

Использование матриц передачи и псевдоспектрального метода во временной области для исследования дифракции света на планарных периодических структурах

В. В. Харди́ков, Е. О. Ярко, С. Л. Просви́рнин

*Радиоастрономический институт НАН Украины,
ул. Краснознаменная, 4, г. Харьков, 61002, Украина*

Статья поступила в редакцию 6 марта 2008 г.

Предлагается новая математическая модель для численного исследования дифракции электромагнитных волн оптического и инфракрасного диапазонов на плоской периодической структуре резонансных металлических элементов сложной формы, расположенных на диэлектрической подложке, толщина которой во много раз превосходит длину волны. Основу модели составляет псевдоспектральный метод во временной области в комбинации с методом матриц передачи в частотной области. Построенная математическая модель учитывает дисперсию диэлектрической проницаемости металла периодической структуры и диэлектрика подложки. Для инфракрасного диапазона приведены результаты расчета коэффициента отражения решетки из алюминиевых С-образных резонансных элементов в зависимости от длины волны. Решетка имеет квадратную периодическую ячейку с размером 500 нм. Подложкой служит слой кварцевого стекла толщиной 0.5 мм.

Введение

Плоские периодические в двух направлениях структуры традиционно используются в микроволновой технике в качестве частотно-селективных и поляризационно-селективных поверхностей [1], рассеивающих и поглощающих покрытий, искусственных диэлектриков. Интерес к электромагнитным свойствам слоев со сложной структурой периодической ячейки, в частности с резонансными металлическими элементами в ячейке, возобновился в связи с активными исследованиями последнего десятилетия по созданию новых искусственных материалов. Двухпериодические структуры являются основой метаматериалов – искусственных сред с электромагнитными свойствами, которые не обнаружены у сред в природе: материалов со свойствами электромагнитных кристаллов, искусственных магнетиков, сред с отрицательным показателем преломления [2] и др. Использование метаматериалов в мик-

роволновой технике открывает перспективы конструирования устройств с уникальными характеристиками.

Теоретические и экспериментальные исследования резонансной дифракции волн на сложных плоских металлических периодических структурах в микроволновом диапазоне дали возможность обнаружить и изучить интересные для приложений свойства, такие, как чрезвычайно добротные резонансы на “запертых модах” [3, 4], эффект отражения от “стенки из магнетика” [5, 6], резонансное поглощение, асимметричное пропускание волн киральными структурами [7].

Все эти и многие другие свойства микроволновых структур важны для использования в фотонике. Благодаря развитию нанотехнологий в последние годы появилась возможность создавать на поверхности прозрачных материалов металлические слои толщиной в несколько десятков нанометров со сложной периодичес-

кой структурой, шаг которой составляет несколько сотен нанометров [8]. Сложная форма металлических элементов периодической ячейки дает возможность обеспечить условия для резонансного взаимодействия структуры со светом в отсутствие дифракционных порядков, поскольку период структуры может быть меньше длины волны. Это позволяет создавать метаматериалы для использования в инфракрасном и даже в оптическом диапазоне и проводить исследования, направленные на получение оптических аналогов микроволновых структур с уникальными электромагнитными свойствами. Состоявшаяся 8-11 января 2007 г. в Австрии “1-я Европейская тематическая конференция по нанопотонике и метаматериалам” показала большой интерес к этому направлению исследований как со стороны ученых, работающих в микроволновом диапазоне, так и физиков-оптиков [9].

Как известно, диэлектрическая проницаемость металлов в микроволновом и в оптическом диапазонах существенно различна. Поэтому простое масштабирование не дает ответа на вопрос об электродинамических свойствах металлических периодических структур в оптике. Возможны и качественно новые эффекты резонансного взаимодействия света с периодической структурой. Поскольку в оптическом диапазоне реальная часть диэлектрической проницаемости металлов отрицательная, по поверхности металлических элементов структуры распространяются слабо затухающие плазмон-поляритоны. В отраженном и прошедшем свете могут наблюдаться аномалии, соответствующие резонансам на плазмон-поляритонах.

Таким образом, является актуальной задача исследования дифракции света на плоских периодических наноструктурах. В сравнении с микроволновыми структурами единичные лабораторные образцы оптических периодических искусственных материалов при современном уровне развития технологий оказываются существенно более дорогими. Поэтому очень важным является численное моделирование их электромагнитных свойств с учетом особенностей геометрии, дисперсионных и дис-

сипативных свойств материалов, чередования в их структуре областей с сильно различающимися значениями диэлектрической проницаемости. В настоящей работе предлагается эффективное объединение численного псевдоспектрального метода во временной области с аналитическим методом матриц передачи в частотной области для моделирования отражения и пропускания света реальными планарными металлodieлектрическими структурами для оптического диапазона длин волн.

Постановка задачи. Метод решения

Рассматривается задача дифракции плоской электромагнитной волны оптического диапазона на планарной двухпериодической структуре (периодическая ячейка имеет размеры d_x и d_y) со сложной формой проводящих элементов, расположенной на прозрачной плоскопараллельной подложке, толщина которой во много раз больше длины волны (см. рис. 1). Типичная толщина подложки L составляет $0.3 \div 0.5$ мм. Для определенности предполагается, что проводящие элементы решетки алюминиевые, имеют С-образную форму, материал подложки представляет собой двуокись кремния – кварцевое стекло. Эти

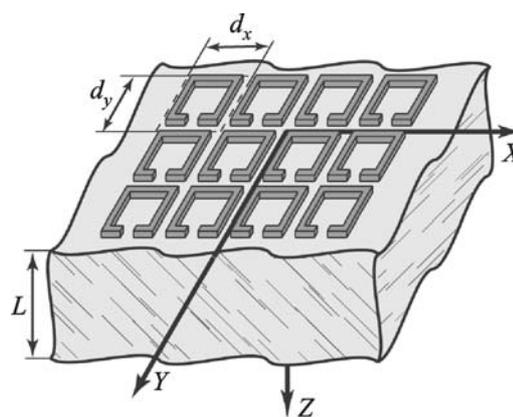


Рис. 1. Геометрия планарной периодической структуры со сложной формой проводящих элементов на подложке

материалы используются в реальных периодических структурах, предназначенных для инфракрасного диапазона. Период решетки составляет сотни нанометров.

