

# Simulation einer Microdisk mit CST/MWS

Sven Backhove, Weiye Cheng

**Abstract**—Es werden verschiedene Möglichkeiten in CST untersucht, Simulationszeiten von Whispering Gallery Modes in einer Microdisk zu reduzieren. Dazu werden zuerst geeignete Simulationseinstellungen bestimmt und anschließend das AR-Filter in der Datenaufbereitung analysiert. Zur Bewertung der Ergebnisse werden die Resonanzfrequenzen und Güten bestimmt.

**Index Terms**—whispering gallery mode, microdisk, ar-filter CST, microwave studio.

## I. EINLEITUNG

**M**ICRODISKS sind optische Halbleiternikrolaser und zeichnen sich durch einen hohen Güte-Faktor, einfache Herstellung und hohe Integrierbarkeit aus. Ein angeregtes Feld breitet sich am Rand der Disk als sogenannte *whispering gallery mode* (WGM) aus. Das Innere der Disk bleibt, je nach Anregung, feldfrei.

## II. KLASSISCHE SIMULATION

Zunächst wird eine klassische Simulation der Disk vorgenommen und passende Simulationseinstellungen bestimmt. Im 2. Teil der Ausarbeitung dienen die Ergebnisse der klassischen Simulation als Referenzergebnis für das dort vorgestellte Verfahren.

### A. Microdisk

Die Disk besteht aus 3 Schichten. 2 äußere Schichten mit der Höhe  $28nm$  aus ZnMgSe mit  $\epsilon_{r,ZnMgSe} = 8,9$  und einer mittleren Schicht der Höhe  $10nm$  aus ZnSe mit  $\epsilon_{r,ZnSe} = 9,1$ . Die Gesamthöhe der Disk beträgt  $h_d = 66nm$ . Da sich WGM nur am Rand der Disk ausbreiten, wird auf die Simulation eines Sockels verzichtet. Der Radius beträgt  $r = 0.25\mu m$ . Um  $E_z$ - und  $H_z$ -Komponenten gleichzeitig anzuregen, sind fünf Dipole in die mittlere Schicht eingebracht, wie in Fig. 1a gezeigt. Ein Dipol in  $\vec{e}_z$ -Richtung und vier Dipole als Leiterschleife in der x-y-Ebene. In Fig. 1b sind in grün die Feldmesspunkte zur Aufnahme des Zeitsignals und in rot die Anregungen durch die Dipole gezeigt.

### B. Postprocessing

Mit MATLAB wird die diskrete Fouriertransformation (DFT) des Zeitsignals der CST-Simulation bestimmt. Anhand der DFT wird anschließend die Güte (Q) berechnet. Zur Berechnung der DFT, wird die Formel

$$F(k) = \sum_{l=0}^{N-1} f(l) \cdot \exp(-2\pi j \frac{l \cdot k}{N}) \quad (1)$$

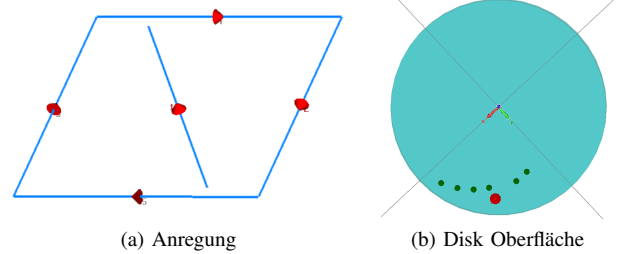


Fig. 1. Anregung der Disk

verwendet, mit  $N =$  Anzahl der Frequenzstützstellen. Zur Bestimmung der Güte wird die  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ -Bandbreite, mit den Frequenzen  $f_1$  und  $f_2$ , zur Resonanzfrequenz  $f_{res}$  bestimmt und anschließend mit

$$Q = \frac{f_{res}}{f_2 - f_1} \quad (2)$$

berechnet. In Fig. 2 sind die DFT der  $E_z$ - und  $H_z$ -Komponenten gezeigt. Im Folgenden werden nur die Moden mit der höchsten Resonanzfrequenz betrachtet, da zu erwarten ist, dass eine Abweichung der Güten und Resonanzfrequenzen durch verschiedene Simulationseinstellungen (Randabstand, Symmetrieebenen, Gitterauflösung) dort am stärksten zu bemerken sind.

