

# CARATTERIZZAZIONE ACCURATA ED EFFICIENTE DI MATERIALI 2D-PBG MEDIANTE UN METODO FULL-WAVE PER RETICOLI DIFFRATTIVI

Lara Pajewski

Università "La Sapienza" di Roma, Dipartimento di Ingegneria Elettronica  
Via Eudossiana 18, 00184 Roma – E-mail: [lara.pajewski@uniroma1.it](mailto:lara.pajewski@uniroma1.it)

## Abstract

*In this paper an accurate and efficient characterization of two-dimensional photonic band-gap (2D-PBG) materials is performed, which exploits a full-wave theory developed for diffraction gratings. PBG structures constituted by 2D arrays of dielectric rods with arbitrary shape and lattice configuration can be analyzed by the proposed method. Results are presented for both TE and TM polarization, showing the efficiencies as a function of frequency and physical parameters. Comparisons with theoretical results reported in the literature are shown with a very good agreement, and the proposed method is also favourably compared with available experimental data. Design efficiency maps are reported, by which an immediate visualization of the band-gap configurations can be obtained, and design formulas are included. The behavioral differences when a periodical defect is present are also highlighted.*

## 1. INTRODUZIONE

I materiali a band-gap fotonico (*Photonic Band-Gap* - PBG) [1] sono strutture periodiche di grande interesse per le loro applicazioni alle frequenze delle microonde e delle onde millimetriche. Nelle strutture PBG, inclusioni di opportuna costante dielettrica sono immerse periodicamente in un materiale ospite. La principale caratteristica dei materiali PBG è la presenza di bande di frequenza entro le quali le onde non si possono propagare. Questa interessante proprietà viene sfruttata in numerose applicazioni: antenne, guide d'onda, filtri, riflettori planari, circuiti integrati, risonatori ad elevato o basso Q, nanocavità ottiche, ed altre. La maggior parte delle applicazioni di materiali PBG coinvolge strutture bidimensionali (2D), invarianti lungo una direzione e periodiche nel piano ortogonale.

Per l'analisi ed il progetto di materiali PBG sono tipicamente impiegati i metodi dell'espansione in onde piane, delle differenze finite, degli elementi finiti, o delle matrici di trasferimento. In questo lavoro si mostra come un metodo full-wave per reticoli diffrattivi possa essere applicato allo studio accurato, versatile e rapido di strutture finite 2D-PBG. Tali strutture possono, infatti, essere considerate come una pila di reticoli unidimensionali separati da strati omogenei, e quindi possono essere caratterizzate facendo uso di una teoria rigorosa della diffrazione da reticoli multistrato.

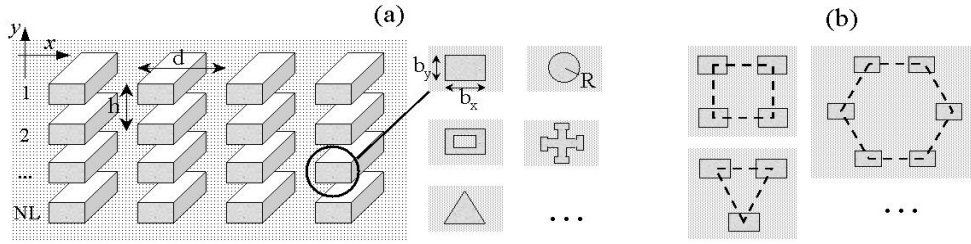
## 2. ANALISI TEORICA

Per risolvere esattamente il problema elettromagnetico associato ad un reticolo diffrattivo multistrato, è necessario risolvere le equazioni di Maxwell nella regione di incidenza, negli strati che costituiscono il reticolo, e nella regione di trasmissione. Si supponga che un'onda piana incida con angolo  $\theta$  su un reticolo di periodo  $d$ . Nelle regioni di incidenza e trasmissione si esprimono i campi mediante sviluppi di Rayleigh. Nel  $j$ -esimo strato del reticolo i campi vengono espressi mediante sviluppi modali, associati alla soluzione delle seguenti equazioni agli autovalori nelle polarizzazioni TE e TM:

