

# به‌کارگیری روش چندقطبی چندگانه برای حل مسئله ویژه مقداری غیرخطی ساختار نواری فوتونی با شبکه‌های مربعی، مثلثی و لانه زنبوری

تهمینه جلالی؛ دانشگاه خلیج فارس بوشهر، گروه فیزیک

## چکیده

در این مقاله، مسئله ویژه مقداری غیرخطی برای محاسبه ساختار نواری فوتونی بلور فوتونیک دوبعدی با استفاده از روش عددی MMP بررسی شده است. ساختار نواری بلور فوتونیک دوبعدی برای دو قطبش TE و TM محاسبه شده است. جزئیات روش محاسباتی شامل چیدمان فضای شبیه‌سازی، مدل‌سازی میدان‌های داخل و بیرون جسم، شرایط مرزی تناوبی فرضی شرح داده شده‌اند. در طراحی فضای شبیه‌سازی خصوصیات فیزیکی منطقه اول بریلونن بلور نظیر شعاع میله‌ها، ضریب گذردمی و تراوایی جسم استفاده شده‌اند. برای مدل‌سازی میدان‌های داخل و بیرون جسم، میدان مختلط را با بسط‌های بسط تقریب زده می‌شود. همچنین با استفاده از نظریه بلوخ، شرایط مرزی تناوبی فرضی برای منطقه اول بریلونن اعمال می‌شود. برای بررسی دقت و کارایی کد، از روش بسط موج تخت استفاده شده است، که نتایج همخوانی خوبی با روش MMP دارد. نشان داده می‌شود که این روش محاسباتی بدون توجه به شکل سطح مقطع میله‌ها و نوع ماده، قابل استفاده برای هر نوع ساختار بلوری مانند ساختار مربعی، مثلثی و لانه زنبوری است. همچنین می‌توان بدون تغییر در کد برنامه از مواد دی‌الکتریک، پاشنده (فلزی) و داده‌های آزمایشگاهی استفاده کرد. بررسی‌های محاسبات عددی نشان می‌دهند که روش MMP بسیار ساده، سریع و قابل استفاده بر روی کامپیوترهای شخصی است.

## مقدمه

پیشرفت‌های روزافزون تکنولوژی در ساخت قطعات الکترونیکی بسیار کوچک و پرسرعت باعث شده است تا دانشمندان به دنبال جای‌گزینی چون فوتون برای الکترون باشند. این تغییر روی‌کرد در تکنولوژی و کاربردهای فراوان این قطعات منجر به تولد شاخه‌ای جدید در علم موسوم به فوتونیک شده است [۱]، [۲]. امروزه اپتیک پیشرفته، خصوصاً در مقیاس نانو، منجر به توسعه ابزارهای مجتمع فوتونیک چندکاره فوق فشرده شده است و علم نانوفوتونیک در دهه گذشته رشد چشمگیری داشته است [۳]، [۴]، [۵]. هدف اصلی نانوفوتونیک کاهش تعداد وسایل و ابعاد مدارهای فوتونیک واقعی بر روی تراشه است. بدین منظور، باید ابعاد وسایل فوتونیک را تا آن سوی حد پراش کاهش دهیم، هرچند مشکلات و پیچیدگی‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی این ساختارها باعث

واژه‌های کلیدی: گاف نواری فوتونی، بلور فوتونیک، روش MMP، روش عددی

پذیرش ۹۲/۴/۹

دریافت ۸۹/۱۱/۳۰

نویسنده مسئول jalali@pgu.ac.ir

شده که توسعه این وسایل به‌کندی صورت گیرد. اخیراً، پژوهش‌های بسیاری بر روی بلورهای فوتونیک به‌عنوان کاندیدی مناسب برای ساخت المان‌های فوتونیک معادل با هر المان الکترونیکی، طراحی و ساخت مدارهای مجتمع فوتونیک انجام شده است [۱]، [۳].

بلورهای فوتونیک موادی با ساختار تناوبی در یک، دو و سه بعد هستند [۱]. رفتار نور در چنین محیط‌هایی قویاً وابسته به بسامد است. در بلورهای فوتونیک گاف نواری (بازه بسامد ممنوعه) وجود دارد که اجازه انتشار هیچ موجی را نمی‌دهد. این خاصیت بلورهای فوتونیک پایه‌گذار ابزارهای کاربردی بسیاری در اپتیک و فوتونیک شده است. در این راستا توانایی محاسبه دقیق ویژگی‌ها و ساختارهای نواری چنین ساختارهایی بسیار اهمیت دارد تا با شناخت آن‌ها، ساخت ابزارهای پیشرفته فوتونیک توسعه یابد [۶]، [۷]، [۸]. به‌علت هزینه زیاد ساخت ابزارهای اپتیکی بر پایه بلورهای فوتونیک، طراحی دقیق و مدل‌سازی این ابزارها به کمک تکنیک‌های محاسباتی قبل از شروع ساخت آن‌ها ضروری است تا هزینه بسیار زیاد طراحی و ساخت قطعات بلورهای فوتونیک به‌طور چشمگیری کاهش یابد.

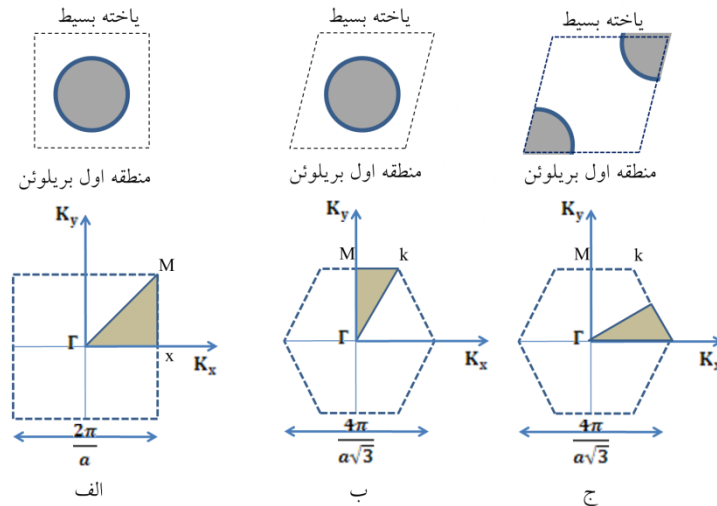
روش‌های متنوعی برای محاسبه ساختارهای نواری فوتونیک وجود دارد. در بیش‌تر موارد، از روش بسط موج تخت استفاده می‌شود که برای ساختارهایی با تضاد دی‌الکتریک زیاد و مدل‌هایی با ضریب گذردهی مستقل از بسامد مناسب است و از مدل تعمیم یافته آن برای مواد با ضریب گذردهی وابسته به بسامد استفاده می‌شود که نتایج این تعمیم رضایت‌بخش نبوده است. دسته دیگری از روش‌ها مبتنی بر مدل کرامرز-کرونینگ هستند که چون براساس بسط موج کروی است، تنها برای ساختارهایی با تقارن دایره‌ای قابل استفاده است. از دیگر روش‌های متداول، روش تفاضل متناهی دامنۀ زمان<sup>۱</sup> (FDTD) است که معمولاً برای مواد پاشنده استفاده نمی‌شود، ولی با تعمیم آن برای محاسبه ساختارهای نواری فوتونیک استفاده شده است. البته این روش دارای خطای پلکانی است و به منابع کامپیوتری (حافظه و سی‌پی‌یو) زیادی نیاز دارد. روش‌هایی نظیر ماتریس انتقال و المان متناهی نیز در بعضی مواقع استفاده شده است که هر یک مزایا و معایب خاص خود را دارند [۸]. روش چندقطبی چندگانه<sup>۲</sup> (MMP) مبتنی بر بسط چندقطبی‌هاست و به‌دلیل استفاده از توابع چندگانه با مبدأهای مختلف می‌تواند همگرایی مناسبی برای اجسام غیرکروی داشته باشد. این روش قابلیت شبیه‌سازی مواد با گذردهی وابسته به بسامد را دارد و به‌دلیل استفاده از دامنه‌های مختلف، شبکه‌بندی کل فضای محاسباتی نیازی نیست. در نتیجه منابع کامپیوتری کمتری نسبت به روش‌های دیگر احتیاج دارد و قابل استفاده بر روی کامپیوترهای خانگی است.

