

나노포토닉스 연구실 강의 노트

## 유한 요소 시간 영역 방법의 기초

Introduction to Finite-Difference Time-Domain Method

김 세 현  
한국과학기술원

2006년 12월 22일

물의 성질을 계산으로 알아낼 수도 있지만, 그 성질을 직접 측정하는 것보다 더 의미 있는 것은 아니다.

*You can calculate the properties of water, but it makes so much more sense just to measure them.*

*- Lev Landau*

# 목 차

## 목 차

<b>제 1 장</b>	<b>서론: 맥스웰 방정식(Maxwell equation)의 기초</b>	<b>1</b>
1.1	Helmholtz의 정리 . . . . .	1
1.2	맥스웰 방정식의 포텐셜 해 . . . . .	2
1.2.1	Lorenz 조건 . . . . .	4
1.2.2	Coulomb 조건 . . . . .	4
1.3	이 장의 과제 . . . . .	5
<b>제 2 장</b>	<b>유한요소 시간 영역 방법(FDTD)의 기초</b>	<b>6</b>
2.1	1차원 스칼라 파동 방정식의 전산 모사 방법 . . . . .	6
2.2	수치 분산 (Numerical Dispersion) . . . . .	8
2.3	수치 안정성 (Numerical Stability) . . . . .	8
2.4	Yee Cell과 3차원 FDTD . . . . .	9
2.5	Real world vs. FDTD Space . . . . .	12
2.6	이 장의 과제 . . . . .	16
<b>제 3 장</b>	<b>Contour FDTD</b>	<b>18</b>
3.1	광대역 source를 이용한 공진 모드 찾기 . . . . .	19
3.2	하나의 공진 모드만을 선택하기 . . . . .	22
3.3	이 장의 과제 . . . . .	23
<b>제 4 장</b>	<b>예제로 배우는 FDTD</b>	<b>24</b>
4.1	Point Dipole Source와 흡수 경계 조건 . . . . .	28
4.1.1	왜 흡수 경계 조건이 필요한가? . . . . .	29
4.1.2	Electric Dipole과 Magnetic Dipole . . . . .	30
4.1.3	Gaussian Dipole과 Lorentzian Dipole . . . . .	31
4.1.4	Poynting 에너지 계산할 때 주의할 점 . . . . .	32
4.2	Microdisk 공진 모드 분석 . . . . .	35
4.2.1	광대역 source를 이용한 공진 모드 찾기 . . . . .	36
4.2.2	하나의 공진 모드만을 선택하기 . . . . .	38
4.3	이차원 광결정 슬랩과 자발 방출 조절 . . . . .	40

4.3.1	Purcell 효과와 자발 방출 조절 이론 . . . . .	40
4.3.2	광결정 슬랩을 이용한 자발 방출 조절 . . . . .	50
4.4	이차원 광결정 공진기 모드 분석 . . . . .	52
4.4.1	광대역 source를 이용한 공진 모드 찾기 . . . . .	52
4.4.2	하나의 공진 모드만을 선택하기 . . . . .	54
4.5	이 장의 과제 . . . . .	56
<b>제 5 장</b>	<b>부록 : KAIST FDTD 함수 설명</b>	<b>58</b>
5.1	FDTD 기본 변수 설정 . . . . .	58
5.2	FDTD 계산 구조 설정 . . . . .	59
5.3	FDTD 계산 수행시 필요한 함수 . . . . .	61
5.4	결과 출력 함수 . . . . .	62
5.5	기타 함수 . . . . .	64
<b>참 고 문 헌</b>		<b>66</b>

# 제 1 장 서론: 맥스웰 방정식(Maxwell equation)의 기초

미소 원반(microdisk)[1]이나 미소 기둥 공진기(micropillar)[2]의 경우 구조 자체가 지닌 회전 대칭성으로 인하여 공진 모드의 해석적인 분석이 가능하다. 하지만 광결정 공진기의 경우 광결정 패턴이 지닌 복잡성으로 인해 공진 모드의 특성을 해석적으로 분석하는 것이 거의 불가능하다고 할 수 있다. 그러므로 전산 모사(numerical simulation)의 방법을 이용하여 광결정 공진기를 분석할 수 밖에 없게 되는데, 대표적으로 많이 이용되는 것이 ‘유한 요소 시간 영역 방법 (Finite-Difference Time Domain; FDTD)’이다.

FDTD 방법은 공간과 시간을 유한한 크기의 증분  $\Delta x$ 와  $\Delta t$ 로 가정하고, 공간의 각 셀(cell)에 위치한 전기장 벡터  $\vec{E}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$ 와 자기장 벡터  $\vec{H}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$  데이터들을 맥스웰 방정식(Maxwell equation)을 만족하도록 업데이트하여 시간  $n\Delta t$ 에서의 데이터를 계산하는 것이다. 2장에서 살펴보겠지만  $\Delta x \rightarrow 0$ 와  $\Delta t \rightarrow 0$ 인 극한에서 전산 모사의 결과는 정확해진다. 즉, 컴퓨터의 메모리와 계산 속도가 허용하는 범위내에서 최적의  $\Delta x$ 와  $\Delta t$ 를 선택하여 계산하면,<sup>1</sup> 계산 영역 내에 있는 모든 점에서의 모든 field 성분을 시간의 함수로 알아낼 수 있으므로, 주어진 광결정 공진 모드의 여러가지 특성들(예: 공진 주파수, 모드의 패턴, 품질값 등)을 계산하는데 유용하게 사용될 수 있다.[3] 또한 계산 구조가 거울 대칭성을 지니고 있거나, 주기성을 갖고 있으면 ‘거울상 경계 조건(mirror boundary condition)’이나 ‘주기적 경계 조건(periodic boundary condition)’을 적용하여 계산의 효율성을 높일 수 있다. FDTD 알고리즘에 관한 보다 깊은 논의는 Taflovie 책[4]을 참조하기 바란다.

이 장에서는 유한 요소 시간 영역의 방법으로 풀게될 맥스웰 방정식에 대한 기본 지식을 다루기로 한다. 맥스웰 방정식은 수학적인 형태만 보면 전기장  $\vec{E}$ 와 자기장  $\vec{B}$ 을 변수로 하는 미분방정식이다. 이 방정식을 풀게 되면  $\vec{E}$ 와  $\vec{B}$ 의 전 공간 영역에서의 시간 변화를 알게되고, 그것으로 전자기의 전파 상황에 대한 모든 정보를 구할 수 있는 것이다. 여기서 다루는 전자기장은 벡터장(vector field)이다.<sup>2</sup> 그러므로 맥스웰 방정식을 본격적으로 다루기 전에 벡터장이 일반적으로 만족해야 하는 성질에 대해서 말하고 있는 Helmholtz의 정리를 살펴본다. 다음으로 스칼라 포텐셜(potential)과 벡터 포텐셜 함수를 사용하여 맥스웰 방정식을 변환하도록 하겠다. 이 과정을 통해서 맥스웰 방정식이 내포하고 있는 전자기장의 해의 성질에 관하여 보다 잘 이해할 수 있을 것이다.

## 1.1 Helmholtz의 정리

“임의의 벡터장  $\vec{C}(\vec{x})$ 는 다음과 같이 비확산(divergence-free) 벡터장과 비회전(irrotational) 벡터장으로 분해될 수 있다.

<sup>1</sup> 뒷 절에서 다루겠지만,  $\Delta x$ 와  $\Delta t$ 를 임의로 선택할 수 있는 것은 아니다. 수치 안정성(numerical stability)을 만족하도록  $\Delta x$ 와  $\Delta t$  사이에 성립해야만 하는 관계식이 있다.

<sup>2</sup> 텐서 변환 관계식을 만족하여야 한다. Arfken[5]을 참조.

즉,  $\vec{C}(\vec{x}) = \vec{D}(\vec{x}) + \vec{F}(\vec{x})$  일 때,  $\vec{D}(\vec{x})$ 와  $\vec{F}(\vec{x})$ 는

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{D}(\vec{x}) &= 0 \\ \nabla \times \vec{F}(\vec{x}) &= 0\end{aligned}\tag{1.1}$$

를 만족한다.”

증명은 다음과 같다.  $\vec{D}$ 와  $\vec{F}$ 가 만족해야 하는 위의 조건으로부터,

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \nabla \times \vec{A} \\ \vec{F} &= -\nabla\Phi\end{aligned}\tag{1.2}$$

를 만족하는 벡터 포텐셜  $\vec{A}$ 와 스칼라 포텐셜  $\Phi$ 를 찾을 수 있다. 식 (1.2)을 식 (1.1)에 대입하면,

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{C} &= -\nabla^2\Phi \\ \nabla \times \vec{C} &= \nabla \times \nabla \times \vec{A}\end{aligned}\tag{1.3}$$

를 얻는다. 그러므로 임의의 벡터장  $\vec{C}$ 에 대해서 위의 방정식을 만족하는 벡터 포텐셜과 스칼라 포텐셜이 존재함을 보일 수 있다면 Helmholtz 정리를 증명하게 된다. 그런데, 위의 식 (1.3)은 Helmholtz 방정식으로 알려진 유명한 형태의 방정식이고, 그것의 해 또한 잘 알려져 있다. 즉 해를 다음과 같이 적을 수 있고,<sup>3</sup> 문제의 증명은 끝난다.

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{x}) &= \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{\nabla \cdot \vec{C}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \\ \vec{A}(\vec{x}) &= \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{\nabla \times \vec{C}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|}\end{aligned}\tag{1.4}$$

나중에 비확산장을 transverse 장으로, 비회전장을 longitudinal 장으로 부를 것이다. 한편 Helmholtz 정리의 또 다른 형태가 있다. 이것은 벡터장의 유일성에 대해서 말하는 것으로, “ $\nabla \cdot \vec{C}$ 와  $\nabla \times \vec{C}$ 가 정해지면 벡터장  $\vec{C}$ 는 유일하게 정해진다.” 자세한 논의는 Arfken을 참조하기 바란다.[5]

## 1.2 맥스웰 방정식의 포텐셜 해

나중에 FDTD 방법을 사용하여 맥스웰 방정식을 풀게 되겠지만, 여기서는  $\vec{E}$ 와  $\vec{H}$ 에 관한 맥스웰 방정식을 두 개의 포텐셜 함수(벡터 포텐셜, 스칼라 포텐셜)를 사용하여 변형함으로써 풀어본다. 먼저 다음과 같은 맥스웰 방정식을 생각한다.

<sup>3</sup>이것을 보이는 것을 이 장의 과제로 한다.

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t) = \rho & & \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0 \\
\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 & & \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) - \epsilon(\vec{r}) \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{J}(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{1.5}$$

여기서  $\vec{J}$ 는 field를 생성하는 source 항(또는 gain)이 될 수도 있고, field의 에너지를 소모시키는 dissipation 항(또는 loss)이 될 수도 있다. 그러므로  $\vec{J} = \vec{J}_{source} + \sigma \vec{E}$ 와 같이 나누어 적음으로써 의미를 분명히 할 수도 있다.<sup>4</sup> 이 절의 논의를 위하여서는  $\vec{J}$ 가 source 항을 묘사하고 있다고 생각한다. 한편 항상  $\mu = 1$ 이 성립한다고 가정하자. 그러므로  $\vec{B} = \vec{H}$ 이다. 그리고,  $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ 인 선형 물질을 생각한다.

자기장의 divergence-free 관계식으로부터

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \tag{1.6}$$

로 둘 수 있고, 이 식을 전기장의 curl 방정식에 대입하면,

$$\nabla \times \left( \vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0 \tag{1.7}$$

를 얻는다. 위 방정식의 curl-free 결과로부터, 스칼라 포텐셜 함수  $\Phi$ 를 도입할 수 있다.

$$\vec{E} = -\nabla \Phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \tag{1.8}$$

위 식을 다시 전기장의 divergence 방정식에 대입하면,

$$\boxed{\nabla^2 \Phi + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \vec{A}) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}} \tag{1.9}$$

식 (1.6)을 자기장의 curl 방정식에 다시 대입 정리하면

$$\boxed{\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \nabla \left( \nabla \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) = -\mu_0 \vec{J}} \tag{1.10}$$

결국  $\vec{E}$ 와  $\vec{H}$ 에 관한 4개의 맥스웰 방정식을 위의 식 (1.9)와 식 (1.10)에서 처럼, 두 개의 포텐셜을 이용하여 변형하였다(=풀었다). 이와같은 수학적 변형을 통해서 얻어진 두 개의 포텐셜 방정식은 본래의 맥스웰 방정식에 비해서 훨씬 풀기가 쉽다.<sup>5</sup>

앞 절 후반부에서 언급했던 Helmholtz 정리의 두 번째 형태에 따르면, 벡터 포텐셜  $\vec{A}$ 는 식 (1.6)만 가지고서는 유일하게 정해지지 않는다. 원래의 결과  $\vec{B}$ 를 바꾸지 않는 범위 내에서  $\vec{A}$ 를  $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla \Lambda$ 와 같이 변형하는 것이 가능하다.

<sup>4</sup>Taflove 책[4]의 Chap. 3의 맥스웰 방정식과 비교하여 보라.

<sup>5</sup>사실 여기서 얻어진 포텐셜 방정식들은 결국 Helmholtz 방정식과 동일하게 된다. 한편 컴퓨터에게는 본래의 맥스웰 방정식이 훨씬 다루기 쉽다. 그래서 뒤에 나올 FDTD 방법에서는 맥스웰 방정식을 직접 유한 요소법으로 표현한다.

이제  $\vec{A}$ 에 대하여 다음과 같은 두 가지 divergence 조건을 생각하여 본다.

### 1.2.1 Lorenz 조건

이것은  $\nabla \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$ 인 조건이다.<sup>6</sup> Lorenz 조건을 두 개의 포텐셜 방정식(식 (1.9)와 식 (1.10))에 대입하여 정리하면 다음과 같은 Helmholtz 방정식을 얻는다.

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} &= -\mu_0 \vec{J} \\ \nabla^2 \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} &= -\frac{\rho}{\epsilon_0}\end{aligned}\quad (1.11)$$

이와 같은 형태의 방정식의 해는 잘 알려져 있다. 수학적으로 해를 구하는 것은 이 노트의 주제를 벗어나므로 다루지 않기로 한다.<sup>7</sup> 결과만 요약하면, 다음과 같은 형태의 4차원 Helmholtz 방정식에서

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -4\pi f(\vec{x}, t) \quad (1.12)$$

$f(\vec{x}, t)$ 가 source 항의 역할을 하게 되며, 일반해는 source 항의 retardation을 고려하여<sup>8</sup> 다음과 같이 된다.

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int \frac{[f(\vec{x}', t')]_{ret}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3 x' \quad (1.13)$$

여기서  $[\dots]_{ret}$ 는  $t' = t - |\vec{x} - \vec{x}'|/c$  인 retardation을 나타낸다.

즉, source 항  $\vec{J}$ 와  $\rho$ 에 의한 포텐셜이 식 (1.13)으로 주어지고, 다시 식 (1.6)과 식 (1.8)에 대입하여  $\vec{E}$ 와  $\vec{B}$ 를 구하게 된다.

### 1.2.2 Coulomb 조건

이것은  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ 인 조건이다. 이 조건을 만족하는  $\vec{A}$ 를 Coulomb gauge 또는 radiation gauge 또는 transverse gauge라고 부른다.<sup>9</sup> Coulomb 조건을 두 개의 포텐셜 방정식(식 (1.9)와 식 (1.10))에 대입하여 정리하면,

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.14)$$

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \mu_0 \vec{J} \quad (1.15)$$

<sup>6</sup>이 조건이 원래의 E와 B를 바꾸지 않음을 보이는 것이 이 장의 과제이다.

<sup>7</sup>Jackson 책을 참조.[6]

<sup>8</sup>causality를 만족하기 위함

<sup>9</sup>왜 이렇게 부를 수 있는지는 본문의 내용을 통해서 명백해진다.



의 두 방정식을 얻는다. 여기서 식 (1.14)는 다소 의외의 결과라 할 수 있다. 이 경우 스칼라 포텐셜 함수는 정적(static)이며<sup>10</sup> 예를들면 원점에 놓여있는 점전하의 시간 변화에 대해서  $\Phi(\vec{x} \neq 0)$ 는 즉각적으로(instantaneously) 반응해야만 한다! 이것은 어떠한 신호도 광속을 넘을 수 없다는 상대성 원리를 위반하는 것처럼 보인다. 하지만 위의  $\Phi$ 를 사용하여 얻어진  $\vec{E}$ 와  $\vec{B}$ 는 결국 어떠한 gauge를 사용하더라도 동일한 결과를 얻게 된다. 즉, 포텐셜 함수 자체는 물리적 의미를 갖지 않는다. 다만  $\vec{E}$ 와  $\vec{B}$ 를 편리하게 계산할 수 있도록 도와주는 수학적인 가상의 양일 뿐이다.<sup>11</sup>

한편 두 번째 방정식은 4차원 Helmholtz 방정식의 형태이다. 전류벡터  $\vec{J}$ 를 transverse 성분과 longitudinal 성분으로 분해해서 적으면 우변의 source 항은 결국  $-\mu_0 \vec{J}_t$ 로 적을 수 있다.<sup>12</sup> 즉,

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \vec{J}_t \quad (1.16)$$

Coulomb gauge를 사용한 경우 전하 근처에서의 near-field 상황과 전하로부터 멀리 떨어져 있는 far-field 상황의 두 부분으로 나누어서 생각하는 것이 쉬워진다. 일반적으로 전하 또는 source 근방의 field는 전하에서 멀어질 수록 지수적으로 급격하게 감소한다. 그러므로 모든 존재하는 전하 또는 source로부터 멀리 떨어진 곳의 field는 사실상 식 (1.16)으로만 기술될 수 있다. 이때의 전기장 벡터는  $\vec{E} \simeq -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ 로 쓸 수 있다.<sup>13</sup>

### 1.3 이 장의 과제

1. 식 (1.4)가 식 (1.3)의 해가 됨을 보여라. (벡터 포텐셜  $\vec{A}$ 에 대해서  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ 인 조건을 사용하라.
2. 자기장 벡터  $\vec{B}$ 는 벡터 포텐셜과  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ 인 관계에 있다. 또한 전기장 벡터  $\vec{E}$ 는 스칼라 포텐셜과  $\vec{E} = -\nabla\Phi - \partial\vec{A}/\partial t$ 인 관계에 있다. Helmholtz 정리에 따르면, 벡터 포텐셜  $\vec{A}$ 를 유일하게 정하기 위해서  $\nabla \cdot \vec{A}$ 을 정의하여야 한다. Lorenz 조건  $\nabla \cdot \vec{A}' + (1/c^2)(\partial\Phi/\partial t) = 0$ 하에서 원래의  $\vec{E}$ 와  $\vec{B}$ 를 바꾸지 않는 다음과 같은 함수  $\Lambda$ 를 항상 고를 수 있음을 보여라.

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda$$

3. 전류벡터  $\vec{J}$ 를 transverse 장  $\vec{J}_t$ 와 longitudinal 장  $\vec{J}_l$ 의 합으로 나타내었을 때,  $(1/c^2)\nabla(\partial\Phi/\partial t) = \mu_0 \vec{J}_l$ 이 됨을 보여라.
4. 전기장 벡터  $\vec{E}$ 를 transverse 장  $\vec{E}_t$ 와 longitudinal 장  $\vec{E}_l$ 의 합으로 나타내었을 때,  $\vec{E}_l = -\nabla\Phi$ ,  $\vec{E}_t = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ 로 쓸 수 있음을 보여라.

<sup>10</sup>Helmholtz 방정식의 미분 항이 3차원이다.

<sup>11</sup>하지만 양자역학 이론에 따르면  $\vec{B}$  보다는  $\vec{A}$ 가 물리적 실체에 더 가깝다. Aharonov-Bohm 효과에 관한 자세한 논의는 Sakurai 책을 참조.[7]

<sup>12</sup>이것을 보이는 것이 이 장의 과제이다.

<sup>13</sup>이때의  $\vec{E}$ 는 transverse field 이다.

## 제 2 장 유한요소 시간 영역 방법(FDTD)의 기초

파동 방정식에 나오는 미분 표기를  $\Delta x$ 와  $\Delta t$ 의 유한요소(finite difference)로 나타내는 것이 수치 계산의 기본이다. 보통의 일변수 미분 방정식의 경우는  $\Delta x$ 의 크기를 임의로 작게 잡아도 상관 없지만, 앞으로 다루게 될 맥스웰 방정식과 같은 다변수 편미분 방정식의 경우 공간의 유한요소  $\Delta x$ 와 시간의 유한요소  $\Delta t$ 가 독립적이지 않으며 수치 안정성(numerical stability)을 만족시키기 위해서 연관되어 있어야 함을 알게 될 것이다. 이 장에서는 먼저 해석적인 해가 잘 알려져 있는 1차원 스칼라 파동 방정식을 유한요소 시간 영역 방법으로 접근하여 본다. 1차원의 간단한 모델임에도 불구하고 앞으로 나올 맥스웰 방정식의 FDTD<sup>1</sup>를 이해하기 위한 중요 개념들을 모두 담고 있음을 보일 것이다. 후에 2.4절에서 Yee 가 도입한 유명한 Yee Cell의 아이디어와 함께 3차원 FDTD 방법을 설명하도록 하겠다. 마지막으로 FDTD 계산 과정에서 얻어진 결과들을 실제 세계에서 물리적인 값들과 연관시키는 방법에 대해서 논의하겠다.

### 2.1 1차원 스칼라 파동 방정식의 전산 모사 방법

다음과 같은 1차원 스칼라 파동 방정식의

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

일반해  $u(x, t)$ 는 다음과 같이 임의의 함수  $F$ 와  $G$ 의 조합으로 나타낼 수 있음이 잘 알려져 있다.

$$u(x, t) = F(x + ct) + G(x - ct) \quad (2.2)$$

또한 식 (2.1)에 평면파 해  $e^{i(\omega t - kx)}$ 를 대입하면 분산 관계식(dispersion relation)  $\omega^2 = c^2 k^2$ 을 얻을 수 쉽게 보일 수 있다. 위상 속도  $v_p$ 가

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \pm c \quad (2.3)$$

로 일정하므로 전파 과정에서 분산이 일어나지 않는다 (dispersionless). 이 사실은 (2.2)의 수치해에서 나타나는 분산을 비교할 때 사용될 것이다.

이제 (2.1)의 파동 방정식에 있는 2차 편미분을 유한 요소 방법으로 표기해보도록 하자. 예를들어 다음과 같은 2차 이상의 항을 무시한 Taylor 전개식으로부터

$$u(x_i + \Delta x)|_{t_n} = u|_{x_i, t_n} + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}|_{x_i, t_n} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}|_{x_i, t_n} \quad (2.4)$$

<sup>1</sup>앞으로 FDTD를 맥스웰 방정식을 유한 요소 시간 영역으로 접근한 방법을 언급할 때 사용하기로 한다.

$u(x_i + \Delta x)|_{t_n}$ 와  $u(x_i - \Delta x)|_{t_n}$ 를 서로 더하면  $x$ 에 대한 편미분을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \left[ \frac{u(x_i + \Delta x) - 2u(x_i) + u(x_i - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \right]_{t_n} \equiv \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (2.5)$$

마찬가지 방법으로  $t$ 의 편미분은

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_{x_i, t_n} = \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{(\Delta t)^2} \quad (2.6)$$

위의 두 결과를 원래의 편미분 방정식 (2.1)에 대입하여 정리하면, 다음과 같은 유한요소 1차원 파동 방정식을 얻는다.

$$u_i^{n+1} = (c\Delta t)^2 \left[ \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right] + 2u_i^n - u_i^{n-1} \quad (2.7)$$

이것을 컴퓨터를 이용하여 계산할 때 다음과 같이 한다. 우선 시각  $n-1$ 과  $n$ 에서 모든 공간 좌표  $i$ 에 대한 해가 메모리에 저장되어 있다고 가정한다. 이때 다음 시각  $n+1$ 의 해를 계산하기 위해서 위의 식 (2.7)을 사용할 수 있다. 이와 같이 이전 시간과 그 이전 시간의 데이터가 필요한 이유는 파동 방정식 (2.1)에 2차 편미분이 포함되어 있기 때문이며, 마찬가지로  $i$  cell위치의 공간 데이터를 업데이트 하기 위해서도  $i-1$  cell과  $i+1$  cell의 두 인접한 데이터가 필요함을 볼 수 있다. 짐작할 수 있듯이, 위의  $\Delta x$ 와  $\Delta t$ 가 작아질 수록 정확한 해석해 (2.2)에 가까워짐을 보일 수 있다. 또한  $n+1$  시각의 데이터를 계산할 때, 공간적으로 인접한 두 cell 사이의 데이터들만 연관된다는 사실 때문에  $\Delta x$ 와  $\Delta t$  사이에 특별한 관계식이 필요할 것이라고 추측해 볼 수 있다. 예를들어  $\Delta t$  시간 후에 빛이 전파하는 거리  $c\Delta t$ 가  $\Delta x$ 보다 크게 선택되었다면, 빛의 전파 과정을 제대로 묘사할 수가 없을 것이다. 실제로 2.3절에서 올바른 계산 결과를 얻기 위해서  $c\Delta t \leq \Delta x$ 인 관계를 만족해야 됨을 보일 것이다.

우선 이 절에서는  $c\Delta t = \Delta x$ 이 되도록  $\Delta x$ 와  $\Delta t$ 를 선택하면, 식 (2.7)이

$$u_i^{n+1} = u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - u_i^{n-1} \quad (2.8)$$

로 간단해지며, 이 유한요소 방정식의 일반해가<sup>2</sup> 정확한 해석해 (2.2)의 유한요소 표현인

$$u_i^{n+1} = F[i\Delta x + c(n+1)\Delta t] + G[i\Delta x - c(n+1)\Delta t] \quad (2.9)$$

가 된다는 점에서 이 식은 정확하다. Talyor 전개식에서 2차 이상의 항을 무시하였음에도 불구하고 정확한 수치해를 구할 수 있음은 매우 놀라운 사실이다.<sup>3</sup> 실제로 이와 같은 현상은 1차원 파동 방정식에 서만 나타나며 일반적으로는 수치 계산에 따른 작은 오류가 항상 나타나게 된다.

<sup>2</sup>자세한 증명은 Taflve [4], Chap. 2를 참조. 이것을 증명하는 것이 이 장의 과제이다.

<sup>3</sup>그래서  $\Delta t = \Delta x/c$ 를 magic step이라고 부르기도 한다.

## 2.2 수치 분산 (Numerical Dispersion)

유한요소 1차원 파동 방정식 (2.7)에 평면파 해  $e^{i(\omega t - kx)}$ 를 대입하여  $\omega$ 와  $k$  사이에 성립하는 관계식(dispersion relation)을 구해보자. 식 (2.7)가 정확할 수록 평면파 전파에 따른 분산은 나타나지 않을 것이다 (식 (2.3) 참조).

