

## Итерационный подход к расчету фотонно-кристаллических элементов

П.В. Мокшин<sup>1</sup> , Д.Л. Головашкин<sup>1,2</sup> , В.С. Павельев<sup>1,2</sup> 

<sup>1</sup> Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева  
443086, Россия, г. Самара,  
Московское шоссе, 34

<sup>2</sup> ИСОИ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН  
443001, Россия, г. Самара,  
ул. Молодогвардейская, 151

**Аннотация – Обоснование.** Изложен подход к расчету фотонно-кристаллических элементов, отличающийся от уже известных методов оптимизации общего назначения (например, генетического алгоритма или градиентных процедур) использованием информации о дифракционных картинах на разных частотах при оптимизации элемента, предназначенного для работы на одной выбранной длине волны. Фактически речь идет о расчете функциональных структур с ожидаемыми характеристиками (например, волноводов) под определенную длину волны (пусть заданную монохроматическим источником излучения). **Цель.** Разработка на основе FDTD-метода и подтверждение работоспособности итерационной процедуры расчета характеристик металл-диэлектрических фотонных кристаллов. **Методы.** В основе исследования лежит итерационный подход к расчету фотонно-кристаллических элементов, основанный на использовании FDTD-метода. **Результаты.** Разработанная итерационная процедура продемонстрировала практическую сходимости и работоспособность на модельных примерах. Эффективность фотонно-кристаллического волновода, понимаемая как отношение выходной энергии к входной, повышалась на каждой итерации процедуры вплоть до 97,2 %. **Заключение.** Предложен и аргументирован метод синтеза металл-диэлектрических фотонно-кристаллических структур с заданными свойствами, основанный на применении разработанной итерационной процедуры. На результатах анализа двумерного фотонного кристалла, основанного на наборе медных стержней круглого сечения, показана работоспособность предложенного метода.

**Ключевые слова** – фотонный кристалл; итерационный подход; волновод; FDTD-метод; дифракция.

### Введение

В различных устройствах современной фотоники [1] успешно применяются структуры, выполненные на основе фотонных кристаллов (ФК). Эти конструкции используются при реализации как волноводов и различных сенсоров, так и для более сложных устройств. Интересной задачей [2] является расчет таких структур для различных диапазонов длин волн, в том числе для терагерцового диапазона. В известной авторам настоящей работы литературе [1–5] основное внимание уделяется анализу фотонно-кристаллических структур, связанному с определением их свойств на разных частотах. Вместе с тем безусловный интерес представляет обратная задача – расчет структур с ожидаемыми характеристиками (например, волноводов) под определенную длину волны (пусть заданную монохроматическим источником излучения). Целью исследования является разработка на основе FDTD-метода и подтверждение работоспособности итерационной процедуры расчета характеристик металл-диэлектрических фотонно-кристаллических решеток.

### 1. Влияние дисперсии

Поясняя идею авторского подхода, для простоты допустим в начале изложения, что дисперсией материала при заданной ширине импульса (выбранной полосе частот) можно пренебречь. Тогда зависимость пропускания фотонного кристалла от частоты можно понимать как зависимость пропускания выбранной монохроматической волны (пусть связанной с центральной частотой импульса) от некоторого параметра фотонного кристалла (положим, его периода). При этом будем подразумевать вместо фактически проведенного одного вычислительного эксперимента (с импульсом) постановку совокупности нескольких воображаемых экспериментов по моделированию падения монохроматической волны на набор различных фотонных кристаллов, отличающихся друг от друга лишь масштабным коэффициентом. Последний задается, с одной стороны, отношением центральной частоты (связанной с фотонным кристаллом, рассматриваемым в фактически проведенном эксперименте) к иной частоте, которой соответствует другой кристалл в одном из воображаемых экспе-

риментов. С другой стороны, обсуждаемый масштабный коэффициент равен отношению любых соответствующих характеристических неоднородностей (допустим, периодов) двух рассматриваемых кристаллов (связанных с центральной и иной частотами) в воображаемых экспериментах. Возможность указанного перехода обосновывается волновой природой излучения, когда дифракционные эффекты задаются отношением геометрических параметров волны и препятствия, не будучи связаны с абсолютными значениями этих параметров.