در این مقاله، ابتدا بلور فوتونیک دوبعدی و گاف نواری آن به‌طور خلاصه معرفی می‌گردد. سپس جزئیات ریاضی روش نیمه‌تحلیلی چندقطبی چندگانه شرح داده می‌شود. مسئله ویژه مقداری غیرخطی بررسی می‌شود و تکنیک حل مسئله به‌کمک روش نیمه‌تحلیلی چندقطبی چندگانه ارائه می‌شود. همچنین نحوه چیدمان مدل در فضای

۱. Finite Difference Time Domain (FDTD)

۲. Multiple Multipole Program (MMP)

شبیه‌سازی و روش محاسبه ساختار نواری ارائه می‌گردد. نهایتاً با اعمال مسئله در فضای شبیه‌سازی، نتایج بررسی می‌شود.



شکل ۱. یاخته بسیط و منطقه اول بریلون سه ساختار الف) مربعی و ب) مثلثی و ج) لانه زنبوری

### بلور فوتونیک دوبعدی

با محاسبه گاف نواری فوتونیک برای انتشار نور در صفحه می‌توان بلورهای فوتونیک را در ابزارهایی مبتنی بر منابع نوری قطبیده به‌کار برد. برای نمونه می‌توان به دیودهای گسیل‌کننده نور، قطبنده‌ها، خمیدگی‌های تیز با عبور بالا، فیلترهای عبور نواری، فیلترهای کانالی و ... اشاره کرد. در چنین ساختارهایی، انتشار نور در صفحه، متضمن گاف نواری فوتونیک کامل در صفحه است. توجه به این نکته ضروری است که برای انتشار نور در صفحه، دو قطبش فوتون با یکدیگر مخلوط نمی‌شوند و معادلات ماکسول به دو معادله اسکالر برای هر قطبش تقلیل می‌یابند. ابزارهای متنوعی با استفاده از ساختارهای نواری دوبعدی پیشنهاد و ساخته شده‌اند.

منشأ فیزیکی گاف با مدهای میدان الکتریکی برای حالت‌هایی بلافاصله زیاد و کم گاف توصیف می‌شود. اغلب گاف بین نوارهای اول و دوم در لبه منطقه بریلون رخ می‌دهد. دو روش برای تمرکز موج ایستاده وجود دارد. گره‌های موج ایستاده می‌تواند در هر لایه با  $E$  کم، یا در هر لایه با  $E$  زیاد قرار گیرد. هر موقعیت دیگری، تقارن سلول واحد را حول مرکزش برهم می‌زند. با توجه به قضیه وردشی الکترومغناطیسی، می‌توان دریافت که مدهای با بسامد کم، انرژی‌شان در نواحی با  $E$  زیاد و مدهای با بسامد بالا، انرژی‌شان در نواحی با  $E$  کم متمرکز می‌شود. توان مدی که درست زیر گاف قرار دارد، در نواحی  $E$  بالا متمرکز شده و بسامد پایین‌تری دارد. در حالی که، مدی که درست در بالای گاف قرار دارد، بیش‌تر توانش در نواحی  $E$  اندک است؛ بنا بر این اندکی افزایش بسامد دارد. بر این اساس و بر پایه قضیه وردشی می‌توان گاف نواری را برای پیکربندی‌هایی با تفاوت ثابت دی‌الکتریک زیاد توصیف کرد. در این حالت، دیده می‌شود که میدان‌ها برای هر دوی نوارها اصولاً در

لایه‌های  $\epsilon$  بالا متمرکز می‌شوند، اما دره نوار بیش‌تر از قله آن متمرکز می‌شود. از اختلاف در انرژی میدان، گاف به وجود می‌آید. تقارن انتقالی گسسته بلور فوتونیک اجازه می‌دهد که مدهای الکترومغناطیسی را با بردار موج دسته‌بندی کنیم. مدها را می‌توان به شکل تابع موج بلوخ نوشت، که شامل موج تختی است که با تابعی با همان تناوب شبکه مدوله شده است [۱]، [۲]، [۳]، [۴].

$$\mathbf{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathbf{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathbf{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathbf{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathbf{u}_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \quad (1)$$

ویژگی مهم حالت‌های بلوخ آن است که مقادیر مختلف  $\vec{k}$  لزوماً به مدهای متفاوتی منجر نمی‌شوند. بردار موج  $\vec{k}$  ارتباط فازی بین سلول‌های مختلف را که با تابع  $u$  توصیف می‌شوند، مشخص می‌کند. همه مقادیرهای  $\vec{k}$  که خارج از این منطقه قرار می‌گیرند، با اضافه کردن بردار شبکه وارون به درون آن انتقال می‌یابند. این منطقه، منطقه بریلوئن است. شکل ۱ مناطق بریلوئن و یاخته بسیط برای سه ساختار مثلثی، مربعی و لانه زنبوری را نشان می‌دهد.