Основные отличия задачи дифракции волн на решетках в оптическом диапазоне от подобных задач дифракции на печатных полосковых структурах, предназначенных для микроволнового диапазона, состоят в следующем: 1) проводящие элементы оптической решетки могут иметь в поперечном сечении конечные размеры, сравнимые с длиной волны; 2) алюминий, как и другие металлы, в оптическом диапазоне представляет собой проницаемую для электромагнитного поля среду, у которой реальная и мнимая части диэлектрической проницаемости соизмеримы (реальная часть – отрицательная) и обладают сильной дисперсией; 3) толщина подложки многократно превосходит длину волны; 4) рабочий диапазон длин волн – широкий (типичные значения от 500 до 2500 нм).

Перечисленные особенности определяют выбор методов для решения задач дифракции. Чаще всего используются сеточные численные методы как в частотной, так и во временной областях. Методы решения задачи во временной области имеют ряд преимуществ, основные из которых – простота вычислительного алгоритма (используются только операции сложения и умножения матриц) и возможность за одну численную реализацию получить коэффициенты рассеяния во всем представляющем интерес диапазоне длин волн.

Одним из простейших в применении является метод конечных разностей для решения уравнений Максвелла во временной области, так называемый FDTD-метод. Однако такая простейшая разностная схема использует дискретные приближенные представления для производных с точностью только до величин второго порядка малости, что приводит к ряду проблем, которые снижают эффективность метода. Одна из них – это отличие волновых чисел волн в конечно-разностной модели, описывающей дифракцию, от волновых чисел реальных электромагнитных волн, получившее название численной дисперсии.

Уравнение для определения волнового числа электромагнитной волны, распространяющейся в свободном пространстве в направлении оси x , которое следует из конечно-разностного представления уравнений Максвелла, имеет вид [10]:

$$\frac{c\Delta t}{\Delta x} \sin \frac{k\Delta x}{2} = \sin \frac{\omega\Delta t}{2},$$

где Δx и Δt – пространственный шаг сетки и шаг по времени соответственно, c – скорость света в свободном пространстве, ω – частота монохроматической волны и k – волновое число. Легко видеть, что это “конечно-разностное” дисперсионное уравнение точно соответствует дисперсионному уравнению $k = \omega/c$ только при условии $\Delta x \rightarrow 0$ и $\Delta t \rightarrow 0$, а следовательно, численная дисперсия наблюдается в любой модели с конечным шагом сетки. Кроме того, может возникать так называемая численная анизотропия, при которой в сеточной модели волновые числа волн, распространяющихся в различных направлениях в изотропной области, различаются. Численные эксперименты показывают, что даже в сетке с небольшим шагом, когда на минимально возможную длину волны приходится 20 узлов сетки, ошибка в определении фазовой скорости этой волны составляет примерно 0.3 %, а анизотропия фазовой скорости – 0.2 %.

Еще одно условие, которому должна удовлетворять математическая модель на основе конечно-разностного метода во временной области и которое снижает ее эффективность и тем самым ограничивает область применимости, – это так называемый критерий Куранта [10]. Для того чтобы вычислительная схема была стабильной, т. е. энергия электромагнитной волны не возрастала при ее распространении в сеточной модели, число Куранта

$$S = \frac{c \cdot \max(\Delta t)}{\min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)}$$

должно удовлетворять условию $S \leq 1/\sqrt{D}$, где D – размерность задачи. Критерий Куранта

связывает максимально возможный шаг временной дискретизации с минимальным шагом пространственной сетки и, следовательно, ограничивает величину шага по времени в FDTD-методе.

Численная дисперсия фазовой скорости и рост ошибок дискретизации пространственных производных с уменьшением числа узлов сетки, приходящихся на длину волны, делают применение FDTD-метода для решения трехмерных задач весьма неэффективным, поскольку, как правило, необходимо $10 \div 20$ узлов на минимальную длину волны.

Альтернативой является псевдоспектральный метод во временной области (PSTD-метод). Суть псевдоспектрального метода состоит в поиске коэффициентов разложения решения задачи по системе пространственных базисных функций из условия, заключающегося в том, что значения разложения и истинного решения, удовлетворяющего уравнениям Максвелла, должны совпадать в узлах сетки (метод коллокации). Эта схема используется для каждого из последовательных временных отсчетов, выбранных с некоторым шагом. Значения пространственных производных функции-решения в узлах сетки определяются аналитически. В [11] показано, что эта схема характеризуется так называемой спектральной, или экспоненциальной, сходимостью в пределах пространственной области, в которой поле не имеет разрывов. Поэтому для получения решения в виде разложения по системе аналитических базисных функций с хорошим уровнем точности достаточно использовать небольшое число базисных функций.

Наиболее простым для алгоритмической реализации и требующим минимального числа арифметических операций, приходящихся на один временной шаг, является псевдоспектральный метод с экспоненциальными базисными функциями ряда Фурье. При таком выборе базиса число операций оказывается минимальным благодаря возможности использовать алгоритм быстрого преобразования Фурье.

Для вычисления в уравнениях Максвелла пространственных производных компонент поля, представленных в виде дискретных рядов Фурье, используется теория преобразо-

ваний Фурье [12]. Если на периоде l некоторой периодической функции $f(x)$ выбрать систему из N равноотстоящих узлов $x_n = nl/N$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$), то, как известно, эту функцию в узлах можно представить дискретным рядом Фурье:

$$f(x_n) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} a_m e^{i \frac{2\pi mn}{N}} = iFFT(a_m).$$

Производную функции $f(x)$ в узловых точках можно найти по формуле:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} f(x_n) &= \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} ik_m a_m e^{i \frac{2\pi mn}{N}} = iFFT(ik_m a_m) = \\ &= iFFT(ik_m FFT(f(x_n))). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь обозначения FFT и $iFFT$ использованы для операций прямого и обратного быстрого преобразования Фурье соответственно, $k_m = 2\pi m/l$ ($m = 0, 1, 2, \dots, N-1$). Формула (1) лежит в основе алгоритма вычисления пространственных производных уравнений Максвелла в псевдоспектральном методе во временной области. Как показано в [13], фурье-псевдоспектральный метод соответствует конечно-разностной схеме бесконечного порядка, что позволяет определять точное значение производной аналитической периодической функции, если в соответствии с критерием Найквиста система узловых точек состоит по крайней мере из двух узлов на длину волны.