Таким образом, при отсутствии дисперсии материала достаточно одного вычислительного эксперимента для расчета оптимальной ФК-структуры с заданным масштабным коэффициентом (речь не обязательно должна идти о пропускании кристалла без дефекта). Изменение такого коэффициента (например, увеличение радиуса цилиндра при неизменном периоде структуры), разумеется, необходимо сопроводить новым моделированием. С вычислительной точки зрения преимущество развиваемого в настоящей работе подхода по замене множества вычислительных экспериментов с разными фотонными кристаллами и падающей на них монохроматической волной одним экспериментом с импульсом, падающим на один выбранный кристалл, связано с многократным сокращением длительности моделирования (время расчетов – критический фактор, сдерживающий развитие предметной области). Замена тем более уместной, что некоторые реализующие FDTD-метод пакеты (например, Ansys Lumerical FDTD [6]) и вовсе не допускают задания монохроматической падающей волны. Другие пакеты (например, МЕЕР [7]) позволяют задавать монохроматическое излучение, однако расчеты в этом случае характеризуются численной неустойчивостью при работе с проводящими структурами.

## 2. Особенности реализации подхода

Допустим наличие заранее заданной ФК-структуры с оптимальными параметрами под определенную длину монохроматического излучения. Если дисперсией материала в этом случае можно пренебречь, то задача синтеза элемента с искомыми свойствами может считаться решенной для любой длины волны из рассматриваемого диапазона. Однако при проведении экспериментов дисперсия материала учитываться должна, поэтому авторы предлагают итерационное пред-

ставление подхода к расчету ФК-элементов. Так, при каждой новой итерации вычислительного эксперимента моделируется частотная дисперсия материала, что приводит к обнаружению фотонного кристалла, наиболее соответствующего по характеристикам к задуманному результату. Рассчитанный в ходе одной итерации кристалл может не показывать высокой эффективности либо не соответствовать необходимой частоте.

Несмотря на это, найденная структура каждый раз пересчитывается под центральную частоту с учетом ранее введенного масштабного коэффициента. Моделирование повторяется до достижения критерия оптимальности фотонно-кристаллической структуры для центральной частоты. Важной характеристикой подхода, конечно, является условие сходимости предложенного итерационного процесса. Считая преждевременным его точное представление, чему будут предшествовать дополнительные исследования, следует ограничиться соображениями общего характера. Очевидно, сходимость связана с видом функции диэлектрической проницаемости, в общем случае комплексной, выбранного материала. Монотонность функции на используемой полосе частот представляется достаточным условием сходимости обсуждаемого итерационного процесса. Наличие резонансных областей в данной полосе, наоборот, может обусловить его расходимость.

Другой особенностью подхода, связанной с практической реализацией FDTD-метода, авторы признают различную точность разностного решения для отличающихся фотонно-кристаллических структур в рамках одного вычислительного эксперимента. Действительно, проводя моделирование на одной сеточной области для разных частот (иначе говоря, разных ФК-структур), нельзя получить результаты для каждой с одинаковой погрешностью. С уменьшением длины волны (размеров характеристических неоднородностей структур) все меньшее количество узлов сеточной области будет приходиться на один период волны (кристалла), что обусловит падение точности. Таким образом, при выборе сеточной области следует ориентироваться на наименьшую длину волны в импульсе (кристалл с наименьшими размерами характеристических неоднородностей).

## 3. Итерационный подход

Задавая любой итерационный подход, традиционно говорят о выборе начального приближения,

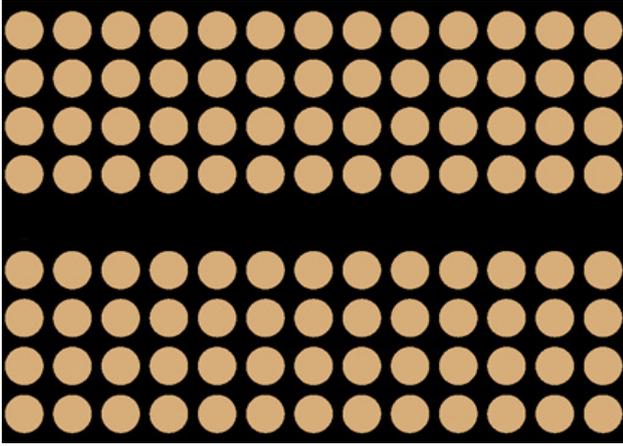


Рис. 1. Общий вид исследуемого волновода  
Fig. 1. Waveguide general view

переходе от текущего приближения к следующему и критерии останова. Здесь под начальным приближением будет пониматься ФК-структура, наиболее подходящая, по мнению исследователя (основанному на практическом опыте, расчете в рамках менее строгой теории, публикации и т. п.), для такой роли [8; 9].

