

Elektromagnetische Simulation Photonischer Kristalle

Mirsad Hadžiefendić, Daria Tishkina und Lilli Friederike Kuen

Technische Universität Berlin, Fakultät für Elektrotechnik und Informatik

Fachgebiet Theoretische Elektrotechnik, Einsteinufer 17, D-10587 Berlin, Germany.

Zusammenfassung—Die Anforderung, Daten schneller und verlustärmer als mit Elektronen zu übertragen, prädestiniert die optische Datenübertragung als möglichen Lösungsansatz. Hierbei können photonische Kristalle den Ausgangspunkt für die Realisierung integrierter optischer Schaltkreise darstellen, denn durch das Einbringen von Defektstellen können beispielsweise Wellenleiter mit sehr kleinen Krümmungsradien verwirklicht werden. In der vorliegenden Arbeit wird mithilfe der Methode der finiten Integration sowohl die Bandlücke eines photonischen Kristalls als auch verschiedene Wellenleiterstrukturen bei unterschiedlichen Anregungsmechanismen simulativ untersucht. Zudem wird eine vergleichende Untersuchung mittels der FDTD-Methode durchgeführt. [M. H.]

Index Terms—Photonischer Kristall, Photonische Bandlücke, Wellenleiter, Methode der finiten Integration, FDTD-Methode.

I. EINFÜHRUNG [D. T.]

MIT dem raschen Ausbau des Internets steigt die zu übertragende Datenmenge und die Bandbreite stetig an. Vor allem über große Entfernungen erfolgt der Datenverkehr fast ausschließlich in optischen Netzwerken. Die Gewährleistung der steigenden Komplexitäts- und Funktionalitätsanforderungen benötigt neue Bauelemente mit neuen Eigenschaften, besonders neue integriert-optische Bauelemente.

Der photonische Kristall wird durch die periodische Anordnung dielektrischer Materialien realisiert und funktioniert analog zu einem Festkörperkristall. Jedoch breiten sich hierbei Photonen anstatt Elektronen aus. Im Festkörperkristall ist die Ausbreitung von Elektronen, die eine bestimmte Energie besitzen, nicht möglich. In diesem Energiebereich entsteht die sogenannte Bandlücke. Analog dazu sind im photonischen Kristall Wellen bestimmter Frequenzen nicht ausbreitungsfähig: Es entsteht eine optische bzw. *photonische Bandlücke*. Mit diesem Prinzip lässt sich eine gezielte Beeinflussung der Wellenpropagation durch den Kristall realisieren.

Durch das Einbringen von Defektstellen wie Punkt- oder Liniendefekten in das ansonsten periodische Gitter können Filter und Wellenleiter verwirklicht werden. Die Ausbreitung der Welle bei Frequenzen innerhalb der optischen Bandlücke erfolgt ausschließlich im Defekt. Das Prinzip dieses Wellenleiters unterscheidet sich von dem der Glasfaser, in der die elektromagnetische Welle infolge der Totalreflexion propagiert. Außerdem lassen sich extrem kleine Krümmungsradien realisieren.

M. Hadžiefendić, D. Tishkina, L. F. Kuen,
Technische Universität Berlin, Fachgebiet Theoretische Elektrotechnik,
Einsteinufer 17, 10587 Berlin, Germany.

II. THEORIE [D. T.]

Das elektrische Feld \mathbf{E} einer harmonischen elektromagnetischen Welle in einem dielektrischen Medium mit der Kreisfrequenz ω und dem Materialparameter ε_r erfüllt die Wellengleichung [1]

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \left(\frac{\omega}{c_0}\right)^2 \varepsilon_r(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

mit \mathbf{r} aus \mathbb{R}^3 , $c_0 = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ und $(\omega/c_0) = k_0 = (2\pi)/\lambda_0$, wobei c_0 die Lichtgeschwindigkeit, k_0 die Wellenzahl und λ_0 die Lichtwellenlänge im Vakuum sind.