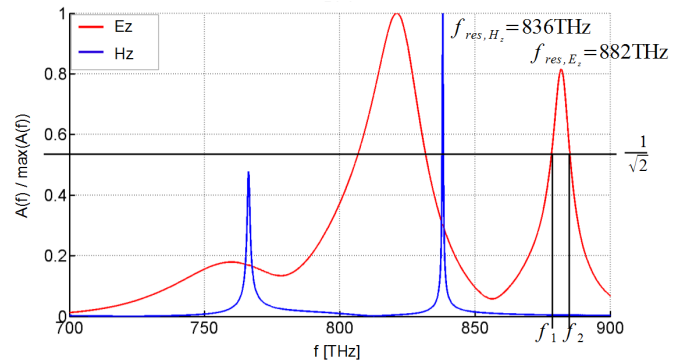


Fig. 2. DFT und  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ -Bandbreite

### C. Simulationseinstellungen

Die Simulationseinstellungen sind so zu bestimmen, dass die Güte sowie die Resonanzfrequenz genügend konvergieren und die Simulationszeit dabei möglichst gering ist. Dazu wird zunächst der Randabstand festgelegt, anschließend werden zur Bestimmung der minimalen Gitterzellen pro Wellenlänge Symmetrieebenen eingefügt. Simuliert wird ein Frequenzbereich von  $700THz$  bis  $900THz$ .

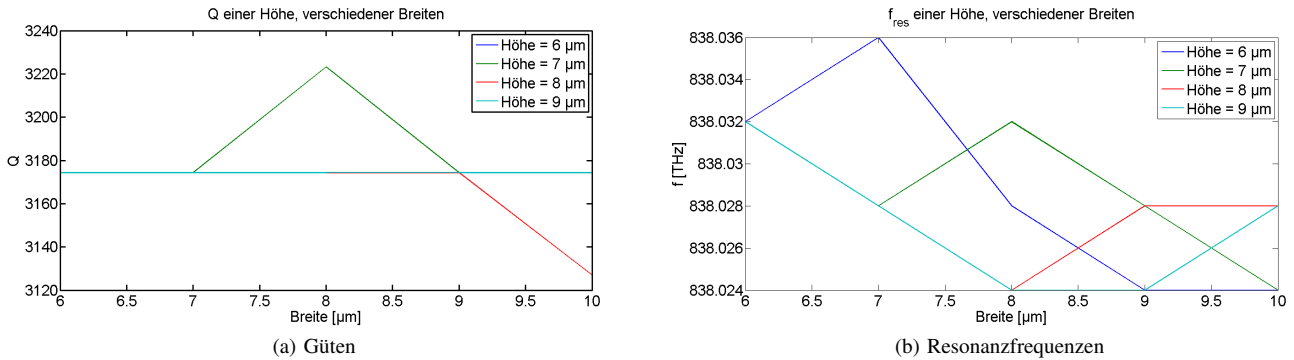


Fig. 3. Konvergenzkurven zur Variation des Randabstands

#### D. Bestimmung des Randabstands

Zunächst wird ein offener Rand gewählt, um Reflexionen zu vermeiden. Das Energieabbruchkriterium liegt hier bei  $-40dB$ , um die Simulationszeit zu verkürzen.

Der Randabstand wird durch 2 Parameter variiert, die Höhe in  $\vec{e}_z$ -Richtung von  $1 \cdot h_d$  bis  $9\mu m$  und die Breite in  $\vec{e}_x$ - bzw.  $\vec{e}_y$ -Richtung von  $1 \cdot r$  bis  $10\mu m$ .