Переход к следующему  $k$ -му приближению сопровождается проведением моделирования (по FDTD-методу) распространения широкополосного импульса через структуру, полученную в ходе предыдущего приближения. По итогам такого моделирования выделяется длина волны  $\lambda'$ , для которой результирующая дифракционная картина признается наилучшей среди остальных дифракционных картин (для других длин волн) в соответствии с заданным критерием эффективности ФК-элемента. Например, под эффективностью  $\delta$  можно понимать отношение энергии вышедшего из ФК-волновода излучения к энергии вошедшего на выбранной длине волны. В конце текущей итерации геометрические параметры элемента пересчитываются с сохранением отношения

$$\frac{d_{k-1}}{\lambda'} = \frac{d_k}{\lambda_0}, \quad (1)$$

где  $\lambda_0$  – основная длина волны (под которую рассчитывается элемент);  $d_{k-1}$  и  $d_k$  – периоды фотонно-кристаллических структур, рассчитанные в конце предыдущей и текущей итераций соответственно.

$$d_k = d_{k-1} \frac{\lambda_0}{\lambda'}. \quad (2)$$

При этом все пропорции неоднородностей внутри ФК (например,  $\gamma$  – отношение периода к радиусу цилиндра) сохраняются, и геометрические

Таблица. Характеристика итерационного процесса  
Table. Iterative process characteristics

$k$	$\lambda'$ , мкм	$d^{k-1}$ , мкм	$\delta$
1	60,6	40	91,4
2	63,1	41,6	95,9
3	68	44,3	96,7
4	59	49,5	97,2

размеры упомянутых неоднородностей пересчитываются в соответствии с этими пропорциями.

На каждой итерации моделирование сопровождается распространением через новую структуру одного и того же импульса с центральной длиной волны  $\lambda_0$  (или импульсов, содержащих  $\lambda_0$ ). Критерием останова итерационного процесса будет достижение наперед заданного значения эффективности на центральной длине волны  $\lambda_0$  или превышение наперед заданного числа итераций.

Повторно отмечается, что для расчета диэлектрических структур довольно одной итерации при искусственном допущении об отсутствии дисперсии материала (такое допущение хотя и «нефизично», но позволяет быстро получить результат). Учет дисперсии обязателен для численной устойчивости FDTD-метода при работе с металл-диэлектрическими структурами, что обуславливает итерационный характер предлагаемого подхода к расчету таких ФК-элементов.

Изложенное можно проиллюстрировать на примере расчета ФК-волновода из [4], где рассматривается двумерный кристалл, задаваемый решеткой из медных стержней кругового сечения ( $\gamma = 2,62$ ). Линейный дефект (часть стержней вдоль выбранного направления удалена, рис. 1) обуславливает каналирование терагерцового излучения на длине волны  $\lambda_0 = 59$  мкм.

### 3. Результаты и обсуждение

Для обоснования функциональности предложенного метода в эксперименте (используя среду Ansys Lumerical FDTD [6]) было взято наперед заданное значение периода решетки ФК-волновода  $d = 40$  мкм, не дающее высокой эффективности распространения излучения. В ходе применения итерационного процесса (см. таблицу) результат сошелся к решетке с периодом  $d = 50$  мкм из [4], что и подтверждает работоспособность предложенного подхода.

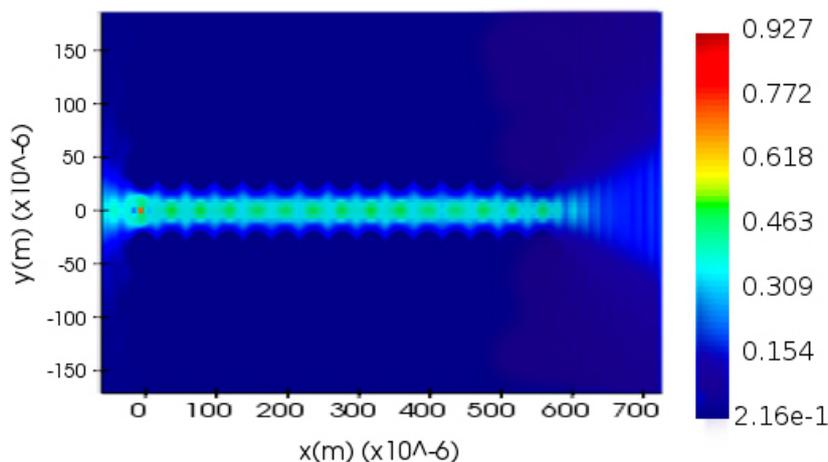


Рис. 2. Дифракционная картина (модуль комплексной амплитуды) перед первой итерацией  
Fig. 2. Initial diffraction pattern (modulus of a complex amplitude)