Согласно [14] волновое число волны в свободном пространстве, распространение которой моделируется с использованием псевдоспектрального метода, определяется выражением

$$k = \frac{2}{c\Delta t} \sin \frac{\omega\Delta t}{2}.$$

Численная дисперсия псевдоспектрального метода, в отличие от конечно-разностного

метода, зависит только от величины шага по времени. Критерий Куранта имеет следующий вид: $S \leq \frac{2}{\pi\sqrt{D}}$.

Таким образом, псевдоспектральный метод в задачах дифракции электромагнитных волн на периодических структурах дает возможность уменьшить численные ошибки дискретизации, а также число узлов сетки в $3 \div 5$ раз в каждом из направлений в пространстве, вдоль осей x , y , и z , по сравнению с конечно-разностной схемой обычного FDTD-метода. Последнее обстоятельство позволяет в десятки раз уменьшить объем необходимой для работы алгоритма памяти, а также число выполняемых операций (время решения задачи) при решении задач об электромагнитном поле в трехмерных структурах. Еще одно достоинство метода, существенно упрощающее описание дифракционной структуры и алгоритм в целом, состоит в том, что все компоненты электромагнитного поля определяются в одних и тех же узловых точках в отличие от конечно-разностного метода, в котором сетки для электрического и магнитного полей смещены. Все это объясняет наш выбор псевдоспектрального метода в качестве основы построения эффективного алгоритма для решения задач дифракции электромагнитных волн оптического и инфракрасного диапазонов на реальных планарных периодических структурах нанометрового масштаба.

Отмеченная выше экспоненциальная сходимость псевдоспектрального метода имеет место для решений в областях, где нет разрывов у компонент поля. В большинстве практически важных задач в периодических структурах имеются границы раздела между высококонтрастными материалами, например, границы между диэлектриком и металлом, на которых компоненты полей претерпевают разрывы или имеют очень большие пространственные производные. Решение в этом случае называют разрывным. Проблема получения разрывного решения заключается в потере точности за счет эффекта Гиббса [14] и как следствие в медленной сходимости метода.

Для того чтобы находить разрывные решения можно построить алгоритм на основе псевдоспектрального метода с разбиением на конечное число подобластей. Суть этого метода состоит в разбиении всей структуры на подобласти, в которых решение не имеет разрывов, и сшивании полей на границах подобластей с помощью граничных условий. Однако этот подход к решению задачи является весьма сложным в алгоритмическом отношении и трудоемким с точки зрения предварительной подготовки вычислительной схемы для каждой новой структуры.

Мы используем предложенный в [14] метод, который дает возможность свести к минимуму потерю точности за счет эффекта Гиббса при поиске решений с разрывами на границах раздела высококонтрастных материалов при сравнительно небольшом усложнении алгоритма. Для изложения сути метода рассмотрим поле в окрестности границы раздела высококонтрастных материалов, например диэлектрика и проводника с конечной проводимостью. Хотя на границе раздела выполняется условие непрерывности тангенциальных составляющих напряженности поля, их изменение вблизи границы весьма существенно, в частности, в металле поля значительно изменяются в пределах скин-слоя. Поэтому, если шаг сетки превышает или примерно равен толщине скин-слоя, то в сеточной модели будет наблюдаться разрыв тангенциальных составляющих поля, что приведет к эффекту Гиббса. Под эффектом Гиббса, как обычно, понимается отсутствие сходимости ряда Фурье к значению функции, которую представляет ряд, в точке разрыва. Кроме того, первая и высшие производные поля оказываются разрывными на границе раздела между диэлектриком и металлом.

Самый простой и естественный способ уменьшения ошибки решения состоит в уменьшении шага сетки вблизи границы раздела контрастных сред. Правильно подобранная неоднородная сетка дает возможность не только понизить амплитуду скачка приближенного решения вблизи границы, но и контролировать разрывы высших производных решения. Псевдоспектральный метод, в котором исполь-

зается неоднородная сетка узлов с гладкой функцией изменения шага, получил название псевдоспектрального метода с отображением (mapped PSTD-method) [14].

Предположим, что функция $f(x)$ имеет разрыв при $x = x_0$, а функция $x = x(u)$ осуществляет отображение узлов однородной сетки u_i на неоднородную сетку x_i , тогда

$$\frac{df(x)}{du} = \frac{df(x)}{dx} \frac{dx}{du}.$$

Таким образом, разрыв $df(x)/dx$ в точке x_0 масштабируется на величину dx/du , малую в локально частой сетке. Производные более высокого порядка по переменной u включают в себя производные по x соответствующего порядка, которые масштабируются на соответствующую степень dx/du , а также произведения производных низших порядков по x на высшие производные функции $x(u)$. Например, для второй производной имеем $\frac{d^2 f}{du^2} = \frac{d^2 f}{dx^2} \left(\frac{dx}{du}\right)^2 + \frac{df}{dx} \frac{d^2 x}{du^2}$. Поэтому, если быстрое преобразование Фурье применить для вычисления производной df/du , то эффект Гиббса будет значительно ослаблен. Использование так называемой интегральной формы функции Блэкмана–Харриса (Blackman–Harris) [14] в качестве отображения $x = x(u)$ для построения dx/du позволяет подавлять эффект Гиббса и избегать ошибок в описании распространения волны в результате использования модели с неоднородной сеткой. Интегральная форма функции Блэкмана–Харриса изменяется от нуля до единицы на интервале $x \in [0, 1]$ и определяется формулой:

$$IBH(x) = \sum_{k=0}^M a_k \frac{\sin(2\pi kx)}{2\pi k}.$$

Здесь параметры выбраны следующим образом: $M = 3$, $a_0 = 1$, $a_1 = -1.3611$, $a_2 = 0.3938$ и $a_3 = -0.0326$. В случае, когда есть одна точка

