

شبیه‌سازی نانوجت فوتونیک و موجبر خمیده بهینه 60° ، با روش‌های عددی MMP و FDTD

تهمینه جلالی^۱، مرتضی زرگروشتری^۱، دانیل ارنی^۳

^۱ گروه فیزیک، دانشگاه شهیدچمران، اهواز

^۲ گروه فیزیک، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

^۳ گروه تئوری مهندسی برق، دانشگاه دایسبورگ، آلمان

چکیده - در این مقاله، روش دوبعدی تفاضل متناهی بازه زمانی با استفاده از گذردهی مؤثر ارائه می‌گردد. برای بررسی اعتبار این روش، از موجبر خمیده 60° بلور فوتونیک بهینه استفاده شده است. میزان عبور به دست آمده، بخوبی در توافق با روش‌های شبیه‌سازی دوبعدی دیگر نظیر روش دوبعدی المان مرزی و روش دوبعدی چندقطبی چندتایی می‌باشد. همچنین، با تابش موج تخت به اشکال مختلف ذرات نظیر کره، بیضی و لنز برای ضریب شکست‌های مختلف، نانوجت فوتونیک بهینه بسیار کانونی شبیه‌سازی گردیده، که پهنای آن کوچکتر از حدپراش است و تا چندین طول‌موج بدون پراش قابل‌ملاحظه‌ای منتشر می‌شود.

کلیدواژه- پراکندگی، روش عددی، نانوجت، فوتونیک، موجبر.

۱- مقدمه

هنگام شدن الگوریتم و رفتار قابل کنترل واگرایی با در نظر گرفتن نقاط نمونه فضایی را می‌توان نام برد [۲]. اگرچه یک موضوع مهم در شبیه‌سازی به روش FDTD دقت در روی مرزهای ماده است، که در این مقاله مورد بررسی قرار می‌گیرد. نانوجت فوتونیک^۲، از برخورد موج تخت به میکرواستوانه دی‌الکتریک با بهینه کردن اندازه و ضریب شکست ذرات استوانه‌ای شکل، برای اولین بار در سال ۲۰۰۴ توسط گروه تافلر تولید شد [۷-۳]. نور انتشار یافته کانونی شده غیرمیرا، زیر حد پراش، جایگزیده در امتداد خط برخورد نور فرودی و در قسمت سایه استوانه را نانوجت فوتونیک نامیدند. احتمال رفتن به زیر حد پراش، دارای کاربردهای بسیاری از جمله SNOM^۳، لیتوگرافی با قدرت تفکیک بالا^۴، ذخیره‌سازی اطلاعات^۵ اپتیکی و مغناطیسی

امروزه اپتیک پیشرفته، بخصوص در مقیاس نانو، منجر به ابزارهای مجتمع فوتونیک فشرده چندکاره فوق فشرده شده است. نانوفوتونیک در طی دهه گذشته رشد قابل ملاحظه‌ای داشته است [۱]. هدف اصلی آن کاهش وسایل فوتونیک و مدارهای فوتونیک واقعی بر روی تراشه به ابعاد نانومتری است. برای درک این موضوع، باید ابعاد وسایل فوتونیک را آنسوی حد پراش کاهش دهیم. اگر چه مشکلات مدل‌سازی این ساختارها و محدودیت‌ها در استفاده ابزارهای مدل‌سازی و شبیه‌های الکترومغناطیسی توسعه این وسایل را به تاخیر انداخته است. برای بررسی این ساختارها، روشهای محاسبات عددی اپتیکی بر پایه تقسیم بندی حجم مورد استفاده قرار می‌گیرد. یکی از این روشها، روش تفاضل متناهی بازه زمانی FDTD^۱ است، که از مزایای بسیار آن سادگی به