Zur Bestimmung des Randabstands ist jeweils eine Konvergenzkurve für die Güten und Resonanzfrequenzen der  $H_z$ -Komponenten erzeugt worden, die  $E_z$ -Komponenten sind hier nicht weiter zu betrachten, da dort die Güten wesentlich schlechter ( $Q \approx 50$ ) im Vergleich zu den  $H_z$ -Komponenten sind.  $Q$  und  $f_{res}$  für eine Höhe sind in Fig. 3 über die Breiten aufgetragen, um zu sehen, ob sie gegen einen Wert konvergieren. In Fig. 3a erkennt man zwei starke Abweichungen, die durch die zu geringe Anzahl an Frequenzstützstellen bei der Bestimmung des Spektrums (hier 50001) hervorgerufen werden, wodurch die  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ -Bandbreite nicht richtig bestimmt werden kann. Um diese Abweichungen zu vermeiden, kann entweder ein Spektrum mit mehr Frequenzstützstellen bestimmt oder die Funktion interpoliert werden.

In Fig. 3b ist  $f_{res}$  schon gut konvergiert, die Schwankungen liegen im GHz-Bereich, d.h. im Promillebereich.

Der Rand wird somit zu  $6\mu m$  Höhe und  $8\mu m$  Breite gewählt.

#### E. Symmetrieebenen

Die Anzahl der Gitterzellen, und damit die Simulationszeit, kann stark mithilfe von Symmetrieebenen verkleinert werden. Bei einem zylindrischem Körper, wie die hier betrachtete Disk, können alle 3 möglichen Symmetrieebenen genutzt und damit das Rechengebiet auf  $1/8$  verkleinert werden. Dabei ist zu beachten, welche Randbedingungen die Symmetrieebenen haben.

In Fig. 4 sind die gewählten Symmetrieebenen gezeigt. Dadurch, dass in der  $y$ - $z$ -Ebene  $E_{tan} = 0$  gewählt ist, ist die  $H_{(z,1,6)}$  Mode nicht mehr ausbreitungsfähig. Da allerdings nur die höhere  $H_{(z,1,7)}$  Mode von Interesse ist, aufgrund der höheren Resonanzfrequenz, entsteht hierdurch kein Problem.

#### F. Gitterauflösung

Die Auflösung des Gitters, bezeichnet mit dem Parameter *lines per wavelength* ( $l_n$ ), liegt in CST standarmäßig bei

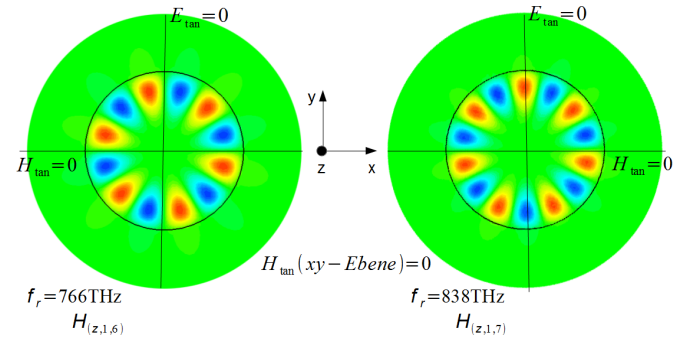


Fig. 4. Symmetrieebenen

$l_n = 10$ . Um zu überprüfen, ob diese Gitterauflösung ausreichend ist, ist  $l_n$  für 20, 30 und 40 *lines per wavelength* variiert worden. Bei einem Vergleich von  $l_n = 30$  zu  $l_n = 40$  ist eine Abweichung zu der Resonanzfrequenz von  $0,05\%$  zu beobachten.

#### G. Simulation des vorgestellten Setups

Verwendet man das bestimmte Simulationssetup, erhält man knapp über 101 Millionen Gitterzellen.

Diese Anzahl an Unbekannten ist leider nicht mit den vorhandenen 8GB RAM des Computers simulierbar, weshalb ein Mittelweg aus Randabstand und Gitterauflösung zu wählen ist. Mit 60 Millionen Gitterzellen ist ein Rand von  $6\mu m \cdot 6\mu m$  (Höhe  $\cdot$  Breite) und  $l_n = 20$  gewählt worden.