다음과 같이 유한요소 방식으로 표현된 1차원 평면파 식에서

$$u_i^n = e^{i(\omega n \Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} \quad (2.10)$$

$\tilde{k}$ 를  $\tilde{k} = \tilde{k}_{real} + i\tilde{k}_{imag}$  인 복소수로 가정한다. 이것을 식 (2.7)에 대입하면,

$$e^{i\omega \Delta t} = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \cdot (e^{-i\tilde{k}\Delta x} - 2 + e^{i\tilde{k}\Delta x}) + 2 - e^{-i\omega \Delta t} \quad (2.11)$$

정리하면,

$$\cos(\omega \Delta t) = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 [\cos(\tilde{k}\Delta x) - 1] + 1 \quad (2.12)$$

$$\tilde{k} = \frac{1}{\Delta x} \cos^{-1}\left\{1 + \left(\frac{\Delta x}{c\Delta t}\right)^2 [\cos(\omega \Delta t) - 1]\right\} \quad (2.13)$$

앞에서 언급하였듯이, 위 식에  $c\Delta t = \Delta x$ 인 조건(magic step)을 대입하면  $\tilde{k} = \omega/c = k$  가 됨을 쉽게 볼 수 있다. 한편  $\Delta t$ 와  $\Delta x$  가 0으로 가는 극한을 취하면,

$$\begin{aligned} \tilde{k} &= \frac{1}{\Delta x} \cos^{-1}\left\{1 + \left(\frac{\Delta x}{c\Delta t}\right)^2 \left[1 - \frac{(\omega \Delta t)^2}{2} - 1\right]\right\} \\ &= \frac{1}{\Delta x} \cos^{-1}\left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 (\Delta x)^2\right] \rightarrow \frac{1}{\Delta x} (k\Delta x) = k \end{aligned} \quad (2.14)$$

$\tilde{k} = k$ , 즉 완벽한 해로 접근함을 볼 수 있다.<sup>4</sup> 이와같이 유한요소 시간영역 방법의 유일한 가정인 공간과 시간의 유한요소를 점점 작게 가져가면 본래의 가정은 사라지고, 수치 분산도 없어진다 (해가 완벽해진다).

좀 더 일반적인 경우의 논의는 Taflove의 책([4])을 참조하기 바라며,  $\Delta t$ 가 수치 안정성 관계를 만족하도록 선택된 경우,  $\Delta x$ 가 작아질 수록 역시 수치 분산 효과는 줄어들음을 보일 수 있다.

## 2.3 수치 안정성 (Numerical Stability)

여기서는 수치 안정성 문제를 다루기로 한다. 먼저 안정성의 정의를 짚고 넘어가도록 하자. 수치 계산이 안정적이라는 뜻은 계산의 step이 진행되면서 얻어지는 수치해가 유한한 값을 가지며 발산하지 않

<sup>4</sup>여기서  $\omega \Delta t < 1$ 이기만 하면, 앞에서 복소수로 가정했던  $\tilde{k}$ 는 실수가 됨을 볼 수 있다. 사실  $\omega \Delta t < 1$ 인 조건은 주어진 주파수  $\omega$ 에 대해서  $\Delta t$ 가 만족해야 하는 기본적인 조건이다.

음을 의미한다. 앞에서도 잠깐 언급하였지만, 유한요소 시간영역 계산법의 경우  $\Delta t$ 가 주어진  $\Delta x$ 와 관련하여 어떤 값보다 커지면 계산이 불안정해진다. 즉,  $u_i^n$  값의 이상한 행동, 예를들어 발산을 보게 된다. 시간에 대한 이와같은 안정성을 분석하기 위해서 앞에서 다룬 평면파 가정해( (2.10))에서  $\omega$ 만을 복소수로 취급하고,  $\tilde{k}$ 는 정확한 해의  $k$ 와는 조금 다를 수 있지만 실수라고 가정한다<sup>5</sup>.

$$u_i^n = e^{i(\tilde{\omega}n\Delta t - \tilde{k}i\Delta x)} \quad (2.15)$$

위의 가정해를 식 (2.7)에 대입하여 정리하면, 식 (2.12)로부터,

$$\cos(\tilde{\omega}\Delta t) = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 [\cos(\tilde{k}\Delta x) - 1] + 1 \quad (2.16)$$

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{\Delta t} \cos^{-1}\left\{\left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 [\cos(\tilde{k}\Delta x) - 1] + 1\right\} = \frac{1}{\Delta t} \cos^{-1}(\xi) \quad (2.17)$$

여기서  $S \equiv c\Delta t/\Delta x$ 로 두면 (Courant stability parameter),

$$\xi = S^2[\cos(\tilde{k}\Delta x) - 1] + 1 \quad (2.18)$$

이 된다. 모든 가능한  $\tilde{k}$ 에 대해서  $1 - 2S^2 \leq \xi \leq 1$ 을 만족해야 한다.

(1)  $-1 \leq \xi \leq 1$  일 때 ( $0 \leq S \leq 1$ ) :

$\tilde{\omega}_{imag} = 0$  이므로, 안정적인 해를 얻는다.

(2)  $1 - 2S^2 \leq \xi \leq -1$  ( $S > 1$ ) :

$\tilde{\omega}_{imag} \neq 0$  이므로, 불안정한 해를 얻는다.

이상의 사실을 종합하면, 해의 수치 안정성을 위해서 다음과 같은 조건을 만족하여야 한다.

$$S = \frac{c\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \rightarrow \quad \Delta t \leq \frac{\Delta x}{c} \quad (2.19)$$

## 2.4 Yee Cell과 3차원 FDTD

이제 다음과 3차원 맥스웰 방정식을 유한요소의 방법으로 나타내보자.

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \quad (2.20)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} \quad (2.23)$$

<sup>5</sup>공간 전파에 따른 안정성을 가정하고 나서 시간 변화에 따른 안정성 조건을 찾아본다.

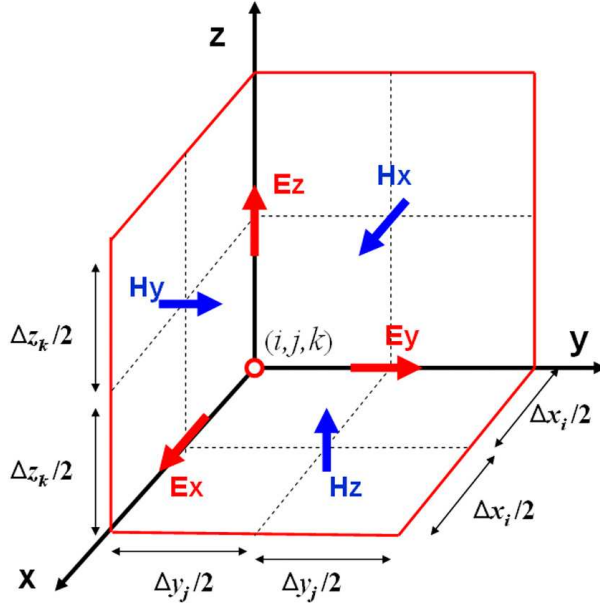


Figure 2.1:  $(i, j, k)$ 에 위치한 단위 Yee Cell의 모습. 각 cell 마다 맥스웰 방정식을 만족시키기 위해서, 6개의 field 성분들이 1/2 grid 차이의 미소 배향을 갖고 있음을 볼 수 있다.

여기서 source free ( $\rho = \vec{J} = 0$ )인 공간을 가정하였다.<sup>6</sup> FDTD에서는 위의 4개의 방정식 중에서 2개의 curl 방정식만을 사용하게 되는데, 그 이유는 나머지 2개는 FDTD의 cell 구조의 특성상 자동적으로 만족되기 때문이다.<sup>7</sup> 이 맥스웰 방정식에는 오직 1차의 미분항 만이 포함되어 있으므로, 앞에서 다루었던 1차원 스칼라 파동 방정식을 상기하면 별다른 어려움 없이 유한요소의 방법으로 나타낼 수 있을 것으로 보인다. 하지만 이 전자기 방정식에는 field를 묘사하기 위한 6개나 되는 스칼라 성분( $E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$ )을 다루어야 한다. 이 경우에 각  $(i, j, k)$  메모리 cell에 위치하는 field 성분들의 미세한 배치가 중요하게 되므로 예상만큼 간단하지는 않다. 예를들어 같은  $(i, j, k)$ 에 위치한  $E_x$ 와  $H_x$ 를 다룰때에, 같은 cell 내에서 1/2 만큼씩의 위치 차이와 벡터의 방향 차이를 고려해 주어야 한다는 것이다.<sup>8</sup>

이와 같은 개념들은 1966년에 Kane Yee가 제안한 Yee cell 구조[8]의 모습을 살펴보면 쉽게 이해될 수 있을 것이다. 그림 2.1에  $(i, j, k)$  cell 위치에 해당되는 6개의 field 성분들의 미소 배향을 나타내었다. 여기에 나타난 field 성분들은, 예를들어 컴퓨터 메모리 상의 위치로 표기할 때에는  $E_x[i][j][k]$ 처럼 같은 좌표  $(i, j, k)$ 를 갖게 되지만, (다른 성분에 대해서도 마찬가지) 1/2 grid 까지 정확히 나타내면  $E_x|_{i+1/2, j, k}$ 로 나타낼 수 있다. 같은 방식으로  $H_x[i][j][k] \leftrightarrow H_x|_{i, j+1/2, k+1/2}$  이 됨을 쉽게 볼 수 있다. 한편 그림 2.1에 나타난 단위 Yee cell을 반복적으로 쌓으면 전체 3차원 공간을 빈틈없이 채움을 알 수

<sup>6</sup>FDTD계산에 초기 field를 만들어내는 source를 넣기 위해서 전기 전류 벡터( $\vec{J}$ )와 자기 전류 벡터( $\vec{M}$ )의 도입이 필요하다.

<sup>7</sup>이것을 보이는 것을 이 장의 과제로 한다.

<sup>8</sup>즉, 같은 cell내에서도 맥스웰 방정식을 만족하도록 field 성분들을 정교하게 배치해야 한다는 것이다.

있다. 또한 각  $(i, j, k)$  위치마다 다른 크기의 공간요소  $(\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k)$ 를 가정하였다.<sup>9</sup>

이제 맥스웰 방정식에 있는 1차 편미분을 다음과 같이 유한요소의 방법으로 나타내면,<sup>10</sup>

$$\frac{\partial u}{\partial x}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = \frac{u_{i+1/2,j,k}^n - u_{i-1/2,j,k}^n}{\Delta x} \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = \frac{u_{i,j,k}^{n+1/2} - u_{i,j,k}^{n-1/2}}{\Delta t} \quad (2.25)$$

이 방식을 사용하여 예를들어 다음과 같은 curl 방정식의 한 성분을,

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right] \quad (2.26)$$

유한 요소의 방법으로 나타내면,

$$\begin{aligned} \frac{H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta t} &= \frac{1}{\mu_{i+1/2,j+1/2,k}} \left\{ \frac{E_x|_{i+1/2,j+1,k}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta y_j} \right. \\ &\quad \left. - \frac{E_y|_{i+1,j+1/2,k}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta x_i} \right\} \end{aligned} \quad (2.27)$$

정리하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} &= H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_{i+1/2,j+1/2,k}} \cdot \left[ \frac{1}{\Delta y_j} (E_x|_{i+1/2,j+1,k}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\Delta x_i} (E_y|_{i+1,j+1/2,k}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n) \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

위의 식을 컴퓨터 메모리 상의 cell의 위치로 표시하면,

$$\begin{aligned} H_z[i][j][k] &= H_z[i][j][k] + \frac{\Delta t}{\mu[i][j][k]} \cdot \left[ \frac{1}{\Delta y[j]} (E_x[i][j+1][k] - E_x[i][j][k]) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\Delta x[i]} (E_y[i+1][j][k] - E_y[i][j][k]) \right] \end{aligned} \quad (2.29)$$

가 된다.

마찬가지 방식으로  $E_z$  성분의 업데이트 식을 계산하면 다음과 같이 됨을 쉽게 보일 수 있다.

$$\begin{aligned} E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1} &= E_z|_{i,j,k+1/2}^n - \frac{\Delta t}{\epsilon_{i,j,k+1/2}} \cdot \left[ \frac{2}{(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)} (H_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - H_x|_{i,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} (H_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_y|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}) \right] \end{aligned} \quad (2.30)$$

<sup>9</sup>계산 구조에 부분적으로 세밀한 공간 묘사가 필요한 경우, 그 부분만을 세밀한 유한요소로 나타낼 수 있으므로 효율적인 메모리 배치가 가능하게 된다.

<sup>10</sup> $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ ,  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$  이상의 오차는 무시하였다.

여기서 식 (2.28)과 (2.30)을 살펴보면,  $E$ 와  $H$  데이터의 업데이트 시각이  $1/2$  만큼 다르게 됨을 알 수 있다. 그러므로 FDTD에서 한 step이란, 시각  $n$ 에서  $E$ 를 업데이트하고 시각  $n + 1/2$ 에서  $H$ 를 업데이트하는 것이다. 이렇게 하면 다음 step 시각  $n + 1$ 에서  $E$ 를 업데이트할 때에 바로 전에 계산했던  $n + 1/2$ 에서의  $H$ 를 이용할 수 있게 된다. 이와같은 순차적인 업데이트 방법에 의해서 시간에 대한 field의 변화를 구할 수 있게 되는 것이다. 나머지 성분들에 대한 업데이트 식은 Taflove의 책([4])을 참조하기 바라며, 마지막으로 3차원 FDTD에서의 수치 안정성 관계식을 언급하도록 하겠다.

유도 과정은 생략하고 결론만 나타내면,<sup>11</sup> 식 (2.19)에 대응하는 3차원 수치 안정성 조건은 다음과 같다.

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}} \quad (2.31)$$

여기서  $\Delta x$ 는  $\{\Delta x_i\}$  중에서 최소값이다 (다른 성분에 대해서도 마찬가지).

## 2.5 Real world vs. FDTD Space

FDTD 절의 마지막으로 FDTD 공간에서의 수치와 실제 세계에서의 값들 사이의 관계식을 살펴보도록 한다. 여기서 FDTD에서의  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 가 공간에 대해서 균일(uniform)하나 서로 다를 수 있다고 가정한다. 그리고  $\Delta t$  는 Courant stability 조건 (2.31)을 만족하도록 선택되었다.

### (1) Grid의 크기

KAIST에서 개발한 FDTD에서<sup>12</sup> 공간의 grid  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  크기는 길이  $1(a)$ 로 가정<sup>13</sup> 광결정 격자를 나눈 크기로 입력 받는다. 이 크기를 각각  $\text{lattice}_x, \text{lattice}_y, \text{lattice}_z$ 라고 두면, 예를들어 삼각형 격자 구조를 묘사할 때에  $x$ 방향으로의 최소 격자의 크기가  $1(a)/(\text{lattice}_x)$ 가 된다. 하지만 수치 계산에서 이와 같은 분수식은 원치않는 부정확성<sup>14</sup>을 야기할 수 있으므로, 실제로는 적당한 최소공배수를 곱하여 다음과 같은 세 수 비율의 최소 정수값으로 grid 값을 정하였다.

$$\text{The smallest integers of the ratio } \frac{1}{\text{lattice}_x} : \frac{1}{\text{lattice}_y} : \frac{1}{\text{lattice}_z} \quad (2.32)$$

이 세 값을 각각  $\Delta x(q), \Delta y(q), \Delta z(q)$ 로 표기하기로 한다. 여기서  $q$ 는 길이의 차원을 가지며 grid의 크기를 묘사하는 최소단위가 된다.<sup>15</sup>

<sup>11</sup> 유도과정은 Taflove 책([4]), Chap. 4 참조. 이것을 이 장의 과제로 한다.

<sup>12</sup> 김국현이 개발한 ver. 3.4를 기반으로하여 김세현이 수정 보완하였다. 현재 ver. 6.57 까지 개발되어있다.

<sup>13</sup> 광결정 구조가 아닌 경우를 계산할 때는 상황에 맞게 단위길이를 임의로 정할 수 있을 것이다. 예를들어 microdisk 계산의 경우 disk의 지름을  $1(a)$ 로 둘 수 있다.

<sup>14</sup> 예를들어 순환하지 않는 무한 소수가 되거나, 순환의 주기가 매우 큰 경우 정확한 수치 계산이 어렵게 된다.

<sup>15</sup> 예를들어  $\text{lattice}_x = 20, \text{lattice}_y = 20, \text{lattice}_z = 30$ 인 경우,  $1/20 : 1/20 : 1/30$ 의 최소 정수비는  $3 : 3 : 2$ 가 되므로,  $\Delta x = 3(q), \Delta y = 3(q), \Delta z = 2(q)$  가 된다.



위의 세 값을 실제 공간에서의 값으로 환산하는 일은 매우 간단하다. 주어진 광결정 격자의 주기를  $a(m)$ 라고 하면,<sup>16</sup>

$$\Delta x(m) = \frac{a(m)}{\text{lattice}_x} \quad \Delta y(m) = \frac{a(m)}{\text{lattice}_y} \quad \Delta z(m) = \frac{a(m)}{\text{lattice}_z} \quad (2.33)$$

## (2) 광속도

실제 공간에서 광속도  $c$ 가 약  $3 \times 10^8(m/sec)$ 으로 주어짐은 명백하다. FDTD 공간에서도 광속도 수치는 위의 상수로 똑같이 주어진다. FDTD time 업데이트 식에서 공간 좌표와 시간 좌표의 유한요소화를 제외하고는 정확한 맥스웰 방정식을 사용하였기 때문에, FDTD에서의  $c$ 도  $3 \times 10^8(m/sec)$ 로 표현되는 값이다.

## (3) 시간 단위의 크기

FDTD 공간에서 시간 step의 크기  $\Delta t$ 는 Courant stability 조건( (2.19), (2.31))을 만족하도록 선택되어 있다. 이와 같은 조건을 만족하는  $1/(c\Delta t)$ 를  $\mathcal{S}$ 로 표기하면,<sup>17</sup>  $\mathcal{S}$ 는 다음의 조건을 만족해야 하고

$$\mathcal{S} > \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}} \quad (2.34)$$

여기서  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 를  $q$ 의 단위로 하면,  $\mathcal{S}$ 의 단위는  $q^{-1}$ 가 된다.  $\Delta t$ 의 단위는 FDTD time 업데이트의 최소단위 (update)가 되고,

$$\Delta t(\text{sec} \cdot q \cdot \text{m}^{-1}) = 1(\text{update}) = \frac{1}{c\mathcal{S}(q^{-1})} \quad (2.35)$$

여기서  $c = 3 \times 10^8(m/sec)$ 이다. 또는 위의 식을 변형하여

$$c = \left(\frac{1}{\mathcal{S}}\right) \frac{q}{(\text{update})} \quad (2.36)$$

를 얻는다. 여기서 속도  $c$ 의 평면파는 FDTD 공간상에서 time step 1 후에  $q$ 만큼 전진함을 볼 수 있다.

한편 실제 공간에서 시간 step의 크기는  $\mathcal{S}$ 를  $m^{-1}$ 의 단위로 환산하여 식 (2.35)를 이용하여

$$\Delta t(\text{sec}) = \frac{1}{3 \times 10^8(m/sec) \cdot \mathcal{S}(m^{-1})} \quad (2.37)$$

가 된다.

## (4) 규격 주파수(normalized frequency)

<sup>16</sup>여기서 단위  $q$ 와  $m(\text{meter})$  사이의 관계식을 얻을 수 있다. 즉,  $\Delta x \cdot q = a \text{ m} / \text{lattice}_x$  가 된다.

<sup>17</sup>이  $\mathcal{S}$ 와 식 (2.19)의 Courant parameter와 혼동하지 말 것

광결정을 다룰때 많이 이용되는 규격 주파수는 광결정 격자의 크기로 규격화된 주파수로 무차원의 값이다. 그러므로 FDTD 공간과 실제 공간에서 같은 값을 갖는다. 즉,

$$\omega_n = \frac{a(q)}{\lambda(q)} = \frac{a(m)}{\lambda(m)} = \frac{a(u)}{\lambda(u)} \quad (2.38)$$

여기서  $u$ 는 계산 cell을 세는 최소 단위로,  $u$ 와  $q$  사이에는 다음과 같은 관계가 있다.<sup>18</sup>

$$\begin{aligned} a(u) &= \text{lattice}_x(u) \\ a(q) &= \Delta x(q) \cdot \text{lattice}_x \end{aligned} \quad (2.39)$$

#### (5) 진공에서의 파장

앞의 규격 주파수 관계식 (2.38)을 이용하면, FDTD 공간에서

$$\lambda(u) = \frac{a(u)}{\omega_n} = \frac{\text{lattice}_x(u)}{\omega_n} \quad (2.40)$$

실제 공간에서,

$$\lambda(m) = \frac{a(m)}{\omega_n} \quad (2.41)$$

가 된다.

#### (6) 주파수

각주파수  $\omega$ 는 진공에서의 파장  $\lambda$ 와 다음과 같은 관계에 있다.

$$\omega = ck = \frac{2\pi c}{\lambda} \quad (2.42)$$

식 (2.36), (2.40)을 사용하여 FDTD 공간에서의 단위로 환산하면,

$$\omega(\text{update}^{-1}) = \frac{2\pi c}{\lambda} = 2\pi c \times \frac{\omega_n}{a(q)} = \frac{2\pi\omega_n}{\mathcal{S}(q^{-1})a(q) \cdot 1(\text{update})} \quad (2.43)$$

주파수  $f$ 는

$$f(\text{update}^{-1}) = \frac{\omega_n}{\mathcal{S}(q^{-1})a(q) \cdot 1(\text{update})} \quad (2.44)$$

실제 공간에서의 각주파수는

$$\omega(1/\text{sec}) = ck = \frac{2\pi c}{\lambda} = 2\pi c \times \frac{\omega_n}{a(m)} \quad (2.45)$$

<sup>18</sup>여기서  $x$ 와  $y$  방향으로 놓인 광결정 슬랩을 가정하였다.

(7) 주기

주기는 간단히 주파수  $f$  (2.44)의 역수로 구할 수 있다.

FDTD 공간에서

$$T(\text{update}) = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{\mathcal{S}(q^{-1})a(q) \cdot 1(\text{update})}{\omega_n} \quad (2.46)$$

실제 공간에서

$$T(\text{sec}) = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{a(\text{m})}{c\omega_n} \quad (2.47)$$

(8) 불확정성 관계식

FDTD에서 Gaussian 모양의 envelope을 갖는 dipole source를 도입할 때에<sup>19</sup> 특정 공진 모드를 선택적으로 띄우기 위해서 source의 시간폭  $\Delta T$ 와 주파수의 선폭  $\Delta\omega_n$  사이의 관계식이 유용하게 된다.

실제 공간에서의 이와 같은 불확정성 관계식은

$$\Delta T \Delta f = 1 \quad (2.48)$$

이고, FDTD 공간에서의 관계식은 위의 식 (2.48)에 식 (2.44)를 이용하면,

$$\Delta t(\text{update}) \Delta \left( \frac{\omega_n}{\mathcal{S}(q^{-1})a(q) \cdot 1(\text{update})} \right) = 1 \quad (2.49)$$

정리하면,

$$\Delta t(\text{update}) \Delta(\omega_n) = \mathcal{S}(q^{-1})a(q) \cdot 1(\text{update}) \quad (2.50)$$

의 불확정성 관계식을 얻는다.

(9) 품위값(Quality factor)

공진기의 품위값은 다음과 같이 공진 주파수에 무관한 공진기 만의 손실을 묘사하는 양으로 정의된다.<sup>20</sup>

$$Q = \omega\tau \quad (2.51)$$

<sup>19</sup>실제 FDTD 계산 과정의 예는 3에서 다를 것이다.

<sup>20</sup>예를들어 동일한 반사율을 갖는 두 개의 mirror로 구성된 공진기의 경우 공진 각주파수( $\omega$ )가 2배로 커지면 시간에 대한 에너지 손실률( $\gamma$ )은 2배가 되고 lifetime( $\tau$ )은 1/2배가 된다. 그러므로  $\omega \times \tau$ 는 일정하며 주어진 mirror에 의한 손실만을 묘사하는 양이 된다.  $Q$ 의 정의는 [3]를 참고.

그러므로 공진 모드의 lifetime  $\tau$ 가 FDTD 시간의 단위(update)로 알려졌을 때, 품위값은 식 (2.43)을 이용하여

$$Q = \frac{2\pi\omega_n}{S(q^{-1})a(q) \cdot I(\text{update})} \tau(\text{update}) \quad (2.52)$$

로 쓸 수 있다. 한편 공진 모드의 lifetime은 공진모드의 에너지 감소 비율로 정의 된다.

$$U(t(\text{update})) = U_0 \exp(-t(\text{update})/\tau(\text{update})) \quad (2.53)$$

## 2.6 이 장의 과제

1. 식 (2.8)의 일반해가 식 (2.9)로 주어짐을 보여라.
2. 일반적으로 dipole source를 포함하는 FDTD에서는 다음과 같은 2개의 맥스웰 방정식만 가지고 field 업데이트를 하게된다.

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \end{aligned}$$

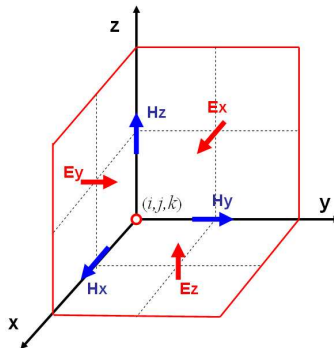
여기서 dipole source의 효과는 전류벡터  $\vec{J}$ 를 통하여 표현된다. 위의 두 방정식으로 부터 출발하여 다음과 같은 맥스웰 방정식의 다른 두 식이 성립함을 보여라. 한편, FDTD 계산 초기에 모든 field의 값은 0으로 가정한다. (Xu의 논문[9]과 Taflove의 책 pp.75 - 79 참조)

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho.$$

3. 다음과 같이 변형된 Yee cell을 살펴보자.

이것을 그림 2.1와 비교해 보면, E와 H의 위치가 바뀌어져 있음을 볼 수 있다. 이 변형된 Yee cell을 기반으로하여 식 (2.26)의 유한 요소의 표현(식 (2.28))을 적고, 그것을 컴퓨터 메모리 상의 cell 위치로 표현(식 (2.29))하라. 이 변형 Yee cell을 사용하여도 동등한 FDTD 계산을 수행할 수 있음을 보여라.



4. 식 (2.31)의 수치 안정성 조건을 증명하여라. (Taflove의 책의 Chap. 4 참조.) 그리고, 정성적인 설명을 사용하여  $c\Delta t \leq \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2}$ 와 같이 표현될 수가 없는지 설명해보라.

5.  $a(t)$ 를 공진기 내부에 저장된 에너지 amplitude로 두자. (즉,  $|a(t)|^2 = a^*(t)a(t) = U(t)$ ) 일반적으로, 저장된 에너지는 시간에 대하여 지수적으로 감소한다. 그러므로,

$$a(t) = a_0 e^{i\omega_0 t} e^{-t/(2\tau)}$$

로 쓸 수 있다. 여기서  $\omega_0$ 는 공진 모드의 공진 주파수이다. 이 때 공진기의 품위값  $Q$ 에 관한 다음의 세 가지 표현이 수학적으로 서로 동등함을 보여라.