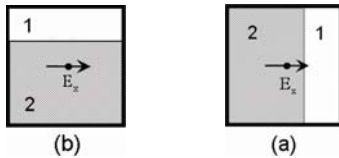
^۲ Photonic nanojet

^۳ Scanning near-field optical microscopy

^۴ High-resolution lithography

^۵ Data storage

^۱ Finite difference time domain



شکل ۱: سلول نیمه پر (a) مرز عمود به مؤلفه میدان الکتریکی (b) مرز موازی با مؤلفه میدان الکتریکی

در نظر گرفته، که σ پهنای پالس و t_0 زمان تأخیر است. پهنای پالس به گونه‌ای انتخاب شده است که پهنای باند موجبر خمیده بلور فوتونیک را می‌پوشاند. از شرط مرزی جذبی CPML¹² استفاده گردیده است. سطوح دی الکتریک با شکل اختیاری، سلولهای FDTD نیمه پر تولید می‌کنند، که در روش معمولی این سلولها با سلولهای خالی یا کاملاً پر تقریب زده می‌شوند. بنابراین نمایش سلولها به صورت عددی با شکل واقعی جسم متفاوت و سبب خطا در محاسبات می‌گردد. برای کاهش این گونه خطاها باید از شبکه بسیار ریز استفاده کرد که باعث افزایش زمان پردازش و حافظه مورد نیاز را فراهم می‌آورد. یک روش کارا برای این موارد استفاده از گذردهی مؤثر برای سلولهای نیمه پر است. زمانی که مرز عمود به مؤلفه میدان الکتریکی باشد، ثابت دی الکتریک مؤثر می‌تواند توسط متوسط سطح وزنی ثابت دی الکتریک بدست آید.

$$\epsilon_{||} = f\epsilon_2 + (1-f)\epsilon_1 \quad (1)$$

که f فاکتور پرشدگی سلول (نسبت مساحت پر شده سلول به مساحت کل سلول) و ϵ_1 ، ϵ_2 گذردهی محیط ۱ و ۲ می‌باشند. میدان الکتریکی زوایای مختلف با مرز ناپیوستگی گذردهی دو محیط می‌سازد. گذردهی مؤثر باید برای هر دو مؤلفه‌های عمود و موازی، میدان الکتریکی بدست آید. برای میدان الکتریکی موازی معادله (۱) در نظر گرفته شده است (شکل ۲). اگر میدان الکتریکی عمود به مرز باشد، با استفاده از قانون فاراده گذردهی مؤثر به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\epsilon_{\perp} = \left(\frac{f}{\epsilon_2} + \frac{(1-f)}{\epsilon_1} \right)^{-1} \quad (2)$$

برای سطوح انحنادار، مولفه‌های میدان از برهم‌نهی گذردهی مؤثر عمود و موازی با توجه به زاویه بین میدان الکتریکی و

پیشرفته و تصویر فلئورسانس سلولهای زنده^۶ می‌باشد. همچنین برای تکنیک‌های فوق میکروسکوپی^۷ با استفاده از نور مرئی برای یافتن و تصویرگیری نانو ذرات^۸، نظیر پروتئین‌ها و تک ملکول‌ها^۹ مفید است [۳-۷]. بنابراین، این فرآیند در شاخه‌های بیولوژی، مهندسی پزشکی و علم مواد کاربرد دارد.

۲- روش‌های عددی

در حالی که ابعاد ساختارها به طول موج اپتیکی (نانومتر) کاهش می‌یابد، اعتبار تقریب‌های محاسبات عددی معادله-های الکترومغناطیسی از بین می‌رود و امروزه شبیه‌سازی وسایل فوتونیک در ابعاد نانو از مسائل مهم روز به شمار می‌رود. یکی از این روشها، روش FDTD است، در این روش تقسیم بندی مدل اغلب با شبکه بندی دکارتی انجام می‌شود، که این شبکه‌های اعمال شده بر اجسام اختیاری انحنادار، منجر به سلولهای مربعی نیمه پر با گذردهی دی الکتریک متفاوت می‌شود [۸]. به دلیل ابعاد بسیار ریز ساختار، منجر به افزایش خطای محاسباتی می‌گردد. در اینجا روش جدیدی برای محاسبه و اعمال کردن گذردهی در الگوریتم یی^{۱۰} می‌پردازیم. روش دیگر، روش چند قطبی چندگانه (MMP^{۱۱}) است، این روش بسیار دقیق و سریع می‌باشد، ولی برای گذاردن چندقطبی‌ها در مسئله باید با سعی و خطا جای بهینه آنها را یافت و چیدن درست آنها به گونه‌ای که خطا می‌نیمم شود، بسیار دشوار است [۹].