Nach einer Simulationsdauer von ca. 309 Stunden ist die Energie des Zeitsignals auf  $-80dB$  abgeklungen. Die Güte beträgt  $Q = 3816$  und die Resonanzfrequenz  $f_{res} = 837,7THz$

Sven Backhove

### III. AUTOREGRESSIVE (AR)-FILTER

Aufgrund der hohen Güte der Microdisk für die Ausbreitung der  $H_z$ -Komponente ist die Simulationszeit bis zum Erreichen des Energieabbruchkriteriums sehr lang. Verkürzt man die obige Simulation, indem man diese bereits bei  $-8dB$  anstatt bei  $-80dB$  abbricht, erhält man ein Spektrum mit starkem Leakageeffekt (s. Fig. 5).

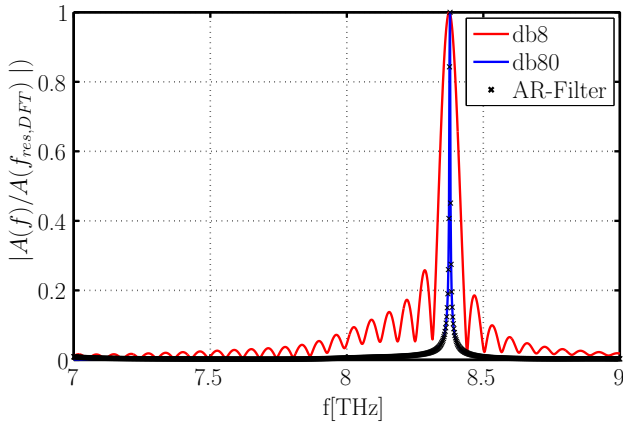


Fig. 5. Spektrum zur Darstellung des Leakageeffekts. Gezeigt ist das Spektrum des -80dB und -8dB-Signals und der Amplitudengang des AR-Filters.

Berechnet man jedoch das Spektrum nicht über die DFT des verkürzten Zeitsignals, sondern über den Amplitudengang der Übertragungsfunktion eines AR-Filters erhält man ein "Spektrum" ohne Leakageeffekte (Fig. 5). Dabei prädiziert das rekursive AR-Filter mit seinen Filterkoeffizienten aus dem kleinen Ausschnitt den Gesamtverlauf des Zeitsignals. Eine zeitdiskrete Fouriertransformation der zeitdiskreten Definitionsgleichung liefert die Übertragungsfunktion des Filters. Durch den in der Regel kleineren Ausschnitt, der zur Berechnung des AR-Filters nötig ist, wird Simulationszeit ohne spektrumverzerrende Leakageeffekte eingespart. Folgend wird die Theorie des AR-Filters näher erläutert und die Einstellmöglichkeiten des in CST vorimplementierten AR-Filters vorgestellt und untersucht. Die Analysen werden an der bis -8dB gedämpften  $H_z$ -Komponente ausgeführt; als Referenz dienen die Ergebnisse der -80dB Simulation. Zur Auswahl der besten Paramtereinstellung werden Konvergenzanalysen zu den relativen Abweichungen zur Referenzgüte  $\Delta Q_{rel}$  und zur Referenz-Resonanzfrequenz  $\Delta f_{res,rel}$  durchgeführt.

### A. Theorie

Das AR-Filter ist ein rekursives Prädiktionsfilter und definiert über die Differenzgleichung:

$$y(n) = \sum_{k=1}^N c_k y(n-k) \quad (3)$$

Wobei  $c_k$  die Filterkoeffizienten und  $y$  das Ausgangssignal des Filters darstellen. Mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate wird das Spektrum  $\underline{S}(j\omega)$  über den Amplitudengang  $\underline{Y}(j\omega)$  des AR-Filters approximiert:

$$\int_{w=-\infty}^{\infty} |\underline{S}(j\omega) - \underline{Y}(j\omega)|^2 d\omega = \min \quad (4)$$