$$k_y^{(j)2} E_m^{(j)} + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} E_p^{(j)} (\delta_{mp} k_{px}^2 - \alpha_{m-p}^{(j)} k^2) = 0 \quad (\text{TE})$$
$$H_m^{(j)} = k^2 \sum_{p=-\infty}^{+\infty} G_p^{(j)} \|\beta^{-1}\|_{pm}^{(j)} = 0 \quad k_y^{(j)2} k^2 G_m^{(j)} = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} (k^2 \delta_{mp} - k_{mx} \|\alpha^{-1}\|_{mp}^{(j)} k_{px}) H_p^{(j)} \quad (\text{TM})$$

dove  $m=0,\pm 1,\dots$ ;  $E_m^{(j)}, H_m^{(j)}, G_m^{(j)}$  sono gli autovettori e  $k_y^{(j)2}$  gli autovalori,  $\alpha_{m-p}^{(j)}$  e  $\beta_{m-p}^{(j)}$  sono i coefficienti dello sviluppo in serie di Fourier della permittività dello strato  $\varepsilon(x)^{(j)}$  e del suo inverso  $\varepsilon^{-1}(x)^{(j)}$ ,  $\|\alpha^{-1}\|_{mp}^{(j)}$  e  $\|\beta^{-1}\|_{mp}^{(j)}$  sono gli elementi delle matrici generate invertendo le matrici di Toeplitz  $\|\alpha\|^{(j)}$  e  $\|\beta\|^{(j)}$  (con  $\|\alpha\|_{mp}^{(j)}=\alpha_{m-p}^{(j)}$  e  $\|\beta\|_{mp}^{(j)}=\beta_{m-p}^{(j)}$ ),  $\delta_{mp}$  è il simbolo di Kronecker,  $k$  è il numero d'onda nel vuoto,  $k_{px}=2\pi x/d+n_1\sin\theta$  esprime la condizione di Floquet (essendo  $n_1$  l'indice di rifrazione della regione di incidenza). In corrispondenza delle superfici di interfaccia si impongono le condizioni al contorno per le componenti tangenziali dei campi elettrici e magnetici, e si ottiene un sistema di equazioni che deve essere risolto per determinare le ampiezze dei campi riflesso e trasmesso. Per migliorare la stabilità numerica e l'efficienza dei codici implementati, è stata applicata la tecnica proposta in [2].

Il metodo proposto permette di analizzare e progettare, in modo stabile e rapidamente convergente, strutture PBG costituite da inclusioni di sezione arbitraria, con distribuzione all'interno della cella base di tipo qualsiasi (Fig. 1). Le inclusioni ed il materiale ospite possono essere dielettrici, isotropi o anisotropi, oppure metalli. Si possono tenere in considerazione le perdite. E' inoltre possibile studiare materiali PBG in cui siano presenti difetti periodici: strutture in cui alcune inclusioni siano assenti, o presentino parametri fisici e geometrici diversi dalle altre. L'occorrenza di difetti può essere dovuta ad errori di fabbricazione; spesso, tuttavia, si introducono appositamente dei difetti periodici nei materiali PBG per realizzare filtri o switch: l'introduzione di un difetto può infatti provocare, nella risposta del PBG, la presenza di uno stretto picco di trasmissione all'interno di una banda proibita.

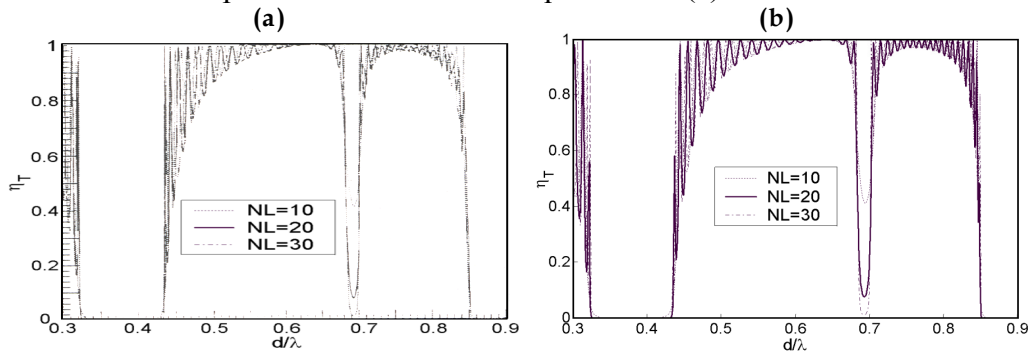


**Fig. 1** – Con il metodo proposto è possibile studiare materiali PBG con inclusioni che presentino arbitraria sezione trasversa (a) e disposizione all'interno della cella base (b).