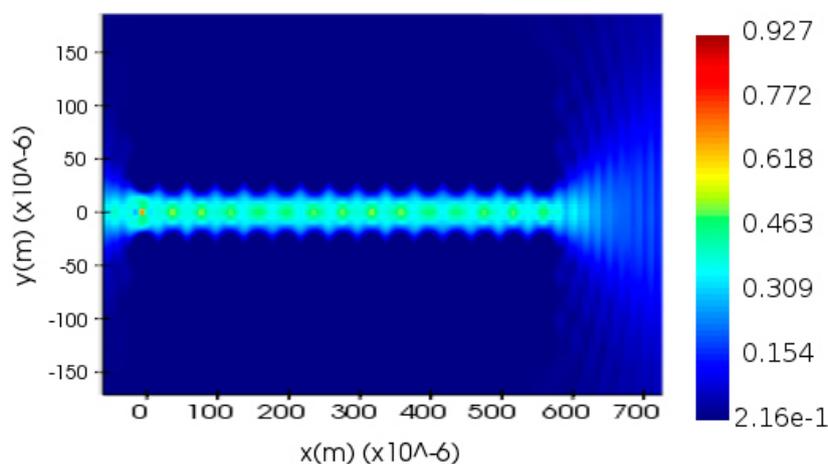


Рис. 3. Дифракционная картина (модуль комплексной амплитуды) после последней итерации  
Fig. 3. Resulting diffraction pattern (modulus of a complex amplitude)

На рис. 2 и 3 представлены дифракционные картины, характеризующие работу элемента до улучшения и последний шаг итерационного процесса соответственно. Видно, что с увеличением номера итерации эффективность каналирования излучения в рассчитанных фотонно-кристаллических волноводах возрастает.

Стоит отметить, что использованный пакет моделирования также позволяет снимать показания с экранов. Предполагается, что эти экраны установлены в начале и конце волновода. Анализируя выходные данные, можно получить графическое и численное сравнение показаний величины квадрата амплитуды (интенсивности) излучения на разных участках. Падение величины квадрата ам-

плитуды (интенсивности) означает более низкую эффективность волноводной структуры.

### Заключение

Обоснован и формализован подход на основе FDTD-метода к синтезу металл-диэлектрических ФК-структур. На выбранном примере двумерного кристалла, задаваемого решеткой медных стержней кругового сечения, демонстрируется работоспособность предложенного подхода.

Предполагаемое развитие связано с расчетом более сложных ФК-структур и строгим математическим обоснованием сходимости итерационного процесса.

### Список литературы

1. Advances in Photonic Crystals and Devices / ed. by N. Kumar, B. Suthar. London: CRC Press, 2020. 358 p. <https://doi.org/10.1201/9781351029421>
2. Hossain M.S., Shuvo S., Hossain M.M. Design of a chemical sensing circular photonic crystal fiber with high relative sensitivity and low confinement loss for terahertz (THz) regime // Optik. 2020. Vol. 222. P. 165359. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165359>