Da hier jedoch zeitdiskrete Zeitsignale vorliegen überführt man dieses Optimierungsproblem zunächst mit Hilfe des Parseval'schen Satzes in den Zeitbereich und substituiert anschließend die zeitkontinuierliche Variable mit der Zeitdiskreten  $n := n \cdot T_{samp}$ ,  $n = 1 \dots N$ ,  $T_{samp} = 1/f_{samp}$ . Für die zeitdiskrete Bestimmungsgleichung ersetzt man die

Integration mit einer unendlichen Summe und beschränkt  $n$  zusätzlich durch ein Rechteckfenster der Länge  $M$  an der Stelle  $n = m$ . Daraus folgt (5), der zu entnehmen ist, dass der Rechenaufwand und die Simulationszeiten sich stark verringern, wenn  $M$  und  $m + M$  deutlich kleiner sind als der Datensatz für die Berechnung der DFT.

$$\sum_{n=m}^{m+M} |s(n) - y(n)|^2 = \min, M \geq 2 \cdot N \quad (5)$$

Die Stabilität eines solchen AR-Filters ist über den Schur-Cohn-Test nachweisbar (s. [2]). Hierbei gilt: Je höher das Verhältnis von  $M/N$  ist, desto gesicherter ist die Stabilität des Filters. Ist das so berechnete Filter instabil, ist zunächst  $N$  zu verringern, damit der Berechnungsaufwand nicht durch Vergrößerung von  $M$  steigt. Bringt auch das kein stabiles Filter, ist schließlich  $M$  sukzessive zu erhöhen.

### B. AR-Filter in CST

Im Folgenden wird die Umsetzung des AR-Filters in CST analysiert und die Parameter und deren Einfluss auf das Approximationsergebnis erläutert. Dazu werden vereinzelte Parameter variiert, wobei die nicht betrachteten Parameter vor-eingestellt bleiben.

1) *First time step*: Der *first time step* (fts) entspricht dem, in der Theorie beschriebenen, ersten Zeitwert  $m_1$  des Beobachtungsfensters (s. Fig. 6). In resonanten Strukturen mit hohen Güten, wie der vorliegenden Microdisk, ist darauf zu achten, dass fts an einer Stelle des Zeitsignals liegt, an der die Feldkomponente bereits resoniert und das strukturspezifische Verhalten aufweist. Wählt man fts zu weit am Anfang streuen Laufzeiteffekte stark in das Ergebnis ein.

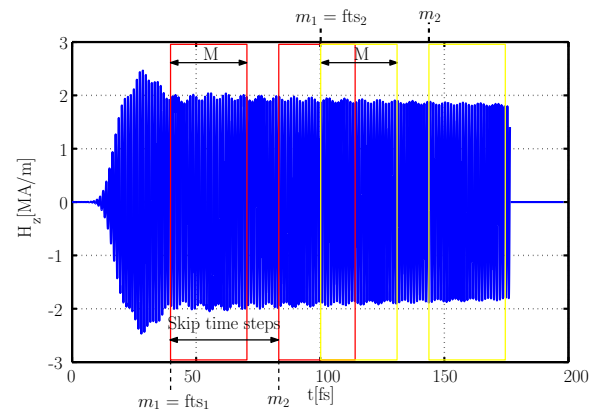


Fig. 6. Ausschnitt aus -8dB-Signal mit *first time step* (fts), Beobachtungsfensterlänge  $M$  und *skip time steps*