Die Größe $\varepsilon_r(\mathbf{r})$ bezeichnet die relative Permittivität am Ort \mathbf{r} , die sich aus dem Quadrat des Brechungsindex n ergibt. Sie bestimmt in Abhängigkeit ihrer räumlichen Verteilung die Lösungen für $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ und ω . Die komplette Bandstruktur eines photonischen Kristalls, welcher aus periodisch angeordneten Materialien unterschiedlicher Permittivität besteht, resultiert aus der Dispersionsrelation, also der Darstellung der Frequenz bzw. Wellenlänge über die Wellenzahl k_0 . Die Frequenzbereiche, in denen sich keine Moden ausbreiten, stellen eine Bandlücke dar [2].

In dieser Arbeit wird ein zweidimensionaler photonischer Kristall betrachtet. Bei dieser Anordnung sind nur zwei Polarisierungstypen ausbreitungsfähig: TE- und TM-Moden. Diese weisen unterschiedliche Bandstrukturen sowie unterschiedliche Bandlücken gemäß Abb. 2 in [3] auf.

Bei der Einspeisung des Lichtes mit einer Wellenlänge innerhalb der Bandlücke in den oben beschriebenen Liniendefekt wird das Licht im Defekt gefangen und propagiert im Wesentlichen entlang der fehlenden Zylinder, wobei nur evaneszente Feldanteile senkrecht zur Ausbreitungsrichtung in den Kristall eindringen. Für die Charakterisierung dieser Wellenausbreitung werden die Streuparameter bzw. *S-Parameter* eines Zweitores verwendet. Der Eingangsreflexionsfaktor S_{11} und der Vorwärts-Transmissionsfaktor S_{21} sind für diese Arbeit von Bedeutung:

$$S_{11} = \left. \frac{b_1}{a_1} \right|_{a_2=0}, \quad S_{21} = \left. \frac{b_2}{a_1} \right|_{a_2=0}, \quad (2)$$

wobei a_1 die am Tor 1 hineinlaufende Wellenamplitude, b_1 die am Tor 1 hinauslaufende und b_2 die am Tor 2 hinauslaufende Wellenamplitude sind.

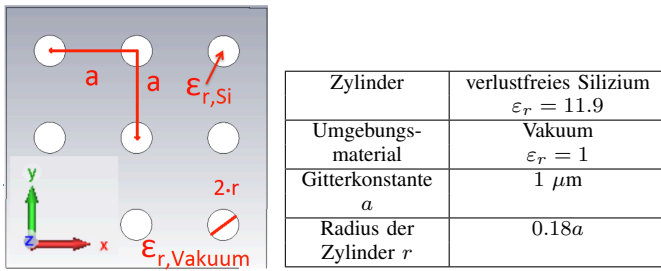


Abbildung 1. Anordnung der Zylinder in einem Kristallgitter. Tabelle 1. Wichtige Parameter des simulierten Kristalls.

III. VORSTELLUNG DES SIMULIERTEN KRISTALLS [D. T.]

In dieser Arbeit wird ein quasi-2D photonischer Kristall mit Hilfe der Methode der finiten Integration (FIT, [5]) unter Verwendung von CST Microwave Studio (CST MWS, [6]) untersucht. Der Kristall besteht aus einer periodischen Anordnung von dielektrischen Zylindern, deren Mittelpunkte den Abstand einer Gitterkonstante a aufweisen (siehe Abb. 1 und Tab. 1). Der Zwischenraum ist mit Vakuum gefüllt. Die Zylinderhöhe wird soweit minimiert, dass nur noch zwei Gitterpunkte in z -Richtung existieren. Hiermit wird das elektromagnetische Feld bzgl. dieser Raumkoordinate konstant, wodurch eine Quasi-2D-Simulation erreicht wird.

In den vorliegenden Simulationen werden nur TE-Moden, d. h. hier nur $E_z \neq 0$, betrachtet. Daher wird in der z_{min} -Ebene und in der z_{max} -Ebene $\mathbf{E}_{tan} = 0$ gesetzt. An den anderen Rändern des Rechengebiets werden offene Randbedingungen gesetzt, die absorbierende Schichten (sogenannte „Perfectly Matched Layer“ bzw. PML, [4]) darstellen.