(a)  $Q = \omega_0 \frac{U(t)}{-dU/dt}$

(b)  $Q = \omega_0 \tau$

(c)  $Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} = \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda}$

여기서  $\lambda = 2\pi c/\omega$ 이고,  $\Delta\lambda$  와  $\Delta\omega$ 는  $a(t)$ 의 Fourier transform의 Power spectrum에서의 FWHM이다.<sup>21</sup>

---

<sup>21</sup>주의: (c)를 증명할 때에  $\Delta\lambda$ 와  $\Delta\omega$ 가 매우 작다는 근사를 사용하지 말 것.

## 제 3 장 Contour FDTD

일반적으로 실제 광결정 샘플을 제작하면, 제작 과정에서 도입되는 여러가지 요인으로 인하여 구조적 결함이 나타날 수 있다. 이와같은 불완전한 구조에서 발생하는 공진 모드의 특성을 이상적인 계산 구조와 비교한다는 것은 쉬운 일이 아니다.<sup>1</sup> 만약에 제작된 구조의 전자현미경(Scanning Electron Microscope; SEM) 사진으로부터 실제 패턴을 입력받아서 가능한한 실제에 가까운 구조를 사용하여 계산하게 되면, 실험 데이터를 해석하는 일이 훨씬 간단해 질 것이다. 이와 같은 일을 가능하도록 하는 방법이 Contour FDTD 이다.

이 장에서는 contour FDTD 방법을 사용하여 광결정 공진기를 해석하는 전형적인 과정에 대해서 살펴본다.<sup>2</sup> 여기서 다루게 될 광결정 공진기 구조는 그림 3.1에 나타나 있다. 이것은 InAs 양자점을 포함하고 있는 GaAs 슬랩에 공기 구멍이 뚫려있는 단일 결함 광결정 공진기이다.[10, 11] 실험에 사용된 InAs 양자점은  $\sim 950\text{nm}$  에서 PL peak을 가지며 PL의 inhomogeneous broadening 폭은  $\sim 50\text{nm}$  정도이다. 광결정 슬랩의 두께는  $200\text{nm}$  이다.

Contour FDTD 계산을 위해서는 먼저 제작된 샘플의 전자현미경 사진을 찍어야 한다 (그림 3.1(a)). 전자현미경 사진으로부터 제작된 광결정의 주기가  $\sim 285\text{nm}$ 로 측정되었다. 그런데, 제작된 공기 구멍의 모양이 불규칙적이므로 구멍의 반경을 정의하기가 쉽지 않다. 이 경우 전자현미경 사진에서 보이는 대로 구멍 모양의 contour를 그대로 FDTD epsilon 구조에 반영할 수 있다면 실제 상황을 그대로 반영하는 보다 정확한 계산이 가능해질 것이다. 그림 3.1(b)가 FDTD 계산에 실제로 사용될 FDTD epsilon 구조를 보여준다. FDTD 계산을 위한 전체 domain의 크기는  $x - y$  방향으로는  $18 \times 14$  이고  $z$  방향으로는 슬랩의 두께  $T = 200/285$ 를 포함하여  $3 + T$ 로 하였다.<sup>3</sup> 계산 구조의 경계 조건은 Perfectly Matched Layer (PML)로 알려진 흡수 경계층을 사용하였다. 이것을 사용하면 유한한 계산 domain으로 무한히 큰 배경을 묘사할 수 있다.<sup>4</sup> PML에 관한 자세한 논의는 Taflove 책을 참조하기 바란다.[4]

FDTD 계산의 공간 cell의 크기는 전방향으로 같은 크기인  $\sim 20$  grids/ $a$ 로 하였다. 그러므로,  $(\text{lattice}_x, \text{lattice}_y, \text{lattice}_z) = (20, 20, 20)$ 이다. 식 2.32에 정의되어 있는 the smallest integers of the ratio 값은  $(1 q, 1 q, 1 q)$ 가 된다. 이것을 mks 단위계를 사용하여 나타내면,  $\Delta x = \Delta y = \Delta z \simeq 14.25 \text{ nm}$ 가 된다. 이제 수치 안정성 조건을 보장하는 시간 cell의 크기  $\Delta t$ 를 구해보도록 한다. 식 2.34에 따르면,  $\mathcal{S}$ 는  $\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} = \sqrt{3}$ 보다 크게 선택되어야만 한다. 여기서는  $\mathcal{S}$ 를  $2 q^{-1}$ 로 정하자. 그러므로, FDTD 공간에서 빛은 한번의 FDTD 업데이트 동안에  $1/2$  grid를 전파해 나가게 된다 [식 2.36. 이 FDTD 시간

<sup>1</sup>예를들어 실제 제작된 구조에서 발견한 레이저 모드가 어떤 모드에서 기인하였는지를 살펴보기 위해서, FDTD 계산과 실제 발견 모드의 파장을 비교하는 일이 다반사이다.

<sup>2</sup>최근에 나온 Taflove의 새 edition에서(*The finite-difference time-domain method*, Artech House, 3rd ed.) 우리의 contour FDTD를 소개하였다.

<sup>3</sup>여기서 모든 구조의 크기는 격자 상수  $a(=1)$ 의 단위로 나타내었다.

<sup>4</sup>만약에 PML 경계 조건을 사용하지 않는다면 어떤 일이 발생할까? 계산 구조 경계 너머의 영역은 사실상 모든 field를 0으로 가정한 것으로 볼 수 있으므로, Perfectly conducting mirror가 놓인 것과 같은 효과를 얻게 된다.

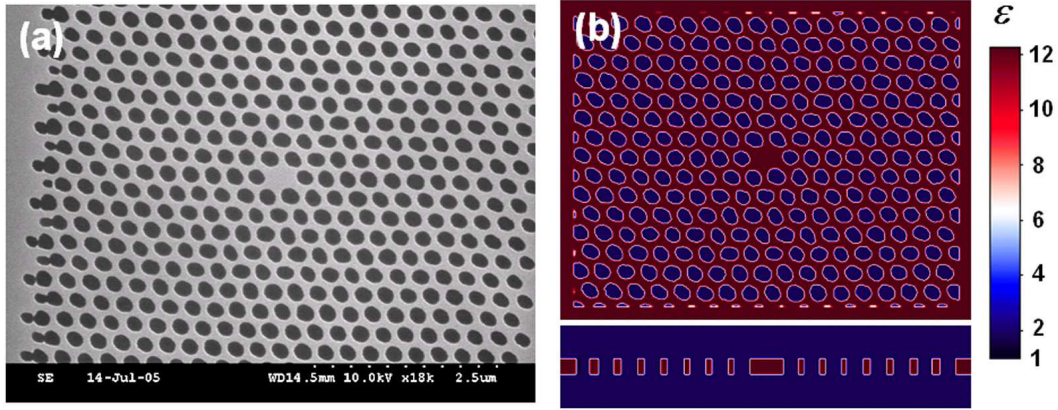


Figure 3.1: (a) 제작된 단일 결함 광결정 공진기의 전자현미경 사진. 이 공진기는 InAs 양자점을 포함하고 있는 GaAs 슬랩 위에 제작되었다. 삼각형 광결정의 격자 주기  $a$ 는  $\sim 285$  nm 이고 슬랩의 두께는 200nm이다. (b) 제작된 샘플의 FDTD epsilon 구조. 슬랩의 굴절률은 3.5로 선택되었다. FDTD 계산에 사용된 공간 cell의 크기는  $\sim 20$  grids/ $a$ 였다. 제작된 공진기의 중심 부근을 FDTD 계산 구조의 원점으로 하였다.

단위  $\Delta t$ 를 초의 단위로 나타내면,  $1 \text{ q}^{-1} = (1/14.25 \times 10^{-9})\text{m}^{-1}$ 이므로, 식 2.37를 사용하면

$$\Delta t(\text{sec}) = \frac{1}{3 \times 10^8 (\text{m/sec}) \cdot (2/14.25 \times 10^{-9}) (\text{m}^{-1})} \simeq 2.4 \times 10^{-17} (\text{sec}) \quad (3.1)$$

이 값은 전자기 field의 진동을 자세히 묘사할 수 있을 정도로 매우 작다. 예를들어 파장  $1 \mu\text{m}$ 인 빛의 경우 한 주기는  $\sim 10^{-15}$ 초 이다. 그리고 10 000번의 업데이트 시간은 약 2.4 ps에 해당된다.

### 3.1 광대역 source를 이용한 공진 모드 찾기

FDTD 계산이 막 시작하려고 하는 시점에는 모든 FDTD 계산 cell의 field 값이 0이다. 그러므로 무엇인가를 계산하고 싶다면 빛을 넣어주어야 할 것이다. FDTD 구조에 초기 빛 source를 넣어주는 대표적인 방법은 다음과 같다. 맥스웰 방정식에 전기 전류 벡터  $\vec{J}$ 와 자기 전류 벡터  $\vec{M}$ 을 포함시켜 보자.

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} - \frac{1}{\epsilon} \vec{J} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} - \frac{1}{\mu} \vec{M} \quad (3.3)$$

원래 맥스웰 방정식에 자기 전류 벡터  $\vec{M}$  항은 없다.<sup>5</sup> 그러나 FDTD에서는 계산의 편의상 도입할 수 있다! 예를들어 초기에 특정 공간 지점에  $E_x$  field 성분을 주고 싶다면  $J_x$  성분에 값을 주면 된다 (식 (4.1)참조). 한편  $H_z$  field 성분을 주고 싶다면  $M_z$  성분을 이용하면 된다. 이와같이 전류벡터에 의한 source 항이 포함되어 있는 경우 앞에서 유한요소의 방법으로 나타내었던 맥스웰 방정식의 한 성분, 예를들면 식 (2.28)는 다음과 같이 확장된다.

$$H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} = H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu_{i+1/2,j+1/2,k}} \cdot \left[ \frac{1}{\Delta y_j} (E_x|_{i+1/2,j+1,k}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n) - \frac{1}{\Delta x_i} (E_y|_{i+1,j+1/2,k}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n) - M_z|_{i+1/2,j+1,k}^n \right] \quad (3.4)$$

마찬가지 방법으로 다른 성분의 방정식들도 source 항을 포함시켜 적을 수 있을 것이다.<sup>6</sup>

공진 모드를 띄우기 위해서 가장 많이 사용하는 source 함수의 형태는 Gaussian 함수의 envelope을 갖는 harmonic으로 진동하는 것이다. 우리는 이것을 Gaussian dipole source라고 부른다.<sup>7</sup>

$$\vec{J}(\vec{r}_0, t) \propto \sin(2\pi ft + \phi) \exp\{-[(t - t_0)/\delta t]^2\} \quad (3.5)$$

공진 모드의 node가 아닐 것으로 예상되는 공진기 내의 특별한 점  $\vec{r}_0$ 에 dipole source를 줄 수 있다. 여기서  $\vec{J}$ (또는  $\vec{M}$ )는  $E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$  6개의 field 성분 들 중의 하나가 될 수 있다. 한편 KAIST FDTD에서는,  $\exp(-3^2) \simeq 0.2\%$ 라는 사실을 이용하여 field의 세기가 최대가 되는 정점에서의 시각  $t_0$ 를  $3\delta t$ 로 정하였다. 시각  $t = 0$ 에서 Gaussian dipole source가 시작할 때는  $\exp\{-(3\delta t/\delta t)^2\}$ 의 크기를 갖는다. 그런 후에 시각  $t = 3\delta t$ 에서 정점의 값을 갖고 다시 field의 세기는 감소한다. 결국 Gaussian source가 작동하는 전체 시간의 길이는  $6\delta t$ 가 되고 FWHM는  $3\delta t$ 이다. 그러므로 source에 의하여 띄워진(excited) 공진 모드의 특성을 분석하기 위해서는  $6\delta t$  이후의 field를 관찰하게 된다.

먼저, 주어진 공진기 내에 존재할 수 있는 모든 모드를 관찰하기 위하여 넓은 주파수 대역폭을 갖는 Gaussian dipole source를 사용하였다. 여기서는  $H_z$  Gaussian dipole source를 사용하였는데, Gaussian envelope의 시간폭 (FWHM)이  $3\delta t = \Delta T = 600$  (update)이고 중심 주파수는 (규격 주파수)  $\omega_0 = 0.3$ 였다. Dipole source의 위치는  $(0.0, -0.3a)$ 로 하였다. 앞에서 유도한 시간-주파수 불확정성 관계식에 따르면 [Eq. 2.50],  $\Delta T = 600$ 의 시간폭은 주파수 대역에서의  $\Delta\omega_n \simeq 0.067$  만큼의 선폭을 나타냄을 알 수 있다.

<sup>5</sup>전하(electric charge)는 있지만 자기 전하(magnetic charge)는 없기 때문이다. 자기 전하가 없기 때문에 항상  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ 로 쓸 수 있는 것이다. 이와 관련된 흥미로운 논의는 Jackson의 “On the question of magnetic monopoles”를 읽어보기 바란다.[6]

<sup>6</sup>이와 같이 도입된 source는 물리적으로 자연스럽다. 만약에 FDTD 공간상의 한 점에 field 값을 임의로 정해진 값을 준다고 가정해보자. 이 경우 자신이 만들어낸 field 에 의해서 source 가 변할 수가 없다! 이것은 매우 비물리적인 상황이다. 일반적으로 빛을 방출하는 원자는 주변 환경에 의해서 그 방출 특성이 변한다. 이것의 대표적인 예는 Purcell 효과로 알려져 있다.[12] 이와 같은 현상까지 정확히 묘사하기 위해서는 전류벡터 항을 바꾸어야 한다.

<sup>7</sup>시간 영역에서의 Gaussian 함수는 주파수 영역에서도 Gaussian 형태가 된다. 그러므로 주파수 영역에서 dc 성분을 잘 만들지 않는다는 장점이 있다.



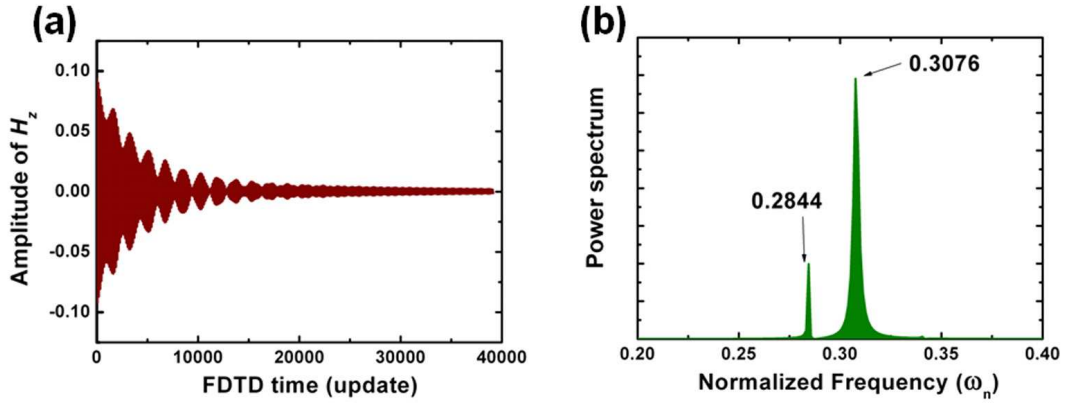


Figure 3.2:  $(0.0, -0.3a)$  지점에서 측정된  $H_z$  field 데이터. 공진기에 존재하는 모든 모드를 띄우기 위하여, 중심 주파수가  $\omega_n = 0.3$ 이고 비교적 짧은 시간폭 [ $\Delta T = 600$  (update)]을 갖는 Gaussian dipole source를 사용하였다. (a) 시간의 함수로 측정된  $H_z$  field. (b) Fourier 변환으로 얻어진 power spectrum.

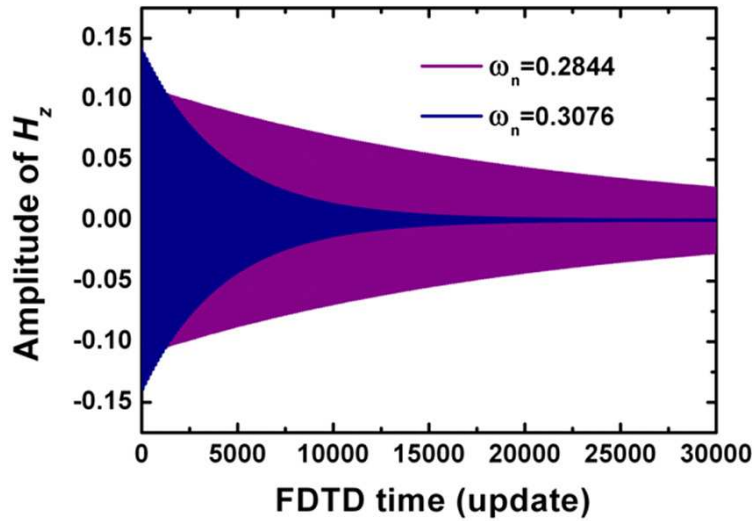


Figure 3.3:  $(0.0, -0.3a)$  지점에서 측정된  $H_z$  field 데이터. 하나의 공진 모드만을 선택적으로 띄우기 위해서,  $H_z$  Gaussian dipole source의 시간폭을 길게 선택하였다 [ $3\delta t = \Delta T = 4500$  (update)]. 다른 변수는 앞의 경우와 동일하게 하였다.

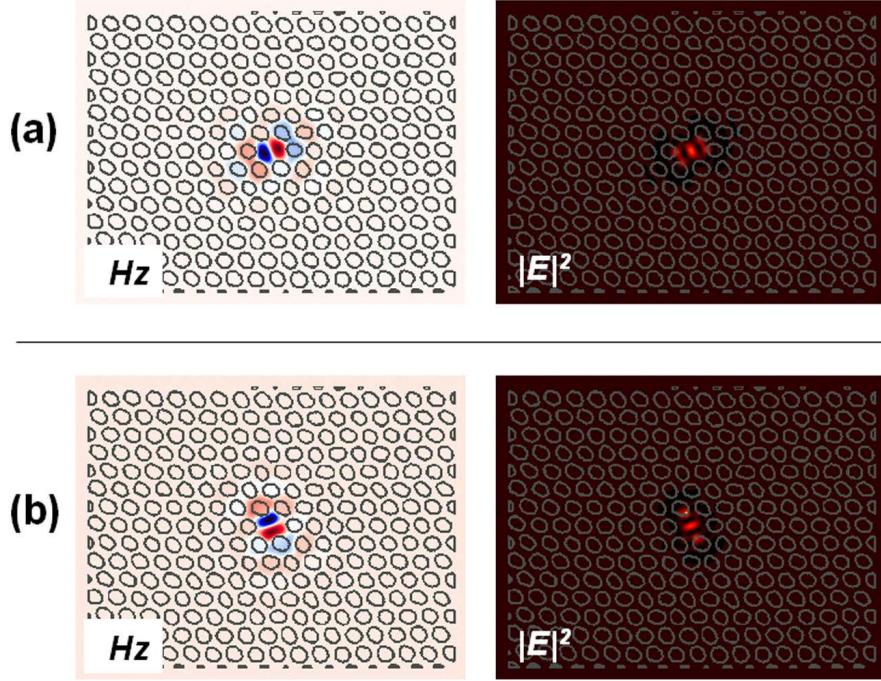


Figure 3.4: 공진기 내에 존재하는 두 개의 모드를 분리하였다. 각 모드에 대하여, 슬랩 중앙에서 측정된  $H_z$  field 분포와 전기장 세기 분포  $|E|^2$ 를 나타내었다. (a) 모드 1,  $\omega_n = 0.2844$ ,  $\lambda = 1002$  nm,  $Q \sim 470$ . (b) 모드 2,  $\omega_n = 0.3076$ ,  $\lambda = 927$  nm,  $Q \sim 100$ .

이제  $H_z$  field를 FDTD 시간(update)의 함수로 source를 주었던 동일한 위치에서 측정하였다 (그림 3.2(a)). 데이터에 표시된 시간축의 전체 길이는 실제 시간으로 환산하면  $\sim 10$  ps 정도이다. 전체적인 모습이 지수적으로 감소하고 있으나 다른 모드가 함께 섞여 있기 때문에 맥놀이의 모습을 분명히 관찰할 수 있다. 그림 3.2(a)의 데이터를 Fourier 변환을 해보면 두 개의 모드가 존재함을 확실히 볼 수 있다.

### 3.2 하나의 공진 모드만을 선택하기

하나의 공진 모드만을 선택적으로 띄우기 위해서,  $H_z$  Gaussian dipole source의 시간폭을 길게 선택하였다 [ $3\delta t = \Delta T = 4500$  (update)]. 다른 변수는 앞의 경우와 동일하게 하였다. 이와 같은 긴 시간폭은 주파수 영역에서의 선폭  $\Delta\omega_n < 0.009$ 에 해당된다. 이 선폭은 두 모드 사이의 간격  $(\omega_n(2) - \omega_n(1))/2 \simeq 0.011$  보다 분명히 작다.

하나씩 개별적으로 모드를 띄운 경우 시간 영역에서 보면 field의 세기가 깨끗하게 지수적으로 감소하는 것을 볼 수 있다. 이 감소 경향으로 부터 공진기 모드의  $Q$  값을 추정할 수 있다. 공진 모드의 lifetime은 식 2.53로 부터 구할 수 있다.  $Q$  값은 식 2.52로 부터 구해진다. 이 방법으로 구해진  $Q$  값은 모드 1의 경우  $\sim 470$ 였고 모드 2의 경우는  $\sim 100$ 였다.

한편 슬랩의 중앙에서 측정된  $H_z$  field의 분포와 전기장 세기의 분포를 그림 3.4에 나타내었다. 원래 이와 같은 단일 결합 공진기에서 공진기의 모양이 완벽한 육방 대칭성을 갖고 있었다면 두 모드는 동일한 주파수를 갖고 있어야만 한다 (degeneracy).<sup>8</sup> 하지만 제작 과정에서 발생한 구조의 불균일성으로 인하여 두 모드는 분리(split)되었다. 그런데도 흥미로운 사실은 두 개의 분리된 모드의 진동 방향이 서로 수직이라는 점이다.[14] 이것과 관련된 논의는 본 노트의 범위를 벗어나므로 생략하기로 한다.

### 3.3 이 장의 과제

1. 그림 3.1(a)의 광결정 공진기를 contour FDTD 방법을 이용하여 분석해 보려고 한다.

(a)  $(\text{lattice}_x, \text{lattice}_y, \text{lattice}_z) = (30, 30, 20)$

(b)  $(\text{lattice}_x, \text{lattice}_y, \text{lattice}_z) = (40, 40, 20)$

위와 같이 두 가지 공간 cell 크기에 대해서 1) 식 2.32에 정의되어 있는 the smallest integers of the ratio 값을  $q$ 의 단위와 mks 단위로 나타내고, 2) 수치 안정성 조건을 만족하는  $S$ 를 선택하여  $q^{-1}$ 의 단위로 나타내어라. 3) 마지막으로  $\Delta t$  (식 3.1)를 계산하여라.

2. 1) 맥스웰 방정식을 이용하여 시각  $t$ 에서 displacement vector  $\vec{D}$ 와 전류벡터  $\vec{J}$  사이에 다음과 같은 관계식이 성립함을 보여라.

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{x}, t) = - \int_0^t dt' \nabla \cdot \vec{J}(\vec{x}, t')$$

2) 일반적으로  $\vec{J}$ 를 dipole source로 하였을 때  $t > t_{DS}$  이면  $\vec{J} = 0$ 으로 만든다. 예를들어 Gaussian envelope을 갖는 dipole source의 경우  $t = 6\delta t$  이후에는 강제적으로  $\vec{J} = 0$ 이 되도록 한다. (식 3.5 참조) 그러므로 공진 모드 만의 특성을 관찰하기 위해서는  $t > t_{DS}$  이후의 시간 변화를 살펴계 된다.

앞 문제의 결과를 이용하여 일반적으로  $\vec{D}(\vec{x}, t = \infty) \neq 0$ 임을 보여라. (즉, 오랜 시간이 지난 후에 공진기 내에 갇혀있던 모든 에너지가 전파되어 빠져 나가더라도 field가 존재한다!)

3)  $\vec{D}(\vec{x}, t = \infty)$ 는 longitudinal field임을 보여라.

4)  $\vec{J}(\vec{x}, t) = \hat{d}e^{-\Gamma t} \cos(\Omega t + \Phi)\delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$ 인 dipole source를 사용할 때,  $\vec{D}(\vec{x}, t = \infty) = 0$ 으로 만드는 위상( $\Phi$ )조건을 구하여라.

---

<sup>8</sup>이것은 군론(Group theory)으로 부터 자연스럽게 나오는 결과이다. 회전 대칭성과 축퇴에 관한 보다 교육적인 논의는 다음 논문을 참조.[13]

## 제 4 장 예제로 배우는 FDTD

이 장에 설명되어 있는 모든 예제는 KAIST FDTD ver.6.65를 기반으로 하였다 (이하 KFDTD). 예제를 설명하기에 앞서, KFDTD를 설치하는 방법부터 설명한다.

KAIST 나노포토닉스 연구실에서 사용한 컴퓨터 성능은 다음과 같다. RAM 2Gbite, CPU는 Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 2.80GHz 이다. 한편 사용하고 있는 OS는 Red Hat Linux 8.0이다.<sup>1</sup> 배포된 KFDTD의 압축을 풀면 다음과 같은 디렉토리 구조를 갖고 있음을 볼 수 있다.

```
\example - README
          example.c
\source - pFDTD
         energy.c
         farfield.c
         input.c
         memory.c
         output.c
         parameter.c
         sigma.c
         source.c
         timeupdate.c
         transmap.c
         pFDTD.h
         pFDTDvar.h
makefile
```

이것을 자신의 개인 디렉토리에 옮겨 놓고서 설치를 시작한다. 자신의 디렉토리에 \bin 디렉토리가 없다면,<sup>2</sup> 설치 전에 \bin를 생성해 준다.

```
[foo@linux foo] mkdir bin
```

이제 \FDTDv665 디렉토리 내부로 이동한다.

```
[foo@linux foo] cd FDTDv665
```

---

<sup>1</sup>KFDTD를 약간 수정해주면 Windows XP에서도 작동 가능하다. 하지만 Unix 계열의 컴퓨터에 설치하는 것을 적극 권장한다.

<sup>2</sup>binary의 약자로 일반적으로 실행 파일을 모아놓을 때 사용한다.

먼저 makefile을 열고 편집해준다.

```
[foo@linux foo] vi makefile
```

```
install :
    cp libpFDTD.a /home/camel/bin/
    cp $(SDIR)pFDTD.h /home/camel/bin/
    cp $(SDIR)pFDTDvar.h /home/camel/bin/
    rm *.o
    chmod +x $(SDIR)pFDTD
    cp $(SDIR)pFDTD /home/camel/bin/
```

위에서 /home/camel/bin/ 부분을 자신의 bin 디렉토리 위치로 고쳐준다.

이제 makefile을 실행시킨다.

```
[foo@linux foo] make
```

\source 디렉토리 내부에 있던 c 파일들이 개별적으로 컴파일되어 목적 파일 (object file)이 생성된다. 마지막으로 목적파일들이 묶이면서 라이브러리 파일 libpFDTD.a가 생성됨을 볼 수 있다.