### روش چندقطبی چندگانه

پروفسور هافنر در سال ۱۹۸۰ روش چندقطبی چندگانه (MMP) را در مرکز تکنولوژی ETH توسعه داده است. این روش روشی نیمه‌تحلیلی مرزی در دامنه بسامد برای حل معادلات ماکسول در محیط‌های غیرخطی و همسان‌گرد با شکل دل‌خواه است [۷]، [۸]، [۹]، [۱۰]، [۱۱]، [۱۲]. در این روش، برخلاف روش FDTD نیازی به شبکه‌بندی کل فضا نیست و فقط مرز بین دامنه‌های مختلف در نظر گرفته و شبکه‌بندی می‌شود. در نتیجه با روش MMP شبیه‌سازی مسائلی که دارای گستردگی فضایی بسیار بزرگتری نسبت به طول‌موج هستند، بر روی کامپیوترهای شخصی امکان‌پذیر است. بدین ترتیب با داشتن این ضرایب می‌توان کمیت‌های فیزیکی مورد نظر را در هر نقطه از فضای محاسباتی به‌دست آورد. در این برنامه کافی است مؤلفه‌های طولی

$$\text{میدان الکتریکی و عرضی مغناطیسی در } D_i \text{ در دویعد } \Phi_{(D_i)}(\mathbf{r}) = \{E_{z(D_i)}(\mathbf{r}), H_{z(D_i)}(\mathbf{r})\} \text{ به‌دست آید.}$$

$$E_{T(D_i)}(\mathbf{r}) = \frac{i}{(K_{T(D_i)})^2} [K_z \nabla_T E_{z(D_i)}(\mathbf{r}) - \omega \mu_{(D_i)} (\hat{\mathbf{e}}_z \times \nabla_T) H_{z(D_i)}(\mathbf{r})] \quad (2)$$

در این رابطه،  $K_{T(D_i)}$  عدد موج عرضی است که بدین صورت محاسبه می‌شود:

$$\epsilon_{(D_i)} \mu_{(D_i)} \omega^2 = (K_{(D_i)})^2 = (K_{T(D_i)})^2 + (K_z)^2 \quad (3)$$

برای مدل‌سازی میدان درون جسم باید مراکز چندقطبی‌ها را در اطراف جسم قرار داد و با بسط‌های بسط مبدأ مختلط را تقریب زد (شکل ۲).

$$\varphi_{\text{app}(D_i)}(\mathbf{r}) = \varphi_{\text{exc}(D_i)}(\mathbf{r}) + \varphi_{\text{sca,app}(D_i)}(\mathbf{r}) = \varphi_{\text{exc}(D_i)}(\mathbf{r}) + \sum_{l=1}^{N_{D_i}} f_{l(D_i)} \varphi_{l(D_i)}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

در این رابطه،  $\varphi_{\text{app}(D_i)}(\mathbf{r})$  تقریب میدان واقعی است. عبارت‌های  $\varphi_{\text{exc}(D_i)}(\mathbf{r})$  و  $\varphi_{\text{sca,app}(D_i)}(\mathbf{r})$  به ترتیب میدان‌های تقریبی پراکنده شده و برانگیخته شده را نشان می‌دهند و  $f_{l(D_i)}$  ضرایب نامعین هستند. برای  $\varphi_{l(D_i)}(\mathbf{r})$  از توابع چندقطبی به‌عنوان توابع پایه استفاده می‌شود. این تابع چندقطبی دویعدی اسکالر با مبدأ در  $\mathbf{r}_0$  بدین‌صورت داده می‌شود:

$$\varphi_{I(D_i)}(r_1, \phi_1) = H_{nl}^1(K_{T(D_i)}r_1) \cdot \begin{cases} \cos(n_1\phi_1) \\ \sin(n_1\phi_1) \end{cases} \quad (5)$$

در این رابطه،  $H_{nl}^1$  تابع هنکل نوع اول و مرتبه  $n_1$  و  $(r_1, \phi_1)$  مختصات قطبی با مبدأ در  $r_0$  است. عبارت بسط چندقطبی مرتبه  $n$  دارای شاخه‌ای با مرتبه‌های  $n_1$  در گستره صفر تا  $n$  است. برای تعیین ضرایب نامعین  $f_{I(D_i)}$  شرایط مرزی در یک دسته نقاط (نقاط جفت شده)  $r_k$  و  $k=1, \dots, N_{col}$  در روی مرز  $\partial D_{ij}$  اعمال شده‌اند (شکل ۲).

$$\begin{cases} \omega_{E_{\parallel}}(r_k) [E_{\parallel(D_i)}(r_k) - E_{\parallel(D_j)}(r_k)] = 0 \\ \omega_{E_{\perp}}(r_k) [\varepsilon_{(D_i)}E_{\perp(D_i)}(r_k) - \varepsilon_{(D_j)}E_{\perp(D_j)}(r_k)] = 0 \end{cases} \quad (6)$$

فاکتورهای وزنی  $\omega_{\dots}(r_k)$  به ترتیب معرف موازی و عمود به مرز است و  $\perp$  و  $\parallel$  در این رابطه، علامت‌های محاسبه می‌شود. تمامی شرایط مرزی عمودی و مماسی الکترومغناطیس مستقل  $E$  نظیر میدان  $H$  هستند. میدان نیستند. منتها در مسائلی که میدان‌ها روی مرز به صورت تقریبی به دست می‌آیند، بهتر است همه شرایط مرزی استفاده شوند [۱۰]. همه شرایط مرزی به کار برده شده‌اند تا همه مؤلفه‌های میدان، این شرایط را با دقت یکسان ارضاء کنند. دستگاه معادلات به معادله ماتریسی زیر منجر می‌شود:

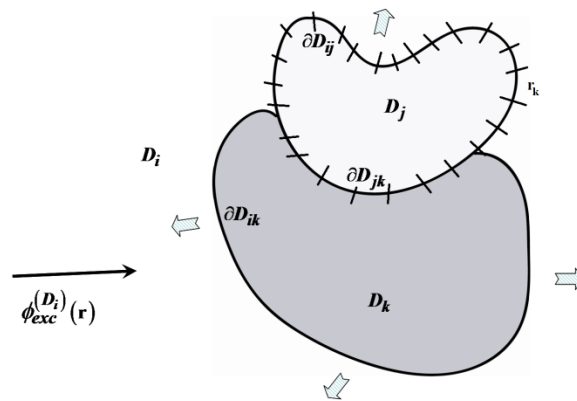
$$\sum_{\beta} A_{\alpha\beta} F_{\beta} = G_{\alpha} \quad (7)$$

در این رابطه،  $A_{\alpha\beta}$  ماتریسی مربعی است. بردار  $F_{\beta}$  نامعین، شامل ضرایب  $f_{I(D_i)}$  می‌شود و بردار  $G_{\alpha}$  با منبع برانگیختگی به دست می‌آید. برای محاسبه خطاهای ناشی از جفت نشدن میدان‌ها باید رابطه  $\mathbb{R} = |AF - G|$  کمینه شود [۹]. مانده  $\mathbb{R}$  به صورت جمع مانده‌های محلی در هر نقطه جفت شده  $r_k$  بدین صورت تعیین می‌شود:

$$\begin{aligned} \mathbb{R} = & \sum_{k=1}^{N_{col}} \left| \omega_{E_{\parallel}}(r_k) \right|^2 \left[ E_{\parallel(D_i)}(r_k) - E_{\parallel(D_j)}(r_k) \right] \left[ E_{\parallel(D_i)}(r_k) - E_{\parallel(D_j)}(r_k) \right]^* \\ & + \left| \omega_{E_{\perp}}(r_k) \right|^2 \left| \varepsilon_{(D_i)}E_{\perp(D_i)}(r_k) - \varepsilon_{(D_j)}E_{\perp(D_j)}(r_k) \right|^2 \\ & + \left| \omega_{H_{\parallel}}(r_k) \right|^2 \left[ H_{\parallel(D_i)}(r_k) - H_{\parallel(D_j)}(r_k) \right] \left[ H_{\parallel(D_i)}(r_k) - H_{\parallel(D_j)}(r_k) \right]^* \\ & + \left| \omega_{H_{\perp}}(r_k) \right|^2 \left| \mu_{(D_i)}H_{\perp(D_i)}(r_k) - \mu_{(D_j)}H_{\perp(D_j)}(r_k) \right|^2 \end{aligned} \quad (8)$$