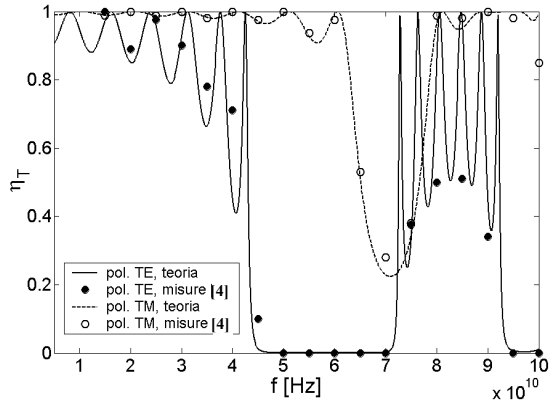
### 3. RISULTATI NUMERICI

I simboli utilizzati in questo paragrafo sono introdotti in Fig. 1. Inoltre  $n_b$  e  $n_o$  sono gli indici di rifrazione delle barre e del materiale ospite, rispettivamente.

In Fig. 2 è mostrato un confronto con i risultati ottenuti in [3] per una struttura PBG di barre con sezione e disposizione nella cella base quadrate: in (b) l'efficienza di trasmissione  $\eta_T$



**Fig. 2** – Confronto tra i risultati ottenuti in [3] (a) e in questo lavoro (b), per una struttura PBG di barre con sezione e disposizione nella cella base quadrate:  $d=h$ ,  $b_x=0.5d$ ,  $n_b=2$ ,  $n_o=1$ ,  $\theta=0$ . L'efficienza di trasmissione  $\eta_T$  è graficata vs.  $d/\lambda$ , nel caso di polarizzazione TE, per diversi valori di NL.



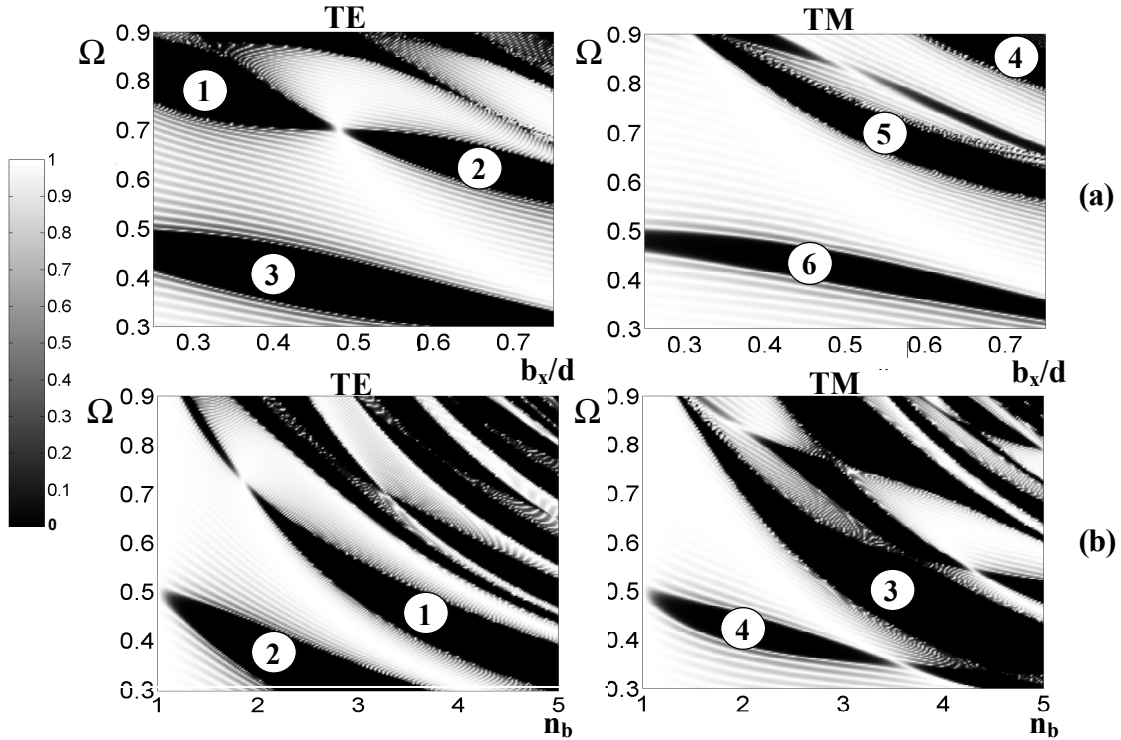
**Fig. 3** – Confronto con i risultati sperimentali ottenuti in [4], per una struttura PBG di barre a sezione circolare disposte a quadrato:  $d=h=1.87\text{mm}$ ,  $R=0.37\text{mm}$ ,  $n_b=2.98$ ,  $n_o=1$ ,  $NL=7$ ,  $\theta=0$ ;  $\eta_T$  è graficata in funzione della frequenza.