۲-۱- FDTD تعمیم یافته

روش FDTD به دلیل توانایی در حل معادلات ماکسول در دامنه زمان برای ساختارهای پیچیده با ابعاد و شکل دلخواه از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. با شبکه بندی فضای مدلسازی و اختصاص خواص اپتیکی به سلولهای این شبکه، ساختار مورد مطالعه و میدان‌های برهم‌کنشی تعریف می‌گردند. چشمه انتشار موج در موجبر به شکل $e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}}$

⁶ Fluorescence imaging of living cells

⁷ Ultramicroscopy technique

⁸ Nanoparticles

⁹ Single molecule

¹⁰ Yee

¹¹ Multiple Multipole method

¹² convolutional perfectly matched layers

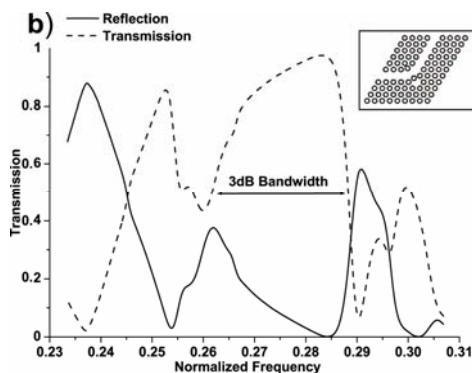
خطاهای ناشی از جفت نشدن در روی مرز را محاسبه می-کند و بدین صورت می-توان با تغییرات در موقعیت چندقطبی‌ها خطا را کمینه کرد. در نهایت به دلیل همگرایی سریع پاسخ‌های MMP نتایج بسیار دقیقی در میدان بسیار نزدیک، یعنی جایی که نانوجفت مشاهده می-شود، به دست می-آید.

۳- مقایسه و نتایج

در این مقاله، به منظور سنجش اعتبار کد FDTD از موجبر خمیده 60° بلور فوتونیک استفاده نموده‌ایم. همچنین در ادامه با استفاده از روش MMP و FDTD سعی در یافتن نانوجفت فوتونیک بهینه پرداخته‌ایم.

۳-۱- موجبر خمیده 60° بلور فوتونیک

بلورهای فوتونیک دارای باندهای ممنوعه می-باشند، که در این بازه، نور مجاز به عبور نمی-باشد. البته با ایجاد نقص خطی در بلور فوتونیک، نور مجاز به عبور با بعضی طول موجهای مشخص می-شود. به منظور داشتن گاف باند ممنوعه پهن طول موج اعمالی 1550 نانومتر، فاکتور پرشدگی 35% و با توجه به هندسه موجبر، قطبش الکتریکی عرضی (TE) انتخاب شده است. در موجبرهای دی‌الکتریک معمولی، شعاع خمیدگی محدود به چندین میلیمتر می-باشد، ولی در بلور فوتونیک به دلیل اینکه نور قویاً توسط ساختار تناوبی هدایت می-شود، موجبر اجازه خمش نور را در ابعاد نانو، قابل مقایسه با طول موج می-دهد. موجبر ساختار شش وجهی و خمشی با زاویه 60° دارد. پهنای باند آن تا 29% کل گاف باند ممنوعه افزایش یافته و بیشینه بازده عبور 96% است (شکل ۲) [۱۰]. برای بررسی اعتبار روش، نتایج



شکل ۲: عبور و انعکاس موجبر خمیده 60° بلور فوتونیک بهینه با جابجایی حفره‌های بحرانی در ناحیه خمیده بلور

