fotonický krystal