РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ДИФРАКЦИОННОЙ НАНОФОТОНИКИ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА

Сойфер В.А.
Институт систем обработки изображений РАН
e-mail: `soifer@ssau.ru`

Головашкин Д.Л.
Досколович Л.Л.
Котляр В.В.
Скиданов Р.В.
Харитонов С.И.
Хонина С.Н.

Дифракционная нанофотоника рассматривает взаимодействие света с неоднородностями, размер которых составляет величину от десятка до нескольких десятков нанометров, при этом определяющую роль играет волновая природа света, а математическим аппаратом являются уравнения Максвелла.

Развитие дифракционной нанофотоники связано с созданием новых и совершенствованием известных численных методов решения уравнений Максвелла. В докладе рассмотрены решения задач дифракционной нанофотоники с помощью методов FDTD, FEM, RCWA, асимптотических и основанных на расчете векторных дифракционных интегралов. Предложены примеры их применения.

1. Разностное решение уравнений Максвелла (FDTD-метод)

Математической основой FDTD-метода принято считать разностные схемы Yee [1], в которых каждая сеточная функция (в общем случае таких функций 6 – по три проекции электрической и магнитной компонент поля) выражается через значения на предыдущих временных слоях в явном виде. Основная особенность схемы состоит в раздельном расположении узлов сеточной области для каждой проекции напряженности поля, что повышает порядок аппроксимации разностной схемой исходной краевой задачи до второго.

При исследовании прохождения TE-волны через цилиндрические оптические элементы ограничиваются двумерной задачей, накладывая сеточную область D_h, в узлах которой (t_m, y_j, z_k): $\mathrm{t}_m=\mathrm{mh}_t$, m=0, 1, .., $\mathrm{M=T/h}_t$, $\mathrm{y}_j=\mathrm{jh}_y$, j=0, .., $\mathrm{J=L}_y/\mathrm{h}_y$, $\mathrm{z}_k=\mathrm{kh}_z$, k=0, .., $\mathrm{K=L}_z/\mathrm{h}_z$ определена сеточная проекция электрического поля на ось X - $E^m_{x_{j,k}}$. Сеточная проекция магнитного поля на ось Z - $H^{m+0.5}_{z_{j+0.5,k}}$ определена в узлах ($\mathrm{t}_{m+0.5}$, $\mathrm{y}_{j+0.5}$, z_k): $\mathrm{t}_{m+0.5}=(\mathrm{m}+0.5)\mathrm{h}_t$, m=0, 1, .., M-1, $\mathrm{y}_{j+0.5}=(\mathrm{j}+0.5)\mathrm{h}_y$, j=0, .., J-1, $\mathrm{z}_k=\mathrm{kh}_z$, k=1, .., K-1 и проекция магнитного поля на Y - $H^{m+0.5}_{y_{j,k+0.5}}$ в узлах ($\mathrm{t}_{m+0.5}$, y_j, $\mathrm{z}_{k+0.5}$): $\mathrm{t}_{m+0.5}=(\mathrm{m}+0,5)\mathrm{h}_t$, m=0, 1, .., M-1, $\mathrm{y}_j=\mathrm{jh}_y$, j=1, .., J-1, $\mathrm{z}_{k+0.5}=(\mathrm{k}+0,5)\mathrm{h}_z$, k=0, .., K-1. Тогда схема Yee принимает вид:

$$\mu_0\frac{H^{m+0.5}_{y_{j,k+0.5}}-H^{m-0.5}_{y_{j,k+0.5}}}{h_t}=-\frac{E^m_{x_{j,k+1}}-E^m_{x_{j,k}}}{h_z},\ \mu_0\frac{H^{m+0.5}_{z_{j+0.5,k}}-H^{m-0.5}_{z_{j+0.5,k}}}{h_t}=\frac{E^m_{x_{j+1,k}}-E^m_{x_{j,k}}}{h_y},$$

$\epsilon_0\epsilon_{j,k}\frac{E^{m+1}_{x_{j,k}}-E^{m}_{x_{j,k}}}{h_t}=\frac{H^{m+0.5}_{z_{j+0.5,k}}-H^{m+0.5}_{z_{j-0.5,k}}}{h_y}-\frac{H^{m+0.5}_{y_{j,k+0.5}}-H^{m+0.5}_{y_{j,k-0.5}}}{h_z}$,
где ϵ_0,μ_0 – электрическая и магнитная постоянные, оптический элемент описывается сеточной функцией диэлектрической проницаемости $\epsilon_{j,k}$.