разрыва (x_0) на периоде структуры $x \in [0, l]$, функция dx/du определяется формулой:

$$\left(\frac{dx}{du}\right)_j = \frac{h_0 + (h_{\min} - h_0) \cdot \varphi\left(\frac{j-j_1}{j_0}\right) + (h_0 - h_{\min}) \cdot \varphi\left(\frac{j-j_2}{j_0}\right)}{h_u},$$

$$\text{где } \varphi(y) = \begin{cases} 0, & y < 0, \\ IBH(y), & y \in [0, 1], \\ 1, & y > 1 \end{cases} - \text{функция, обеспечивающая плавное изменение пространственного шага неоднородной сетки от начального значения (вычитаемое в скобках перед } \varphi(y)) \text{ до конечного (уменьшаемое в скобках перед } \varphi(y)); j_1 \text{ и } j_2 - \text{номера узлов, в которых начинается изменение шага неоднородной сетки до и после точки разрыва соответственно; } j_0 - \text{количество точек на интервале, в пределах которого происходит изменение шага неоднородной сетки (в нашем алгоритме выбрано } j_0 = 4); h_{\min} - \text{шаг вблизи точки разрыва, величина которого выбирается таким образом, чтобы эффективно ослабить эффект Гиббса; } h_u - \text{шаг однородной сетки (} u_j = jh_u); h_0 - \text{шаг на краях сетки, который должен быть одинаковым, чтобы избежать эффекта Гиббса на границах периода. Параметры } j_1, j_2, h_0 \text{ и количество узлов в сетке выбираются таким образом, чтобы узлы сетки с минимальным шагом покрывали область вблизи } x_0, \text{ а последний узел сетки располагался в точке } l - h_0 \text{ (это обеспечивает условие периодичности в пределах } x \in [0, l]).$$

В псевдоспектральном методе с отображением пространственные производные компонент поля вычисляются по следующему алгоритму:

1) на первом этапе вычисляется производная в однородной сетке $\{u_j\}_{j=1}^N$ по формуле (1),

$$\frac{d}{du} F(u_j) = iFFT\left(ik_m FFT\left(F(u_j)\right)\right),$$

2) по известному значению производной в однородной сетке определяется производная в сетке $\{x_j\}_{j=1}^N$,

$$\frac{d}{dx} F(x_j) = \left(\frac{d}{du} F(u_j) \right) \left(\frac{dx}{du} \right)_j^{-1}.$$

Предложенный подход не приводит к значительному увеличению объема вычислений, так как величины $\left(\frac{dx}{du} \right)_j$ ($j = 0, 1, \dots, N-1$) могут быть найдены до начала численного эксперимента с использованием псевдоспектрального метода.

Реальные планарные периодические структуры для оптического диапазона имеют большую электрическую толщину подложки. Толщина оптически прозрачной подложки может составлять от сотен до десятков тысяч длин волн. Это обстоятельство приводит к еще одной проблеме при попытке прямого использования сеточных методов, включая и псевдоспектральный метод, обусловленной огромным объемом необходимых вычислений и катастрофическим падением эффективности метода. Действительно, для корректного моделирования распространения волны в подложке ее необходимо “покрыть” сеткой хотя бы с двумя, а желательно с четырьмя узлами на длину волны. Это приводит к необходимости использовать большой объем памяти для хранения значений полей в узлах сетки и выполнять огромное число операций для вычисления поля в однородной подложке. Далее, для корректного описания интерференционных явлений в структуре временное окно численного эксперимента должно включать в себя несколько переотражений исходного импульса падающей волны между внешними границами структуры. Поэтому чем толще прозрачная подложка, тем большим должно быть временное окно численного эксперимента. С другой стороны, максимально возможный шаг по времени в псевдоспектральном методе ограничен критерием Куранта, т. е. имеет величину

$c(\Delta t)_{\max} = \frac{2}{\pi\sqrt{3}} \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, и связан с минимальным шагом в пространстве, который определяется необходимостью подавления эффекта Гиббса на границе раздела высококонтрастных материалов. Кроме того, численная дисперсия фазовой скорости в случае электрически больших структур может приводить к ошибке решения, которой нельзя пренебречь.

Таким образом, моделирование поля в толстом слое однородной диэлектрической подложки неэффективно в рамках псевдоспектрального метода. В тоже время в частотной области решение задачи о распространении волн в диэлектрическом полупространстве с дисперсией диэлектрической проницаемости, их отражении и прохождении через плоскую границу между диэлектриком и свободным пространством может быть представлено в простой аналитической форме. Поэтому для решения задач дифракции волн на структурах с однородной подложкой большой толщины мы предлагаем использовать комплексный подход, в котором объединены численный псевдоспектральный метод во временной области с методом матриц передачи в частотной области.

Суть этого подхода к решению задачи состоит в следующем. На первом этапе решения с помощью псевдоспектрального метода и дискретного преобразования Фурье определяется матрица рассеяния в частотной области для двухпериодической решетки, расположенной между свободным полупространством и полупространством, заполненным диэлектриком, из которого состоит подложка. Далее, по известной матрице рассеяния, находится матрица передачи решетки. Матрица передачи всей структуры определяется как произведение матрицы передачи решетки и найденной аналитически “матрицы передачи подложки” – матрицы передачи однородного слоя диэлектрика, имеющего толщину L и граничащего со свободным пространством (L – толщина подложки). Полученная таким образом матрица передачи содержит всю необходимую информацию о коэффициентах рассеяния планарной периодической структуры на подложке.

Такой подход к решению задачи дает возможность существенно снизить погрешность из-за численной дисперсии фазовой скорости в псевдоспектральном методе, а также радикально сократить время решения за счет уменьшения электрического размера области, в которой поле моделируется на сетке.