این رابطه به کمیت‌های  $\varepsilon$  و  $\mu$  و فاکتور هندسی بستگی دارد. توزیع هندسی نقاط جفت شده در مرز بسیار مهم است و با کنترل مکان‌های چندقطبی‌ها و ... می‌توان خطای محاسبات را با تغییر موضع آن‌ها کاهش داد. بدین صورت می‌توان پاسخ را به طور محلی در بعضی نواحی که خطا زیاد است، بهینه کرد. به منظور چین چندقطبی‌ها روش‌های متنوعی نظیر روش منبع کمکی، روش چندقطبی تعمیم یافته و ... ارائه شده‌اند [۹]. بعضی از این تکنیک‌ها الگوریتمی برای قرار دادن چندقطبی‌ها به صورت خودکار ارائه می‌دهند. بر پایه نظریه الکترومغناطیس و با توجه به مفهوم و مشخصات سطوح هم پتانسیل (مکان هندسی نقاطی از فضا که دارای

تأثیرات مشابهی از عامل به وجود آورنده میدان هستند)، به جستجوی مکان مناسب برای چندقطبی‌ها می‌پردازیم. از آن جاکه در بسیاری از اشکال، نقاط نوک تیز، انحناها یا محل جفت‌شدگی میدان‌ها، اتصالات و ... وجود دارد، با ایده گرفتن از خواص توابع پتانسیل و سطوح هم‌پتانسیل (دوبعدی) ناشی از برهم‌کنش میدان‌ها، می‌توان چندقطبی‌ها را در روی یکی از خطوط هم‌پتانسیل قرار داد تا بتوان میدان‌ها را شبیه‌سازی کرد. سپس با داشتن محل این چندقطبی‌ها، می‌توان با یافتن خطای ناشی از جفت نشدن، میدان‌ها را محاسبه و با تغییر مکان چندقطبی‌ها آن‌ها را بهینه کرد. با محاسبه تقارن انتقالی بلور می‌توان ابرسلولی را در نظر گرفت که منطقه اول بریلون را پوشش دهد [۱۲]. چندقطبی‌ها را بر روی مرز منطقه بریلون قرار می‌دهیم و میدان‌ها را محاسبه می‌کنیم. با توجه به خطای نسبی بسیار کم، به نظر می‌رسد چیدمان چندقطبی‌ها بر روی مرز منطقه مناسب است. به‌طور کلی در روش MMP خطاهای ناشی از جفت نشدن در روی مرز را محاسبه می‌کنیم و بدین‌صورت با تغییرات در موقعیت چندقطبی‌ها خطا را کمینه می‌کنیم (شکل ۲). همچنین می‌توان مواد پاشنده را با استفاده از گذردهی مختلط استفاده کرد. در نهایت به‌دلیل هم‌گرایی سریع پاسخ‌های MMP نتایج بسیار دقیقی در میدان نزدیک، به‌دست می‌آید [۹].



شکل ۲. نمایش شماتیک دامنه‌های  $D_i$ ،  $D_j$  و  $D_k$  و مرزهای  $\partial D_{ij}$ ،  $\partial D_{jk}$  و  $\partial D_{ik}$ . برانگیختگی  $\phi_{exc(D_i)}(\mathbf{r})$  و میدان پراکنده شده (پیکان‌های ضخیم)

بیش‌ترین کاربرد روش MMP در حل مسائل پراش است، بدین‌صورت که میدان فرودی به مانعی برخورد می‌کند و پراکنده می‌شود. این‌گونه مسائل به‌صورت مسئله پراکندگی فرمول‌بندی می‌شوند که با یک مد تشدید نظیر فرود موج تخت برانگیخته می‌شوند. هر چند مسائل قابل توجه بسیاری وجود دارد که نوسان تشدید با انرژی درون سیستم بسته تقویت می‌شود. در مواردی نظیر کاواک‌ها و موج‌برها، برای تشدید هیچ برانگیختگی وجود ندارد. این نوع پیکربندی‌های بدون برانگیختگی، به‌صورت مسئله ویژه مقداری در ریاضیات فرمول‌بندی می‌شوند. تعیین ساختار نواری و میدان‌ها در بلورهای فوتونیک از این نوع مسائل است [۹].

### محاسبه مسئله ویژه مقداری غیرخطی

به منظور حل مسئله ویژه مقداری ساختار نواری، موجبرها و میدان‌های بلور فوتونیک در نظر گرفته می‌شود. چنان‌که در تحقیقات مختلف ذکر شده است، MMP روشی استاندارد (معادله ۷)  $R(e)X(e) = (P(e))$  برای حل این گونه مسائل دارد. اما با توجه به این که مسئله محاسبه ساختار نواری هیچ برانگیختگی مشخصی ندارد، روش MMP مرسوم برای استفاده در چنین سیستم‌هایی مناسب نیست [۱۲]. روش MMP ویژه مقداری، تابع  $f(e) = \frac{P^2(e)}{Amp(e)}$  را کمینه می‌کند که  $P^2$  مربع بردار خطا،  $P$  و  $Amp$  دامنه میدان هستند. تعیین مقدار  $Amp$  به نوع مسئله مورد نظر وابسته است و اغلب با انتگرال‌گیری روی چگالی انرژی یا بردار پوئین-تینگ محاسبه می‌شود. در تکنیک حل مسئله ویژه مقداری استاندارد هیچ برانگیختگی صریحی تعیین نمی‌شود. بنا بر این تکنیک جدیدی برای حل مسئله ویژه مقداری با روش MMP به کمک برنامه MATLAB توسعه داده شده است [۱۲]. این تکنیک بر پایه مسائل پراکنده است. در این مقاله تشدیدها، به صورت مسئله وابسته تعیین شده‌اند، به طوری که مطابق با مسئله ویژه مقداری اصلی باشند.