Für die Konvergenzanalyse wird die Frequenzauflösung der CST-Rohdaten nach Absch. II-D, sowohl für die DFT als auch den Amplitudengang des AR-Filters, erhöht ( $n = 100001$ ). Der Amplitudengang wird hierzu mit der Spline-Interpolation interpoliert, die im Vergleich zur linearen und kubisch-hermiteschen Interpolation den geringsten Fehler für die Güte und Resonanzfrequenz aufweist und den Verlauf am besten nachstellt. Eine Variation des Zeitpunkts für fts liefert

die Konvergenzverläufe  $\Delta Q_{rel}$  und  $\Delta f_{res,rel}$  in Fig. 7, in denen deutlich zu erkennen ist, dass eine Wahl von  $fts$  zu weit am Anfang einen großen Fehler zur Folge hat. Ab einem  $fts = 60 fs$  konvergieren beide Fehler zu konstanten Werten von  $\Delta Q_{rel} \approx 1.54\%$  und  $\Delta f_{res,rel} \approx 0.00024\%$ . Die geringen relativen Fehler zeigen die Güte der Approximation des Spektrums durch das AR-Filter.

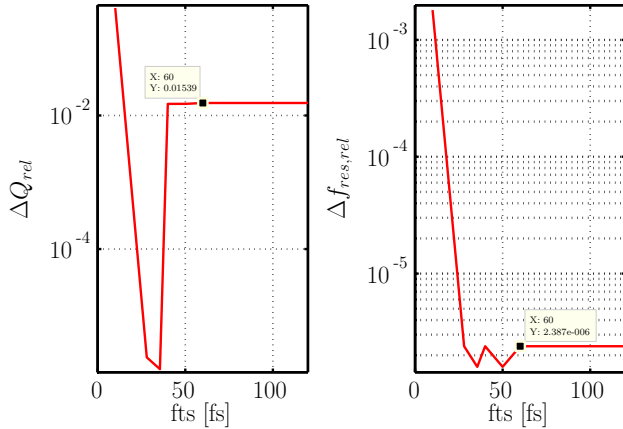


Fig. 7. Konvergenzanalyse  $\Delta Q_{rel}$  und  $\Delta f_{res,rel}$  bei Variation von  $fts$

Für Folgeuntersuchungen wird das  $fts$  gewählt bei dem beide Fehler konvergieren:  $fts = 60 fs$ .

2) *Skip time steps*: CST berechnet das AR-Filter für Zeiten, die beginnend mit  $fts$  *Skip time steps* voneinander entfernt sind (s. Fig. 6). Anschließend wählt CST dasjenige Filter aus, das den geringsten Approximationsfehler aufweist. Verwendung findet dieser Parameter bspw. um sich eine qualitative Übersicht über die geeignete Position von  $fts$  zu verschaffen, ohne weitere Konvergenzanalysen durchzuführen, oder bei stark überabgetasteten Signalen. Hier wird dieser Wert nicht verändert.

3) *Max. frequency*: In CST erfolgt für das ausgeschnittene Signal vor der Approximation zunächst eine Tiefpassfilterung. *Max. frequency* stellt die Grenzfrequenz des Tiefpassfilters dar. Nach Angaben der CST-Hilfe sollte *Max. frequency* das 1.2-fache der maximalen für das Spektrum interessierenden Frequenz betragen. Die Einstellung auf diesen Wert erfolgt automatisch und wird im Folgenden nicht weiter verändert.

4) *Max. order of filter und Relative window length*: Mit *Max. order of filter* lässt sich die maximale Ordnung  $N_{max}$  der angesetzten AR-Filter vorgeben. *Relative window length* ( $rwl$ ) ist die relative Länge des Beobachtungsfenster  $M$  gemessen an  $N_{max}$ , d.h.  $M = rwl \cdot N_{max}$ .  $rwl$  sollte nach Angaben der Hilfefunktion zwischen 2 und 4 liegen.  $N_{max}$  ist dabei ein Richtwert für die max. Filterordnung, die je nach Stabilität des AR-Filters nach unten anzupassen ist. Um die Einflüsse der beiden Parameter zu analysieren, wird  $rwl = [2, 3]$  und  $N_{max} = [10, 40]$  variiert und das Konvergenzverhalten von  $\Delta Q_{rel}$  und  $\Delta f_{res,rel}$  ausgewertet.