Отметим, что, вообще говоря, этот метод решения задачи предполагает вычисление матриц рассеяния, в которых представлены соответствующие коэффициенты для каждой распространяющейся моды Флоке как в диэлектрике, так и в свободном пространстве. Однако во многих важных приложениях периодических структур, таких, например, как планарные метаматериалы, используются структуры с периодом меньшим, чем длина волны не только в свободном пространстве, но и в диэлектрике подложки, что обеспечивает условие одномодового режима – распространяющейся является только основная пространственная гармоника поля. В одномодовом режиме матрица передачи подложки, т. е. эквивалентного восьмиполюсника, входной порт которого расположен в диэлектрике у границы раздела диэлектрик-решетка, а выходной – в свободном пространстве непосредственно за границей раздела между диэлектриком и свободным пространством, определяется матрицей с размерами 4×4 :

$$T_p = \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix},$$

где T и 0 – 2×2 -матрицы. Матрица 0 – ноль-матрица, а матрица T определяется аналитическим выражением:

$$T = \frac{1}{2\sqrt{n_s(\omega)}} \begin{pmatrix} (1+n_s(\omega))e^- & (n_s(\omega)-1)e^- \\ (n_s(\omega)-1)e^+ & (1+n_s(\omega))e^+ \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $n_s(\omega)$ коэффициент преломления подложки, $e^\pm = \exp(\pm 2i\pi n_s(\omega)L/\lambda)$.

Заметим также, что для определения матрицы передачи решетки между свободным пространством и полупространством, заполненным диэлектриком, необходимо найти коэффициенты рассеяния при падении волн с обеих сторон структуры, т. е. с помощью псевдоспектрального метода численно решить две задачи дифракции.

Анализ численных результатов

С целью иллюстрации эффективности предложенного выше подхода рассмотрим решение задачи дифракции нормально падающей плоской волны на периодической планарной структуре с квадратной ячейкой на подложке с относительно небольшой толщиной ($L = 2500$ нм). Выбор такой малой толщины подложки обусловлен желанием сравнить результаты, полученные с помощью метода с использованием матриц передачи в частотной области и путем прямого применения псевдоспектрального метода к решению задачи дифракции на структуре с конечной подложкой. Прямое использование псевдоспектрального метода потребовало бы очень большого времени для решения задачи дифракции на структуре с подложкой толщиной порядка 0.1 мм, а также привело бы к появлению ошибок, связанных с численной дисперсией.

Исследуется дифракция волн на решетке из проводящих алюминиевых элементов С-образной формы толщиной $h = 50$ нм (см. рис. 1 и рис. 2), расположенных в квадратных ячейках ($d_x = d_y = 500$ нм), границы ячейки обозначены пунктиром на рис. 2. На рис. 3 приведены зависимости от длины волны относительной диэлектрической проницаемости алюминия [15] и двуоксида кремния – материала подложки [16, 17]. В рассматриваемом диапазоне длин волн от 500 до 2500 нм потери в кварцевом стекле подложки пренебрежимо малы.

Временная зависимость падающей волны выбрана в виде импульса Неймана [18]:

$$T(t) = 2 \frac{t-t_0}{\tau} \exp \left[- \left(\frac{t-t_0}{\tau} \right)^2 \right].$$

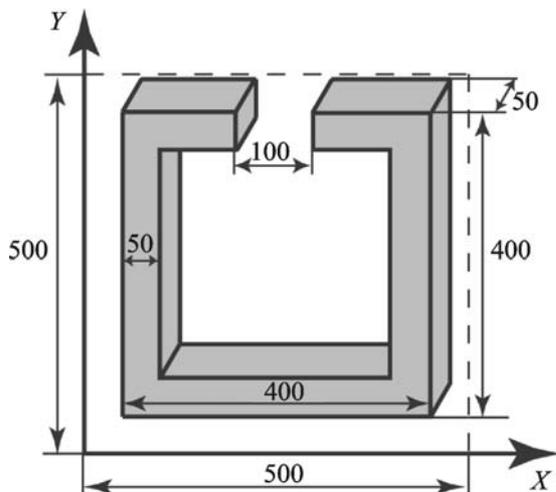


Рис. 2. Геометрия и размеры (указаны в нанометрах) С-образного элемента решетки

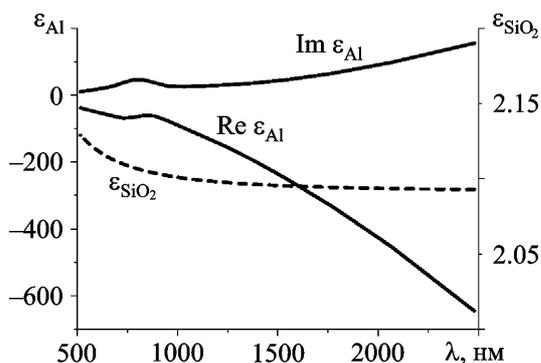


Рис. 3. Частотные зависимости относительной диэлектрической проницаемости материалов планарной структуры

В численном эксперименте параметры импульса Неймана были заданы следующим образом: $t_0 = 3\tau$ и $\tau = \frac{\lambda_{\min}}{\pi c}$, где $\lambda_{\min} = 500$ нм – коротковолновая граница выбранного диапазона.

На рис. 4 представлена схема пространственных областей численного эксперимента при решении задачи дифракции на решетке между двумя полупространствами (свободным и заполненным диэлектриком, у которого диэлектрическая проницаемость имеет частотную дисперсию). Поглощающие слои ог-

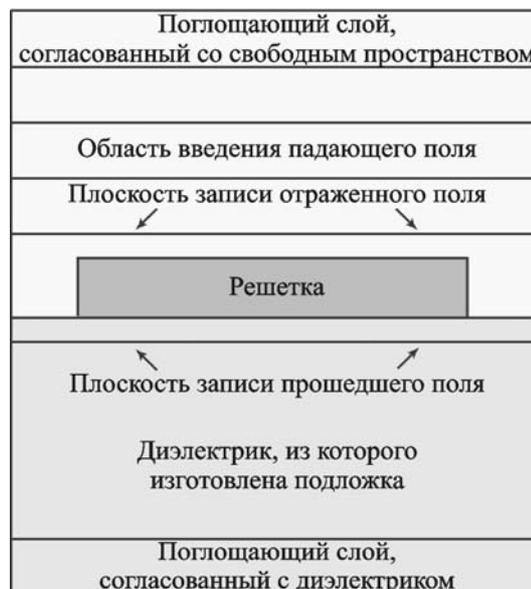


Рис. 4. Схема пространственных областей при численном эксперименте

раничивают расчетную область и обеспечивают эффективное поглощение уходящих из нее волн – они эквивалентны введению неотражающих плоских границ. В качестве таких слоев были использованы так называемые одноосные идеально согласованные слои [10] из восьми элементов, что обеспечивает ослабление нормально падающей волны на уровне 140 дБ.