fattore di riempimento e dell'indice di rifrazione delle barre. In Fig. 4(a) sono riportate due mappe in scala di grigi (una per ogni polarizzazione), per  $\eta_T$  in funzione di  $\Omega=d/\lambda$  e  $b_x/d=b_y/d$ . La scala di grigi va dal nero ( $\eta_T=0$ ) al bianco ( $\eta_T=1$ ), quindi le mappe forniscono un'indicazione completa del comportamento della struttura al variare del fattore di riempimento e le zone nere consentono di individuare in maniera immediata la configurazione delle bande proibite (le più ampie delle quali sono numerate). Analogamente, in Fig. 4(b) sono riportate due mappe in scala di grigi per  $\eta_T$  in funzione di  $\Omega$  e  $n_b$ . Effettuando un'interpolazione polinomiale dei risultati numerici calcolati, si sono inoltre derivate formule di progetto per la frequenza centrale  $\Omega_c$  e l'ampiezza di banda proibita  $\Delta\Omega$ , in funzione di  $b_x/d$  e  $n_b$ . Nel seguito, il pedice  $i$  denota band-gap diversi, con riferimento alle

calcolata con il metodo qui proposto, è graficata in funzione di  $d/\lambda$ , nel caso di polarizzazione TE, per diversi valori di  $NL$ : le curve possono essere direttamente confrontate con i risultati di [3], riportati in Fig. 2(a), e si può notare che c'è ottimo accordo.

In Fig. 3 è riportato un confronto con i dati sperimentali misurati in [4], per una struttura PBG di barre a sezione circolare disposte a quadrato. Le misure si riferiscono, ovviamente, ad un array finito di cilindri di lunghezza finita. Si può notare che c'è buon accordo.

Ora si consideri nuovamente la struttura di Fig. 2, con  $NL=20$ , allo scopo di studiare gli effetti di una variazione del



**Fig. 4** – Mappe di  $\eta_T$  per la struttura di Fig. 2, con  $NL=20$ , in funzione di  $\Omega$  e (a)  $b_x/d$ , (b)  $n_b$ .

etichette della Fig. 4; il grado dei polinomi è stato scelto con un compromesso tra accuratezza e semplicità delle formule; a fianco di ogni coppia di formule è specificato l'intervallo di validità ( $\eta_T < 0.001$ ), ed i vari coefficienti sono riportati in Tab. I:

$$\Omega_{ci} = A_{2i}(b_x/d)^2 + A_{1i}b_x/d + A_{0i}; \quad \Delta\Omega_i = B_{2i}(b_x/d)^2 + B_{1i}b_x/d + B_{0i} \quad (C_{i,\min} \leq b_x/d \leq C_{i,\max})$$

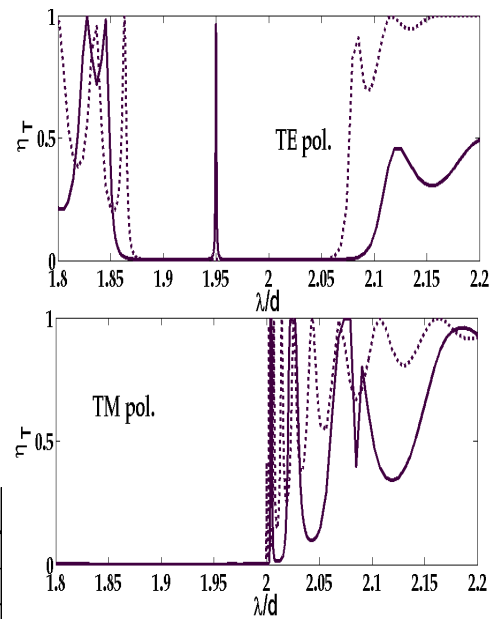
$$\Omega_{ci} = A_{3i}n_b^3 + A_{2i}n_b^2 + A_{1i}n_b + A_{0i}; \quad \Delta\Omega_i = B_{3i}n_b^3 + B_{2i}n_b^2 + B_{1i}n_b + B_{0i} \quad (C_{i,\min} \leq n_b \leq C_{i,\max})$$