Fig. 8 zeigt, dass  $\Delta Q_{rel}$  bei  $N_{max} = 30$  ungeachtet des  $rwl$  konvergiert, wohingegen  $\Delta f_{res,rel}$  für  $rwl = 2$  bei  $N_{max} = 30$  und  $rwl = 3$  bei  $N_{max} = 20$  konvergiert. Um

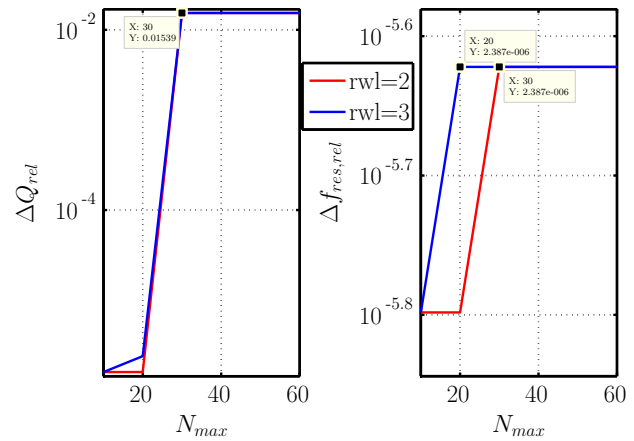


Fig. 8. Konvergenzanalyse der maximalen Filterordnungen  $N_{max} = [10, 40]$  mit einem  $rwl = [2, 3]$

den Berechnungsaufwand so gering wie möglich zu halten, wird für Folgeuntersuchungen das minimale, konvergente Parametersetup gewählt, das außerdem die günstigeren Stabilitätseigenschaften aufweist:  $N_{max} = 30$ ,  $rwl = 2$ .

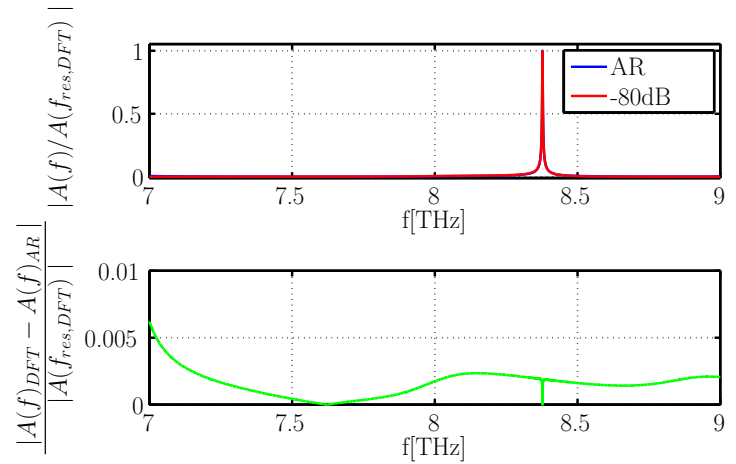


Fig. 9. Vergleich der Referenz-DFT und des Amplitudengang des AR-Filters ( $N_{max} = 30$  und  $rwl = 2$ ) mit Differenzspektrum.

5) *Zusammenfassung*: Mit diesen Einstellungen erhält man ein Amplitudengang (s. Fig. 9), der das Referenzspektrum für alle Frequenzen mit einem relativen Fehler unterhalb von 0.75% approximiert und der insbesondere bei  $f_{res}$  minimal ist. Die Simulationszeit verkürzt sich durch die Verwendung des AR-Filters von  $\sim 309$  auf  $\sim 4$  Stunden um  $\frac{1}{77}$ . Die Ergebnisse zeigen, dass das AR-Filter sich sehr gut für die zeitoptimierte Simulation von Microdisks eignet. Weiyue Cheng

## REFERENCES

- [1] A. Pawlis, M. Panfilova, K. Sanaka, T.D. Ladd, D.J. As, K. Lischka, Y. Yamamoto, Low-threshold ZnSe microdisk laser based on fluorine impurity bound-exciton transitions, *Microelectronic Journal*, vol. 40, 256-258 (2009)
- [2] P. Thoma, *Zur numerischen Lösung der Maxwellischen Gleichungen im Zeitbereich*, TU Darmstadt, 1997