이제 생성된 라이브러리, 헤더파일, 실행파일들을 정해진 디렉토리로 옮기는 작업을 해준다.

```
[foo@linux foo] make install
```

이제 설치가 완료되었다. 이와 같은 설치 과정을 해주면 KFDTD에서 제공하는 수많은 함수들을 특별한 정의 없이 사용할 수 있게 된다. 예를들어 아래에, 4.1절에서 사용할 예제 c 파일을 첨부하였다. 초기에 pFDTD.h와 pFDTDvar.h 를 include해주기만 하면 structure\_size(), lattice\_size(), pml\_size(), background(), propagation(), outplane() 등과 같이 KFDTD에서 미리 컴파일되어 라이브러리에 저장된 함수들을 이용할 수 있게 된다.

```
#include "/home/camel/bin/pFDTD.h"
```

```
#include "/home/camel/bin/pFDTDvar.h"
```

```
main() /* This function is a main part of 3D FDTD code. */
```

```
{
    float x,y;
    int i,j,k;
    float WC; //dipole frequency
```

```

long DT,DD,DS;

//-----//

////////////////////////////////////
//////// Basic Parameters (START) //////////
////////////////////////////////////

///// dipole source parameter /////
DT=100;
DS=DT*6;
DD=3000;
WC=0.5;
//-----

structure_size(5,5,5);
lattice_size(20,20,20);
pml_size(0,0,0,0,0,0); // without using absorbing layers
set_default_parameter(2);
Hz_parity(0,0,0);
memory();

////////////////////////////////////
//////// Basic Parameters (END) //////////
////////////////////////////////////

//-----//

////////////////////////////////////
//////// Input Structure (START) //////////
////////////////////////////////////

background(1.0);

////////////////////////////////////
//////// Input Structure (END) //////////
////////////////////////////////////

```

```

//-----//

make_epsilon();
out_epsilon("x",0,"epsilon.x");
out_epsilon("y",0,"epsilon.y");
out_epsilon("z",0,"epsilon.z");

coefficient();
//-----//

////////////////////////////////////
////////// Do something during the iterations (START) //////////
////////////////////////////////////
for(t=0;t<DD;t++)
{
    Gaussian_dipole_source("Hz",0,0,0,WC,0,3*DT,DT);

    propagate();

    out_point("Hz",0,0,0.5,0,DD,"mode1.dat");
    out_point("Hz",0,0,1,0,DD,"mode2.dat");
    out_point("Hz",0,0,2,0,DD,"mode3.dat");

    if(t%5==0)
        out_plane("LogH^2","y",0,".LogH2");
}

////////////////////////////////////
////////// Do something during the iterations (END) //////////
////////////////////////////////////
//-----//
}

```

위의 c 코드를 간단히 살펴보고 넘어가기로 하자. #include 선언문 이후에는 일반적인 c 코드의 main() 함수가 나온다. main() 내에서는 먼저 변수 선언부가 있다. 다음으로는 1) Basic parameters 가

따라오는데, 여기서는 FDTD 계산 영역의 크기,<sup>3</sup> FDTD grid의 크기,<sup>4</sup> 수치 안정성을 위한 파라미터  $S$ ,<sup>5</sup> 흡수 경계층의 두께,<sup>6</sup> 계산 구조가 대칭성을 갖고 있을 때 사용할 수 있는 대칭성 경계 조건<sup>7</sup> 등을 입력받는다. 다음으로는 2) Input structure 가 나온다. 여기서는 계산 구조물(epsilon structure)를 입력한다.<sup>8</sup> 현재 KFDTD에서는 real  $\epsilon(\vec{r})$ 로 표현되는 유전체 구조만 입력 가능하다. 마지막으로 3) 실제 FDTD time update가 수행되는 계산 부분이다. 여기는 FDTDvar.h 에서 예약된 전역 변수 “t”를 사용하여 FDTD 의 time step을 나타내며, 이 time loop 가 for() 문에 의하여 둘러싸여 있다. 매 time step 마다 dipole source를 주거나,<sup>9</sup> 실제 Maxwell’s equation 을 사용하여 field 데이터를 update 하거나,<sup>10</sup> field의 평면 그림 또는 점 데이터를 출력하는 일<sup>11</sup> 등을 수행할 수 있다.

계산할 내용을 잘 정의한 c 코드를 완성한 후에는 다음과 같이 pFDTD라는 명령어를 사용하여 계산을 시작한다.

```
[foo@linux foo] pFDTD example.c
```

본 장의 목표는 KFDTD에서 제공하고 있는 수많은 함수들을 자유자재로 사용할 수 있도록 도와주는 것이다. 앞으로 설명하게 될 4 가지 예제를 통해서 KFDTD 함수의 활용 방법을 배운다.<sup>12</sup> 실제 KFDTD 프로그램 작성시에 참조할 수 있도록 부록에 KFDTD 함수 정의표를 요약해 놓았다.

## 4.1 Point Dipole Source와 흡수 경계 조건

3.1절에서 설명하였듯이, FDTD 계산 초기에 모든 field 의 값은 0이다. 그러므로 다음과 같은 Maxwell 방정식에서

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} - \frac{1}{\epsilon} \vec{J} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} - \frac{1}{\mu} \vec{M} \quad (4.2)$$

전류 벡터  $\vec{J}$ 와 자기 벡터  $\vec{M}$ 에 적절한 함수를 가정함으로써 원하는 계산을 할 수 있다.

이 절에서는 원자에서 방출하는 빛을 묘사할 수 있는 점 광원 형태의 source를 사용하는 방법을 배운다. 그리고 FDTD 계산에 있어서 흡수 경계 조건이 필요한 이유를 살펴보고, 가장 널리 사용되고 있는 Perfectly Matched Layer (PML)을[4] 적용해 보기로 한다.

---

<sup>3</sup>structure\_size()

<sup>4</sup>lattice\_size()

<sup>5</sup>set\_default\_paramter()

<sup>6</sup>pml\_size()

<sup>7</sup>Hz\_parity()

<sup>8</sup>background(), input\_object()

<sup>9</sup>Gaussian\_dipole\_source()

<sup>10</sup>propagate()

<sup>11</sup>out\_point(), out\_plane()

<sup>12</sup>나노포토닉스 연구실 웹페이지 <http://pbg.kaist.ac.kr>에서 여기서 다룬 예제 c코드와 결과 파일들을 다운로드 받을 수 있다.



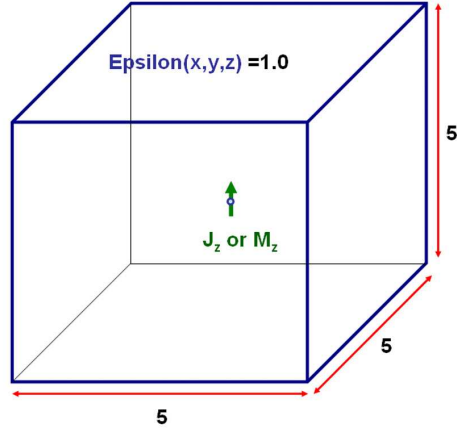


Figure 4.1: FDTD 계산 구조. 전체 공간은 진공으로 하였고, 원점에 point dipole source를 두었다.

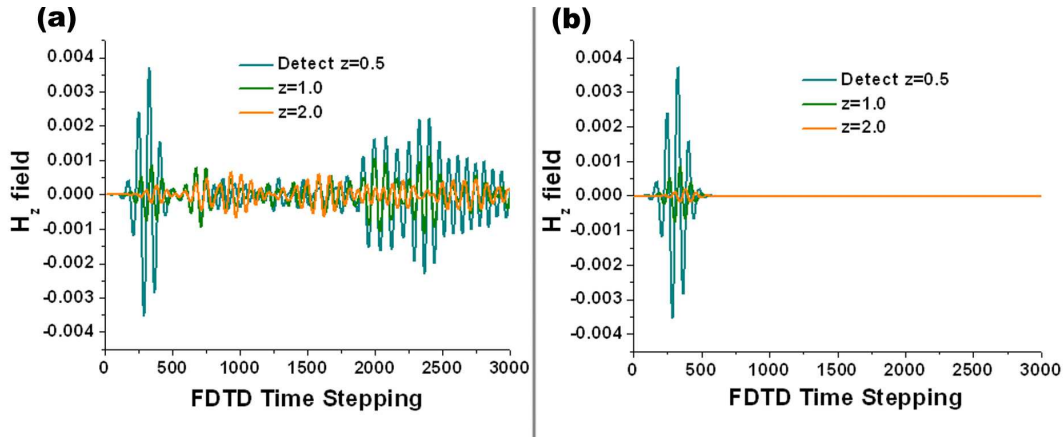


Figure 4.2: 한 점에서 측정한  $H_z$  field의 값. (a)PML을 사용하지 않은 경우. 경계에서 반사된 빛이 되 돌아 오면서 복잡한 양상을 보여준다. (b) PML을 사용한 경우. 최초의 펄스가 빠져 나간 후에 경계로부터 되돌아오는 성분이 없다.

#### 4.1.1 왜 흡수 경계 조건이 필요한가?

이 절에서 우리는 point dipole source를 사용하여 점 광원으로 부터의 빛의 전파를 계산할 것이다. 계산 공간의 크기는 그림 4.1에 묘사된 것처럼  $5 \times 5 \times 5$ 로 하였고,<sup>13</sup> 배경 물질은 진공( $\epsilon = 1.0$ )으로<sup>14</sup> 하였다. 한편 FDTD에서의 단위 길이 1은 20개의 grids로 하였다.<sup>15</sup> 식 3.1처럼  $M_z$  성분을 이용하여 dipole source를 묘사하였고, 다음과 같이 Gaussian envelope을 갖는 sin 함수를 원점에 적용하였다.<sup>16</sup>

$$M_z(\vec{r}_0 = 0, t) \propto \sin(2\pi ft + \phi) \exp\{-[(t - t_0)/\delta t]^2\} \quad (4.3)$$

<sup>13</sup>structure\_size(5,5,5)

<sup>14</sup>background(1.0)

<sup>15</sup>lattice(20,20,20)

<sup>16</sup>Gaussian\_dipole\_source("Hz",0,0,0,WC,0,3\*DT,DT)

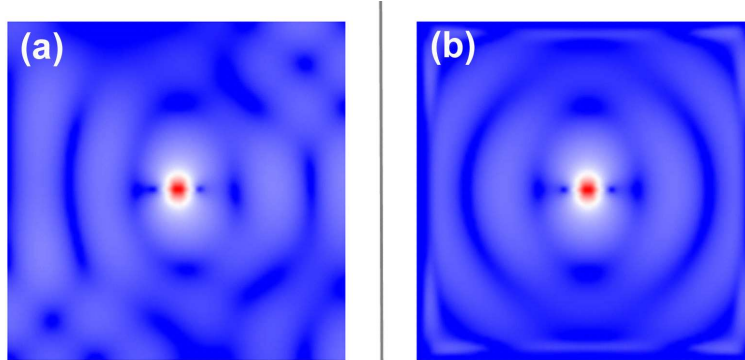


Figure 4.3: (동영상)  $y=0$  평면에서 측정된  $|\vec{H}|^2$ 을 Log scale로 나타내었다. (min=-8, max=-1) (a)PML을 사용하지 않은 경우. 경계에서 반사된 빛이 되돌아 오면서 복잡한 양상을 보여준다. 반사된 빛의 패턴이 대칭적이지 않은 이유는 Yee Cell 자체가 지닌 1/2 만큼의 비대칭성 때문이다. (b) PML을 사용한 경우. 반사되는 빛이 전혀 없음을 확인할 수 있다. 계산 구조의 경계에 있는 밝은 사각형은 PML에서 빛이 흡수되는 과정을 나타낸다.

여기서 주파수  $\omega_n = 0.5$  (normalized frequency),<sup>17</sup>  $\delta t = 100$  (FDTD time steps)로 정하였다. 그리고 detection의 위치를 바꾸어 가면서  $H_z$  field 를 3000 step까지 측정하였다.

그림 4.2(a)의 결과가 보여주듯이, 컴퓨터 메모리의 한계로 인하여 자유 공간에서의 빛의 전파를 묘사하는데 어려움이 따른다. 즉, 점 광원으로부터 전파된 빛이 계산 공간의 경계에 닿으면 반사가 일어난다! 이 반사를 없애기 위해서 계산 구조의 크기를 계속해서 키울 수는 없는 것이다. 그러므로 일반적인 빛의 입사에 대해서 반사가 전혀 일어나지 않는 수학적<sup>18</sup> 경계 조건이 필요하다. 이와 같은 가상의 경계 조건을 ‘흡수 경계층’ (Absorbing boundary condition)이라고 한다. FDTD 계산 공간 벽 안쪽에 잘 조절된 흡수 계수를 갖는 비등방성 물질을 가정하게 되는데, 가장 널리 사용되는 방법이 PML이라 불리는 조건이다. 자세한 내용은 Taflove의 책[4]을 참조하기 바라며, 여기서는 PML을 사용하였을 때와<sup>19</sup> 사용하지 않을 때의<sup>20</sup> 차이를 FDTD 계산을 통하여 보여주는 것으로 마무리 하겠다.(그림 4.3)

#### 4.1.2 Electric Dipole과 Magnetic Dipole

앞에서 묘사한 점 광원으로부터의 전파(radiation)는 수학적으로는 다중 극자항(multipole)들로 분해하여 묘사할 수 있다.[6] 이와 같은 점 광원의 경우 일반적으로 이중 극자항(dipole)의 세기가 가장 크게 된다. 또한  $\vec{J}$  또는  $\vec{M}$ 을 사용하였느냐에 따라서 전기 이중 극자(Electric dipole) 또는 자기 이중 극자(Magnetic dipole)의 두 가지로 나뉘게 된다.<sup>21</sup> 여기서는 전기 이중 극자 방출과 자기 이중 극자 방

<sup>17</sup>Normalized frequency  $\omega_n$ 과  $f$  사이의 관계식은 식 2.44를 참조.

<sup>18</sup>여기서 ‘수학적’이란 표현은 물리적인 ‘실제’ 세계에는 존재하지 않음을 강조한다.

<sup>19</sup>`pml.size(10,10,10,10,10,10)`

<sup>20</sup>`pml.size(0,0,0,0,0,0)`

<sup>21</sup>이 두 가지는 서로 수학적으로 수직(orthogonal)하다.

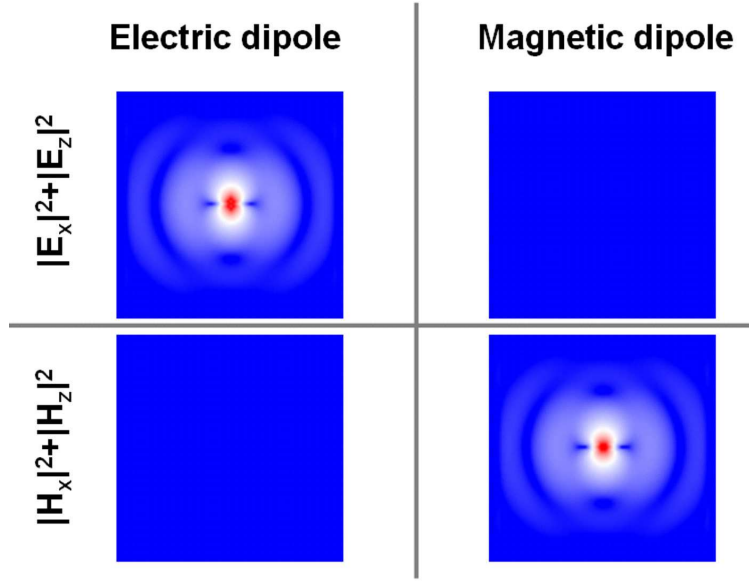


Figure 4.4: (동영상)  $y=0$  평면에서 측정된  $|E_x|^2 + |E_z|^2$ 과  $|H_x|^2 + |H_z|^2$ 을 Log scale로 나타내었다. (min=-8, max=-1)

출을 계산하여 본다.

전기(자기) 이중 극자 방출을 만드려면, 앞에서 (식 4.3) 한 것처럼  $J_z(M_z)$ 를 이용하면 된다.<sup>22</sup> 여기서 Gaussian dipole source의 조건은 앞 절과 동일하게 하였다. 즉, 주파수  $\omega_n = 0.5$ 와  $\delta t = 100$ 로 정하였다.

그림 4.4에 나타난 것처럼, 전기(자기) 이중 극자 방출의 경우  $|H_x|^2 + |H_z|^2(|E_x|^2 + |E_z|^2)$ 에서 아무런 성분도 나타나지 않는다. 이것은 전기(자기) 이중 극자 방출이  $\theta(\phi)$  방향으로 편광되어 있음을 확실히 보여준다.[6]

### 4.1.3 Gaussian Dipole과 Lorentzian Dipole

식 4.3에 주어진 dipole source의 경우 시간 영역에서 Gaussian 함수 형태의 envelope을 갖고 있다. 이것을 Fourier 변환하여 주파수 영역에서 살펴보면 여기서도 역시 Gaussian 함수의 형태를 하고 있을 것이다.[15]

한편 시간 영역에서 다음과 같이 exponential decay 하는 envelope을 가진 dipole source를 생각한다.

$$M_z(\vec{r}_0 = 0, t \geq t_0) \propto \sin(2\pi ft + \phi) \exp\{-(t - t_0)/\tau\} \quad (4.4)$$

이와 같은 함수를 주파수 영역에서 보게되면 Lorentzian 함수의 형태를 하고 있을 것이다.[15] 그러므로 식 4.3를 Gaussian dipole, 식 4.4을 Lorentzian dipole이라고 부르기로 한다.

<sup>22</sup>Gaussian\_dipole\_source("Ez",0,0,0,WC,0,3\*DT,DT)    Gaussian\_dipole\_source("Hz",0,0,0,WC,0,3\*DT,DT)

Gaussian dipole의 경우, 공진주파수  $f$ 와 초기 위상  $\phi_G$  이외에 Gaussian envelope의 형태를 결정하는  $\delta t$ 와 envelope이 최대값을 갖는 정점에서의 시각  $t_0$  를 조절 변수로 사용한다.<sup>23</sup> Lorentzian dipole의 경우, 공진주파수  $f$ 와 초기 위상  $\phi_L$ , 그리고 exponential decay의 lifetime인  $\tau$ 와 초기 시각  $t_0$ 를 조절 변수로 사용한다.<sup>24</sup>  $\delta t$  또는  $\tau$ 와, 주파수 영역에서의 공진주파수  $f$ 의 불확정성  $\delta f$  사이의 관계식은 3.1절에서 다룬 것처럼 Fourier 변환 관계식을 통해서 주어진다. 하지만 같은 정도의 주파수 불확정성을 가정하더라도 Gaussian 함수가 Lorentzian 함수에 비해서 더 좋은 주파수 응답 특성을 갖고 있다.<sup>25</sup>

이 절에서는 dipole source의 초기 위상 선택의 중요성을 다루기로 하겠다. 이 내용은 3장의 과제 2번 문제에서 다룬 것과 밀접한 관계가 있다. 즉, 모든 source 항  $\vec{J}$ 와  $\vec{M}$ 이  $t = t_{DS}$ 에서 사라졌더라도 일반적으로  $t \rightarrow \infty$ 에서 남아있는 field 성분이 있다. 이와 같이 dipole source를 도입하는 과정에서 남게 되는 static longitudinal field를 상쇄하기 위해서는 초기 위상값을 신중하게 선택하여야 한다.

다음과 같은 Lorentzian dipole source의 경우

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = \hat{d}e^{-\Gamma t} \cos(\Omega t + \phi_L) \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) \quad (4.5)$$

초기 위상  $\phi_L$ 은 식  $\sin \phi_L = \Gamma/\sqrt{\Omega^2 + \Gamma^2}$ 와  $\cos \phi_L = \Omega/\sqrt{\Omega^2 + \Gamma^2}$ 를 만족해야 하며, Gaussian dipole source의 경우

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = \hat{d}e^{-\left(\frac{t-t_0}{\delta t}\right)^2} \sin(\Omega t + \phi_G) \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) \quad (4.6)$$

초기 위상  $\phi_G$ 는  $\phi_G = -\Omega t_0$ 를 만족해야 한다. KFDTD 에는 이와 같은 초기 위상을 계산해 주는 함수가 정의되어 있다.<sup>26</sup>

그림 4.5에  $z = 1.0$ 에서 측정된  $H_z$  field의 값을 나타내었다. 먼저 초기 위상값을 0으로 정한 경우  $t = 2000$ 에서<sup>27</sup> 측정된 field의 크기는 각각  $-3.82 \times 10^{-8}$  (Gaussian)과  $-4.17 \times 10^{-5}$  (Lorentzian) 이었다.<sup>28</sup> 식 4.5와 4.6에서 정한 적절한 초기 위상값을 사용한 경우, field의 크기가 각각  $-1.13 \times 10^{-10}$  (Gaussian)과  $-9.64 \times 10^{-6}$  (Lorentzian)으로 적어도 인자 10 만큼은 줄어들음을 볼 수 있다. 이 결과는 원점 근방에 남아있는 static longitudinal field 성분이 줄어들었기 때문이다.

#### 4.1.4 Poynting 에너지 계산할 때 주의할 점

4.1.3절에서 살펴보았듯이 dipole source가 존재하는 영역 근처에는 강한 static field 가 있다. 이것을 near-field 또는 에바네스cent파 (evanescent wave)라고 부른다. FDTD 계산을 하다보면 어떤 닫힌 폐곡면을 (혹은 열린 곡면) 빠져나오는 Poynting energy의 크기를 계산해야 할 필요성이 생긴다. Poynting

<sup>23</sup>KFDTD에서  $t_0 = 3 \times \delta t$ 로 정해져 있다. 3.1절의 내용 참조

<sup>24</sup>Gaussian\_dipole\_source("Hz", 0, 0, 0, WC, Gphase, 3\*DT, DT)      Lorentzian\_dipole\_source("Hz", 0, 0, 0, WC, Lphase, T0, DT)

<sup>25</sup>이것을 보이는 것이 이 장의 과제이다.

<sup>26</sup>Gaussian\_phase(WC, 3\*DT)      Lorentzian\_phase(WC, T0)

<sup>27</sup> $t_{DS} = 600 \ll t = 2000$ 이므로 이 시각을  $t = \infty$ 로 볼 수 있다.

<sup>28</sup>Gaussian 함수의 대칭적인 형태 때문에, Lorentzian source 경우에 비해서 Gaussian source의 dc 성분이 훨씬 작게 나타난다.

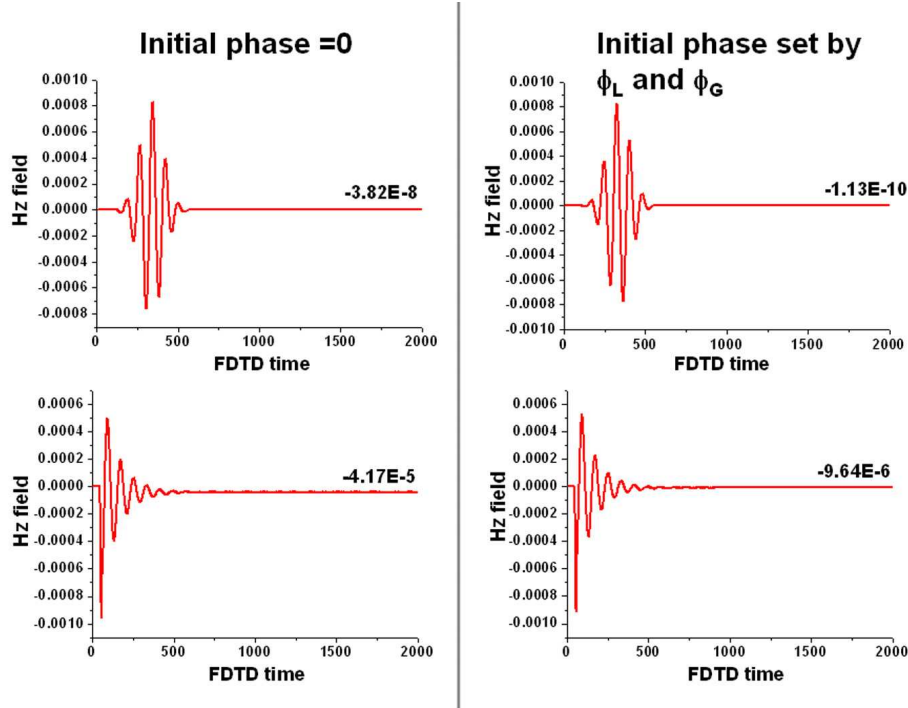


Figure 4.5:  $z = 1.0$ 에서 측정된  $H_z$  field 값. 초기 위상을 적절하게 정해주면 최종적으로 남게되는  $H_z$  field의 dc 성분의 크기가 줄어들 수 있다.

vector  $\vec{P}$ 는  $\vec{P} = \vec{E} \times \vec{H}$ 와 같이 정의되며[6] 이것은 단위 시간당 단위 면적을 빠져나오는 energy flux 이다. 그러므로 다음과 같은 양

$$E_p = \int dt \int_A \vec{P} \cdot d\vec{S} \quad (4.7)$$

은 정해진 시간  $\Delta t$  동안 곡면 A (열린 혹은 닫힌)를 통과하는 Poynting energy를 묘사하게 된다.

이 절에서는 위와 같은 계산을 수행할 때에 주의해야 하는 사항을 다루도록 한다. 그림 4.6에 묘사한 것처럼 원점에  $M_z$  Gaussian dipole source를 두었다. 사용한 dipole source의 파라미터는 이전 절의 것들과 동일하다.<sup>29</sup> 이때 한 변의 길이가  $L$ 인 정육면체 모양을 가정하고, 이 폐곡면을 빠져나오는 Poynting energy의 크기를 FDTD time step마다 계산하여 합산하였다.<sup>30</sup> 즉,

$$E_p(t) = \int_0^t dt \int_{\text{cube}} \vec{P} \cdot d\vec{S} \quad (4.8)$$

정육면체 한 변의 길이를 0.5 에서 2.0까지 바꾸어 가면서 계산하여 본 결과  $E_p(t = 2000)$  (또는  $E_p(\infty)$ )의 값이 279.74 ( $L = 0.5$ ), 260.07 ( $L = 1.0$ ), 254.66 ( $L = 1.5$ ), 252.02 ( $L = 2.0$ ) 으로 점차 줄어드는 경향을 볼 수 있다. 한편 그림 4.7에  $E_p(t)$ 의 결과를 나타내었다. 정육면체의 크기가 작은 경우

<sup>29</sup> $\omega_n = 0.5, \delta t = 100$

<sup>30</sup>Poynting\_block(x0,y0,z0, Lx,Ly,Lz)

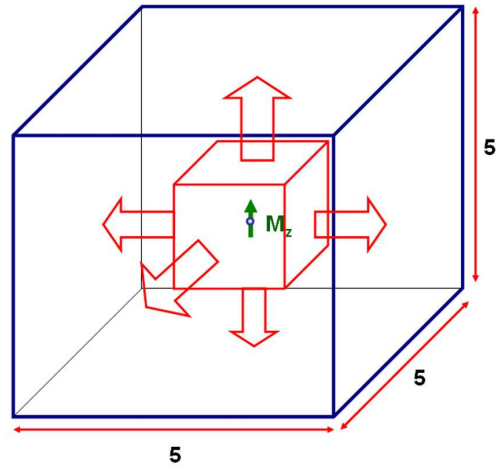


Figure 4.6: 원점에 point dipole source를 주었다. 가상의 폐곡면(빨간 실선으로 나타난 정육면체)의 크기를 바꾸어 가면서 시간에 대해서 적분한 Poynting energy를 계산하였다.