IV. SIMULATION IN CST MICROWAVE STUDIO

A. Bestimmung der Bandlücke mittels Eigenmodelöser [M. H.]

Die simulative Bestimmung der photonischen Bandlücke in CST MWS erfolgt zunächst mithilfe des Eigenmodelösers. Der Ansatz hierbei ist eine Einheitsrechenzelle, wie sie in Abbildung 2.a) dargestellt ist, zu verwenden [7]. Dabei wird zum einen der Abstand des Einheitszylinders zum Rechengebietsrand auf die halbe Gitterkonstante gesetzt, zum anderen werden in der x - und in der y -Richtung periodische Randbedingungen mit variablem Phasenverschiebung angesetzt, wodurch eine unendliche Fortsetzung der Einheitsrechenzelle in den entsprechenden Richtungen erzielt wird. Die Betrachtung der TE-Eigenmoden wird gemäß den entsprechenden Randbedingungen aus Abschnitt III erreicht.

Die Wellenausbreitung erfolgt in y -Richtung mit der Wellenzahl k_y . Für den Phasenverschiebung φ_y zwischen einem elektrischen Feldvektor \mathbf{E} an einem Ende der Einheitsrechenzelle und einem Feldvektor $\mathbf{E}e^{j\varphi_y}$ am anderen Ende gilt der Zusammenhang in Gleichung (3).

$$\varphi_y = k_y \cdot a \quad (3)$$

Die Abbildung 2.b) verdeutlicht diese Gegebenheit für den Phasenwinkel $\omega t + \varphi_y$ mit $\omega t = 90^\circ$ und $\varphi_y = 90^\circ$.

Im Weiteren wird eine Parameterstudie angefertigt, bei der für den Phasenverschiebung 11 Werte im Bereich von 0° bis 180° vorgegeben und schließlich die zugehörigen Frequenzen

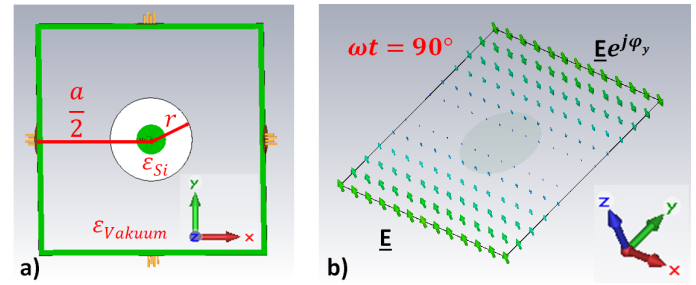


Abbildung 2. a) Einheitsrechenzelle b) E-Feldvektoren beim Phasenwinkel $\omega t + \varphi_y$ mit $\omega t = 90^\circ$ und $\varphi_y = 90^\circ$.

für die ersten beiden Moden durch Lösen des zugehörigen Eigenwertproblems bestimmt werden. In Abbildung 3 ist das entsprechende Dispersionsdiagramm dargestellt. Es kann sehr deutlich die Bandlücke im Frequenzbereich von ca. 80 THz bis 130 THz erkannt werden, in der keinerlei Wellenausbreitung stattfindet.

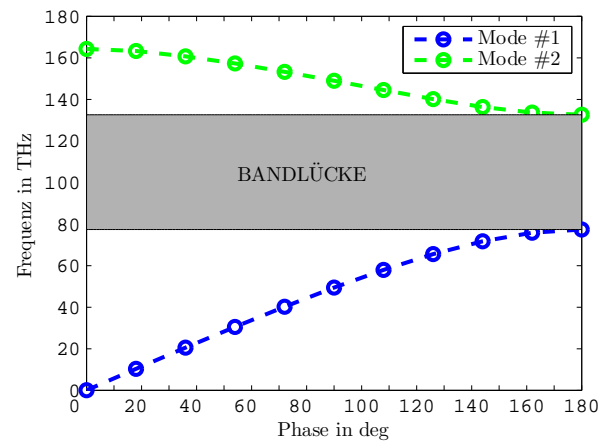


Abbildung 3. Dispersionsdiagramm.