برای محاسبه ثابت انتشار در موجبر یا بسامد تشدید در کاواک یا ساختار نواری در بلورهای فوتونیک مسئله ویژه مقداری غیرخطی باید حل شود. مسئله ویژه مقداری را به صورت  $|f\rangle = (H(\lambda) - \lambda I)|f\rangle$  در نظر می‌گیریم [۱۳]. وابستگی  $H$  به  $\lambda$  نشان‌دهنده غیرخطی بودن آن است.  $H$  عملگر،  $\lambda$  ویژه بردار و  $f, g$  ویژه مقادیر هستند. برای پیدا کردن  $f$  باید  $\mathcal{R} = (H(\lambda) - \lambda I)^{-1}$  را بیابیم. روش حل را به طور خلاصه بدین صورت دسته‌بندی می‌کنیم: (۱) توابع پایه  $\phi_i^{Di}(\vec{r})$  را با بسط میدان به عنوان منبع برانگیختگی مجازی در نظر می‌گیریم. (۲) ماتریس معادله ۷، به عنوان تابعی از پارامتر  $\lambda$  حل می‌شود. (۳) مسئله باقیمانده  $\mathcal{R}$  را برای همه محاسبات در نظر می‌گیریم. ویژه مقادیر به دست آمده را برای مقادیر مختلف  $\lambda$ ، با استفاده از تابع  $\mathcal{R}(\lambda)$  کمینه می‌کنیم. ابتدا این توابع را بر حسب توابع پایه متعامد  $u, v$  بسط می‌دهیم، تا بردار یکه و هامیلتونی را تجزیه کنیم.

$$1 = \sum_j |u_j\rangle\langle u_j| + \int dk |v(k)\rangle\langle v(k)| \quad (9)$$

$$H = \sum_j \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j| + \int dk \lambda(k) |v(k)\rangle\langle v(k)| \quad (10)$$

حال تابع  $\mathcal{R}(\lambda)$  را می‌توان با ترکیب دو رابطه ۹ و ۱۰ بدین صورت تجزیه کرد:

$$\mathcal{R}(\lambda) = \sum_j \frac{1}{\lambda - \lambda_j} |u_j\rangle\langle u_j| + \int dk \frac{1}{\lambda - \lambda(k)} |v(k)\rangle\langle v(k)| \quad (11)$$

هنگامی که عملگر با توجه به برانگیختگی محاسبه می‌شود، این رابطه به دست می‌آید:

$$\mathcal{R}f = (\lambda) |g\rangle = \sum_j \frac{1}{\lambda - \lambda_j} |u_j\rangle\langle u_j| g + \int dk \frac{1}{\lambda - \lambda(k)} |v(k)\rangle\langle v(k)| g \quad (12)$$

در روش MMP، تابع چندقطبی را به عنوان عامل برانگیختگی انتخاب می‌کنیم و این تابع در نقطه خاصی از سلول قرار می‌گیرد. در اغلب موارد از تک قطبی برای برانگیختگی استفاده می‌شود. تک قطبی را در مکان  $\vec{r}_0$  در سلول بسیط قرار داده و شرایط مرزی بلوخ را با  $\vec{r}_0 + \vec{R}_{pq}$  اعمال می‌کنیم.

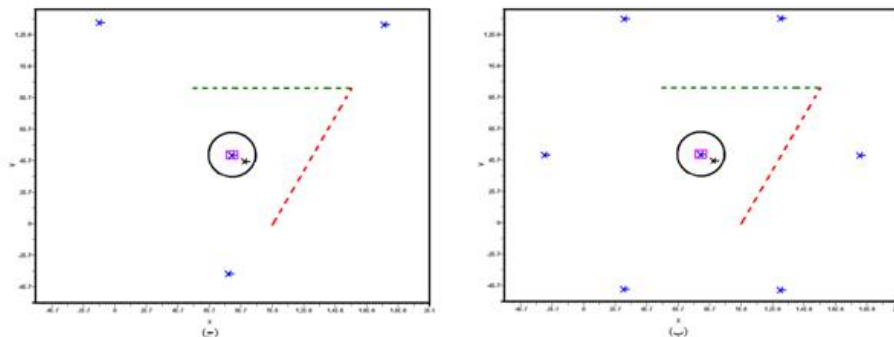
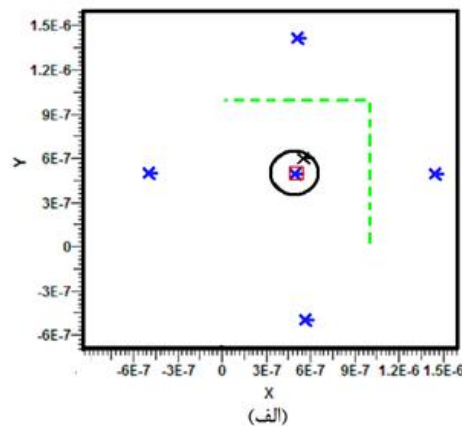
$$H_{z,exc}^{\vec{k}_0}(\vec{r}) = \sum_{pq} (\vec{r} - \vec{r}_0 + \vec{R}_{pq}) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}_{pq}} \quad (13)$$

$\vec{k}_0$  بردار موج در منطقه اول بریلونن است. در رابطه  $\vec{R}_{pq} = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2$  ،  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  بردارهای یاخته بسیط و  $p, q$  عدد صحیح هستند. سپس با قرار دادن برانگیختگی در رابطه ۱۳ داریم:

$$H_z^{\vec{k}_0}(\vec{r}) = c^2 S_{1st Bz} \sum \frac{H_z^{\vec{k}_0, n}(\vec{r}) H_z^{*\vec{k}_0, n}(\vec{r})}{\omega^2 - (\omega^{\vec{k}_0, n})^2} \quad (14)$$

بنا بر این در مسئله همگن با پیدا کردن تشدید، ویژه مقادیر  $\omega^{\vec{k}, n}$  و ویژه مدهای  $H_z^{\vec{k}, n}(\vec{r})$  به دست می آید. سپس برای یافتن ساختار نواری، بدین روش عمل می کنیم: ابتدا نقطه  $k^{ini}$  اولیه از مرز منطقه تحویل ناپذیر اول بریلونن را انتخاب می کنیم تا ویژه مقادیر  $\omega^{\vec{k}, ini, n}$  پیدا شوند. این فرآیند، یعنی "یافتن اولین ویژه مقدار" بسیار زمان بر است.

زمانی که ویژه مقدار  $k^{ini}$  پیدا شد، نقطه  $k^{ini}$  در فضای وارون به اندازه  $k^{ini} + \delta k$  جابه جا می شود و دوباره این عمل تکرار می گردد. با این تفاوت که جستجو بسیار سریع تر است، زیرا تنها اطراف ویژه مقادیر  $k^{ini}$  جستجو می شود. هرچند این روش نسبت به روش های مرسوم پیچیده تر و زمان برتر است، برای ساختارهای پیچیده و وابسته به بسامد (نظیر فلزات) می توان از آن استفاده کرد. برای مواد با ثابت دی الکتریک وابسته به بسامد می توان از مدل های مختلف نظیر مدل درود و یا مدل لورنتس استفاده کرد و یا مستقیماً داده های آزمایشگاهی وابسته به بسامد را بدون هیچ تغییری به کار برد.