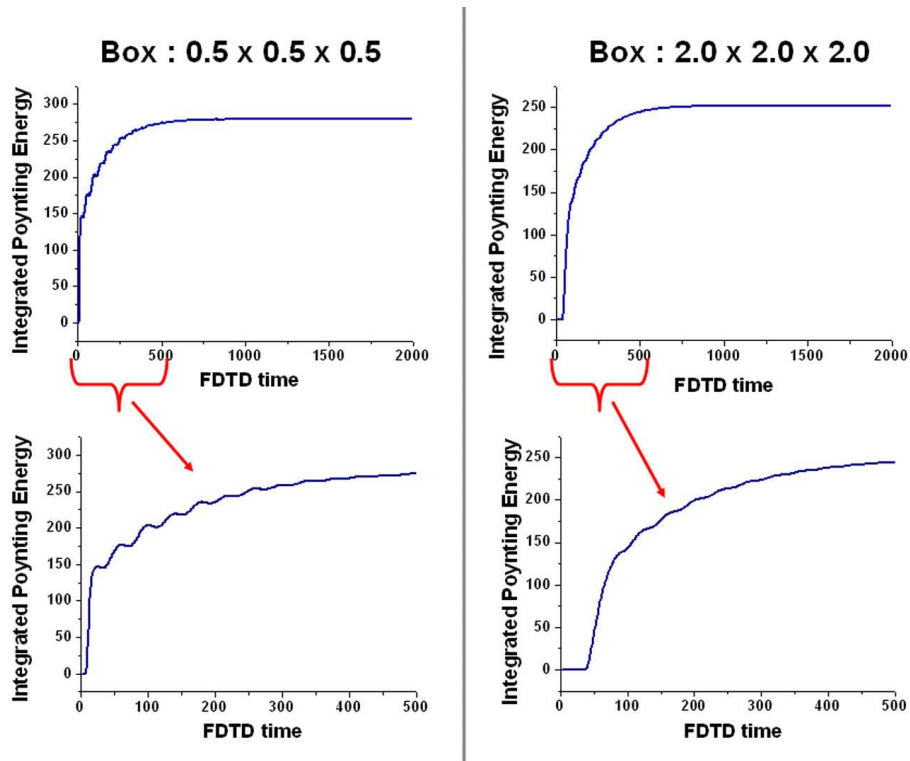


Figure 4.7: 원점에 point dipole source를 주었다. 가상의 폐곡면(빨간 실선으로 나타난 정육면체)의 크기를 바꾸어 가면서 시간에 대해서 적분한 Poynting energy를 계산하였다.

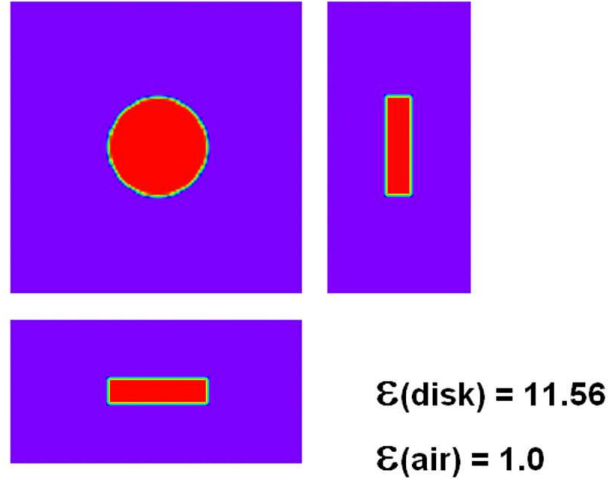


Figure 4.8: 미소 원반 공진기의 epsilon 구조. FDTD 계산 영역의 크기는  $6 \times 6 \times 3$  이고 원반의 반지름은 1, 두께는 0.5로 하였다. FDTD grid의 크기는  $1/20$  로 하였다.

$E_p(t)$ 에서 작은 진동을 관측할 수 있었다. 즉, Poynting energy의 값이 음인 시간 구역이 존재한다는 뜻이다. 이것은 그 구간에서 energy flux의 방향이 음의 방향으로 (정육면체 안쪽으로) 되었음을 나타낸다!

이와같은 결과는 source의 near-field 근방에서는 energy flux의 방향이 단순하지 않고 복잡한 진동 양상을 띄고 있음을 알려준다. 실제로 near-field 영역은 propagating wave 성분과 non-propagating wave (static field 또는 에바네스цент파)로 구성되어 있는데,  $\exp(i\omega t)$ 로 진동하는 에바네스цент파의 특성으로 인하여 이와 같은 결과를 얻게 된다. 그러므로 가상의 폐곡면이 source의 near-field 영역에 놓여 있으면 올바른 Poynting energy를 얻지 못하게 된다. 예제의 경우  $L = 2.0$ 인 폐곡면을 사용하였을 때 좀 더 정확한 결과를 얻었다고 볼 수 있다.

## 4.2 Microdisk 공진 모드 분석

이 절에서는 미소 원반 공진기(microdisk)에 존재하는 모드를 분석해 보기로 한다. 미소 원반 공진기는 S. L. McCall이 최초로 제안하였는데[16] 그림 4.8에 묘사된 것처럼 ‘원반’형태이다. 기하 광학의 관점에서 이와 같은 원반 구조 내부에는 원반과 공기 경계에서 일어나는 ‘전반사’(Total internal reflection) 과정으로 인하여 빛의 강한 구속이 일어날 수 있다. 원반의 반지름이 빛의 파장과 비슷해지면 Maxwell’s equation을 적용하여 생각해야 하는데, 일반적으로 whispering-gallery mode 라고 불리는 형태의 모드가 존재함이 알려져 있다. McCall의 논문을 바탕으로 이 미소 원반 모드의 특성을 간단히 정리해 보겠다.

우선 공진기 구조의 대칭성을 살펴본다. 원반의 두께 방향을  $z$ 로 하고, 원반이  $x-y$  평면에 놓여 있다고 가정하자. 또 원반의 중심이 원점에 놓여 있다고 하자.<sup>31</sup> 이때  $z=0$ 인 평면을 중심으로 거울상 대칭성을 갖고 있다. 그리고  $x-y$  평면에서 보면 원통형 대칭성<sup>32</sup>을 갖고 있음을 볼 수 있다. 그러므로 원반에 존재하는 모드는, 우선  $z=0$  평면에 대해서 even 모드 (또는 TE)와 odd 모드 (또는 TM)로 나누어 지고, 원형 단면으로 인하여 반지름 방향 양자수  $N$ 과 각운동량 양자수  $M$ 을 이용하여 나타낼 수 있게 되었다. 여기서 원반의 두께가 어느 임계값 이하로 작아지면 (보통  $\lambda/2n_{\text{eff}}$ ) TE 모드만이 존재할 수 있다. 이런 조건하에서는 전기장 벡터는  $x-y$  평면에 놓여 있고, 자기장 벡터는  $z$  방향을 갖게 된다. 앞으로 다루게 될 미소 원반 공진기는 이와 같은 두께 조건을 만족한다. 한편 양자수  $(M, N)$ 으로 표시되는 미소 원반 모드를 고려해보자. 여기서  $M$ 은 whispering-gallery mode의 각운동량 즉, 회전하는 성질과 관련이 있다. 즉  $M$  값이 클 수록 원반 내에서 빛이 빠져나가려는 성질이 커질 것이다. 빛이 미소 원반에 구속되려는 성질은 미소 원반 자체가 지니고 있는 높은 굴절률 때문인데, 이와 같은 인력 포텐셜은  $M^2/r^2$ 에 비례하는 반발 포텐셜과 조화로 이루면서 원반 주변에 우물 모양의 포텐셜을 형성하게 된다. 즉,  $R_D$ 를 원반의 반지름으로 두면, whispering-gallery mode는 대략  $r \cong M\lambda/2\pi \cong n_{\text{eff}}R_D$  정도까지 퍼져있게 된다. 이 때의  $r$  값이 사실상 미소 원반 모드의 유효 반경을 정하게 된다. 한편  $M$  값은 양수와 음수 두 가지가 가능하며  $(+M, N)$ 과  $(-M, N)$  모드는 서로 수직(orthogonal)이며 축퇴되어 있다.<sup>33</sup>

#### 4.2.1 광대역 source를 이용한 공진 모드 찾기

그림 4.8에 나타난 미소 원반에 존재하는 모드를 찾기 위해서 광대역 Gaussian dipole source를 이용하였다. 두 개의  $M_z$  dipole source를 좌표  $(0,0.85)$ 와  $(0.1,0.9)$ 에 적용하였다.  $\delta t = 300$ 으로 하였고 규격 주파수  $\omega_n$ 은 각각 0.4와 0.7이었다. 세 가지 다른 위치에서 측정한  $H_z$  field의 값을 그림 4.9에 나타내었다.

$B$ 에서 측정한 field 데이터에서 source 부분을 제외한 Fourier 변환을 통하여 power spectrum을 계산하였다. (그림 4.10) Dipole source의 중심 주파수인 0.4와 0.7 근방에 공진 모드 peak 들이 모여 있음을 볼 수 있다. 여기 나타난 모든 peak 들은 두 개의 양자수  $(M, N)$ 으로 묘사할 수 있다. 예를들어  $\omega_n \cong 0.7$  근방에 있는 모드의 각운동량 양자수  $M$ 을 예상해 보자. 앞에서 언급하였듯이 whispering-gallery mode의 공진 조건은

$$2\pi R_D n_{\text{eff}} = M\lambda \quad (4.9)$$

로 나타낼 수 있고,  $R_D = 1(a)$ <sup>34</sup>이고  $\omega_n = a/\lambda \cong 0.7$  이므로,  $2\pi \cdot 1(a) \cdot n_{\text{eff}} = M(1/0.7)$ 에서  $M \cong 2\pi \times 0.7n_{\text{eff}} \sim 4.2n_{\text{eff}}$  가 된다.  $n_{\text{eff}}$ 는 대략 2 정도로 볼 수 있으므로  $M \sim 8$  정도가 될 것으로 예상된다.

<sup>31</sup>input\_object("rod",EMP,0,0,0,1,0.5,0,11.56)

<sup>32</sup> $r$ 과  $\theta$ 로 묘사될 수 있음

<sup>33</sup>이상적인 원반의 경우 같은 공진 주파수를 갖는다.

<sup>34</sup>여기서  $a$ 는 FDTD에서의 단위 길이를 나타낸다. 2.5절의 내용을 참조



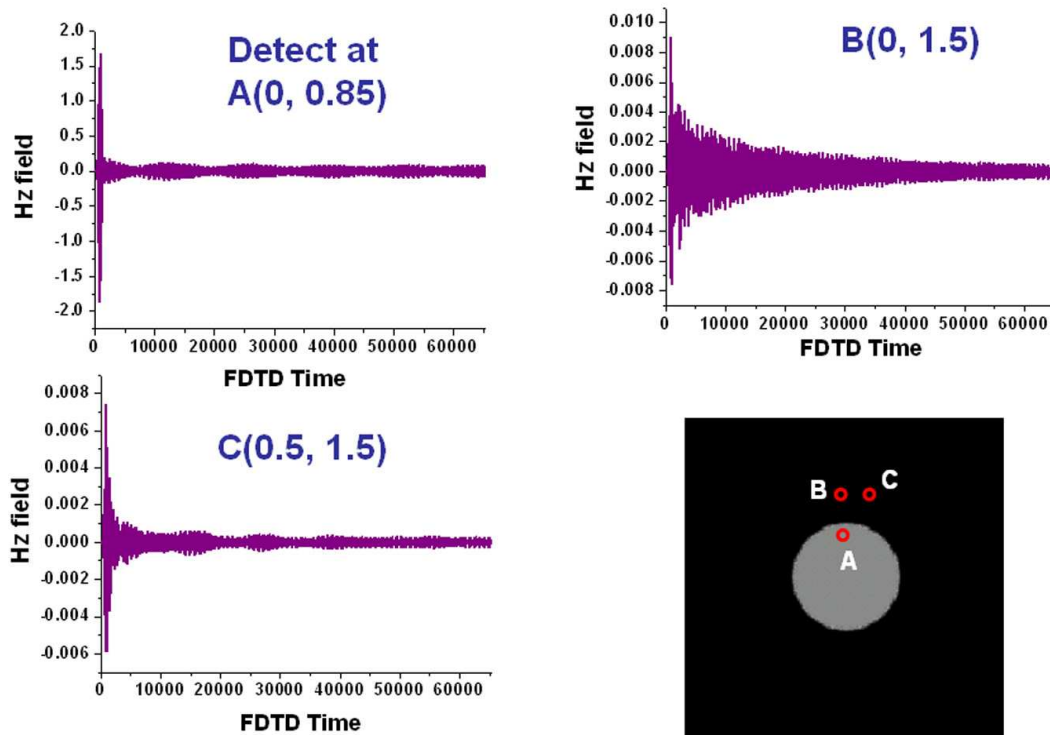


Figure 4.9:  $t=0$  에서부터  $t=65536$  까지 측정된  $H_z$  field.  $t \leq 6\delta t = 1800$  구간에는 dipole source에서 방출된 field 성분이 포함되어 있다. 그 이후에는 여기된 공진 모드들의 exponential decay 하는 모습을 관찰할 수 있다. 한편 여러 모드들로 인한 복잡한 beating이 나타나 있다.

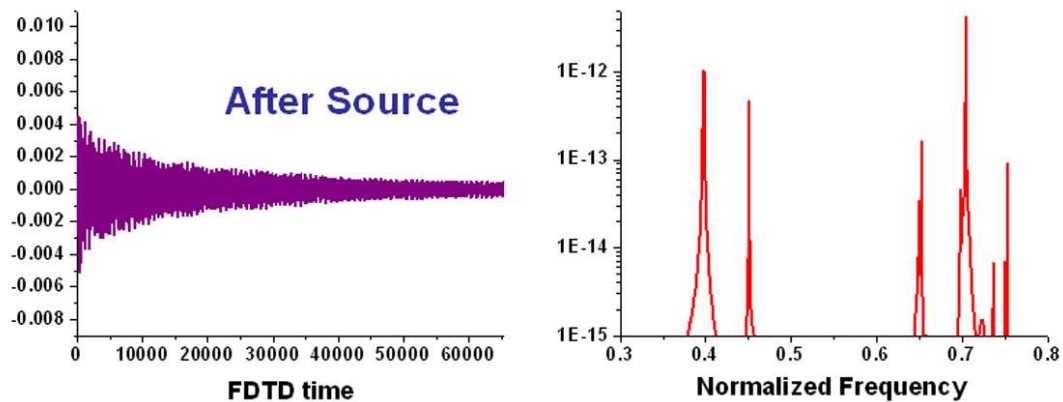


Figure 4.10: 광대역 dipole source를 사용하여 여기시킨 미소 원반 공진기의 모드들.

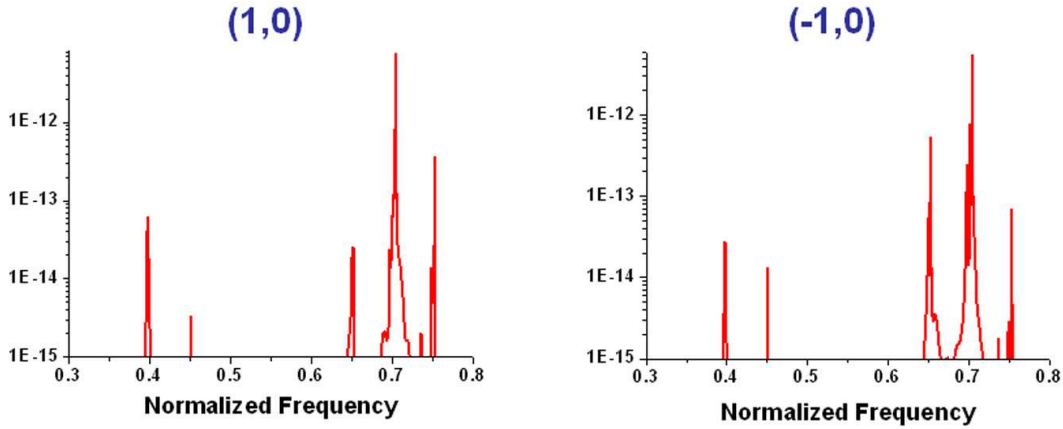


Figure 4.11: 광대역 dipole source를 사용하여 여기시킨 미소 원반 공진기의 모드들.  $x = 0$  평면에 대해서 even(1,0), odd(-1,0)의 대칭성을 가정하였다.

#### 4.2.2 하나의 공진 모드만을 선택하기

이제 규격 주파수 0.7 정도에 위치한 공진 모드를 선택적으로 여기시켜 보기로 한다. 4.2.1절에서 언급하였듯이  $M$  값에 의한 축퇴 때문에 dipole source의  $\delta t$ 만 조절한다고 해서 하나의 모드만을 선택적으로 여기시킬 수는 없다. 이런 경우에는 구조의 대칭성을 이용하여 모드를 분류하는 방법을 사용할 수 있다. KFDTD에는  $x = 0, y = 0, z = 0$  평면에 대해서 거울상 대칭 조건을 쓸 수 있다.<sup>35</sup> 나노포토닉스 연구실에서 주로 2차원 광결정 슬랩 구조를 다루므로, 편이상  $H_z$  field의 대칭성을 기준으로 정의하였다. 그림 4.11은  $x = 0$  평면에 대해서만 even(1,0), odd(-1,0)의 대칭성을 가정한 경우, Fourier 변환으로 얻어진 모드의 power spectrum이다. 하지만  $x$ 축에 대한 대칭성 조건만으로는  $M$ 값 축퇴를 분리하기에는 힘든 것으로 생각된다.

그림 4.12은 (1,0) 대칭성 조건만을 가정하고서,  $\delta t = 1500, \omega_n = 0.7043$ 인<sup>36</sup> Gaussian dipole source를 사용하여 구한  $H_z$  field의 시간 변화를 보여준다. 여전히 이중으로 축퇴된  $\pm M$  모드로 인한 beating 현상을 볼 수 있다.<sup>37</sup> Fourier 스펙트럼에서 살펴보면 두 개의 peak 이 나타남을 볼 수 있는데, 미소 원반 공진기에서 일반적으로 나타나는  $M$  축퇴로 인한 결과로 생각된다.

이번에는  $y = 0$  평면에 대해서도 거울상 대칭성 조건을 사용하였다. 그림 4.13의 결과를 보면,  $(x = 0, y = 0) = (\text{even}, \text{odd})$ 인 조건을 사용하였을 경우에  $H_z$  field의 깨끗한 exponential decay를 볼 수 있었다. 이 모드의 전기장 세기( $\log |\vec{E}|^2$ )와 자기장 세기( $\log |\vec{H}|^2$ )의 평면 이미지를 측정하여 나타낸 결과를 그림 4.14에 나타내었다. 원반의 가장자리를 따라가면서 형성되어 있는 field node의 갯수는 각 운동량 양자수  $M$ 인 모드에 대해서  $2M$ 이 된다. 전기장 세기와 자기장 세기 분포에서 field node의 갯

<sup>35</sup>Hz\_parity()

<sup>36</sup>Fourier 스펙트럼에서 찾은 값임

<sup>37</sup>FDTD 계산 구조의 유한한 grid 크기로 인하여 두 축퇴된 모드 사이의 약간의 주파수 차이가 있다. 이와 같은 현상은 실제 제작된 미소 원반 공진기에서도 관측 가능하다.[16]

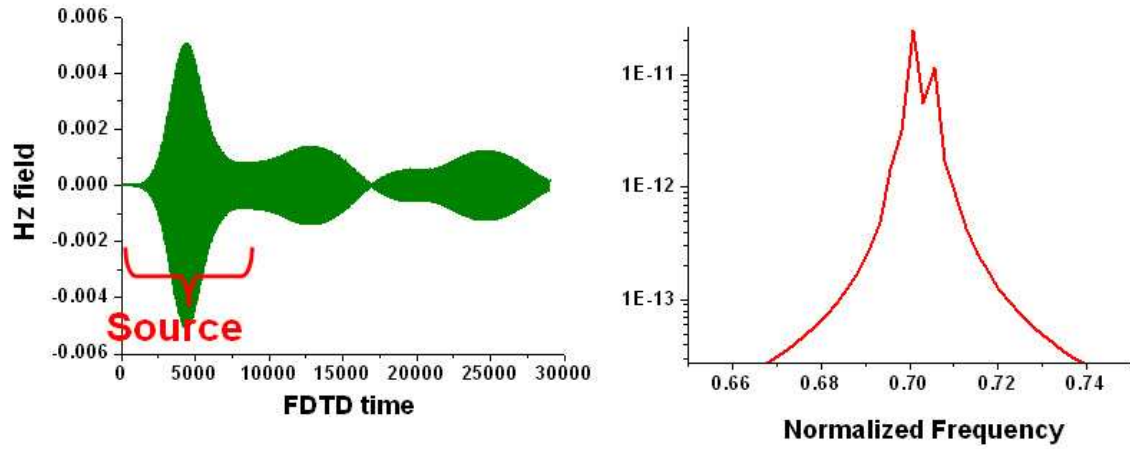


Figure 4.12:  $\delta t = 1500$ ,  $\omega_n = 0.7043$ 인 Gaussian dipole source를 사용하여 여기시킨 미소 원반 공진기의 모드들.  $x = 0$  평면에 대해서 even(1,0) 대칭성을 가정하였다. 이중으로 축퇴된  $\pm M$  모드 사이의 beating 현상이 나타난다.

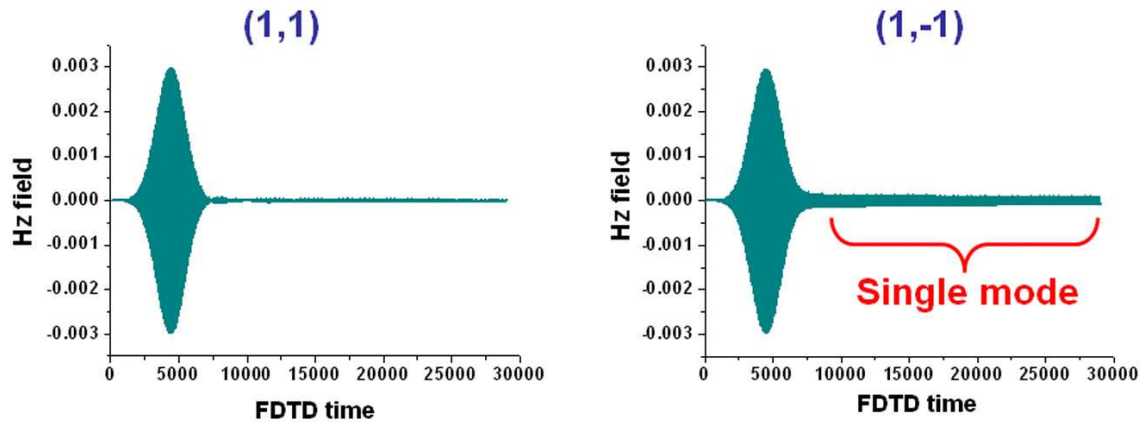


Figure 4.13:  $\delta t = 1500$ ,  $\omega_n = 0.7043$ 인 Gaussian dipole source를 사용하여 여기시킨 모드의  $H_z$  field.  $x = 0$  평면에 대해서는 even 대칭성을,  $y = 0$  평면에 대해서는 even과 odd인 거울상 대칭성을 가정하였다 ((1,1),(1,-1)). (1,-1)인 경우에 단일 모드의 깨끗한 exponential decay를 관측할 수 있다.

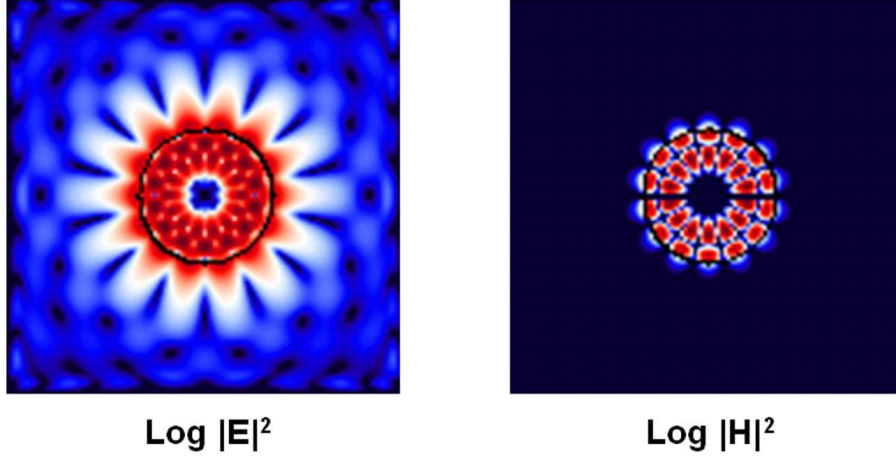


Figure 4.14: (동영상)  $\omega_n = 0.7043$ 인 whispering-gallery mode의  $\log |\vec{E}|^2$ 와  $\log |\vec{H}|^2$ . 시계 방향으로 도는 모드와 반시계 방향으로 도는 모드 사이의 간섭으로 인해 standing wave 형태의 진동을 하고 있다. 원반의 가장자리에 놓인 field node의 갯수( $2M$ )가 14이므로  $M = 7$ 인 모드임을 알 수 있다.

수가 14이므로,  $\omega_n = 0.7043$ 인 모드는  $M = 7$ 인 모드임을 알 수 있다.<sup>38</sup> 한편 전기장 세기 분포의 동영상을 살펴보면, whispering-gallery mode가 원반 반지름의 약 2배 정도까지 퍼져 있음을 볼 수 있다. 이것은  $r \cong n_{\text{eff}} R_D$  정도 된다는 4.2 절의 내용과 일치한다.

마지막으로, 이 절에서 선택적으로 여기서 킨  $\omega_n = 0.7043$ 인 모드의 공진기  $Q$  값을 계산해 보기로 한다. 식 2.52를 이용하여 계산해보면 약 2100 정도였다.