B. Wellenleiter mit quadratisch angeordneten Zylindern [L. K.]

Es werden unterschiedliche Wellenleiter mithilfe des Zeitbereichslösers simuliert. Diese besitzen alle die in Abschnitt III angegebenen Parameter und werden durch Auslassen einer Reihe von Zylindern realisiert. Die Anregung wird mittels einer Hohlleiterapertur realisiert, die vor sich einen homogenen Bereich von mindestens vier Gitterkanten voraussetzt. Diese dient zur Einkopplung des Signals in das Rechengebiet sowie zur Auskopplung und Messung am Ende der Wellenleiterstruktur. Die Grenzfrequenz der Hohlleiterapertur liegt unterhalb des zu simulierenden Frequenzbereichs. Die Anregung im Zeitbereich erfolgt mit einem sinusmodulierten Gauß-Impuls, da dieser im Frequenzbereich seine Signalform beibehält. Es wird im Folgenden eine Anordnung aus 11×7 Zylindern erstellt und symmetrisch in der Mitte eine Reihe als Liniendefekt ausgelassen. Feldbilder für eine Frequenz außerhalb und eine innerhalb der Bandlücke sind in Abbildung 4 zu sehen. In der Abbildung 4.a) liegt die Frequenz außerhalb der Bandlücke, so dass die Welle im gesamten Kristall ausbreitungsfähig ist.

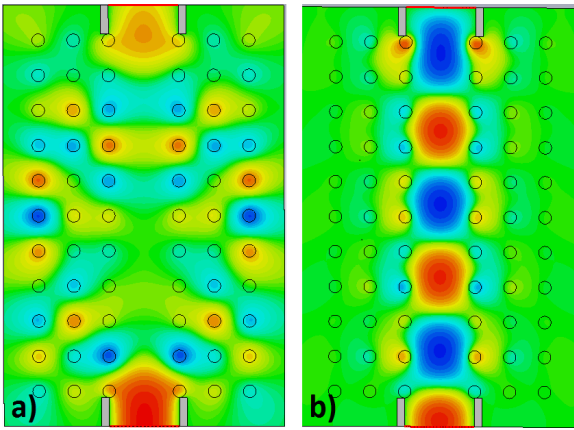


Abbildung 4. Feldbilder des geraden Wellenleiters a) 80 THz und b) 110 THz.

In der Abbildung 4.b) hingegen liegt die Frequenz innerhalb der Bandlücke. Das Licht wird im Defekt gefangen und es kommt zur gewünschten Führung entlang des Defektes.

Um die Güte des Wellenleiters zu bewerten, kann die Bilanz-Kurve untersucht werden. Die Bilanz ist gemäß der Gleichung (4) definiert.

$$\text{Bilanz} = |S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 \quad (4)$$

Für den Bereich guter Transmission im Liniendefekt, also dem Bereich der im Abschnitt IV-A detektierten Bandlücke, ist auch die Bilanz nahezu eins (siehe Abbildung 5.a)). Die Abweichung entsteht hauptsächlich durch den offenen Rechengebietsrand, durch den ein Teil der Welle aus dem Rechengebiet propagieren kann. Ein wichtiges Kriterium für die Aussagekraft der Simulation ist das Energiekriterium. Dieses überprüft, ob die in das System eingespeiste Energie auf einen gewissen Wert abgefallen ist. Hier wird es auf -40 dB gesetzt. Um es zu erfüllen, muss die Anzahl der eingespeisten Pulse genügend hoch und der Rechengebietsrand genügend weit von der Struktur entfernt sein.