شکل ۳. چیدمان میله ها (مرزها)، چندقطبی ها، بسط های بسط و مرز تناوبی فرضی خط چین الف) ساختار مربعی، ب) ساختار مثلثی، ج) ساختار لانه زنبوری



## اعمال مسئله در MMP

محاسبات را به یک یاخته بسیط که شامل چند دامنه از ساختار تناوبی است، محدود می‌کنیم. توابع پایه درون یاخته بسیط بسط داده می‌شوند. چندین چندقطبی و بسط بسط درون این سلول قرار می‌دهیم تا بتوان میدان پراکنده شده را شبیه‌سازی کرد [۷]. همچنین چند بسط چندقطبی در اطراف سلول در نظر می‌گیریم. این منابع (چندقطبی‌ها)، میدان تابش فرودی را درون یاخته بسیط مدل‌سازی می‌کنند. این میدان‌ها باید نظریه بلوخ را ارضا کنند.

$$\phi^k(\vec{r} + \vec{R}_{pq}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \phi^k(\vec{r}) \quad (15)$$

که در آن،  $\vec{k}$  به منطقه اول بریلونن تعلق دارد. معادله ۱۵ برای اعمال شرایط مرزی بلوخ در مرز یاخته بسیط به‌کار برده می‌شود. برای تعیین ساختار نواری باید مسئله ویژه مقداری غیرخطی حل شود. این مسئله بدون وجود برانگیختگی همگن است. در این روش یکی از بسط‌های توابع پایه را به‌عنوان برانگیختگی در نظر می‌گیریم، معادله ماتریسی ۷ را به‌صورت تابعی از پارامتر ویژه بردار حل می‌کنیم و با استفاده از ویژه مقادیر به‌دست آمده تابع خطا را کمینه می‌کنیم. با در نظر گرفتن مد TE و محاسبه میدان برانگیخته توسط منبع، معادله هلمهولتز به مسئله ویژه مقداری زیر تبدیل می‌گردد:

$$\frac{(\omega_{\vec{k},n})^2}{c^2} H_z^{\vec{k},n}(\vec{r}) + \vec{\nabla}_T \cdot \frac{1}{\epsilon_r(\vec{r}, \omega_{\vec{k},n})} \vec{\nabla} H_z^{\vec{k},n}(\vec{r}) = 0 \quad (16)$$

در نهایت پس از ساده‌سازی ویژه مدها، معادله ویژه مقداری غیرخطی بدین صورت به‌دست می‌آید:

$$\left( \frac{\omega^2}{c^2} + \vec{\nabla}_T \cdot \frac{1}{\epsilon_r(\vec{r}, \omega)} \vec{\nabla}_T \right) H_z(\vec{r}) = H_{z,exc}(\vec{r}) \quad (17)$$

تابع گرین را برحسب مدهای بلوخ می‌سازیم.

$$G_\omega(\vec{r}, \vec{r}') = c^2 \int_{\text{FBZ}} d\vec{K} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_z^{\vec{k},n}(\vec{r}) H_z^{\vec{k},n*}(\vec{r}')}{\omega^2 - (\omega_{\vec{k},n})^2} \quad (18)$$

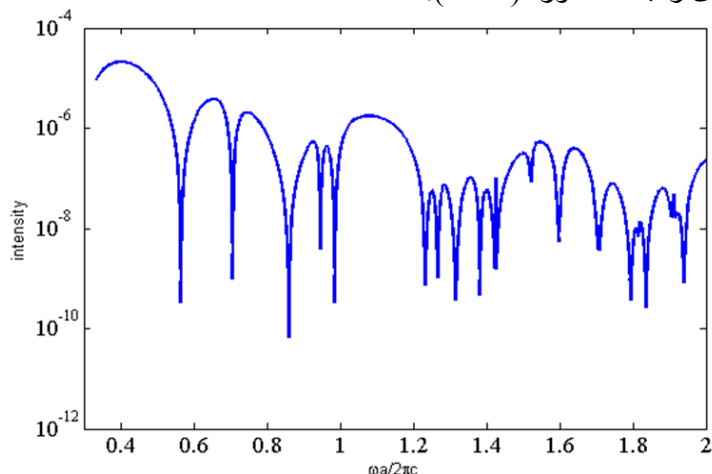
پاسخ معادله ویژه مقداری غیرخطی ۱۷ بدین‌صورت در می‌آید:

$$H_z(\vec{r}) = \int d\vec{r}' G_\omega(\vec{r}, \vec{r}') H_{z,exc}(\vec{r}') \quad (19)$$

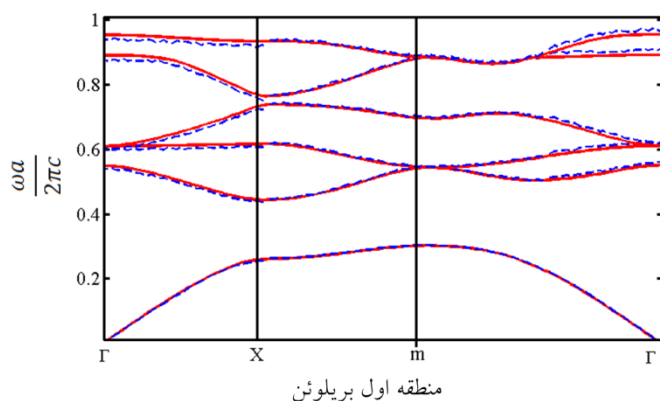
برای اعمال برانگیختگی از چند پنج‌قطبی استفاده می‌کنیم، تا زمان محاسبات کاهش یابد. در ابتدا برای یک  $\vec{k}$  خاص، ویژه بردار را پیدا می‌کنیم و سپس  $\vec{k}$  را به اندازه  $\delta\vec{k} + \vec{k}$  تغییر می‌دهیم و دوباره ویژه مقدار را می‌یابیم. این کار را تا زمانی که بردار موج تمام نوار منطقه بریلونن را پوشش دهد، تکرار می‌کنیم. شکل‌های ۱ و ۳ به‌ترتیب یاخته بسیط و چیدمان چندقطبی‌ها در صفحه را نشان می‌دهند. برای چیدن مدل در فضای شبیه‌سازی، ابتدا شکل میله یا حفره و محیط با استفاده از خواص فیزیکی نظیر گذردهی، تراوایی و ... اعمال می‌شوند. چنان‌که در شکل ۳ مشخص شده است، چندقطبی‌ها در محل تقاطع مرز منطقه بریلونن قرار داده می‌شوند. سپس برای اعمال شرایط مرزی بلوخ دو مرز فرضی در جهت‌های x,y رسم می‌کنیم (شکل ۳). در نهایت از یک چندقطبی و بسط بسط در مرکز میله برای مدل‌سازی میدان‌های درون و بیرون استفاده می‌کنیم. با استفاده از

خطاهای به دست آمده در نتایج و روش سعی و خطا می‌توان جای چندقطبی‌ها، مرتبه و تعداد آن‌ها را به گونه‌ای یافت که خطاها و زمان محاسبات کوتاه شود.

این روش بسیار مشکل‌تر و زمان محاسبه طولانی‌تر از روش‌های مرسوم نظیر بسط موج تخت است، ولی قادر است تمام ساختارها با اشکال مختلف، گذردهی مختلط و تراوایی‌های متفاوت را حل کند. با جستجوی ویژه مقدار در هر  $\vec{k}$  روی لبه منطقه بریلوئن برای ۲۰۰۰ نقطه از بازه بسامدی، تابعی را می‌یابیم که با قله‌های آن می‌توان ساختار نواری را به دست آورد (شکل ۴).