### 4.3 이차원 광결정 슬랩과 자발 방출 조절

#### 4.3.1 Purcell 효과와 자발 방출 조절 이론

이 절에서는 일반적인 미소 공진기<sup>39</sup>가 원자의 자발 방출률 변화에 미치는 효과에 대한 이론을 다룬다. 원자의 자발 방출률은 원자만의 고유한 특성이 아니며 주변의 광자 분포 밀도(photon density of state)에 의해 변하는 양이다. 원자가 일반적인 공진기 내에 존재할 때의 자발 방출률( $\gamma_1$ )과 균일한 유전체 내에 존재할 때의 자발 방출률( $\gamma_2$ )의 비율( $\gamma_1/\gamma_2$ )을 Purcell factor라고 하며 Purcell이 처음으로 유도하였다.[17]

그러나 자발 방출은 진공 요동에 의해서 야기되는 유도 방출로 이해할 수 있고, 진공 요동의 존재 자체가 양자 광학 이론을 통해서만 정량화될 수 있으므로, Purcell factor를 유도하기 위해서는 먼저 빛을 양자적으로 다룰 수 있어야만 한다. 먼저, 원자만을 양자적으로 취급하는 준고전 이론을 이용하여 이준위 원자와 빛과의 상호작용을 다루었다. 원자의 빛과의 상호작용이 크지 않은 영역에서 전이

<sup>38</sup>4.2.1 절의 마지막 부분에서  $M = 8$ 로 예측했었다.

<sup>39</sup>개방적인 형태의 단일 반사경(mirror)에서부터 강한 광자 구속력을 지닌 복잡한 형태의 광결정 공진기에 이르기까지, ‘일반적인’ 형태의 공진기를 의미한다.

확률이 Fermi's Golden Rule로 표현됨을 보이겠다. 그리고 이 식이 자발 방출률 계산에도 적용될 수 있음을 지적할 것이다. 다음으로, 빛까지 양자적으로 취급하는 완전한 양자이론을 통하여 준고전 이론에서의 결과의 정당성을 논의하겠다. 마지막으로, 균일한 유전체에 놓인 원자의 자발방출률과 일반적인 미소 공진기내에 놓인 원자의 자발 방출률을 계산하고, Purcell factor를 유도하겠다. 이 장에 포함된 많은 내용들은 이해웅의 ‘빛의 양자이론’[18]을 참조하였음을 밝혀둔다.

## 흡수 및 유도 방출의 준고전 이론

### 1. Jaynes-Cummings 모델

원자의 빛의 흡수와 유도 방출을 양자 역학적으로 계산하기 위해서 준고전(semiclassical) 이론을 먼저 살펴보기로 한다. 여기서는 원자의 에너지 준위만을 양자화하고 빛은 고전적인 물리량으로 다루게 되는데, 이 방법은 1963년 Jaynes 와 Cummings가 처음으로 시도하였다.[19] 이 모델에서 이준위 ( $E_1, E_2$ ) 원자를 가정하며 외부에서 넣어주는 광자의 에너지가

$$E_2 - E_1 \approx \hbar\omega \quad (4.10)$$

인 상황을 가정한다. 또한 Schrödinger 방정식의 Hamiltonian은 다음과 같이 원자의 에너지 준위만을 기술하는  $H_0$ 와 외부 빛과의 상호작용을 나타내는  $H_i$ 의 두 부분으로 구성되어 있다고 가정한다. 여기서 상호작용 Hamiltonian  $H_i$ 은

$$H_i = -\frac{e}{m} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{A} \quad (4.11)$$

이 모델에서 빛을 고전적으로 취급하므로 위의 벡터 포텐셜  $\vec{A}$ 는 연산자가 아니다. 전체 Schrödinger 방정식은

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi(t)\rangle}{\partial t} = H |\varphi(t)\rangle = (H_0 + H_i) |\varphi(t)\rangle \quad (4.12)$$

로 쓸 수 있으며, 가정해는

$$|\varphi(t)\rangle = a_1(t)e^{-iE_1t/\hbar} |1\rangle + a_2(t)e^{-iE_2t/\hbar} |2\rangle \quad (4.13)$$

이 가정해 (4.13)을 방정식 (4.12)에 대입하고, 좌변에  $\langle 1|$  또는  $\langle 2|$ 를 곱하여 정리하면

$$\frac{da_1}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \{ \langle 1| H_i |1\rangle a_1 + \langle 1| H_i |2\rangle e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} a_2 \} \quad (4.14)$$

$$\frac{da_2}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \{ \langle 2| H_i |1\rangle e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} a_1 + \langle 2| H_i |2\rangle a_2 \} \quad (4.15)$$

위의 식에서 행렬요소  $H_{12} = \langle 1 | H_i | 2 \rangle$ 를 간단히 하면 다음과 같다. 우선 상호작용 Hamiltonian  $H_i$ 은

$$H_i = -\frac{e}{m}\vec{p} \cdot \vec{A} = -\frac{ie}{\hbar}[H_0, \vec{r}] \cdot \hat{\varepsilon}(\hat{A}_0 e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \hat{A}_0^* e^{i\omega t - i\vec{k} \cdot \vec{r}}) \quad (4.16)$$

여기서 쌍극자 근사(dipole approximation)를 <sup>40</sup> 취하면  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \approx 1$ 로 놓을 수 있고, 회전파 근사(rotating wave approximation)를 취하면 두 개의 지수함수 항 중에서  $\exp(i\omega t)$  항만이 남는다.<sup>41</sup> 원자 각주파수  $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$ 로 표시하면,

$$H_{12} \approx \frac{ie}{\hbar} \langle 1 | [H_0, \vec{r}] | 2 \rangle \cdot \hat{\varepsilon}(A_0^* e^{i\omega t}) = \langle 1 | e\vec{r} | 2 \rangle \cdot \hat{\varepsilon}(i\omega_0 A_0^* e^{i\omega t}) = -\frac{1}{2}\vec{d}_{12} \cdot \vec{E}_0^* e^{i\omega t} \quad (4.17)$$

여기서  $\vec{d}_{12}$ 는 전기 쌍극자 모멘트의 행렬요소이고  $\vec{E}_0$ 는 전기장 진폭의 크기를 갖는 복소 벡터이다.  $H_{21}$  항의 경우도 같은 방식으로 계산하면, 회전파 근사를 만족시키기 위해서  $\exp(-i\omega t)$  항이 남게 되고,

$$H_{21} \approx \frac{1}{2} \langle 2 | e\vec{r} | 1 \rangle \cdot \hat{\varepsilon}(-i\omega_0 A_0 e^{-i\omega t}) = -\frac{1}{2}\vec{d}_{21} \cdot \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \quad (4.18)$$

한편  $H_{11} = \langle 1 | H_i | 1 \rangle$ 나  $H_{22} = \langle 2 | H_i | 2 \rangle$ 는  $\vec{r}$ 의 기함수이므로 영이 됨을 쉽게 알 수 있다.<sup>42</sup>  $\tilde{V}_{12} \equiv -\vec{d}_{12} \cdot \vec{E}_0$ 를 빛과 원자와의 상호작용 에너지를 나타내는 항으로 두면, 결국 Jaynes-Cummings 모델의 기본 방정식은

$$\frac{da_1(t)}{dt} = \frac{1}{2i\hbar} V_{12} e^{i(\omega - \omega_0)t} a_2(t) \quad (4.19)$$

$$\frac{da_2(t)}{dt} = \frac{1}{2i\hbar} V_{21} e^{-i(\omega - \omega_0)t} a_1(t) \quad (4.20)$$

이제 가장 간단한 상황인  $\omega = \omega_0$ 에 대해서 위의 방정식의 해를 구하여 본다. 초기에 모든 전자가 바닥 상태(state 1)에 있다고 가정하자. 이 경우 Rabi 진동[21]으로 알려진 해를 구하게 되고, 이것은 입사하는 빛이 전자의 여기와 방출을 계속해서 유도하기 때문에 나타나는 현상이다. 일반적인 경우( $\omega \neq \omega_0$ )에 Rabi 진동의 주파수  $\Omega$ 는

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + |V_{12}|^2/\hbar^2} \quad (4.21)$$

이고, 입사광의 주파수가 원자 에너지준위 차이와 일치하는 경우( $\omega = \omega_0$ )의 해는

<sup>40</sup> 입사광의 파장을  $\lambda \sim 600$  nm 로 가정하면, 일반적인 원자의 크기  $a_0 \sim 0.1$ nm 내에서의 진폭의 변화는 거의 없다.

<sup>41</sup>  $\exp[-i(\omega + \omega_0)t]$ 와 같이 빨리 진동하는 항은  $a_1$ 의 변화에 거의 영향을 미치지 못한다.

<sup>42</sup> 이와 같이 전기 쌍극자 전이가 영인 경우 다른 전이(자기 쌍극자, 전기 사중극자)에 의한 효과가 크게 나타날 수 있다.

자세한 논의는 다음 서적을 참조. [20], Chap. 5.3

$$a_1(t) = \cos(\Omega_0 t/2) \quad (4.22)$$

$$a_2(t) = -i \frac{V_{21}}{|V_{12}|} \sin(\Omega_0 t/2) \quad (4.23)$$

이다.

Jaynes-Cummings 모델은 위에서 전제한 가정하에서 완벽하게 성립하는 해를 준다. 즉 외부 빛과 원자와의 상호작용을 나타내는 의 크기가 원래의 Hamiltonian 와 비슷한 정도가 되더라도 성립하는 식이다. 결국 이 모델을 이용하여 레이저 공진기 내부에서와 같이 강한 빛이 존재할 때에도 원자의 유도 흡수, 방출을 기술할 수 있다.

## 2. Fermi's Golden Rule

이제 마지막으로 상호작용 Hamiltonian의 크기가 충분히 작은 경우  $|H_i| \ll |H_0|$ 의 근사해를 구해보도록 하자. 이 경우에 Fermi's Golden Rule로 알려진 유명한 해를 얻게 되고 약한 공진기 상호작용(weak coupling)에서의 유도 방출 또는 자발 방출을 유도할 때 유용하게 된다.

앞의 경우와 마찬가지로 초기 조건이  $a_1(0) = 1, a_2(0) = 0$ 일 때를 생각한다. 일반적인 경우( $\omega \neq \omega_0$ )의 Jaynes-Cummings 모델의 해를 구하면,

$$a_2(t) = \frac{1}{i\hbar} \frac{V_{21}}{\Omega} e^{-i(\omega - \omega_0)t/2} \sin(\Omega t/2) \quad (4.24)$$

상호작용 Hamiltonian의 크기가 작은 경우  $V_{21}$ 도 작게 되므로, Rabi 진동의 주파수 식 (4.21)를 이용하여 위의 근사해를 구하면,

$$a_2(t) \approx \frac{1}{i\hbar} \frac{V_{21}}{(\omega - \omega_0)} e^{-i(\omega - \omega_0)t/2} \sin((\omega - \omega_0)t/2) \quad (4.25)$$

상태1에서 상태2로의 전이 확률  $P_{12}(t) = |a_2(t)|^2$ 를 계산하면,

$$P_{12}(t) = \frac{\pi |V_{12}|^2}{2\hbar^2} \left\{ \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{(\omega - \omega_0)^2 t} \right\} \cdot t \quad (4.26)$$

여기서  $\{ \}$ 항은  $t \gg 1$  인 극한에서 Dirac delta 함수로 근사할 수 있다.<sup>43</sup>

$$\frac{2}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{(\omega - \omega_0)^2 t} = \delta(\omega - \omega_0) \quad (4.27)$$

그런데 여기서의 논의를 실질적으로 Rabi 진동을 볼 수 없는 영역으로 제한하면, 시간  $t$ 는 위의  $\{ \}$ 를 delta 함수로 취급할 수 있을 만큼 크고 (steady state limit) 동시에  $\Omega t \ll \pi$ 를 만족해야 한

<sup>43</sup>Loudon 책을 참조. [20],p.52

다. 실제 상황에서 입사 빛은 유한한 폭( $\Delta\omega$ )의 주파수 분포를 갖고 있고, 원자의 준위도  $\rho(\omega)$ 로 기술되는 연속적인 분포를 갖으므로,

$$P_{12}(t) = \frac{\pi|V_{12}|^2}{2\hbar^2} \int d\omega \rho(\omega) \delta(\omega - \omega_0) \cdot t \quad (4.28)$$

위 식에서  $\omega$ 에 관한 적분은  $\omega \approx \omega_0$  근방을 충분히 포함한다고 하면, 단위 시간당 전이 확률은

$$\frac{dP_{12}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \rho(\omega_0) \cdot |M_{12}|^2 \quad (4.29)$$

이 식이 유명한 Fermi's Golden Rule 이다. 여기서 새로 정의한 행렬요소  $|M_{12}|$ 는

$$M_{12} \equiv -\vec{d}_{12} \cdot \frac{\vec{E}_0}{2} = -\vec{d}_{12} \cdot \vec{e}_0 \quad (4.30)$$

여기서  $\vec{e}_0$ 는 전기장 진폭의 절반에 해당되는 벡터이다. 한편 위의 행렬요소  $M_{12}$ 의 양자역학적 표현을 얻기 위해서는  $\vec{e}_0$ 를 전기장 벡터 연산자의 양주파수 부분 혹은 음주파수 부분으로 대체하면 된다.

한가지 흥미로운 사실은 준고전 이론을 통해 얻어진 Fermi's Golden Rule이 빛의 유도 방출 계산을 위한 것이었지만, 같은 형태의 식 (4.29)을 원자의 자발 방출률 계산에 동일하게 적용할 수 있다는 점이다. 원자의 자발 방출은 진공 요동에 의해서 유도되는 빛의 방출이다. 진공 요동의 존재 자체가 고전적으로는 설명할 수 없는 양자 현상이므로, 완전한 양자 이론을 통해서만 자연스럽게 도입되는 양인 것이다. 그럼에도 불구하고 식 (4.30)에서 크기가  $|\vec{e}_0| = \sqrt{\hbar\omega/2\epsilon_0 V}$ 인 전기장 벡터를 가정하여<sup>44</sup> 행렬요소의 크기  $|M_{12}|^2$ 를 계산하면 굴절률이  $n$ 인 균일한 매질 속에서의 원자의 자발 방출률 뿐만 아니라, 미소 공진기 내에 위치한 원자의 자발 방출률도 쉽게 (그리고 양자 이론과 정확하게 일치하는) 얻을 수 있다. 이와 같은 사실은 미소 공진기 속에서의 자발 방출 효과(방출률, 방출 패턴의 모양 등)를 계산하기 위해서 양자 이론이 필요하지 않으며[22], 고전 전자기 이론만으로 충분함을 알려준다.

## 유도 방출과 자발 방출의 양자 이론

이 절에서는 앞 절에서 다룬 준고전 이론을 확장하여 빛도 양자적으로 취급하는 완전한 양자 모델을 논의하겠다. 기본적으로 Jaynes-Cummings 모델과 같은 해를 주지만, 준고전 모델로는 설명할 수 없는 현상(예: Rabi 진동의 붕괴와 재현[23])도 설명 가능하다. 이 모델에서는 원자만 아니라 빛도 양자적으로 취급하게 되므로, 물리적 상황을 기술하고 있는 상태 함수는 다음과 같이 원자의 준위와 복사장의 상태(예: 광자수)를 포함하고 있어야 한다

<sup>44</sup>이것은 결과론적으로 유도된 방법일 뿐이다. 완전한 양자 이론을 통하여서만 자발 방출 과정을 자연스럽게 설명할 수 있게 된다.



$$|1\rangle \otimes |n\rangle \equiv |1, n\rangle \quad (4.31)$$

예를 들어 위 식에서 왼쪽의  $|1\rangle$ 은 원자의 준위를 나타내고 오른쪽의  $|n\rangle$ 은 복사장에 포함된 광자수를 나타낸다. 여기서 원자의 상태함수와 광자수 상태함수, 각각은 완전 집합(complete set)을 이룬다. 그러므로 문제를 적합하게 기술하는 Hamiltonian은 광자의 Hamiltonian  $H_p$ 와 원자와 광자의 상호 작용을 나타내는 Hamiltonian  $H_i$ 을 포함하여야 한다.

$$H = H_0 + H_p + H_i = H_0 + \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - \frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} \quad (4.32)$$

Schrödinger 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi(t)\rangle}{\partial t} = (H_0 + H_p + H_i) |\varphi(t)\rangle \quad (4.33)$$

### 1. 원자의 들뜬 상태로의 전이

먼저 정해진 모드  $k$ 의 광자를 흡수하면서 원자의 에너지 준위가  $|1\rangle$ 에서  $|2\rangle$ 로 여기되는 과정을 양자이론으로 계산하여 본다. 즉  $|1, n\rangle$ 와  $|2, n-1\rangle$ 사이의 전이만을 고려하면 가정하는

$$|\varphi(t)\rangle = a_{1n}(t)e^{-i[E_1+(n+1/2)\hbar\omega]t/\hbar} |1, n\rangle + a_{2(n-1)}(t)e^{-i[E_2+(n-1/2)\hbar\omega]t/\hbar} |2, n-1\rangle \quad (4.34)$$

가정해 (4.34)를 Schrödinger 방정식 (4.33)에 대입하고 정리하면

$$\frac{da_{1n}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle 1, n | H_i | 2, n-1 \rangle e^{i(\omega-\omega_0)t} a_{2(n-1)}(t) \quad (4.35)$$

$$\frac{da_{2(n-1)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle 2, n-1 | H_i | 1, n \rangle e^{-i(\omega-\omega_0)t} a_{1n}(t) \quad (4.36)$$

위의 식을 준고전 이론에서의 결과 식 (4.14), (4.15)과 비교하면, 두 상태 사이의 전이를 결정하는 행렬 요소는

$$\langle 1, n | H_i | 2, n-1 \rangle = i\sqrt{\frac{n\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} \hat{\epsilon} \cdot \langle 1 | e\vec{r} | 2 \rangle \quad (4.37)$$

가 됨을 알 수 있고, 여기서

$$\hbar g_{12} \equiv i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{d}_{12} \quad (4.38)$$

로 정의하면, 원자의 유도 흡수를 묘사하는 완전한 양자 이론의 방정식은 다음과 같이 적을 수 있다.

$$\frac{da_{1n}(t)}{dt} = -i\sqrt{n}g_{12}e^{i(\omega-\omega_0)t}a_{2(n-1)}(t) \quad (4.39)$$

$$\frac{da_{2(n-1)}(t)}{dt} = -i\sqrt{n}g_{21}e^{-i(\omega-\omega_0)t}a_{1n}(t) \quad (4.40)$$

여기서 식 (4.19), (4.20)와 비교해 봄으로써, 준고전 이론과 양자 이론과의 대응을 살펴볼 수 있다. 준고전 이론에서와 마찬가지로 상호 작용을 기술하는 항은 전기장의 세기에 비례 ( $\sqrt{n}$ )하며,

$$\sqrt{n}g_{12} \leftrightarrow \frac{V_{12}}{2\hbar} \quad (4.41)$$

가 됨을 볼 수 있다. 기본적으로 식 (4.41)의 대응식만 고려해주면 준고전 이론에서 볼 수 있었던 동일한 Rabi 진동의 결과를 얻는다. 이 때 Rabi 진동의 주파수는

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + 4n|g_{12}|^2} \quad (4.42)$$

## 2. 원자의 바닥 상태로의 전이

이제 광자 하나를 방출하면서 원자의 에너지 준위가  $|2\rangle$ 에서  $|1\rangle$ 로 내려가는 과정을 양자이론으로 계산하여 본다. 즉  $|2, n\rangle$ 와  $|1, n+1\rangle$ 사이의 전이만을 고려하면 두 상태 사이의 전이를 결정하는 행렬요소는

$$\langle 1, n+1 | H_i | 2, n \rangle = i\sqrt{\frac{(n+1)\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} \hat{\epsilon} \cdot \langle 1 | e\vec{r} | 2 \rangle = -i\sqrt{n+1}g_{12} \quad (4.43)$$

이것을 식 (4.37)과 비교해보면  $\sqrt{n}$ 이  $\sqrt{n+1}$ 로 바뀌었음을 볼 수 있다. 여기서  $n=0$ 일 때에도(초기에 원자가 진공 상태에 있을 경우) 에너지 준위의 전이가 일어남을 알 수 있으며, 이것을 원자의 자발 방출이라고 한다. 즉, 완전한 양자 이론을 사용하면 원자의 자발 방출과 유도 방출이 자연스럽게 포함된 식 (4.43)을 얻게 됨을 알 수 있다. 이 결과로부터 왜 Fermi's Golden Rule (4.29)이 유도 방출뿐만 아니라 자발 방출도 정확히 기술할 수 있는 지 이해할 수 있게 된다. 즉 식 (4.29)의 행렬요소 계산에  $|\vec{e}_0| = \sqrt{\hbar\omega/2\epsilon_0 V}$ 인 벡터를 가정하는 것이  $\sim\sqrt{1}$ 에 의한(자발 방출) 에너지 준위 전이에 해당됨을 알 수 있다.  $n$ 이 큰 경우 (고전적인 세기의 빛) 전이 확률은  $\sim\sqrt{n}$ (전기장 세기)에 비례함을 알 수 있고, 역시 유도 흡수와 유도 방출을 올바르게 기술함을 알 수 있다.

마지막으로 Einstein의  $A, B$  계수를 이용해도 같은 결과를 얻을 수 있음을 간단히 설명한다.[20] 계산 과정에 나오는 항들의 정의를 정리하면 다음과 같다.

$\tilde{W}(\omega)$  : 주파수  $\omega$ 에서의 복사장의 에너지 밀도

$A_{21}$  : Einstein의  $A$  계수,  $2 \rightarrow 1$ 로의 전이 확률을 나타냄

$B_{21}, B_{12}$  : Einstein의  $B$  계수

$N_1, N_2$  : 에너지 준위 1,2 에서의 전자의 개수

전자의 개수에 대한 율방정식(rate equation)은

$$\frac{dN_2}{dt} = -N_2 A_{21} - N_2 B_{21} \tilde{W}(\omega) + N_1 B_{12} \tilde{W}(\omega) \quad (4.44)$$

열적 평형 상태에서  $dN_2/dt = 0$  이고,

$$\frac{N_1}{N_2} = \exp(\hbar\omega/k_B T) \quad (4.45)$$

이상의 결과를 대입하여 정리하면,

$$\tilde{W}(\omega) = \frac{A_{21}}{(N_1/N_2)B_{12} - B_{21}} \quad (4.46)$$

이 식을 Planck의 복사법칙과 비교하면 다음의 결과를 얻는다.

$$B_{12} = B_{21} \quad (4.47)$$

$$\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21} = A_{21} \quad (4.48)$$

위의 결과 중에서 특히 (4.48)은 유도 방출 계수로부터 자발 방출 계수를 구하는데 유용하게 쓰일 수 있다. Planck의 복사 법칙으로부터 유도한 복사장의 평균 광자수  $\bar{n}$ 을 이용하면

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (4.49)$$

다음의 중요한 결과를 얻는다.

$$B_{21} \tilde{W}(\omega) = A_{21} \bar{n} \quad (4.50)$$

$$B_{21} \tilde{W}(\omega) + A_{21} = A_{21} (\bar{n} + 1) \quad (4.51)$$

마지막 식 (4.51)의 결과로부터 유도 방출율과 자발 방출율의 합은  $(\bar{n} + 1)$ 에 비례함을 알 수 있고, 식 (4.29), (4.43)의 결과와 일치함을 알 수 있다.

## 미소 공진기에서의 자발 방출

### 1. 굴절률이 $n$ 인 매질 속에서의 자발 방출

가상의 부피  $V$  내에 전자기 모드가 양자화 되어 있다면, 모드의 density of state  $\rho(\omega)$ <sup>45</sup>는

$$\rho_{bulk}(\omega) = \frac{\omega^2 V n^3}{\pi^2 c^3} \quad (4.52)$$

여기서 모드수  $dN = \rho_{bulk}(\omega)d\omega$ 이다.

Fermi's Golden Rule (4.27)에서

$$\frac{1}{\tau_{bulk}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \rho_{bulk}(\omega) \left\langle |\vec{d} \cdot \vec{e}_0|^2 \right\rangle \quad (4.53)$$

위에서 구한 광자의 density of state를 대입하여 정리하면,

$$\frac{1}{\tau_{bulk}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \cdot \frac{\omega^2 V n^3}{\pi^2 c^3} \left\langle |\vec{d}|^2 |\vec{e}_0|^2 \cos^2 \theta \right\rangle = \frac{2\omega^2 V n^3}{\hbar^2 \pi c^3} \cdot \frac{1}{3} |\vec{d}|^2 |\vec{e}_0|^2 \quad (4.54)$$

원자의 자발 방출률을 구하기 위해서  $|\vec{e}_0| = e_{max} = \sqrt{\hbar\omega/2\epsilon_0 n^2 V}$ 를 대입하면 된다. 이것의 의미를 좀 더 살펴보면 우선  $\vec{e}_0 (= \vec{E}_0/2)$ 는 전기장 진폭의 절반이고 (4.30), 가상의 부피  $V$  속에 포함된 전자기 에너지의 총합은

$$\frac{1}{2} \epsilon_0 n^2 |\vec{E}_0|^2 V \quad (4.55)$$

이다. 위의 식에서 인자 1/2은 조화 진동자의 시간 평균으로부터 나왔다. 이것을  $\hbar\omega$ 로 양자화한 것이 위의 결과이다.

$$|\vec{E}_0|^2 = \sqrt{2\hbar\omega/\epsilon_0 n^2 V} = 2|\vec{e}_0| \quad (4.56)$$

그러므로  $e_{max}$ 를 'maximum field per photon'이라고 부르기도 한다.[24] 대입한 결과는

$$\frac{1}{\tau_{bulk}} = \frac{\omega^3 n}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \cdot |\vec{d}|^2 \quad (4.57)$$

그러므로 완전한 양자 이론을 사용한 계산 결과와 동일한 결과를 얻는다.

### 2. 미소 공진기 내부에서의 자발 방출

미소 공진기의 크기가 충분히 작아서  $\omega_c$ 에서 Lorentzian peak을 갖는 단일 모드만을 갖고 있다고 가정하자. 이때 광자의 density of state는 다음과 같이 규격화된 Lorentzian 함수 형태가 된다.

<sup>45</sup> 유도과정은 다음 서적을 참조. [20], Chap. 1

$$\rho_{cav}(\omega) = \frac{2}{\pi\Delta\omega_c} \cdot \frac{\Delta\omega_c^2}{4(\omega - \omega_c)^2 + \Delta\omega_c^2} \quad (4.58)$$

이 때  $\int \rho_{cav}(\omega)d\omega = 1$ 로 규격화(normalization)되어 있다 (단일 모드 가정).

Fermi's Golden Rule (4.53)에 대입하면

$$\frac{1}{\tau_{cav}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{2}{\pi\Delta\omega_c} \cdot \frac{\Delta\omega_c^2}{4(\omega - \omega_c)^2 + \Delta\omega_c^2} \left\langle \left| \vec{d} \cdot \vec{f}(\vec{r}) \right|^2 \right\rangle |\vec{e}_0|_{max}^2 \quad (4.59)$$

여기서  $\vec{f}(\vec{r})$ 는 최대값이 1로 규격화된 전기장 벡터 분포로 미소 공진기 모드의 전기장 분포로부터 구해진다. 식 (4.55)에서 한 것처럼, 미소 공진기 모드의 유효 모드 부피  $V_{eff}$  내에 포함된 전자 에너지를  $\hbar\omega$ 로 양자화하면,

$$\frac{1}{2}(\epsilon_0 n^2) |2\vec{e}_0|_{max}^2 V_{eff} = \hbar\omega \quad (4.60)$$

여기서  $n$ 은 전기장의 세기가 최대인 곳에서의 굴절률이다. 위의 식을 (4.59)에 대입하면,

$$\frac{1}{\tau_{cav}} = \frac{2Q}{\hbar(\epsilon_0 n^2)V_{eff}} \cdot \frac{\Delta\omega_c^2}{4(\omega - \omega_c)^2 + \Delta\omega_c^2} \left| \vec{d} \cdot \vec{f}(\vec{r}) \right|^2 \quad (4.61)$$

여기서  $Q = \omega_c/\Delta\omega_c$ 를 사용하였다.