Es ist ebenfalls möglich, komplexere Strukturen zu erzeugen bspw. eine 90° -Kurve oder einen Leistungsteiler. Solch ein Leistungsteiler wird hier in der Form eines T-Stückes realisiert. Das Ergebnis der S-Parameter ist in Abbildung 5.b) zu sehen. Die S-Parameter zeigen, dass in guter Näherung ein 50/50-Leistungsteiler realisiert werden kann. Der -3 dB-Wert wird hierbei nahezu erreicht. Die Abweichung dazu kann sowohl durch die offenen Ränder als auch durch die auftretenden Reflexionen an der Gabelung erklärt werden.

C. Wellenleiter mit hexagonal angeordneten Zylindern [D. T.]

In diesem Abschnitt wird eine hexagonale Anordnung der Zylinder mit der Gitterkonstante a betrachtet. Im Vergleich zu einer quadratisch angeordneten Struktur ist die Realisierung einer 45° -Kurve (Abb. 6.a)) und einer Y-Verzweigung (Abb. 6.b)) einfacher. Aufgrund der geänderten Anordnung verschiebt sich die Bandlücke und die Arbeitsfrequenz beträgt 120 THz.

Als Anregung dient hierbei ein diskreter Port. Dieser umgeht die Problematik mit dem homogenen Bereich einer

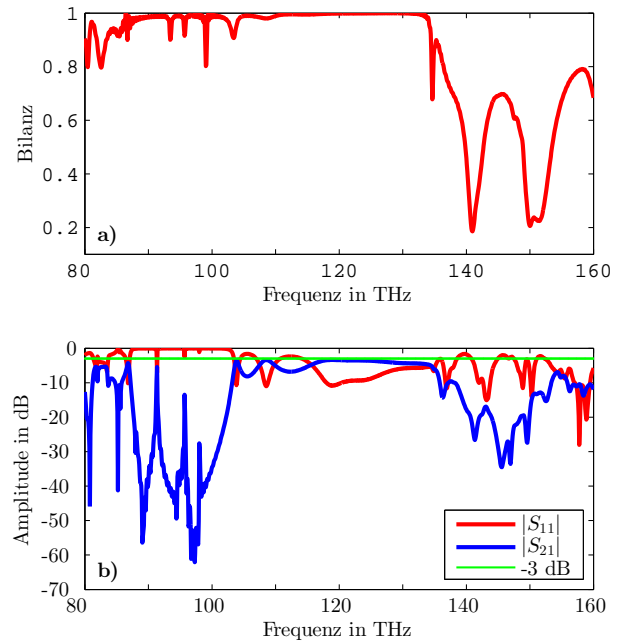
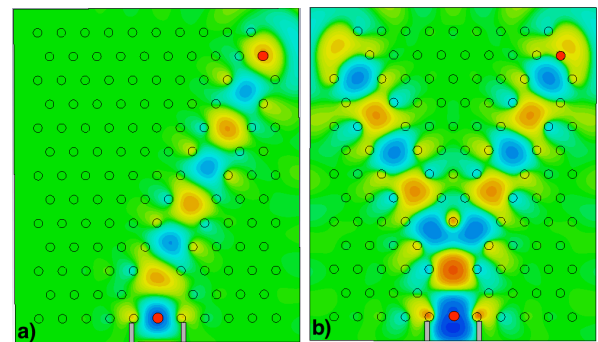


Abbildung 5. a) Bilanz eines geraden Wellenleiters b) S-Parameter eines T-Stückes.

Abbildung 6. Hexagonalen Anordnung der Struktur a) 45° -Kurve b) Y-Verzweigung.

Hohlleiterapertur (s. Abschnitt IV-B). Der diskrete Port stellt einen Liniendipol in z -Richtung dar, wobei die Anregung mindestens über eine Gitterkante erfolgen muss. Es erfolgt eine gleichmäßige Abstrahlung in der xy -Ebene, dabei wird ein Teil der abgestrahlten Leistung nicht in die positive Ausbreitungsrichtung eingekoppelt, was eine Verschiebung bei dem Betrag des Transmissionsparameters S_{21} um etwa -40 dB verursacht.