3. Johnson S.G., Oskooi A., Taflove A. *Advances in FDTD Computational Electrodynamics* Photonics and Nanotechnology. London: Artech House, 2013. 670 p.
4. Degirmenci E., Surre F., Landais P. THz waveguide and bends based on metallic photonic crystals // *Terahertz and Mid Infrared Radiation*. Dordrecht: Springer Netherlands, 2011. P. 23–27. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-94-007-0769-6\\_4](https://doi.org/10.1007/978-94-007-0769-6_4)
5. СВЧ фотонные кристаллы – новый тип функциональных структур, применяемых в радиоэлектронике / Д.А. Усанов [и др.] // *Физика волновых процессов и радиотехнические системы*. 2016. Т. 19, № 3. С. 17–24. URL: <https://journals.ssau.ru/pwp/article/view/7133>
6. Ansys Lumerical FDTD. URL: <https://www.ansys.com/products/photonics/fdtd>
7. Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method / A.F. Oskooi [et al.] // *Computer Physics Communications*. 2010. Vol. 181, no. 3. P. 687–702. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>
8. Мокшин П.В., Головашкин Д.Л., Павельев В.С. Итерационный подход на основе FDTD-метода к расчету металл-диэлектрических фотонно-кристаллических элементов // *Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2022): сб. тр. по материалам VIII Междунар. конф. и молодеж. шк. 2022*. С. 010282.
9. Iterative approach based on the FDTD method for the design of metal-dielectric photonic crystal devices / P. Mokshin [et al.] // *2022 VIII International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT)*. 2022. P. 1–4. DOI: <https://doi.org/10.1109/ITNT55410.2022.9848523>

## Информация об авторах

**Мокшин Павел Валериевич**, инженер кафедры наноинженерии Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева, г. Самара, Россия.

*Область научных интересов:* компьютерное моделирование, фотонные кристаллы, оптические наноструктуры.

*E-mail:* [mokshinfabio@gmail.com](mailto:mokshinfabio@gmail.com)

*ORCID:* <https://orcid.org/0000-0003-4274-0528>

*ResearcherID (WoS):* ABU-1498-2022

**Головашкин Дмитрий Львович**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладных математики и физики Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева; ведущий научный сотрудник лаборатории дифракционной оптики ИСОИ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Самара, Россия.

*Область научных интересов:* вычислительная физика, интеллигентоведение.

*E-mail:* [golovashkin2010@yandex.ru](mailto:golovashkin2010@yandex.ru)

*ORCID:* <https://orcid.org/0000-0001-8628-5382>

*SPIN-код (eLibrary):* 6299-5954

*AuthorID (eLibrary):* 108750

*ResearcherID (WoS):* M-2676-2013

**Павельев Владимир Сергеевич**, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой наноинженерии Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева; главный научный сотрудник лаборатории микро- и нанотехнологий ИСОИ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Самара, Россия.

*Область научных интересов:* дифракционная микрооптика, оптические волноводы, нанопотоника, синтез оптических метаматериалов, технологии формирования микро- и наноструктур.

*E-mail:* [nano@ssau.ru](mailto:nano@ssau.ru)

*ORCID:* <https://orcid.org/0000-0003-2803-2138>

*SPIN-код (eLibrary):* 4577-8028

*AuthorID (eLibrary):* 10688

*ResearcherID (WoS):* B-4395-2014

---

## Physics of Wave Processes and Radio Systems

2027, vol. 27, no. 3, pp. 34–39

DOI [10.18469/1810-3189.2024.27.3.34-39](https://doi.org/10.18469/1810-3189.2024.27.3.34-39)

UDC 535.1

Original Research

Received 12 February 2024

Accepted 14 March 2024

Published 30 September 2024

## Iterative approach for photonic crystal devices design

Pavel V. Mokshin<sup>1</sup> , Dmitry L. Golovashkin<sup>1,2</sup> , Vladimir S. Pavelyev<sup>1,2</sup> 

<sup>1</sup> Samara National Research University

34, Moskovskoye shosse,

Samara, 443086, Russia

<sup>2</sup> IPSI RAS – Branch of FSRC «Crystallography and Photonics» RAS

151, Molodogvardeyskaya Street,

Samara, 443001, Russia

**Abstract – Background.** An approach to the design of photonic crystal devices is proposed, which differs from the known general-purpose optimization methods (for example, a genetic algorithm or gradient procedures) by using information about diffraction patterns at different frequencies when optimizing an element designed to operate at the selected wavelength. The design of functional photonic crystal structures with expected characteristics (for example, waveguides) for a certain wavelength (albeit given by a monochromatic radiation source) is described. **Aim.** Development based on the FDTD method and confirmation of the functionality of the iterative procedure for calculating the characteristics of metal-dielectric photonic crystal lattices. **Methods.** The study is based on an iterative approach to the design of photonic crystal elements based on the use of the FDTD method. **Results.** Model examples were used for demonstration of practical convergence and applicability of the developed iterative procedure. The efficiency of the photonic crystal waveguide, understood as the ratio of the output energy to the input energy, was increasing at each iteration up to 97,2 %. **Conclusion.** The method of synthesis of metal-dielectric photonic crystal structures with preset properties based on application of developed iterative procedure is proposed and argued. The results of the analysis of the 2D photonic crystal waveguide based on a set of round copper rods show the applicability of the proposed method.