### 3. Purcell Factor

원자의 자발 방출률에 대한 미소 공진기 효과를 살펴보기 위해서 기준이 되는 물질을 잘 선택하여야 한다. 즉, 미소 공진기의 경우에 방출 원자가 굴절률이  $n$ 인 곳에 위치한다면 비교 대상으로 사용하게 될 기준 물질도 같은 굴절률  $n$ 을 가져야 할 것이다. 이제 앞에서 구한 식 (4.61)과 (4.57)를 비교하면

$$\begin{aligned} \frac{\tau_{bulk}}{\tau_{cav}} &= \frac{2Q}{\hbar(\epsilon_0 n^2)V_{eff}} \cdot \frac{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}{\omega^3 n} \cdot \frac{\Delta\omega_c^2}{4(\omega - \omega_c)^2 + \Delta\omega_c^2} \cdot \frac{|\vec{d} \cdot \vec{f}(\vec{r})|^2}{|\vec{d}|^2} \\ &= \frac{3Q}{4\pi^2 V_{eff}} \left( \frac{\lambda_c}{n} \right)^3 \cdot \frac{\Delta\omega_c^2}{4(\omega - \omega_c)^2 + \Delta\omega_c^2} \frac{|\vec{d} \cdot \vec{f}(\vec{r})|^2}{|\vec{d}|^2} \end{aligned} \quad (4.62)$$

$$(4.63)$$

여기서 1)공진 모드의 주파수와 원자의 방출 주파수가 일치하고  $\omega = \omega_c$ , 2)전기장 벡터의 방향이 이중극자 모멘트와 일치하며 3)원자가 전기장의 세기가 최대인 곳에 위치하는 경우 최대의 자발 방출률 증가를 갖게 됨을 알 수 있다. 즉 주어진 미소 공진기 ( $Q, V_{eff}$ )를 사용하여 얻을 수

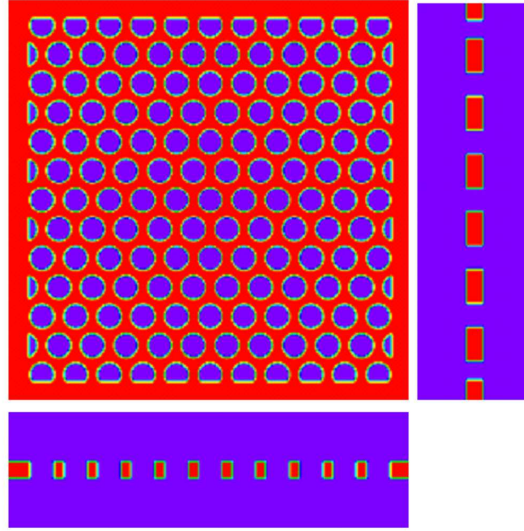


Figure 4.15: 2차원 광결정 슬랩의 FDTD epsilon 구조. 슬랩의  $\epsilon=11.56$  으로, 배경 물질은 진공  $\epsilon=1.0$ 으로 가정하였다. 광결정 슬랩의 두께는  $0.5a$ , 원기둥의 반경은  $0.35a$  이다. 이때 광밴드갭은 약  $0.28 \sim 0.39$  (단위는 규격 주파수)에서 나타난다.

있는 최대의 자발 방출 증가율을 Purcell factor 라고 하며 1946년에 Purcell이 처음으로 유도하였다.[17]

$$F_p \equiv \frac{3Q}{4\pi^2 V_{eff}} \left( \frac{\lambda_c}{n} \right)^3 \quad (4.64)$$

위의 결과를 매우 큰  $Q$ 와 작은  $V$ 를 갖는 공진 모드에 적용할 때는 주의하여야 한다. 왜냐하면 공진 모드와 원자와의 상호 작용( $g \equiv d \cdot e_{max}/\hbar$ )이 그리 크지 않은 경우라도, 공진 모드의 광손실률( $\kappa \equiv \Delta\omega = \omega/Q$ )이 매우 작은 경우는 실질적인 원자와의 상호 작용 시간이 늘어나게 되므로 Rabi 진동을 볼 수 있게 된다. 그러므로 강한 상호 작용과 약한 상호 작용을 구분하는데 있어서 단순히  $g$ 만으로는 말할 수 없고,  $g/\kappa$ 의 크기를 가지고 논의하여야 할 것이다. [25] 즉,

$$g/\kappa = \frac{de_{max}}{\hbar} \cdot \frac{Q}{\omega} = \frac{Qd}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 n^2 V_{eff}}} \propto \frac{Q}{\sqrt{V_{eff}}} \quad (4.65)$$

$Q/\sqrt{V}$ 의 크기가 클수록 강한 상호 작용의 결과를 볼 확률이 커짐을 알 수 있다.

### 4.3.2 광결정 슬랩을 이용한 자발 방출 조절

FDTD를 통하여 자발 방출률을 계산할 수 있다는 사실은 Xu에 의해서 처음 논의되었다.[9, 26] 비록 자발 방출 현상이 양자 현상이지만 고전 전자기학(Maxwell's equation)에서 유도된 자발 방출률( $\gamma_{classic}^{cavity}$ )과 정확한 양자 역학의 결론( $\gamma_{quantum}^{cavity}$ )과는 앞에 붙는 상수를 제외하면 비례 관계에 있다. 그러므로 기준

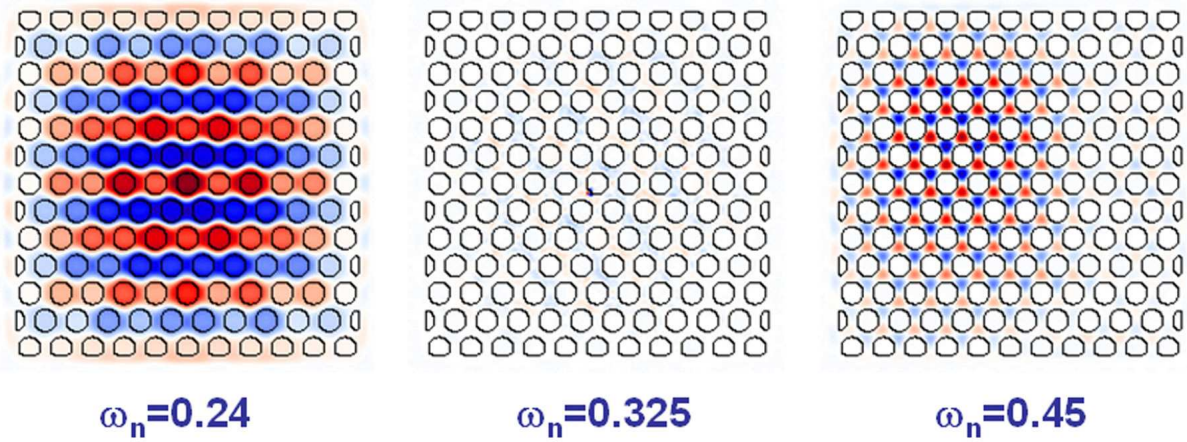


Figure 4.16: (동영상) 광결정 슬랩 중앙에서 측정된  $H_z$  field의 분포.  $\delta t = 1000$ 인 Gaussian dipole source를 좌표  $(-0.2, -0.3)$ 에 적용하였다. Dipole source가 광밴드갭 내에 있으면 source로부터의 빛 방출이 거의 없음을 볼 수 있다.

물질(예를 들면 균일한 굴절률  $n$ 인 bulk 물질)에서의 자발 방출률로 규격화를 하면, 다음과 같은 관계식이 성립한다.

$$\frac{\gamma_{\text{cavity}}^{\text{bulk}}}{\gamma_{\text{cavity}}^{\text{quantum}}} = \frac{\gamma_{\text{cavity}}^{\text{classic}}}{\gamma_{\text{cavity}}^{\text{classic}}} \quad (4.66)$$

이 절에서는 이차원 광결정 슬랩 안에 놓인 dipole source의 자발 방출률 변화를 FDTD를 사용하여 계산해 보겠다. 그림 4.15은 계산에 사용한 광결정 슬랩의 구조이다. 이 구조는 나노포토닉스 연구실에서 많이 사용되는 구조로, 2차원 방향으로의 광밴드갭 효과로  $z$  방향으로로는 슬랩과 진공과의 굴절률 차이로 빛을 가둘 수 있게 된다. 원기둥의 반경이  $0.35a$ 일 때  $z$  방향의 even (TE-like 모드)에 대해서 넓은 광밴드갭 (약  $0.28 \sim 0.39$ )이 형성된다.[27]

$\delta t = 1000$ 인 Gaussian dipole source를 좌표  $(-0.2, -0.3)$ 에 위치시키고서, dipole source의 중심 주파수를 변화시켜가면서 FDTD 계산 영역을 통하여 빠져나가는 광방출 에너지를 계산하였다. (4.1.4절의 내용 참조.) 그림 4.16에 광결정 슬랩 중앙에서 측정된  $H_z$  field의 평면 이미지를 나타내었다. Dipole source의 주파수가 광밴드갭 내부에 있을 때와 외부에 있을 때의 방출 양상이 매우 다름을 볼 수 있다. 광밴드갭 외부에 있을 때는 그 주파수에 해당되는 특정 Bloch 모드를 여기 시키는 것으로 이해할 수 있고, 그 결과 dipole에서 방출된 에너지가 슬랩 방향의 Bloch 모드로 전이된다. 한편 광밴드갭 내에 있는 경우는, 슬랩 방향의 Bloch 모드로 결합될 수가 없으므로 대부분의 에너지는 슬랩의 위 아래로 빠져 나오게 된다. 사실 이와 같은 원리를 이용하면 고효율 광방출 LED의 설계가 가능하다.[28]

그림 4.17에는 시간에 따라서 빠져나오는 Poynting energy를 시간에 대해서 누적한 결과를 보여준다. 분명히, 같은 크기의  $M_z$  source를 사용하였음에도 불구하고 Purcell 효과로 인하여 전체 방출량은 매우 다르다. Dipole source의 중심 파장에 따라서  $7176(\omega_n = 0.24)$ ,  $534(\omega_n = 0.325)$ ,  $8851(\omega_n = 0.45)$ 인 결과를 얻었다.

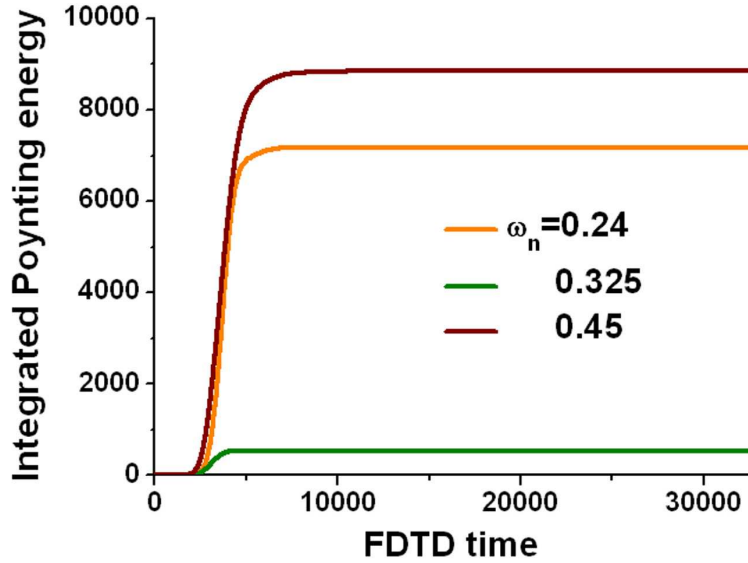


Figure 4.17: FDTD 계산 구조를 빠져나오는 Poynting energy를 시간의 함수로 적분하였다. 같은 크기의  $M_z$  source를 사용하였음에도 불구하고 Purcell 효과로 인하여 전체 방출량은 매우 다르게 된다. Dipole source의 중심 주파수가 광밴드갭 내에 있으면 방출량이 10배 이상 작게 됨을 볼 수 있다.

#### 4.4 이차원 광결정 공진기 모드 분석

앞 절에서 다룬 2차원 광결정 슬랩에 인위적인 구조적 결함(defect)을 도입하면 빛의 강한 구속을 이룰 수 있다. 즉, 결함 주변은 광학 공진기로 작동할 수 있게 된다. 이 절에서는 나노포토닉스 연구실에서 처음으로 제안한 변형 단일 결함 (Modified single cell) 공진기의 공진 모드를 분석해 보겠다.[29]

그림 4.18은 FDTD epsilon 구조로 표현된 변형 단일 결함 공진기를 보여준다. 슬랩의 굴절률은 약 3.4로 가정하였고, 배경 물질은 진공으로 하였다. 광결정 슬랩의 두께는  $z = 0$  평면에 대해서 even 모드만 존재할 수 있도록  $\sim \lambda/(2n_{\text{eff}})$  정도가 되도록  $T = 0.5a$ 로 정하였다. 한편 even 슬랩 모드에 대해서 넓은 광밴드갭을 가질 수 있도록 원기둥의 반경은  $0.35a$ 로 가정하였다. 결함 주변의 변형 공기 구멍의 반경은  $0.25a$ 로 하였다.

##### 4.4.1 광대역 source를 이용한 공진 모드 찾기

먼저 광결정 공진기에 존재할 수 있는 모든 모드를 살펴보기 위해서 광대역 Gaussian dipole source를 사용하였다. Dipole source의 위치는 구조의 대칭성을 고려하여  $(0, -0.5)$ ,  $(-0.2, -0.3)$ 로 정하였다.  $\delta t = 500$ , 중심 주파수는  $\omega_n = 0.30$  으로 하였다.

그림 4.19에  $H_z$  field의 측정 데이터와 그것의 Fourier 스펙트럼을 나타내었다. 스펙트럼에 위치한 peak의 위치로부터 세 개의 모드를 여기 시켰음을 확인하였다. (규격 주파수는 각각 0.2886, 0.3143, 0.3179) 이전 연구 결과에 따르면 이 세 개의 peak은 각각 dipole, quadrupole, hexapole 모드에 해당됨을 알 수 있다. 특히 dipole과 quadrupole 모드의 경우는  $C_{6v}$  대칭성으로 인하여 이중으로 축퇴되어 있



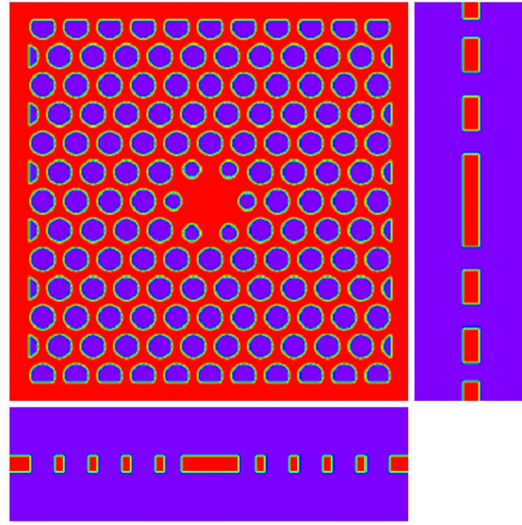


Figure 4.18: 2차원 광결정 단일 결함 공진기의 FDTD epsilon 구조. 슬랩의  $\epsilon=11.56$  으로, 배경 물질은 진공  $\epsilon=1.0$ 으로 가정하였다. 광결정 슬랩의 두께는  $0.5a$ , 광결정 원기둥의 반경은  $0.35a$ , 결함 주변 원기둥의 반경은  $0.25a$  이다.

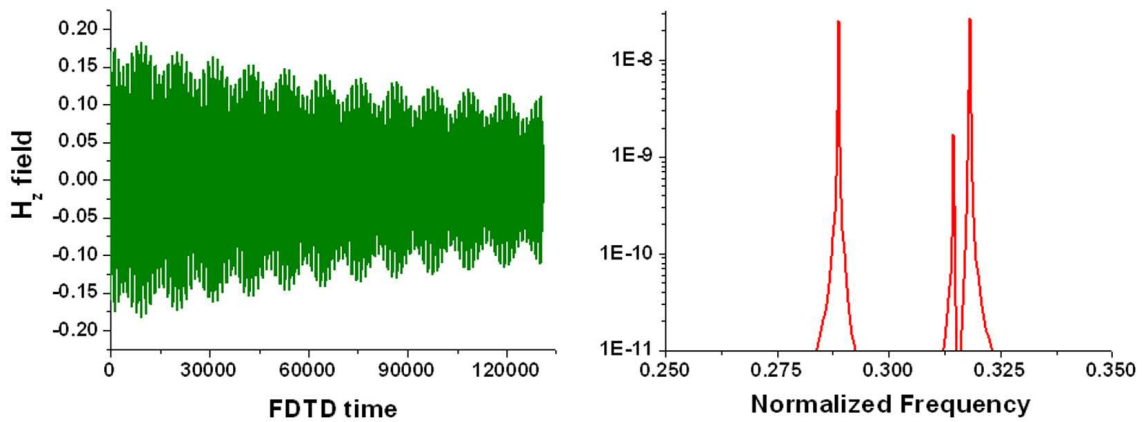


Figure 4.19: 광대역 Gaussian dipole source를 사용한 경우의  $H_z$  field 데이터. Dipole source는  $(0, -0.5)$ ,  $(-0.2, -0.3)$ 에 위치하였다. 여러 모드의 복잡한 beating을 볼 수 있다. Fourier 변환하여 구한 power spectrum에서 여러 공진 모드의 주파수를 확인할 수 있었다. 0.2886, 0.3143, 0.3179 이다.

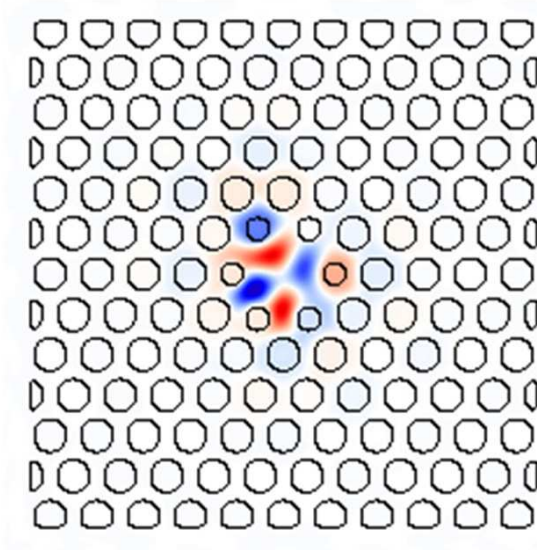


Figure 4.20: (동영상) 광대역 Gaussian dipole source를 사용한 경우의  $H_z$  field 분포.

다.[13]

그림 4.20에  $H_z$  field 분포의 동영상 결과를 나타내었다. 여러 모드가 동시에 존재하므로 매우 복잡한 진동 양상을 보인다. (일반적으로 단일 모드가 여기된 경우 field node 와 antinode가 공간상에 고정되어 있는 standing wave의 진동을 한다.)

#### 4.4.2 하나의 공진 모드만을 선택하기

여기서는  $\omega_n = 0.3442$ 에 위치한 monopole 모드를 선택적으로 여기시켜 보기로 한다.<sup>46</sup>  $\delta t = 1500$ , 중심 주파수  $\omega_n = 0.3442$ 인 Gaussian dipole source를 사용하였다. Source의 위치는 monopole mode의 field 분포를 고려하여  $(-0.2, -0.2)$ 로 정하였다.

그림 4.21에  $H_z$  field의 측정 데이터를 나타내었다. 매우 깨끗한 exponential decay를 볼 수 있는데, 이것은 단일 모드만이 여기되었음을 알려준다. Field energy의 decay 상수로 부터 모드의  $Q$ 값을 산출해낼 수 있는데, 11000 정도였다. Fourier 변환을 통하여 구한 power spectrum 에서 단일 모드임을 다시 한번 확인할 수 있다. 여기서 peak의 모양이 완전한 Lorentzian 모양이 아닌 이유는,  $H_z$  field 측정 위치가 dipole source의 위치여서 source의 dc 성분이 약간 포함되었기 때문이다.

그림 4.22에  $H_z$  field 분포의 동영상 결과를 나타내었다. field node 와 antinode가 공간상에 고정되어 있는 standing wave의 진동 양상을 보여준다. 또한 공진기 중심에서  $H_z$  field 분포가 최대이므로, 반대로  $|E|^2$ 의 경우는 node가 됨을[30] 쉽게 예측해 볼 수 있다.<sup>47</sup>

<sup>46</sup>이전 연구 결과로 부터 공진 주파수가 알려져 있음.[11]

<sup>47</sup>일반적으로  $\vec{E}$ 의 분포와  $\vec{H}$ 의 분포는 서로 Faraday 법칙으로 연결되어 있으므로 node의 위치와 antinode의 위치가 서로 역인 관계에 있다. 이것과 관련된 좋은 논의는 Joannopoulos의 책 “Photonic Crystals”를 참조.[31]

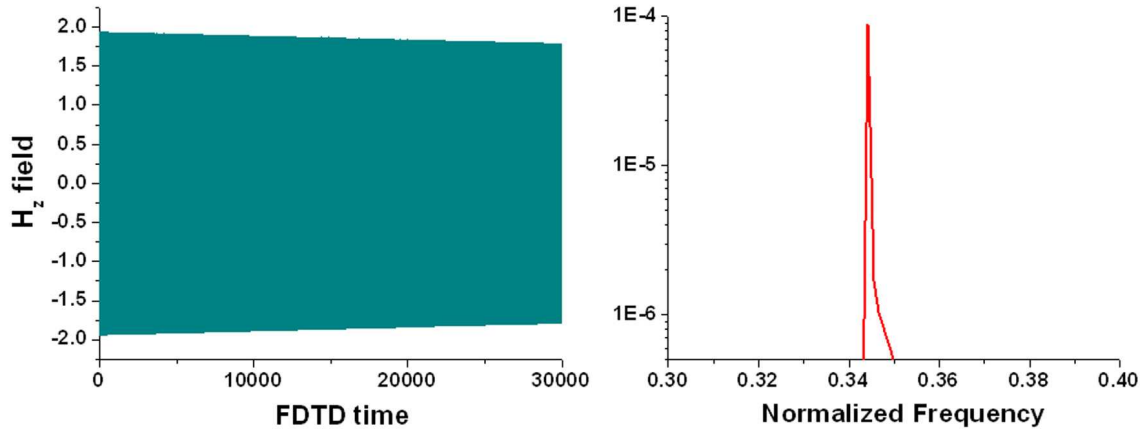


Figure 4.21:  $\delta t = 1500$ ,  $\omega_n = 0.3442$ 인 Gaussian dipole source를 사용한 경우의  $H_z$  field 데이터. Dipole source는  $(-0.2, -0.2)$ 에 위치하였다. 단일 모드의 깨끗한 exponential decay를 볼 수 있다. Fourier 변환하여 구한 power spectrum에서 단일 모드를 확인할 수 있다. (Lorentzian 모양이 아닌 이유는 source의 성분이 약간 포함되었기 때문)

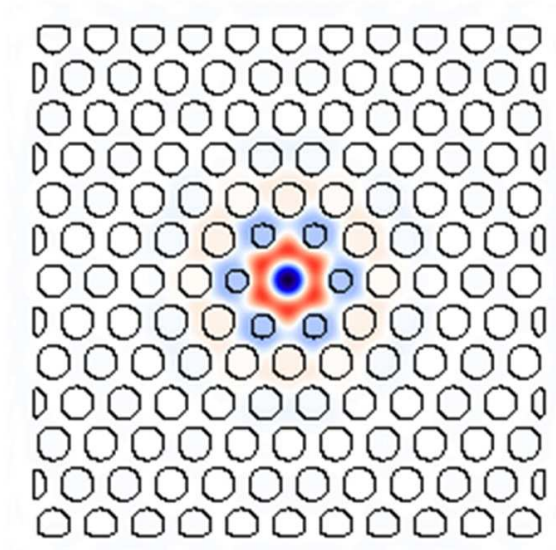


Figure 4.22: (동영상)  $\omega_n = 0.3442$ 에 위치한 모드는 monopole mode임을 확인할 수 있다.

## 4.5 이 장의 과제

1. 주파수 영역에서 다음과 같은 Lorentzian 함수와 Gaussian 함수를 생각한다.

$$L(\omega) = \frac{(\Gamma/2)}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad G(\omega) = \exp\left\{-\alpha \frac{(\omega - \omega_0)^2}{\Gamma^2}\right\} \quad (4.67)$$

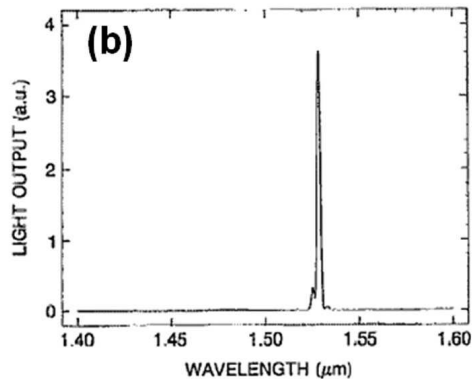
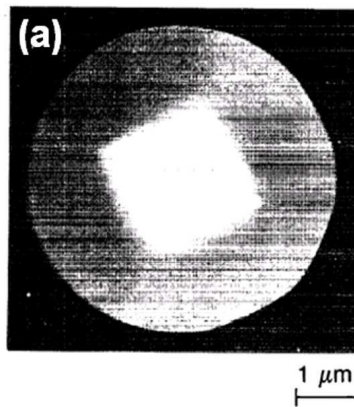
- (a)  $\omega = \omega_0 \pm (\Gamma/2)$  에서  $L(\omega) = L(\omega_0)/2$  가 됨을 보여라. 그러므로  $\Gamma$ 는 주어진 Lorentzian 함수의 FWHM (Full Width at Half Maximum) 이다.
- (b)  $\omega = \omega_0 \pm (\Gamma/2)$  에서  $G(\omega) = G(\omega_0)/2$  가 되는 상수  $\alpha$ 를 구하여라. 그러므로 두 Gaussian 함수와 Lorentzian 함수의 FWHM은 동일해진다. (같은  $Q$  factor를 갖는다.)
- (c)  $\omega = \omega_0 + 3\Gamma$  에서 다음 두 가지 값을 비교하여라.

$$\frac{L(\omega)}{L(\omega_0)}, \quad \frac{G(\omega)}{G(\omega_0)} \quad (4.68)$$

그러므로 같은 선폭을 갖더라도 Gaussian 함수의 주파수 선택성이 더 뛰어나다. 하지만 Lorentzian 함수는 실제 원자의 천이 과정에서 발생하는 빛을 잘 묘사하므로, 보다 실제적인 전산 모사에 적용 가능하다.