مرز می-باشند. گذردهی مؤثر با متوسط‌گیری از زاویه میدان در یک سلول به صورت رابطه زیر می-باشد،

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{\parallel} \cos^2 \theta + \varepsilon_{\perp} (1 - \sin^2 \theta) \quad (3)$$

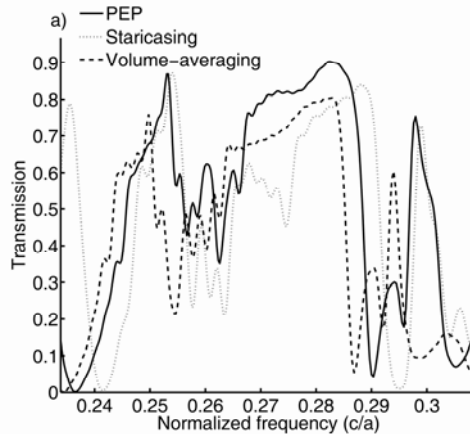
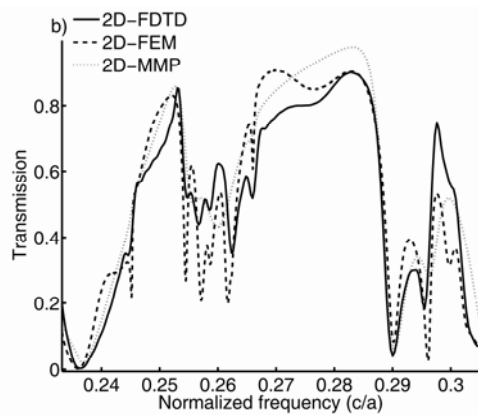
که $\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ زاویه میدان الکتریکی و بردار عمود بر سطح است. در این روش نیازی به تغییر الگوریتم بی نیست و تنها با جایگزینی گذردهی با گذردهی مؤثر می-توان برای مؤلفه‌های میدان الکتریکی آن را در الگوریتم بی اعمال کرد. برای به دست آوردن پاسخ فرکانسی مقادیر، از تبدیل فوریه گسسته استفاده گردیده است [۱۱].

۲-۲- شبیه‌سازی دو بعدی MMP

برنامه چندقطبی چندگانه یک روش نیمه تحلیلی مرزی در بازه فرکانس است، که به نتایج بسیار دقیقی منجر می-شود [۹]. در این برنامه، تکنیک جفت شدن نقطه تعمیم یافته GPM^{13} اعمال شده است، که مانده وزنی شرایط پیوستگی میدان الکتریکی در یک دسته نقاط جفت شده، که در امتداد مرزها بین دامنه‌های همگن توزیع شده‌اند، را مینیمم می-کند. کد MAX-1 به کاربر اجازه می-دهد که فرمول‌های تحلیلی را به کار گیرد. در روش منابع کمکی MAS^{14} که به روش چندقطبی چندتایی بسیار مرتبط است، میدان پراکنده شده خارج جسم با یک دسته منابع تک قطبی (چندقطبی مرتبه اول) که در امتداد خطوط کمکی مرز جسم قرار دارد، تقریب زده می-شود. برای مدلسازی میدان داخل جسم باید موقعیت مراکز چندقطبی-ها را در اطراف آن قرار داد و توسط یک دسته بسط-های بسط مبدأ مختلط تقریب زد. بسیار مهم است بدانیم درجه آزادی بسیاری در قرار دادن منابع کمکی (تک قطبی‌ها) در امتداد خطوط کمکی وجود دارد. برای چندقطبی استاندارد علاوه بر موقعیت، مرتبه آنها را نیز باید تعیین کرد. یافتن یک دسته بهینه از چندقطبی‌ها برای یک پیکربندی بسیار زمانبر است و احتیاج به تحلیل بسیار زیادی دارد. اما کد MAX-1 یک الگوریتم برای یافتن یک دسته کارا و تا حدودی بهینه را داراست. کد MMP امکان محاسبه