شکل ۴. تابع جستجوی ویژه مقدار در نقطه  $\Gamma$  برای ۲۰۰۰ نقطه

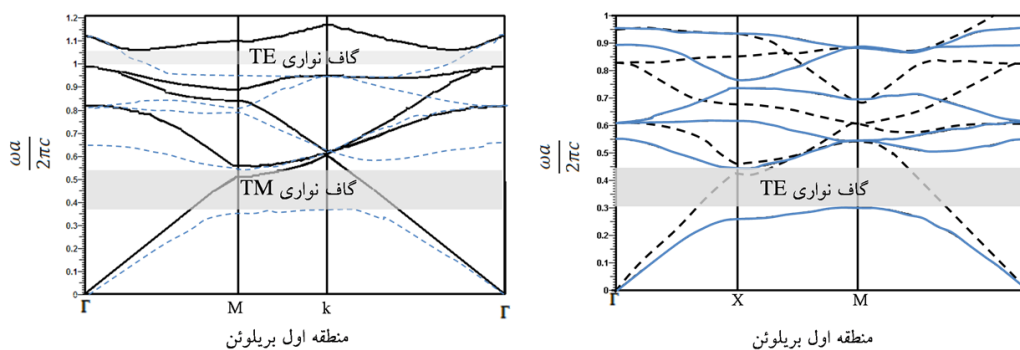


شکل ۵. ساختار نواری شبکه مربعی متشکل از میله‌های دی‌الکتریک  $r=0.18a$  با گذردهی  $11/56$  در هوا با قطبش TE. خط شبیه‌سازی با روش بسط موج تخت، خط چین شبیه‌سازی با روش MMP انجام شده است

### بررسی نتایج شبیه‌سازی

ساختار نواری میله‌هایی با سطح مقطع دایره‌ای را در هوا برای دو قطبش TE و TM در نظر می‌گیریم. میله‌هایی متشکل از مواد دی‌الکتریک (گذردهی مستقل از بسامد) و مواد پاشنده نظیر طلا (گذردهی وابسته به بسامد) بررسی شده‌اند. برای ثابت دی‌الکتریک مواد پاشنده (طلا) از داده‌های آزمایشگاهی کتاب پالیک استفاده شده است [۱۴]. الگوریتم ارائه شده در این مقاله با نرم‌افزار MATLAB اجرا شده است [۱۵] و نتایج حاصل

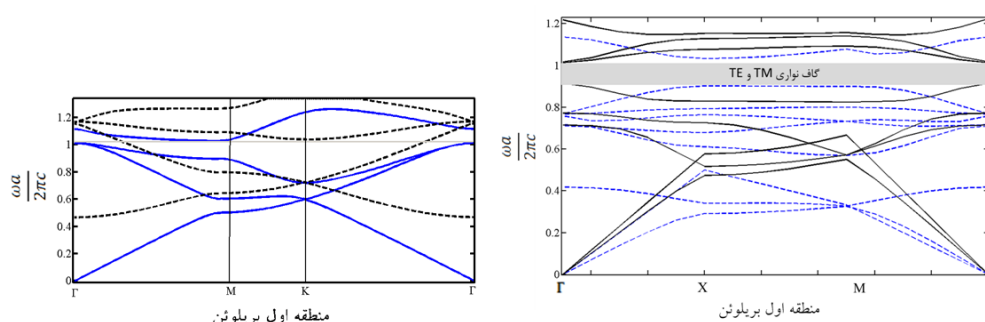
از مدل‌سازی بدین صورت است: شکل ۱ یاخته بسیط و منطقه بریلون سه ساختار مربعی، مثلثی و لانه زنبوری را نمایش می‌دهد. در شکل ۳ فضای محاسباتی هر سه ساختار و نحوه چیدمان چندقطبی‌ها (از مرتبه ۵) و بسط تابع بسط در مراکز دایره‌ها در صفحه نمایش داده شده است. چیدمان چندقطبی‌ها را به صورت شکل منطقه بریلون هر ساختار قرار داده‌ایم، خطای نسبی کمینه (حدود  $10^{-6}$ ) است و میدان‌های درون و بیرون را مدل‌سازی می‌کنند. در روش MMP پس از یافتن مکان مناسب و بهینه برای چندقطبی‌ها، محاسبات با سرعت قابل قبولی بر روی کامپیوتر شخصی انجام می‌گیرد. به منظور بررسی دقت و کارایی کد، ساختار نواری شبکه مربعی با فاکتور پرشدگی  $0/18$  و گذردهی  $11/56$  برای قطبش TE شبیه‌سازی می‌گردد. دلیل انتخاب این مثال این است که ساختار نواری شبکه مربعی با روش‌های مرسوم انجام شده است و پاسخ‌های آن قابل دسترس است. این ساختار به روش بسط موج تخت با استفاده از نرم‌افزار آزاد MPB دانشگاه MIT شبیه‌سازی شده است [۱۶]. چنان‌که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، نمودار ساختار نواری به دست آمده از هر دو روش همخوانی خوبی با یکدیگر دارند که اعتبار مسئله ویژه مقداری غیرخطی با روش MMP را نشان می‌دهد.



شکل ۶. راست) ساختار نواری شبکه مربعی متشکل از میله‌های دی‌الکتریک  $r=0.18a$  با گذردهی  $11/56$  در هوا قطبش خط TE، خط چین TM، چپ) ساختار نواری شبکه مثلثی متشکل از میله‌های دی‌الکتریک  $r=0.15a$  با ضریب گذردهی  $8/41$  در هوا قطبش خط TE، خط چین TM

نمودار نواری برای دو ساختار مربعی و مثلثی با ماده دی‌الکتریک در شکل‌های ۶ و ۷ رسم شده است. در شبکه لانه زنبوری باید توجه کرد که عناصر نزدیک‌ترین همسایه‌ها به دلیل پیکربندی تنگ پکیده همپوشانی نکنند. در نتیجه شعاع میله‌ها به مقدار تقریبی  $0/288a$  که سازه پرشدگی آن حدوداً  $60\%$  است، محدود می‌شود [۱]. علاوه بر محاسبه نمودار نواری ساختار مثلثی و مربعی با مواد دی‌الکتریک، نمودار نواری ساختار مثلثی با میله‌های طلا (ماده پاشنده) با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی نیز انجام یافته است. در شکل ۶ راست نمودار پاشندگی ساختار مربعی با فاکتور پرشدگی  $0/18$  و گذردهی  $11/56$  رسم شده است. محور عمودی بسامد به‌هنگام  $\omega = \frac{2\pi c}{a}$  و محور افقی بردار موج  $\vec{k}$  در لبه منطقه بریلون، نقاط  $\Gamma(0,0)$ ،  $X(0, \frac{\pi}{a})$  و  $M(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$  را نشان می‌دهند. در نمودار ۶ راست گاف نواری برای قطبش TE بین  $0/44 - 0/3$  مشخص است که نسبت گاف به نیم گاف  $38\%$  است. در شکل ۶ چپ نمودار پاشندگی ساختار مثلثی با فاکتور پرشدگی  $0/15$  و گذردهی  $8/41$