V. SIMULATION IN CST MWS VS. SIMULATION IN MEEP

[M. H., L. K.]

Im folgenden Abschnitt wird eine Simulation mit CST MWS und eine mit dem Open-Source-Programm MEEP [8] vom MIT unter vergleichbaren Bedingungen durchgeführt. Als Vergleichsgröße wird der Betrag des Transmissionsparameters S_{21} (siehe Gleichung (2)) gewählt.

MEEP basiert auf der FDTD-Methode [9]. Einige Besonderheiten dieses Programms sind die Normierung der Vakuumlichtgeschwindigkeit ($c_0 = 1$) und die Möglichkeit, *echte*

1D- und 2D-Simulationen durchzuführen. Des Weiteren nutzt MEEP ausschließlich ein äquidistantes Gitter und konzentriert sich daher eher auf geeignete Interpolationsmethoden für die Approximation bspw. bei der Materialfüllung unterschiedlicher Rechenzellen. Der Ansatz in CST MWS hingegen ist, alle Geometrien mithilfe des Gitters bestmöglich nachzubilden.

Die besondere Herausforderung bei der Vergleichsuntersuchung ist, vergleichbare Bedingungen hinsichtlich der Geometrie, des Rechengebiets, der Anregung und der Bestimmung der Ausgangs-/Eingangsgrößen herzustellen.

Hinsichtlich der Geometrie und des Rechengebiets muss auf die Normierung der Größen in MEEP und die absorbierenden Randbedingungen (PML) geachtet werden. Letzteres wird bei MEEP innerhalb und bei CST MWS außerhalb des Rechengebiets angesetzt. Schließlich wird gemäß den bisher verwendeten Geometrieparametern (s. Abschnitt III) ein 7×7 Wellenleiter ohne Krümmung und einer mit einer 90° -Kurve erstellt.

Die Anregung in MEEP erfolgt mithilfe einer in z-Richtung gerichteten Linienstromquelle am Anfang des Liniendefektes. Ein sinusmodulierter Gauß-Impuls wird eingespeist und ein Frequenzbereich von 80 THz bis 160 THz analysiert. Die entsprechende Anregung in CST MWS erfolgt mithilfe des diskreten Ports.

Zur Bestimmung des Transmissionsparameters S_{21} wird in CST MWS ein Messpunkt an der Stelle der Quelle und einer am Ausgang des Liniendefekts platziert, womit die eingangsseitige, bzw. die ausgangsseitige, elektrische Feldgröße (E-Feld) im Zeitbereich aufgezeichnet wird. Der Quotient aus fouriertransformiertem Ausgangsfeld und Eingangsfeld ergibt schließlich den S-Parameter S_{21} . Analog hierzu wird in der MEEP-Simulation vorgegangen.

Abbildung 7.a) zeigt den Verlauf des Betrags des Transmissionsparameters beim 7×7 Wellenleiter ohne Krümmung, wohingegen die Abbildung 7.b) den Verlauf beim 7×7 Wellenleiter mit 90° -Kurve darstellt. Man beachte hierbei, dass das Energiekriterium in der CST MWS Simulation auf -80 dB gesetzt wird, um eine möglichst akkurate DFT-Berechnung zu gewährleisten. Aus demselben Grund wird in MEEP die Abbruchbedingung für die Simulation derart festgelegt, dass die Amplitude des E-Feldvektors über einem gewissen Zeitraum auf das 10^{-10} -fache des Anfangswertes abgeklungen ist.

Die Abbildungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der Verläufe aus der Simulation in MEEP und in CST MWS. Dieses Ergebnis ist auch zu erwarten, denn die FDTD-Methode kann als FIT auf kartesischem Gitter mit Leapfrog-Zeitdiskretisierung interpretiert werden, wodurch die entsprechenden Lösungsalgorithmen der beiden Programme im Kern gleich funktionieren. Die geringfügigen Abweichungen könnten dadurch erklärt werden, dass bei der Simulation in CST MWS ein strukturangepasstes, dahingegen bei der MEEP-Simulation ein äquidistantes kartesisches Gitter verwendet wird. Zudem könnten auch unterschiedliche PML-Realisierungen einen Einfluss haben.