¹³ Generalized point matching

¹⁴ Method of auxiliary sources



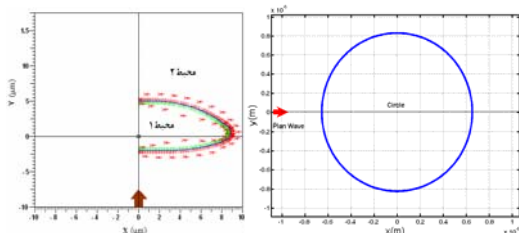
شکل ۳: (a) مقایسه روش‌های FDTD مختلف موجبر خمیده 60° بلور فوتونیک بهینه (b) مقایسه روش‌های شبیه‌سازی مختلف موجبر خمیده 60° بلور فوتونیک بهینه.

جا، ما به بررسی اشکال مختلفی نظیر دایره، بیضی و لنز پرداخته‌ایم و به بررسی جزئیات خواص نانوجت‌های گسیل شده از آنها و میزان کارایی آنها می‌پردازیم. ضریب شکست محیط اطراف جسم را یک فرض کرده‌ایم، طول موج پرتو فرودی 500nm می‌باشد. در شکل (۴) نحوه گذاشتن قطب‌ها در صفحه نمایش داده شده است. البته گذاشتن بهینه آنها کار بسیار مهم و زمان‌بری می‌باشد، منتها با استفاده از خطاهای به دست آمده در نتایج و روش سعی و خطا می‌توان جای چندقطبی‌ها را به گونه‌ای یافت که خطاها و زمان محاسبات نیز کوتاه گردند. چندقطبی‌ها از مرتبه ۲، یعنی دوقطبی می‌باشند. همان طور که در شکل (۱) مشخص است تعداد چند قطبی‌ها در انحنای بیشتر است، تا خطای ناشی از تقریب در آن مکانها را کاهش دهد. همچنین به دلیل تقارن و کاهش زمان محاسبات و ذخیره‌سازی حافظه تنها از یک نیمه لنز استفاده شده است. در شکل (۶) نمای نانوجت فوتونیک با مشخصات، لنز انحنای 10×1.5 و $10^{-7} \times 1.2$ سانتی‌متر و $n=1.76$ ، دایره به شعاع

محاسبه شده موجبر خمیده با روشهای FEM و MMP مقایسه شده که دقت الگوریتم داده شده را تأیید می‌کند. این روشها در نرم افزارهای تجاری فملمب و مکس ۱ وجود دارد [۱۲ و ۱۳]. ابعاد شبکه مربعی 67nm می‌باشد. ناحیه شبیه‌سازی در فضای محاسباتی 20×350 سلول می‌باشد و تعداد لایه‌های CPML برابر ۲۴ است. چشمه در وسط ورودی موجبر اصلی قرار گرفته است. در شبیه‌سازی FEM و FDTD قله اضافی در بازه 0.255 تا 0.266 مشخص است، که بواسطه تداخل مدهای عبوری و انعکاسی در ناحیه خمیدگی و مرز موجبر خمیده بلور فوتونیک است. ولی در MMP بدلیل اینکه تنها مدهای موجبر را برانگیخته کرده‌ایم، این قله دیده نمی‌شود. نتایج کلیه محاسبات برحسب کیفیت عبور و رفتار پهنای باند با یکدیگر بسیار خوب سازگار می‌باشد.

۳-۲- گسیل نانوجت فوتونیک

اخیرا شبیه‌سازی‌ها نشان داده‌اند که نه تنها یک استوانه دی‌الکتریک بسیار طویل بلکه کره و بیضوی دی‌الکتریک با قطر حدود ده طول موج قادر هستند تا نور را آن‌سوی حد پراش متمرکز کنند [۶-۲]. البته با توجه به ضریب شکست دی‌الکتریک، نقطه کانونی می‌تواند در بیرون و یا داخل جسم باشد و امتداد انتشار نیمه ماکزیمم پهنای کل^{۱۵} (FWHM) پرتو کوچکتر از طول موج باقی می‌ماند و پرتو (نانوجت فوتونیک) به شدت بسیار بالایی می‌رسد. در این



شکل ۴: از راست به چپ: روش FDTD خط، مرز دایره و فلاش موج تخت به عنوان برانگیختگی را نمایش می‌دهد. روش MMP نیم میکرولنز، خط راست مرز، علامت ستاره چندقطبی، فلاش موج تخت تابیده شده و هاشور میزان خطای برنامه را در محاسبه انحنای نمایش می‌دهد.