2. 실제 제작된 미소 원반 공진기를 분석하기로 한다. 그림(a)는 실제 제작된 미소 원반 공진기의 SEM 사진이다. 제작된 공진기의 지름은  $5\mu\text{m}$ , 원반의 두께는  $1500 \text{ \AA}$ 이다. 원반의 재질인 InGaAs/InP의 굴절률은  $1.55 \mu\text{m}$  파장에서 3.5로 가정한다. 그림(b)는 실제 광펌핑 실험을 통하여 얻은 레이저 스펙트럼이다. 레이저 모드 근처에 있는 작은 peak은  $M$ -양자수 축퇴에서 기원하는 것으로 생각된다.(McCall의 논문 참조.[16])

- (a) 약  $1525\text{nm}$  에서 발진한 이 whispering-gallery mode의  $M$  값을 FDTD 계산을 통하여 구하여라.
- (b) 위의 모드의 공진기  $Q$ 값을 FDTD 계산을 통하여 예측하여라.



3. 4.3.2절에서 다룬 광결정 슬랩에서의 광방출 에너지를 dipole source의 중심 주파수의 함수로 구하려고 한다.

- (a)  $\omega_n$ 을 0.25 에서 0.45까지  $\Delta\omega_n=0.01$  단위로 변화시켜 가면서 구하려고 한다. Gaussian dipole source의 최적의  $\delta t$ 는 얼마인가? (이 경우 20번의 FDTD 계산이 필요하다.)
- (b) 한 번의 FDTD 계산으로 이 결과를 얻기 위해서는 Poynting energy 적분을 수행할 가상의 면의 각 위치에 대하여 DFT(Discrete Fourier Transformation)을 수행하여야 한다. 예를 들어  $\vec{E}$ 의  $x$  성분 에 대해서는

$$\text{Ex}_{\text{real}}|_{i,j} = \text{Ex}_{\text{real}}|_{i,j} + E_x|_{i,j}^n \cdot \cos(\omega \cdot n\Delta t) \quad (4.69)$$

$$\text{Ex}_{\text{imag}}|_{i,j} = \text{Ex}_{\text{imag}}|_{i,j} + E_x|_{i,j}^n \cdot \sin(\omega \cdot n\Delta t) \quad (4.70)$$

여기서 FDTD 상에서의 각각의 grid 위치  $(i, j)$ 에 대해서 재귀적인 덧셈을 수행하면, 실수 성분과( $\text{Ex}_{\text{real}}$ ) 허수 성분을( $\text{Ex}_{\text{imag}}$ ) 얻을 수 있다. 사실상 위의 덧셈은 다음의 적분식

$$\tilde{E}_x(\vec{r}, \omega) = \int E_x(\vec{r}, t)e^{i\omega t} dt \quad (4.71)$$

의 DFT 표현이다.

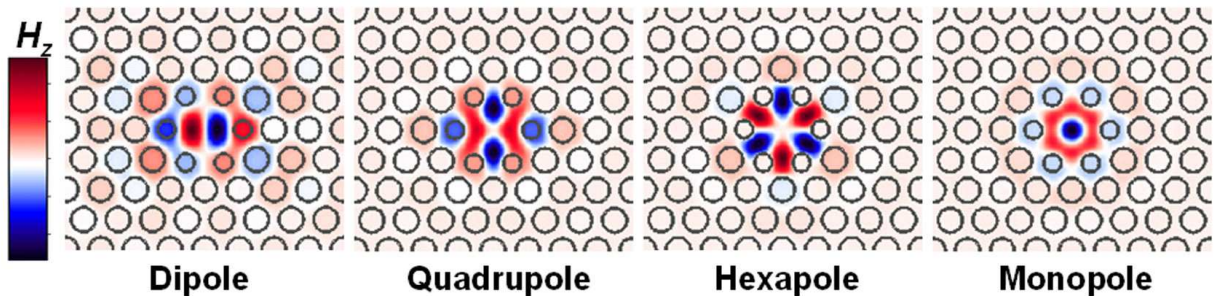
이와 같은 방식으로 적분을 수행할 가상의 면에 대하여  $\tilde{E}_\omega$ 와  $\tilde{H}_\omega$ 를 구하면,  $S_\omega = \tilde{E}_\omega \times \tilde{H}_\omega$ 를 계산할 수 있다.

이 방법을 이용하여 광방출 에너지를 규격 주파수의 함수로(0.25 에서 0.45까지) 구하여라.

- (c) 왜 Poynting vector의 DFT를 통해서 구할 수 없는지 설명하여라. 즉,

$$\vec{P}_\omega \neq \int (\vec{E}(t) \times \vec{H}(t))e^{i\omega t} dt \quad (4.72)$$

4. 4.4절에서 다룬 단일 결함 광결정 공진기의 공진 모드를 계산하려고 한다. 그림에 나타난 dipole, quadrupole, hexapole 모드를 하나씩 띄우고, 모드의 규격 주파수와 공진기 Q값을 계산하여라.



## 제 5 장 부록 : KAIST FDTD 함수 설명

### 5.1 FDTD 기본 변수 설정

1. void structure\_size(float x, float y, float z) :

FDTD 계산 영역의 크기를  $x(a) \times y(a) \times z(a)$  로 설정한다. 여기서  $a$ 는 FDTD 공간 좌표의 단위 길이로서 광결정 공진기의 경우 결정 격자로 정하면 편리하다. 계산 영역의 중심은 원점 좌표 (0,0,0)으로 한다.

2. void lattice\_size(int lx, int ly, int lz) :

FDTD 계산 영역의 공간 분해능을 설정한다. 예를들어  $\Delta x = a/lx$  가 된다. 즉,  $lx$ 는 2.5절에서 사용한  $lattice_x$ 와 동등하다. 일반적인 계산에서  $lx=ly=lz=20$  이 사용된다.

3. void pml\_size(int il,int ir,int jl,int jr,int kl,int kr) :

$x(a) \times y(a) \times z(a)$  크기의 FDTD 계산 영역 내부에 위에서 설정한 두께로 PML층을 설정한다. 여기서  $il, ir$  값은  $x = -(x/2)(a)$ 인 벽면과  $x = +(x/2)(a)$ 인 벽면에 각각 적용된다. ( $j$ 는  $y$ 평면,  $k$ 는  $z$  평면에 적용된다.) 입력값의 단위는 lattice\_size()함수에서 정의한 grid로 예를들어  $lattice_x=20$  이고  $il=10$ 이면 PML 층의 두께는  $0.5(a)$ 가 된다. 보통  $il=ir=jl=jr=kl=kr=10$ 이 사용된다.

4. void set\_default\_parameter(float S) :

이 함수는 FDTD 계산에 필요한 여러가지 기본 상수들을 설정한다. 여기서 설정하는 상수들과 기본값은 다음과 같다.

(a)  $\pi=3.141592$

(b)  $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$

(c)  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$

(d) 광속도  $c = 1.0/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$

(e) FDTD 수치 안정성 조건  $S$ 는 위 함수의 변수로 입력받는다. 즉,  $S=S$ .

(f)  $S$ 를 이용하여 FDTD 시간 좌표의 분해능을 설정한다. 즉,  $\Delta t = 1/(cS)$

(g) PML 층의 조건을 설정하는 여러가지 상수들을 다음과 같이 설정한다.

$$\text{orderxl} = 3.5; \text{orderyl} = 3.5; \text{orderzl} = 3.5;$$

$$\text{orderxr} = 3.5; \text{orderyr} = 3.5; \text{orderzr} = 3.5;$$

$$\text{sig_axl} = 1.0; \text{sig_ayl} = 1.0; \text{sig_azl} = 1.0;$$

```
sig_axr = 1.0; sig_ayr = 1.0; sig_azr = 1.0;
kx = 1.0; ky = 1.0; kz =1.0;
```

5. void set\_sigma\_max(float axl, float axr, float ayl, float ayr, float azl, float azr) :

set\_default\_parameters() 함수에서 설정한 PML 기본 상수를 바꿀 때 사용한다. 여기서는 sig\_axl . . sig\_azr 의 값을 바꾼다.

6. void set\_sigma\_order(float oxl, float oxr, float oyl, float oyr, float ozl, float ozr) :

set\_default\_parameters() 함수에서 설정한 PML 기본 상수를 바꿀 때 사용한다. 여기서는 orderxl . . orderzr 의 값을 바꾼다.

7. void set\_kappa(float kappa\_x, float kappa\_y, float kappa\_z) :

set\_default\_parameters() 함수에서 설정한 PML 기본 상수를 바꿀 때 사용한다. 여기서는 kx, ky, kz의 값을 바꾼다.

8. void Hz\_parity(int x,int y,int z) :

계산 구조가 대칭성을 갖는 경우 거울상 대칭성 조건을 적용할 때 사용한다. 입력 수치의 값은 -1,0,+1 의 세 값 중의 하나여야 하며, 0은 대칭성 조건을 사용하지 않는 경우이다. 1(-1)은 주어진 평면(예를들어 x값은  $x = 0$  평면을 의미함)에 대하여  $H_z$  field가 even(odd) 대칭성을 갖고 있음을 의미한다. 즉, 물리적인 even, odd의 정의와는 정확히 반대가 된다.

9. void memory() :

FDTD 계산에 사용될 여러가지 3차원 변수들을 선언한다.

## 5.2 FDTD 계산 구조 설정

KFDTD에는 여러가지 기하학적인 구조 설정을 위한 함수가 내장되어 있다. 구조 입력시에는 나중에 입력한 구조가 앞에서 설정되어 있던 구조를 덮어 씌운다.

1. void background(float epsilon) :

FDTD 계산 영역 전체를 epsilon 값을 갖는 균일한 유전체로 채운다. 배경 물질을 공기로 설정할 경우 epsilon=1.0이 된다.

2. void input\_object(char \*shape, char \*matrix\_file, float centerx, float centery, float centerz, float size1, float size2, float size3, float epsilon) :

\*shape에 입력할 구조를 입력한다. 입력 가능한 구조와 구조별 입력 변수의 내용은 다음과 같다. (사용하지 않는 입력 변수는 EMP(Empty 변수)로 한다.)

- (a) “rod” 인 경우, 원기둥 모양의 구조를 설정한다.  
 \*matrix\_file : EMP  
 centerx, centery, centerz : 원기둥의 무게 중심 좌표  
 size1 : 원기둥의 반지름  
 size2 : 원기둥의 높이  
 size3 : EMP  
 epsilon : 원기둥의 epsilon 값
- (b) “sphere” 인 경우, 구 모양의 구조를 설정한다.  
 \*matrix\_file : EMP  
 centerx, centery, centerz : 구의 무게 중심 좌표  
 size1 : 구의 반지름  
 size2 : EMP  
 size3 : EMP  
 epsilon : 구의 epsilon 값
- (c) “ellipse” 인 경우, 타원 기둥 모양의 구조를 설정한다.  
 \*matrix\_file : EMP  
 centerx, centery, centerz : 타원 기둥의 무게 중심 좌표  
 size1 : x축 반지름 (Rx)  
 size2 : 타원 기둥의 높이  
 size3 : y축 반지름과 x축 반지름의 비율 (Rx/Ry)  
 epsilon : 타원 기둥의 epsilon 값
- (d) “block” 인 경우, 육면체 모양의 구조를 설정한다.  
 \*matrix\_file : EMP  
 centerx, centery, centerz : 육면체의 무게 중심 좌표  
 size1, size2, size3 : 육면체의 각 모서리의 길이 (각각 x방향, y방향, z방향)  
 epsilon : 육면체의 epsilon 값
- (e) “contour” 인 경우, ‘일반 도형’-‘기둥’ 모양의 구조를 설정한다. 즉,  $x-y$  평면상에 형성된 일반 도형을  $z$  방향으로 병진 시킬 때 만들어 지는 기둥 모양의 구조를 설정한다. (일반 도형 한 개의 기둥 또는 여러 도형의 배열의 기둥도 될 수 있다.)  
 \*matrix\_file : 2차원 matrix 형식의  $M \times N$  데이터 파일. 이 데이터 파일로부터 2차원 일반 도형의 contour를 입력 받는다.  
 centerx, centery : matrix 데이터 파일의 원점을 정의한다. 이 점이 FDTD 계산 영역의 원점에 놓이게 된다. 입력 단위는 matrix 파일의 grid이다.



centerz : 일반 도형 기둥 구조의  $z$  방향 중심 좌표. 입력 단위는 FDTD 단위 길이  $a$ 이다.

size1 : 2차원 matrix 파일에서 ‘일반 도형’으로 선택할 기준값을 입력 받는다. 기준값 보다 작은 값을 가진 영역이 ‘일반 도형’의 contour를 결정한다.

size2 : 일반 도형 기둥의 두께. 입력 단위는 FDTD 단위 길이  $a$ 이다.

size3 : 축소율. matrix 데이터를 입력 수치 만큼 축소하여 FDTD 2차원 평면에 위치시킨다. 예를들어 matrix 데이터의 30 grid를 FDTD 계산 영역에서 20 grid로 축소시키려면, 20.0/30.0 을 입력하면 된다.<sup>1</sup>

epsilon : 선택된 영역의 epsilon 값

### 3. void make\_epsilon() :

input\_object() 함수들로 정의한 구조를 실제 컴퓨터 메모리에 생성한다.

### 4. void coefficient() :

Maxwell's equation을 통한 time update 과정에서 필요한 여러가지 배열들을 정의한다. 반드시 make\_epsilon() 함수 이후에 실행하여야 한다.

## 5.3 FDTD 계산 수행시 필요한 함수

### 1. void propagate() :

실제 Maxwell's equation을 통한 time update가 수행되는 부분이다. (예를들어 식 2.29 참조)

### 2. void Gaussian\_dipole\_source(char \*component,float x,float y,float z,float frequency,float phaes,long to,long tdecay) :

Gaussian dipole source를 설정한다.

(a) \*component : field 성분을 입력 받는다.  $\vec{J}$ 를 주기 위해서 Ex, Ey, Ez를  $\vec{M}$ 을 주기 위해서 Hx, Hy, Hz를 사용한다.

(b) x,y,z : 점 dipole source의 공간상의 위치

(c) frequency : Gaussian dipole source의 중심 주파수. 단위는 규격 주파수 ( $\omega_n = a/\lambda$ )

(d) phase : Gaussian dipole source의 초기 위상.

(e) to : Gaussian dipole source의 envelope 함수가 최대값을 갖는 시각. KFDTD 에서  $t_0 = 3 \times \delta t$ 로 정의되어 있다.

(f) tdecay : Gaussian envelope의 시간 영역에서의 폭. FWHM은  $2\delta t = 2 \text{ tdecay}$  이다.

---

<sup>1</sup>연산의 결과가 floating 숫자가 되도록 ‘.’을 꼭 넣어주어야 한다.

3. void Lorentzian\_dipole\_source(char \*component,float x,float y,float z,float frequency,float phaes,long to,long tdecay) :

Lorentzian dipole source를 설정한다.

- (a) \*component : field 성분을 입력 받는다.  $\vec{J}$ 를 주기 위해서 Ex, Ey, Ez를  $\vec{M}$ 을 주기 위해서 Hx, Hy, Hz를 사용한다.
- (b) x,y,z : 점 dipole source의 공간상의 위치
- (c) frequency : Lorentzian dipole source의 중심 주파수. 단위는 규격 주파수 ( $\omega_n = a/\lambda$ )
- (d) phase : Lorentzian dipole source의 초기 위상.
- (e) to : Lorentzian dipole source가 시작하는 초기 시각.
- (f) tdecay : exponential decay의 lifetime. 단위는 FDTD time step이다.

4. float Gaussian\_phase(float Wn, long t\_peak) :

Gaussian dipole source 의 초기 위상을 정해주는 함수. Wn은 dipole source의 중심 주파수( $\omega_n$ )이고 t\_peak은 Gaussian envelope이 최대가 되는 시각  $t_0$ 이다.

5. float Lorentzian\_phase(float Wn, long tdecay) :

Lorentzian dipole source 의 초기 위상을 정해주는 함수. Wn은 dipole source의 중심 주파수( $\omega_n$ )이고 tdecay는 exponential decay의 lifetime이다.

6. void Poynting\_block(float centerx, float centery, float centerz, float size1, float size2, float size3) :

Poynting energy 적분을 수행한다.(4.1.4절의 내용 참조) 적분을 수행하게 될 가상의 육면체의 위치와 크기는 centerx, centery, centerz, size1, size2, size3에서 입력받는다. 매 FDTD time step에서 시간 적분한 값은 Sumx, Sumy, Sumz 변수에 저장된다. 예를들어, Sumx는 가상의 육면체의 면 중에서  $y - z$  평면과 평행한 면( $x = -size1/2, x = +size1/2$ )을 통과하는 Poynting energy이다.

## 5.4 결과 출력 함수

1. void out\_epsilon(char \*plane,float value,char \*name) :

메모리에 생성된 FDTD 계산 구조(epsilon 구조)의 평면 이미지를 출력한다. \*plane은 "x", "y", "z" 중에 하나가 될 수 있다. value는 epsilon 구조를 보고 싶은 평면의 위치를 결정한다. 예를들어 \*plane이 "z" 이고 value가 0 이면  $z = 0$  평면에서의 epsilon 구조를 출력한다. value의 단위는 FDTD의 단위 길이  $a$ 가 된다. \*name에는 출력 파일의 이름을 적어준다.

2. void out\_plane(char \*component,char \*plane,float value,char \*lastname) :

FDTD 계산 결과물의 평면 이미지를 출력한다.

(a) \*component : 출력하고 싶은 결과물을 적는다.

“Ex” :  $E_x$  field

“Ey” :  $E_y$  field

“Ez” :  $E_z$  field

“Hx” :  $H_x$  field

“Hy” :  $H_y$  field

“Hz” :  $H_z$  field

“E^2” :  $|\vec{E}|^2 = |E_x|^2 + |E_y|^2 + |E_z|^2$

“H^2” :  $|\vec{H}|^2 = |H_x|^2 + |H_y|^2 + |H_z|^2$

“Sx” :  $x$  방향 Poynting vector.  $E_y H_z - E_z H_y$

“Sy” :  $y$  방향 Poynting vector.  $E_z H_x - E_x H_z$

“Sz” :  $z$  방향 Poynting vector.  $E_x H_y - E_y H_x$

“LogE^2” :  $\log_{10} |\vec{E}|^2$

“LogH^2” :  $\log_{10} |\vec{H}|^2$

“EM\_Energy” :  $\epsilon |\vec{E}|^2 + \mu |\vec{H}|^2$

“E\_Energy” :  $\epsilon |\vec{E}|^2$

“Ex2Ey2” :  $|E_x|^2 + |E_y|^2$

“Ey2Ez2” :  $|E_y|^2 + |E_z|^2$

“Ez2Ex2” :  $|E_z|^2 + |E_x|^2$

“LogEx2Ey2” :  $\log_{10} (|E_x|^2 + |E_y|^2)$

“LogEy2Ez2” :  $\log_{10} (|E_y|^2 + |E_z|^2)$

“LogEz2Ex2” :  $\log_{10} (|E_z|^2 + |E_x|^2)$

“Hx2Hy2” :  $|H_x|^2 + |H_y|^2$

“Hy2Hz2” :  $|H_y|^2 + |H_z|^2$

“Hz2Hx2” :  $|H_z|^2 + |H_x|^2$

“LogHx2Hy2” :  $\log_{10} (|H_x|^2 + |H_y|^2)$

“LogHy2Hz2” :  $\log_{10} (|H_y|^2 + |H_z|^2)$

“LogHz2Hx2” :  $\log_{10} (|H_z|^2 + |H_x|^2)$

(b) \*plane : 결과를 보고 싶은 평면을 적는다. “x”, “y”, “z” 중에 하나가 될 수 있다.

(c) value : epsilon 구조를 보고 싶은 평면의 위치를 결정한다. 예를들어 \*plane이 “z” 이고 value가 0 이면  $z = 0$  평면에서의 epsilon 구조를 출력한다. value의 단위는 FDTD의 단위 길이  $a$ 가 된다.

(d) \*lastname : 출력 파일의 extension을 적어준다. 이 함수를 FDTD time-loop 속에 적용하면 시간에 따른 평면 이미지가 연속적으로 출력된다. 파일의 이름은 FDTD time step을 이용하여 자동적으로 정해진다.

3. void out\_point(char \*component,float x,float y,float z,long ti,long tf,char \*name) :

FDTD 계산 결과물의 점 데이터를 출력한다.

(a) \*component : 출력하고 싶은 결과물을 적는다. (void out\_plane() 함수의 경우와 동일)

(b) x,y,z : 결과를 보고 싶은 점 좌표를 적는다. 단위는 FDTD의 단위 길이  $a$ 이다.

(c) ti, tf : 점 데이터를 출력할 FDTD 시간 구간을 입력한다. ti는 초기 시각, tf는 최종 시각이다.

(d) \*name : 출력 파일의 이름을 적어준다.

4. void print\_energy() :

모든 FDTD time-loop가 끝난 후에 Poynting energy 적분 결과를 출력한다. 출력 파일의 이름은 VQSQ.en이다. (예를들어 void Poynting\_block() 함수를 이용시 적용 가능하다.)

## 5.5 기타 함수

본 강의 노트에서 설명하지 않은 far-field 계산에서 사용되는 함수들이 있다. 또한 random 구조를 입력하기 위한 함수들이 있다. 여기서는 함수의 용법은 설명하지 않고 함수의 원형만 적기로 한다.

1. void random\_object(char \*shape, float radius, float height, float epsilon, float x\_min, float x\_max, float y\_min, float y\_max, float z\_min, float z\_max, int gen\_number, int seed)

2. void random\_Gaussian\_dipole(char \*component, float frequency, float tdecay, float x\_min, float x\_max, float y\_min, float y\_max, float z\_min, float z\_max, int gen\_number, int seed)

3. void far\_field\_param(float \*OMEGA, float DETECT)

4. void make\_2n\_size(int NROW)

5. void far\_field\_FFT(int NROW, float NA, float Nfree, float \*OMEGA)

6. float grid\_value(char \*component,int i,int j,int k)

7. void total\_E\_energy()

8. void total\_E2()

9. void Poynting\_total()
10. void Poynting\_side(float value, float zposition)
11. void print\_energy()
12. void Poynting\_UpDown(float value, float zposition)
13. void transform\_farfield(int NROW, int tnum)
14. void add\_farfield(int tnum)
15. void print\_amp\_and\_phase()
16. void print\_real\_and\_imag()

## 참고 문헌

- [1] N. C. Frateschi and A. F. J. Levi, “The spectrum of microdisk lasers,” *J. Appl. Phys.*, vol. 80, p. 644, 1996.
- [2] J. M. Gérard, D. Barrier, J. Y. Marzin, R. Kuszelewicz, L. Manin, E. Costard, V. Thierry-Mieg, and T. Rivera, “Quantum boxes as active probes for photonic microstructures: The pillar microcavity case,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 69, p. 499, 1996.
- [3] P. R. Villeneuve, S. Fan, and J. D. Joannopoulos, “Microcavities in photonic crystals: Mode symmetry, tunability, and coupling efficiency,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, p. 7837, 1996.
- [4] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Boston: Artech House, Inc., 2000.
- [5] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical methods for physicists*. London: Academic Press, 1995.
- [6] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. New York: Wiley, 1974.
- [7] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, 1994.
- [8] P. R. Villeneuve, S. Fan, and J. D. Joannopoulos, “Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media,” *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 14, p. 302, 1966.
- [9] Y. Xu, J. Vuković, R. K. Lee, O. J. Painter, A. Scherer, and A. Yariv, “Finite-difference time-domain calculation of spontaneous emission lifetime in a microcavity,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 16, p. 465, 1999.
- [10] H. G. Park, J. K. Hwang, J. Huh, H. Y. Ryu, S. H. Kim, J. S. Kim, and Y. H. Lee, *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 38, p. 1353, 2002.
- [11] S. H. Kim, S. K. Kim, and Y. H. Lee, “Vertical beaming of wavelength-scale photonic crystal resonators,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 235117, 2006.
- [12] E. A. Hinds, in *Cavity Quantum Electrodynamics*. Orlando: Academic Press, Inc, 1994, edited by P. R. Berman.

- [13] S. H. Kim and Y. H. Lee, "Symmetry relations of two-dimensional photonic crystal cavity modes," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 39, p. 1081, 2003.
- [14] O. Painter and K. Srinivasan, "Polarization properties of dipolelike defect modes in photonic crystal nanocavities," *Opt. Lett.*, vol. 27, p. 339, 2002.
- [15] J. W. Goodman, *Introduction to Fourier Optics*. Singapore: McGraw Hill, 1996, chap. 6.
- [16] S. L. McCall, A. F. J. Levi, R. E. Slusher, S. J. Pearton, and R. A. Logan, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 60, p. 289, 1992.
- [17] E. M. Purcell, "Spontaneous emission probabilities at radio frequencies," *Phys. Rev.*, vol. 69, p. 681, 1946.
- [18] 이해웅, *빛의 양자 이론*. 민음사, 1998.
- [19] E. T. Jaynes and C. W. Cummings, "Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser," *Proc. IEEE*, vol. 51, p. 89, 1963.
- [20] R. Loudon, *The quantum theory of light*. Oxford: Clarendon press, 1988.
- [21] I. I. Rabi, "Space quantization in a gyrating magnetic field," *Phys. Rev.*, vol. 51, p. 652, 1937.
- [22] J. P. Dowling and C. M. Bowden, "Atomic emission rates in inhomogeneous media with applications to photonic band structures," *Phys. Rev. A*, vol. 46, p. 612, 1992.
- [23] J. H. Eberly, N. B. Narozhny, and J. J. Sanchez-Mondragon, "Periodic spontaneous collapse and revival in a simple quantum model," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 44, p. 1323, 1980.
- [24] J. M. Gérard and B. Gayral, "Strong Purcell effect for inas quantum boxes in three-dimensional solid-state microcavities," *J. Lightwave Technol.*, vol. 17, p. 2089, 1999.
- [25] T. Yoshie, A. Scherer, J. Hendrickson, G. Khitrova, H. M. Gibbs, G. Rupper, C. Ell, O. B. Shchekin, and D. G. Deppe, "Vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in a photonic crystal nanocavity," *Nature*, vol. 432, p. 200, 2004.
- [26] J. K. Hwang, H. Y. Ryu, and Y. H. Lee, "Spontaneous emission rate of an electric dipole in a general microcavity," *Phys. Rev. B*, vol. 60, p. 4688, 1999.
- [27] S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, and L. A. Kolodziejski, *Phys. Rev. B*, vol. 60, p. 5751, 1999.
- [28] S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, and E. F. Schubert, "High extraction efficiency of spontaneous emission from slabs of photonic crystals," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, p. 3294, 1997.

- [29] H. G. Park, J. K. Hwang, J. Huh, H. Y. Ryu, Y. H. Lee, and J. S. Kim, “Nondegenerate monopole-mode two-dimensional photonic bandgap laser,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 79, p. 3032, 2001.
- [30] H. G. Park, S. H. Kim, S. H. Kwon, Y. G. Ju, J. K. Yang, J. H. Baek, S. B. Kim, and Y. H. Lee, “Electrically driven single-cell photonic crystal laser,” *Science*, vol. 305, p. 1444, 2004.
- [31] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic Crystals*. Princeton Univ. Press, 1995.