Для задания падающего поля была использована методика “мягких источников”, описанная в [14]. Суть этой методики состоит во введении падающего поля в нескольких слоях сетки (в построенном алгоритме их выбрано 8). Падающее поле в этих слоях домножается на функцию Блэкмана–Харриса, что обеспечивает плавное нарастание эффективной плотности источников от нуля до единицы и затем плавное убывание до нуля. Такой метод позволяет избежать эффекта Гиббса, который возникает при резком изменении падающего поля.

Отраженное и прошедшее поля записываются в узловых точках в некоторых выбранных плоскостях (см. рис. 4). Эти записи с помощью трансформации ближнего поля

в дальнюю зону позволяют определить коэффициенты отражения и прохождения структуры путем деления спектра отраженного и прошедшего полей в дальней зоне на спектр падающего поля.

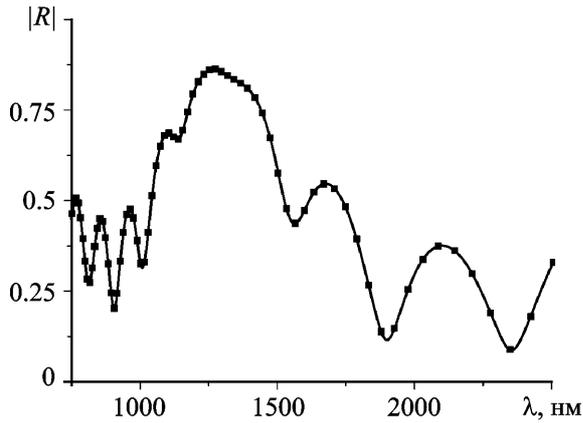
При вычислении матрицы передачи всей структуры с подложкой необходимо учесть, что слой, в котором записывается прошедшее поле, расположен на расстоянии z_p от границы раздела решетка–подложка. Это достигается путем подстановки в формулу (2) вместо истинной толщины подложки L величины $L - z_p$.

Для вычисления матрицы рассеяния всей структуры и решетки, лежащей между свободным пространством и пространством, заполненным диэлектриком, использовались сетки с $64 \times 64 \times 128$ и $64 \times 64 \times 64$ узлами соответственно. Шаг в сетке изменялся от 1 нм вблизи границ раздела металл–диэлектрик и металл – свободное пространство до 22 нм в однородных участках, шаг по времени составлял $\Delta t = 1.2 \cdot 10^{-18}$ с, и, следовательно, за один временной шаг волна в свободном пространстве проходила расстояние 0.36 нм. При этих параметрах полное время решения задачи (вычисление зависимостей коэффициентов прохождения и отражения от длины волны в диапазоне от 500 до 2500 нм) составило 412 мин при прямом применении псевдоспектрального метода и 400 мин (по 200 мин на кардую из двух задач дифракции) при применении описанного алгоритма с использованием матриц передачи. Отметим, что в последнем случае метод позволяет определить в результате одного численного эксперимента матрицу рассеяния всей структуры, т. е. коэффициенты отражения и прохождения при падении волны на структуру как со стороны металлической решетки, так и со стороны подложки. В случае моделирования с помощью прямого псевдоспектрального метода для определения матрицы рассеяния потребовалось бы решать две задачи дифракции: о падении волны с одной и с другой сторон структуры. Все вычисления производились на компьютере с процессором Athlon 64 X2 3800+ и с оперативной памятью 1 Гб.

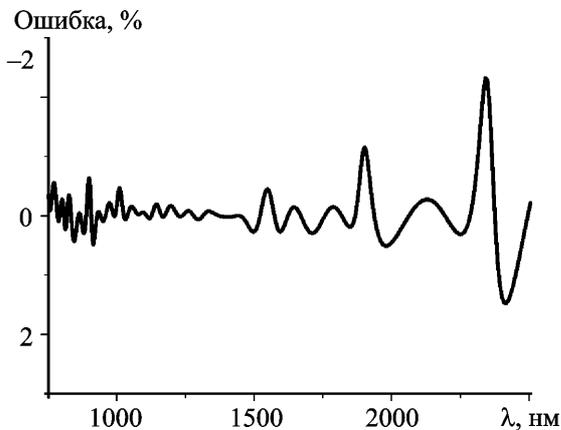
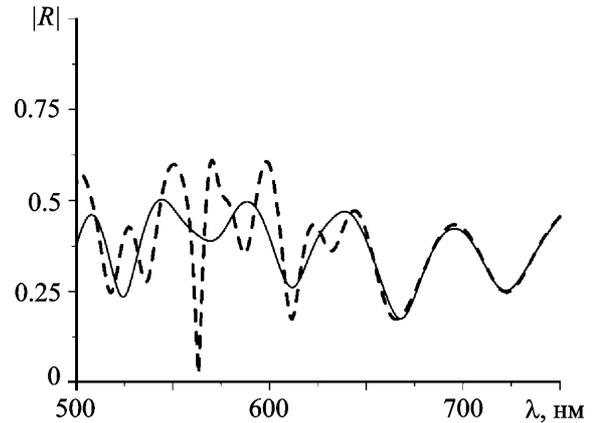
Отметим, что при увеличении толщины подложки вдвое, до 5000 нм, время счета также увеличивается примерно в два раза в случае использования прямого псевдоспектрального метода и остается неизменным при решении задачи с помощью предложенного подхода. Решить задачу дифракции на структуре с реальной подложкой толщиной примерно 0.5 мм с помощью прямого псевдоспектрального метода на персональном компьютере практически не возможно, поскольку необходим очень большой объем памяти.