VI. ZUSAMMENFASSUNG [L. K.]

Mittels CST MWS haben wir zunächst die Bandlücke eines photonischen Kristalls für gegebenen Geometrie- und Materi-

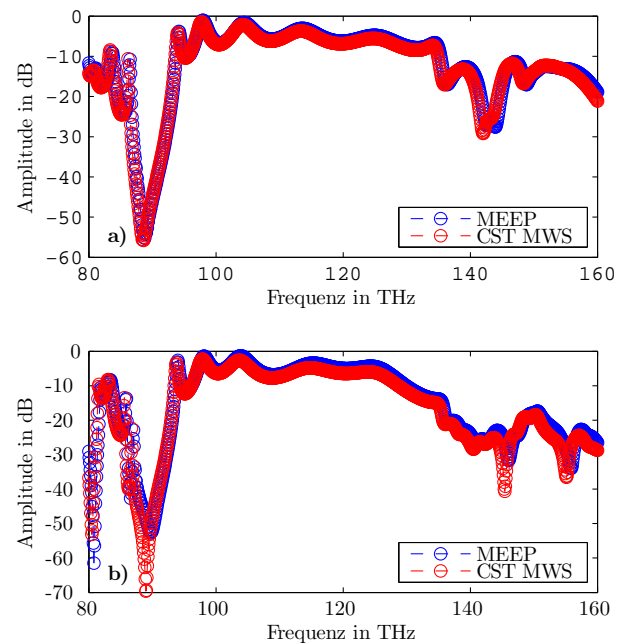


Abbildung 7. Transmissionsparameter $|S_{21}|$ Wellenleiter a) ohne Krümmung b) 90° -Kurve.

alparameter detektiert. Aufbauend auf dieser Erkenntnis haben wir die Wellenführung für verschiedene Wellenleiterstrukturen simuliert. Hierbei haben wir auch einen Leistungsteiler realisiert. Des Weiteren haben wir unterschiedliche Anordnungen der Zylinder im photonischen Kristall betrachtet und dabei auch die Anregung mittels Hohlleiterapertur und mittels diskreten Port untersucht.

Abschließend haben wir mit MEEP eine Vergleichssimulation des Wellenleiters ohne Krümmung und mit einer 90° -Kurve durchgeführt. Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Betragsverläufe des Transmissionsparameters aus MEEP und aus CST MWS.

LITERATUR

- [1] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics*, 4th ed, Pergamon Press, 1970.
- [2] J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve and S. Fan, *Photonic crystals: putting a new twist on light*, Nature 386, pp.143-149, 1997.
- [3] J. D. Joannopoulos, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, 2nd ed, Princeton and Oxford: Princeton University Press, p. 68, 2008.
- [4] J.-P. Berenger, *A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves*, Journal of Computational Physics 114, pp. 185-200, 1994.
- [5] T. Weiland, *Eine Methode zur Lösung der Maxwellschen Gleichungen für sechskomponentige Felder auf diskreter Basis*, Archiv für Elektronik und Übertragungstechnik, vol. 31, pp. 116-120, 1977.
- [6] Computer Simulation Technology AG (CST) [Online]. Verfügbar: <http://www.cst.com/>.
- [7] B. Bandlow, R. Schuhmann, *Computation of Eigenmodes in Periodic Structures with Dispersive Materials*; J. Roos, L.R.J. Costa Ed., Scientific Computing in Electrical Engineering (Mathematics in Industry, The European Consortium for Mathematics in Industry), Springer, vol. 14, pp. 61-68, 2008.
- [8] F. A. Oskooi, D. Rouny, M. Ibanescu, P. Bermel, J.D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, *Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method*, Computer Physics Communications 181, pp. 687-702, 2010.
- [9] K. Yee, *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation 14, pp. 302-307, 1966.