Infine si considera un esempio di materiale PBG con difetto periodico. I parametri che caratterizzano la struttura priva di difetto sono:  $d=h$ ,  $NL=11$ ,  $n_b=3.6$ ,  $n_o=1$ ,  $b_x=b_y=0.4d$ . Il difetto è costituito dalla presenza di uno strato centrale con barre aventi  $b_y=1.2d$ . Nella Fig. 5,  $\eta_T$  è riportata in funzione di  $d/\lambda$  per entrambe le polarizzazioni: la linea continua si riferisce al materiale PBG con difetto, il tratteggio alla corrispondente struttura priva di difetto. Quest'ultima presenta una banda proibita ad entrambe le polarizzazioni per  $1.89 \leq d/\lambda \leq 2$ . Si nota che l'introduzione del difetto provoca all'interno della banda proibita, per la polarizzazione TE, la comparsa di uno stretto picco di trasmissione centrato in  $d/\lambda=1.95$ . La struttura si comporta dunque come un filtro per la polarizzazione TE, mentre si ha propagazione proibita per la polarizzazione TM.

i	$A_{0i}$	$A_{1i}$	$A_{2i}$	$B_{0i}$	$B_{1i}$	$B_{2i}$	$C_{i,\min}$	$C_{i,\max}$
1	0.878	-0.028	-0.745	-0.331	3.216	-5.476	0.25	0.448
2	0.905	-0.429	0.015	-1.085	3.406	-2.486	0.524	0.75
3	0.533	-0.280	-0.049	-0.135	1.080	-1.194	0.25	0.617
4	3.360	-6.151	3.712	-4.044	11.346	-7.796	0.72	0.75
5	1.353	-1.693	0.921	-0.186	0.866	-0.719	0.34	0.75
6	0.547	-0.186	-0.124	-0.320	1.297	-1.199	0.418	0.687

i	$A_{0i}$	$A_{1i}$	$A_{2i}$	$A_{3i}$	$B_{0i}$	$B_{1i}$	$B_{2i}$	$B_{3i}$	$C_{i,\min}$	$C_{i,\max}$
1	1.331	-0.453	0.077	-0.005	-0.589	0.481	-0.111	0.008	2.17	5
2	0.659	-0.172	0.016	0	-0.594	0.649	-0.149	0	1.4	2.2
3	1.591	-0.675	0.148	-0.012	-0.058	0.025	0.028	-0.005	1.42	5
4	0.553	-0.076	0.006	0	-0.386	0.383	-0.088	0	1.74	2.69

**Tab. I** – Coefficienti delle formule per la frequenza centrale e l'ampiezza di banda proibita, in funzione di  $b_x/d$  (tabella in alto) e  $n_b$  (tabella in basso).



**Fig. 5** –  $\eta_T$  (tratto continuo) vs.  $d/\lambda$  per una struttura con  $d=h$ ,  $NL=11$ ,  $n_b=3.6$ ,  $n_o=1$ ,  $b_x=b_y=0.4d$ ; lo strato centrale ha  $b_y=1.2d$ . Il tratteggio si riferisce alla stessa struttura senza difetto.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade e J. N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1995.
- [2] M. G. Moharam, D. A. Pommet, E. B. Grann e T. K. Gaylord, "Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach", *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 12, pp. 1077-1086, maggio 1995.
- [3] S. T. Peng e R. B. Hwang, "Dispersion characteristics of two-dimensionally periodic structures", *Proc. 2001 URSI International Symposium on Electromagnetic Theory*, pp. 317-319, Victoria, Canada, maggio 2000.
- [4] J. M. Elson e P. Tran, "Dispersion in photonic media and diffraction from gratings: a different modal expansion for the R-matrix propagation technique", *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 12, pp. 1765-1771, agosto 1995.