رسم شده است. مقادیر به دست آمده با نقشه گاف نواری در کتاب جوناپلوس همخوانی دارند [۱]. در این نمودار گاف نواری برای قطبش TM بین  $0.54 - 0.37$  مشخص است، که نسبت گاف به نیم گاف  $37\%$  است. نمودار پاشندگی ساختار مثلثی میله‌های طلا با فاکتور پرشدگی  $0.15$  رسم شده است (شکل ۷ چپ). در شکل ۷ راست نمودار پاشندگی ساختار لانه زنبوری با فاکتور پرشدگی  $0.15$  و گذردهی  $8/41$  رسم شده است. در نمودار ۷ راست گاف نواری برای قطبش TE بین  $1.15 - 0.91$  با نسبت گاف به نیم گاف  $23\%$  و برای قطبش TM بین  $1/5 - 0.89$  مشخص است، که نسبت گاف به نیم گاف  $51\%$  است. در این ساختار پایین بودن سازه پرشدگی منجر به گاف نواری فوتونیک بزرگ در قطبش TM می‌شود. زیرا حجم بزرگی از ساختار با ماده دی‌الکتریک پر شده و در نتیجه برهم کنش ماده با نور افزایش یافته و اتلاف‌های ناشی از انتشار کاهش یافته است [۱].



شکل ۷. راست) ساختار نواری شبکه لانه زنبوری متشکل از میله‌های دی‌الکتریک  $r=0.14a$  با گذردهی ۱۳ در هوا قطبش خط TE، خط چین TM، چپ) ساختار نواری شبکه مثلثی متشکل از میله‌های طلا  $r=0.15a$  با گذردهی مختلف در هوا قطبش خط چین TE، خط TM

## نتیجه‌گیری

در این تحقیق، حل مسئله ویژه مقداری غیرخطی برای محاسبه ساختارهای نواری بلورهای فوتونیک با استفاده از روش چندقطبی چندگانه ارائه شده است. میدان‌ها بر پایه توابع چندقطبی (پنج قطبی) بسط داده شده و سپس شبیه‌سازی شده‌اند. بر اساس تشدید و افزایش چشمگیر دامنه میدان‌ها در منطقه اول بریلون، ویژه مقدارها را در بازه بسامد در امتداد مرز منطقه بریلون یافته‌ایم. ابتدا کد با شبکه مربعی با استفاده از روش بسط موج تخت اعتبارسنجی شده و نشان داده‌ایم که نتایج همخوانی خوبی با یکدیگر داشته‌اند. نمودار نواری برای سه ساختار مربعی، مثلثی و لانه زنبوری برای مواد دی‌الکتریک و همچنین ساختار مثلثی برای مواد پاشنده رسم شده است. در این ساختارها گاف نواری برای هر دو قطبش TE و TM مشخص است. به دلیل سازه پرشدگی ساختار لانه زنبوری، برهم کنش ماده با نور افزایش یافته و باعث به وجود آمدن گاف نواری پهن در هر دو قطبش می‌شود. روش MMP با وجود پیچیدگی در چیدمان مسئله در فضای شبیه‌سازی و زمان‌بر بودن محاسبات، به دلیل کارایی در بازه بسامد برای مواد مختلف با گذردهی مختلط و حتی استفاده مستقیم از داده‌های آزمایشگاهی می‌تواند بسیار مورد توجه قرار گیرد. همچنین این روش از همگرایی سریع و مناسبی برخوردار

است، در نتیجه برای اشکال با لبه‌های تیز و شبکه‌های مختلف مناسب است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که ساختار نواری برای سلول‌های اولیه مختلف می‌تواند با دقت زیاد و هزینه محاسباتی کم (CPU و حافظه) محاسبه شود. همچنین با استفاده از نقاط تقارنی بلور تنها بخش کوچکی از یاخته بسط در محاسبات عددی وارد می‌شود که در نتیجه پیشرفت خوبی در کاهش منابع کامپیوتری و زمان محاسبات به دست می‌آید. در واقع می‌توان از روش چندقطبی چندگانه به عنوان روشی با دقت زیاد و قابل استفاده بر روی کامپیوترهای شخصی برای شبیه‌سازی خواص فیزیکی ساختار بلورهای فوتونیک نام برد.

### سپاسگزاری

این کار با پشتیبانی معاونت پژوهشی دانشگاه خلیج فارس انجام شده است.

### منابع

1. جان جوناپلوس، رابرت د. مید، جوشان وین، بلورهای فوتونیک قالبی برای شارش نور، مؤسسه انتشارات دانشگاه شهید چمران، اهواز (۱۳۸۶).
2. C. Manolatu, S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, H. A. Haus, J. D. Joannopoulos, "High-density integrated optics", *J. Lightwave Technol.*, 17 (1999) 1682-1692.
3. J. M. Lourtioz, "Photonic crystals and the real world of optical telecommunications", *Ann. Telecomm.*, 58 (2003) 1197-1237.
4. K. Sakoda, "Optical Properties of Photonic Crystals", (2001) Springer, Berlin.
5. S. Imagawa, K. Edagawa, K. Morita, T. Niino, Y. Kagawa, M. Notomi, "Photonic band-gap formation, light diffusion, and localization in photonic amorphous diamond structures", *Physical Review B*, 82, 11 (2010) 115116-115124.
6. S. Mohammadi, A. A. Eftekhar, A. Khelif, and A. Adibi, "Simultaneous two-dimensional phononic and photonic band gaps in opto-mechanical crystal slabs", *Opt. Express* 18 (2010) 9164-9172.
7. Ch. Hafner, "Multiple multipole program computation of periodic structures", *J. Opt. Soc. Am. A*, 12, 5 (1995) 1057-1067.
8. E. Moreno, D. Erni and Ch. Hafner, "Modeling of discontinuities in photonic crystal waveguides with the multiple multipole method", *Phys. Rev. E*, 66 (2002) 036618-1-12.
9. Ch. Hafner, "Post-modern Electromagnetics", John Wiley & Sons, Chichester (1999).

10. E. Moreno, D. Erni and Ch. Hafner, "Band structure computations of metallic photonic crystals with the multiple multipole method", Phys. Rev. B, 65 (2002) 155120-155129.
11. J. Smajic, C. Hafner, and D. Erni, "Design and optimization of an achromatic photonic crystal bend", Opt. Express, 11(2003) 1378-1384.
12. J. Smajic, C. Hafner, and D. Erni, "Automatic calculation of band diagrams of photonic crystals using the multiple multipole method", Phys. Rev. Lett., 18, 3 (2003) 172-180.
13. A. Raman, S. Fan, "Photonic Band Structure of Dispersive Metamaterials Formulated as a Hermitian Eigenvalue Problem", Phys. Rev. E, 104 (2010) 087401-087404.
14. E. Palik, "Handbook of Optical Constants of Solids", Academic Press, New York (1991).
15. www.mathwork.com
16. Steven G. Johnson and J. D. Joannopoulos, "Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a plane wave basis", Optics Express, 8 (2001) 173-190.