Результаты вычислений модуля коэффициента отражения $|R|$ двумя методами: PSTD и PSTD в комбинации с методом матриц передачи представлены на рис. 5 и рис. 6. Они хорошо совпадают в одномодовом режиме (рис. 5, а). Некоторое увеличение различия между посчитанными разными методами коэффициентами отражения в длинноволновой части диапазона (см. рис. 5, б) объясняется недостаточно большим временным окном численного эксперимента, которое равно произведению числа временных шагов и величины шага Δt , при решении задачи дифракции на структуре с подложкой прямым псевдоспектральным методом. С ростом длины волны требуется значительное увеличение временного окна.

Относительная диэлектрическая проницаемость подложки в рассматриваемом диапазоне приблизительно равна 2.1 (см. рис. 3). Поэтому на длинах волн меньших, чем $\lambda_{kp} = d_x \sqrt{\epsilon} \approx 725$ нм, в подложке распространяется, кроме основной моды, еще и первая мода Флоке. Различие результатов вычислений для длин волн меньших 725 нм (см. рис. 6) обусловлено присутствием первой распространяющейся моды Флоке в подложке, и оно может быть устранено путем учета этой пространственной гармоники в матрицах передачи рассматриваемого алгоритма. Однако время счета в этом случае увеличится в 2 раза, так как потребуются численные решения дополнительных двух задач дифракции на периодической решетке с целью определения матриц рассеяния для четной и нечетной первых мод Флоке при возбуждении структуры со стороны диэлектрика.



а)



б)

Рис. 5. Зависимости величин модуля коэффициента отражения (а), рассчитанных методом PSTD для сетки $64 \times 64 \times 128$ (■) и методом PSTD в комбинации с методом матриц передачи (—), и относительного различия между ними (б) от длины волны в диапазоне $750 \div 2500$ нм при нормальном падении, поляризации поля вдоль оси Ox и толщине подложки 2500 нм

Отметим также, что резонансное отражение x -поляризованной волны (длина волны 1265 нм) соответствует условию:

$$A = 3\lambda_p / 2,$$

где A – длина S -образного элемента, λ_p – длина волны плазмон-поляритона [19]. Полу-

Рис. 6. Зависимость величин модуля коэффициента отражения, рассчитанных методом PSTD для сетки $64 \times 64 \times 128$ (---) и методом PSTD в комбинации с методом матриц передачи (—), от длины волны в диапазоне $500 \div 750$ нм при нормальном падении, поляризации поля вдоль оси Ox и толщине подложки 2500 нм

волновой резонанс находится вне рассматриваемого диапазона длин волн – ему соответствует длина волны 3625 нм. Это хорошо согласуется с известными результатами моделирования решеток из S -образных элементов для микроволнового диапазона. Все остальные резонансы обусловлены интерференцией распространяющихся мод Флоке в подложке.

На рис. 7 показана зависимость от длины волны абсолютной величины коэффициента отражения такой же решетки, но на подложке толщиной 0.5 мм, полученная с помощью разработанного алгоритма.

В заключение отметим, что предложенный метод применялся для изучения свойств оптической решетки из алюминиевых проводов плоско-киральной формы на кварцевом стекле [20]. Результаты численного анализа асимметрии преобразования кругополяризованного света при нормальном падении с одной и с другой сторон структуры получили экспериментальное подтверждение.

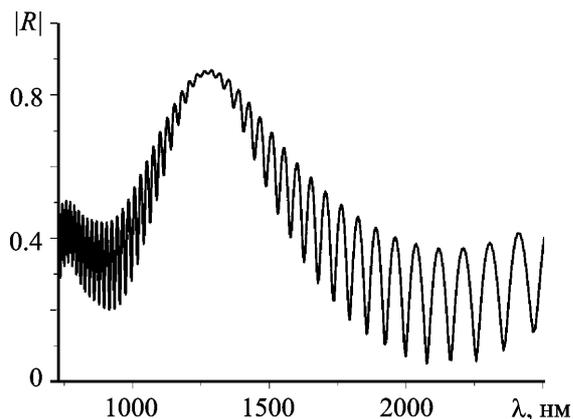


Рис. 7. Зависимость модуля коэффициента отражения от длины волны, рассчитанная методом PSTD в комбинации с методом матриц передачи, при нормальном падении, поляризации поля вдоль оси Ox и толщине подложки 0.5 мм

Выводы

В работе предложен новый эффективный подход к решению задач дифракции электромагнитных волн на реальных оптических двух-периодических планарных структурах со сложной геометрией проводящих элементов. В нем объединены численный псевдоспектральный метод во временной области и метод матриц передачи в частотной области для описания интерференции волн в прозрачной подложке, толщина которой во много раз превосходит длину волны. Такой подход позволяет учесть дисперсию диэлектрической проницаемости реальных материалов. Время численного решения задачи дифракции волн на сложной периодической структуре с подложкой большой электрической толщины сокращается радикально. С целью анализа влияния интерференционных явлений в подложке на свойства структуры после однократного решения задачи толщину подложки можно менять практически без дополнительных затрат времени на вычисления свойств всей структуры.

Предложенный метод делает вполне реальным численный анализ дифракции волн на оптических периодических структурах с помощью обычных персональных компьютеров.

Очевидно также, что он может быть использован для анализа свойств многослойных оптических структур.

Недостатком метода является необходимость в численном решении дополнительных задач дифракции при появлении распространяющихся высших мод Флоке в подложке и в свободном пространстве. В этом случае требуются дополнительные исследования для оценки эффективности предложенного подхода. Однако имеется широкий круг практически важных задач, в частности, относящихся к работам по созданию и изучению искусственных материалов для фотоники, в которых используются планарные структуры с периодом меньшим длины волны. Последнее обеспечивает одномодовость таких структур и как следствие эффективность предложенного метода.