¹⁵ Full width half maximum

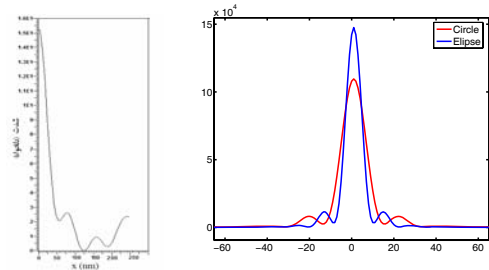
روش FDTD ارائه شده است. روش FDTD توافق خوبی با نتایج بدست آمده از MMP و FEM را دارا می‌باشد و محاسبات عددی نشان داده است که زمان پردازش و حافظه مورد نیاز کاهش می‌یابد. بررسی محاسبات عددی این مسئله نشان می‌دهد که روش MMP بسیار ساده، سریع و قابل استفاده بر روی کامپیوترهای شخصی می‌باشد.

سیاسگزار

از همکاری گروه اپتیک محاسباتی برای استفاده از نرم‌افزار MAX-1 صمیمانه تشکر می‌کنیم. این کار با پشتیبانی وزارت علوم، تحقیقات و فناوری و دانشگاه ETH زوریخ انجام شد.

مراجع

- [1] W. Bogaerts, "Nanophotonic waveguides in silicon-on-insulator fabricated with CMOS technology", *J. Lightwave Technol.*, 23, 401 (2005).
- [2] A. Taflove, S. Hagness, "Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time Domain Method" (Artech, Boston, MA, (2000).
- [3] A. V. Itagi, W. A. Challener, "Optics of photonic nanojets", *J. Opt. Soc. Am. A*, 22(12), 2847, (2005).
- [4] S. Lecher, Y. Takakura, P. Meyrueis, "Properties of a three-dimensional photonic jet", *Opt. Lett.* 30, 2641-2643, (2005).
- [5] Z. Chen, A. Taflove and V. Backman, "Photonic nanojet enhancement of backscattering of light by nanoparticles: a potential novel visible-light ultramicroscopy technique", *Opt. Express* 12, 1214-1220, (2004).
- [6] Z. Chen, A. Taflove, V. Backman, "Highly efficient optical coupling and transport phenomena in chains of dielectric microspheres", *Opt. Lett.* 30, 389, (2006).
- [7] T. Jalali, D. Erni, Ch. Hafner, "Molding the Emission of Photonic Nanojets by Different Particle Shapes", *OWTNM2006*, Italy(2006).
- [8] A. Mohammadi, H. Nadgaran, and M. Agio, "Contour-path effective permittivities for the two-dimensional finite-difference time-domain method", *opt. Express* 13, 10367 (2005).
- [9] Ch. Hafner, *Post-modern Electromagnetics*, John Wiley & Sons, Chichester (1999).
- [10] K. Rauscher, "Improved transmission for 60° photonic crystal waveguide bends", Diss. eth no. 16516, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, Zurich (2006).
- [11] T. Jalali, K. Rauscher, A. Mohammadi, D. Erni, Ch. Hafner, W. Baechtold, M.Z. Shoushtari, "Efficient effective permittivity treatment for the 2D-FDTD simulation of photonic crystals", *J. Comput. Theor. Nanosci.*, accepted (2006).
- [12] <http://max-1.ethz.ch/>
- [13] <http://www.comsol.com/>