**Keywords** – photonic crystal; iteration method; waveguide; FDTD; diffraction.

✉ mokshinfabio@gmail.com (Pavel V. Mokshin)

 © Pavel V. Mokshin et al., 2024

## References

1. N. Kumar and B. Suthar, Eds. *Advances in Photonic Crystals and Devices*. London: CRC Press, 2020, doi: <https://doi.org/10.1201/9781351029421>.
2. M. S. Hossain, S. Shuvo, and M. M. Hossain, “Design of a chemical sensing circular photonic crystal fiber with high relative sensitivity and low confinement loss for terahertz (THz) regime,” *Optik*, vol. 222, p. 165359, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165359>.
3. S. G. Johnson, A. Oskooi, and A. Taflove, *Advances in FDTD Computational Electrodynamics Photonics and Nanotechnology*. London: Artech House, 2013.
4. E. Degirmenci, F. Surre, and P. Landais, “THz waveguide and bends based on metallic photonic crystals,” *Terahertz and Mid Infrared Radiation*. Dordrecht: Springer Netherlands, pp. 23–27, 2011, doi: [https://doi.org/10.1007/978-94-007-0769-6\\_4](https://doi.org/10.1007/978-94-007-0769-6_4).
5. D. A. Usanov et al., “Microwave photonic crystals - a new type of functional structures in radioelectronics,” *Physics of Wave Processes and Radio Systems*, vol. 19, no. 3, pp. 17–24, 2016, url: <https://journals.ssau.ru/pwp/article/view/7133>. (In Russ.)
6. Ansys Lumerical FDTD. URL: <https://www.ansys.com/products/photonics/fdtd>
7. A. F. Oskooi et al., “Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method,” *Computer Physics Communications*, vol. 181, no. 3, pp. 687–702, 2010, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>.
8. P. V. Mokshin, D. L. Golovashkin, and V. S. Pavel'ev, “Iterative approach based on the FDTD method for the calculation of metal-dielectric photonic crystal elements,” *Informatsionnye tekhnologii i nanotekhnologii (ITNT-2022): sb. tr. po materialam VIII Mezhdunar. konf. i molodezh. shk.*, p. 010282, 2022. (In Russ.)
9. P. Mokshin et al., “Iterative approach based on the FDTD method for the design of metal-dielectric photonic crystal devices,” *2022 VIII International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT)*, pp. 1–4, 2022, doi: <https://doi.org/10.1109/ITNT55410.2022.9848523>.

## Information about the Authors

**Pavel V. Mokshin**, engineer of the Department of Nanoengineering, Samara National Research University, Samara, Russia.

*Research interests:* computational modeling, photonic crystal, optical nanostructures.

*E-mail:* mokshinfabio@gmail.com

*ORCID:* <https://orcid.org/0000-0003-4274-0528>

*ResearcherID (WoS):* ABU-1498-2022

**Dimitriy L. Golovashkin**, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor of the Applied Mathematics and Physics Department, Samara National Research University; leading researcher of the Laboratory of Diffractive Optics, IPSI RAS – Branch of FSRC «Crystallography and Photonics» RAS, Samara, Russia.

*Research interests:* computational physics, intellectual studies.

*E-mail:* golovashkin2010@yandex.ru

*ORCID:* <https://orcid.org/0000-0001-8628-5382>

*SPIN-code (eLibrary):* 6299-5954

*AuthorID (eLibrary):* 108750

*ResearcherID (WoS):* M-2676-2013

**Vladimir S. Pavelyev**, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, head of Nanoengineering Department, Samara National Research University; chief researcher of the Laboratory of Micro- and Nanotechnology, IPSI RAS – Branch of FSRC «Crystallography and Photonics» RAS, Samara, Russia.

*Research interests:* diffractive microoptics, optical waveguides, nanophotonics, optical metamaterials synthesis, technologies for forming of micro- and nanostructures.

*E-mail:* nano@ssau.ru

*ORCID:* <https://orcid.org/0000-0003-2803-2138>

*SPIN-code (eLibrary):* 4577-8028

*AuthorID (eLibrary):* 10688

*ResearcherID (WoS):* B-4395-2014