Литература

1. Munk B. A. Frequency selective surfaces: theory and design. – New York: John Wiley and Sons, 2000. – 440 p.
2. Calos C., Itoh T. Electromagnetic metamaterials: transmission line theory and microwave applications: the engineering approach. – New York: John Wiley and Sons, 2005. – 392p.
3. Prosvirnin S., Zouhdi S. Resonances of closed modes in thin arrays of complex particles / Advances in Electromagnetics of Complex Media and Metamaterials. – Dordrecht–Boston–London: Kluwer Academic Publishers. – 2003 – V. 89 – P. 281-290.
4. Fedotov V. A., Rose M., Prosvirnin S. L., Papasimakis N. and Zheludev N. I. Sharp trapped-mode resonances in planar metamaterials with a broken structural symmetry // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol. 99, No. 14. – P.147401(4).
5. Mladenov P., Prosvirnin S., Tretyakov S. and Zouhdi S. Planar arrays of wavy microstrip lines as thin resonant magnetic walls // Proc. of the 2003 AP-S/URSI Conference. – Ohio (Columbus). – 2003. – Vol. 2. – P.1103-1106.
6. Fedotov V., Rogacheva A., Zheludev N., Mladyonov P. and Prosvirnin S. Mirror that does not change the phase of reflected waves // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 88. – P.091119 (3).
7. Fedotov V. A., Mladyonov P. L., Prosvirnin S. L., Rogacheva A. V., Chen Y., and Zheludev N. I. Asymmetric Propagation of Electromagnetic Waves through a Planar Chiral Structure // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 97, No. 16. – P. 167401(4).

8. Chen Y., Tao J., Zhao X., Cui Z., Schwanecke A. S. and Zheludev N. I., Nanoimprint lithography for planar chiral photonic meta-materials // *Microelectronic Engineering*. – 2005. – Vol. 78-79. – P. 612-617.
9. Gevaux D., View from Nanometa-2007: Big minds think small // *Nature Photonics*. – 2007. – Vol. 1. – P. 141-142.
10. Taflove A., Hagness S. C. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Third Edition. – Boston-London: Artech House, 2005. – 1038 p.
11. Boyd J. P. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. Second Edition. – New York: Dover Publications, 2001. – 691 p.
12. Lee T.-W., Hagness S. C. A Compact Wave Source Condition for the Pseudospectral Time-Domain Method // *IEEE Antennas Wireless Propag. Lett.* – 2004. – Vol. 3. – P. 253-256.
13. Fornberg B. *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*. – New York: Cambridge Univ. Press, 1996. – 248 p.
14. Gao X., Mirotznik M. S., Shi S. and Prather D. W. Applying a mapped pseudospectral time-domain method in simulating diffractive optical elements // *J. Opt. Soc. Am. A*. – 2004. – Vol. 21, No. 5. – P. 777-785.
15. Smith D. Y., Shiles E. and Inokuti M. *The Optical Properties of Aluminum* / Ed. by Palik / *Handbook of Optical Constants of Solids*. – Orlando: Academic Press, 1985. – P. 369-406.
16. Rodney W. S. and Spindler R. J. Index of Refraction of Fused-quartz Glass for Ultraviolet, Visible and Infrared Wavelengths // *J. Res. Nat. Bur. Stand.* – 1954. – Vol. 53. – P. 185-189.
17. Malitson I. H. Interspecimen Comparison of the Refractive Index of Fused Silica // *J. Opt. Soc. Am.* – 1965 – Vol. 55. – P. 1205-1209.
18. Jiao D., Jin J.-M., Michielssen E., Riley D. J. Time-Domain Finite-Element Simulation of Three-Dimensional Scattering and Radiation Problems Using Perfectly Matched Layers // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 2003. – Vol. 51, No 2. – P. 296-305.
19. Agranovich V. M., Mills D. L. (Eds.) *Surface Polaritons*. – North-Holland, Amsterdam. – 1982. – 718 p.
20. Fedotov V. A., Schwanecke A. S., Zheludev N. I., Khardikov V. V. and Prosvirnin S. L. Asymmetric transmission of light and enantiomerically sensitive plasmon resonance in planar chiral nanostructures // *Nano Letters*. – 2007. – Vol. 7, No. 7. – P. 1996-1999.

Використання матриць передачі і псевдоспектрального методу в часовій області для дослідження дифракції світла на планарних періодичних структурах

**В. В. Хардіков, К. О. Ярکو,
С. Л. Просвірнін**

Пропонується нова математична модель для числового дослідження дифракції електромагнітних хвиль оптичного та інфрачервоного діапазонів на плоскій періодичній структурі резонансних металевих елементів складної форми, розташованих на діелектричній підкладці, товщина якої багаторазово перевищує довжину хвилі. Основою моделі є псевдоспектральний метод у часовій області в комбінації з методом матриць передачі в частотній області. Побудована математична модель враховує дисперсію діелектричної проникності металу періодичної структури та діелектрика підкладки. Для інфрачервоного діапазону наводяться результати розрахунку коефіцієнта відбиття решітки з алюмінієвих С-подібних елементів залежно від довжини хвилі. Решітка має квадратну періодичну ґратку з кроком 500 нм. Підкладкою є шар кварцового скла товщиною 0.5 мм.

Using of Transmission Matrixes and Pseudospectral Method in Time Domain to Investigate Light Diffraction on Planar Periodic Structures

**V. V. Khardikov, E. O. Iarko,
and S. L. Prosvirnin**

A new mathematical model is proposed for computational investigation of diffraction of electromagnetic waves of optical and infrared bands on a planar periodic structure of resonance metal elements of complex shape located on a dielectric substrate of thickness much exceeding the wavelength. The model employs the pseudo-spectral time domain method in combination with the transmission matrices method in frequency domain. The mathematical model built accounts for dispersion of metal and dielectric permittivities of a periodic structure and a substrate, respectively. For the infrared band, the reflection coefficient calculated for the grating of aluminum C-shaped resonant elements is shown vs. wavelength. The grating has a square periodic cell with the size of 500 nm, the substrate being a 0.5 mm thick layer of quartz glass.