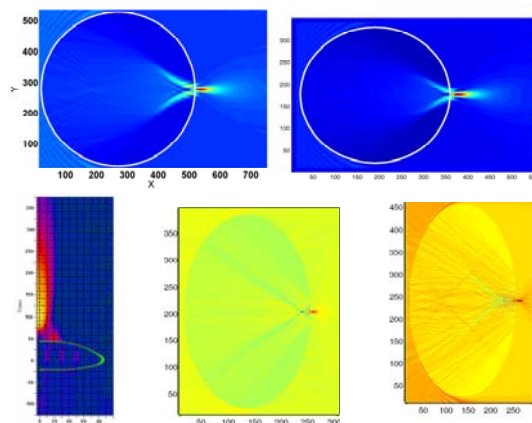


شکل ۵: شدت نانوجت فوتونیک در جهت عمود به راستای موج فرودی.

شکل ۵: شدت نانوجت فوتونیک در جهت عمود به راستای موج فرودی. $n=1/4$ و $R_y=0/9R_x=4/5\mu m$ بیضی‌ها $n=1/54$ و $5\mu m$ $n=2/4$ و $R_y=1/3R_x=6\mu m$ $n=2/1$ و $R_y=1/3R_x=6\mu m$ نمایش داده شده است. در لنز پهنا $W_{FWHM}=80$ nm و شدت 15×10^4 دایره پهنا $W_{FWHM}=240$ nm و شدت 11×10^4 بیضی پهنا $W_{FWHM}=230$ nm و شدت 15×10^4 می‌باشد [۷]. مقایسه اشکال مختلف نشان می‌دهد که میزان پهنا در لنز بیشتر است ولی شدت در بیضی بیشتر می‌باشد و شدت در لنز 10000 مرتبه کمتر از بقیه می‌باشد. مزیت لنزها این است که ساخت آنها در آزمایشگاه امکان‌پذیر باشد.

۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک روش ساده، کارا و سریع برای مدلسازی انتشار نور در محیط دی الکتریک با شکل اختیاری برای



شکل ۶: نانوجت فوتونیک تولید شده توسط موج تخت تابیده شده به دایره و بیضی افقی، بیضی عمودی و نیم نانوجت فوتونیک تولید شده توسط موج تخت تابیده شده به لنز نمایش داده شده است. با مشخصات، ردیف اول از راست به چپ، بیضی $R_y=0/9R_x=4/5\mu m$ و $n=1/4$ دایره به شعاع $5\mu m$ و $n=1/54$ ، ردیف اول از راست به چپ، بیضی‌ها $R_y=1/3R_x=6\mu m$ و $n=2/1$ و $R_y=1/3R_x=6\mu m$ و $n=2/4$ ، لنز انحنای $1/5 \times 10^{-8}$ و $1/2 \times 10^{-7}$ سانتی‌متر و $n=1/76$.

Optimized 60° Photonic Crystal Waveguide Bend and Photonic Nanojet Simulation, by FDTD and MMP Method

T. Jalali^{1,2}, M. Z. Shoushtari¹ and D. Erni³

¹Physics Department, Shahid Chamran University, Ahvaz, Iran

²Physics Department, Persian Gulf University, Bushehr, Iran

³General and Theoretical Electrical Engineering, University of Duisburg-Essen, Duisburg, Germany

Abstract- In this paper, the two-dimensional Finite-Difference Time-Domain method by using an efficient effective permittivity schemes is presented. For validation, a 60° photonic-crystal waveguide bend is used. The obtained transmission agrees very well with other two-dimensional simulation method such as the two-dimensional finite-element method and the two-dimensional multiple multipole method. Particles shaped as e.g. spheres and ellipses with different refractive indices have been studied under plane wave illumination that has a tightly-focused photonic nanojet. Their waists are smaller than the diffraction limit, they propagate over several optical wavelengths without significant diffraction and the beam reaches a high intensity.

Keywords: Computational methods, Nanojet, Photonic, Scattering, Waveguide.

PACSNo: 0706,