В силу высокой вычислительной сложности FDTD-метода актуальна разработка параллельных алгоритмов для современных вычислительных комплексов [2], в частности, получивших широкую популярность графических процессоров (GPU). Это подтверждается обилием современных коммерческих и свободных программных пакетов (W2405 Agilent FDTD Simulation Element компании Agilent, Concerto компании Cobham Technical Sevices, SEMCAD X OPTICS компании Speag, Xfdtd компании RemCom и FastFDTD компании EM Photonics), предназначенных для расчетов по FDTD. Однако, в упомянутых программных комплексах не преодолевается серьезное ограничение на объем вычислительной области, ограничивающейся памятью видео карты. Разработанный авторами метод декомпозиции области для организации вычислений по FDTD-алгоритму на GPU основан на учете особенностей распространения излучения в слоистых средах и позволяет обойти приведенное ограничение.

В качестве примера рассматривается прохождение короткого импульса лазерного излучения через дифракционный оптический элемент (ДОЭ).

2. Метод конечных элементов (Finite Element Method)

Как известно, полное монохроматическое поле u_Ω(x,y) в области Ω должно удовлетворять уравнению Гельмгольца:

$\nabla\cdot\left[\frac{1}{p(x,y)}\nabla u_\Omega(x,y)\right]+k_0^2 q(x,y)\,u_\Omega(x,y)=f_\Omega$, (1)

где $f_\Omega=jk_0Z_0J_z$, $p(x,y)=\mu_r$, $q(x,y)=\varepsilon_r$ для ТЕ-поляризации и $f_\Omega=-\left[\nabla\times\left(\frac{J_\Omega}{\varepsilon_\Omega}\right)\right]\cdot\mathbf{z}$, $p(x,y)=\varepsilon_r$, $q(x,y)=\mu_r$ для ТМ-поляризации, k_0- волновое число. Константы μ_r и ε_r представляют собой отношение магнитной и диэлектрической проницаемостей среды к аналогичным показателям свободного пространства, т.е. $\mu_r=\mu/\mu_0$ и $\varepsilon_r=\varepsilon/\varepsilon_0$, $Z_0=\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ – импеданс свободного пространства, (J_x, J_y, J_z) – вектор плотности электрического тока источника в области Ω.

Метод Галеркина решения уравнения (1) основан на решении соотношений вида:

$\iint\limits_\Omega\left(-\frac{1}{p}\Delta u_\Omega\gamma-qk^2u_\Omega\gamma-f_\Omega\gamma\right)d\Omega=0$,

где γ - произвольная функция из области Ω. Используя первую формулу Грина, получим:

$\iint\limits_\Omega\left(\frac{1}{p}\Delta u_\Omega(\text{x,y})\,\nabla\gamma-qk^2u_\Omega(\text{x,y})\,\gamma\right)d\Omega-\int\limits_\Gamma\frac{\gamma}{p}\frac{du_\Omega(\text{x,y})}{d\mathbf{n}}d\Gamma=\iint\limits_\Omega f_\Omega d\Omega$ (2)

Подставляя в соотношение (2) вместо произвольной функции γ систему кусочно-линейных базисных функций $\left\{\omega^\Omega_{k,l}(x,y)\right\}^{N_x,N_y}_{k,l=0}$, где N_x,N_y - число узлов сеточного покрытия прямоугольной области Ω по оси x и y соответственно, можно записать систему линейных алгебраических уравнений для поля $\mathbf{u}$ и его нормальных производных на границе $\mathbf{v}$: $\mathbf{Au}+\mathbf{Bv}=\mathbf{Cf}$. Решая указанную систему находим численное решение (1).

Иллюстрируем изложенный метод применением для градиентной линзы Микаэляна (ЛМ) [3], которая собирает все лучи, падающие параллельно оптической оси в точку на оптической оси на противоположной поверхности линзы. Показатель преломления ЛМ меняется от центра к краю линзы по закону: $n(y)=\frac{n_0}{ch\left(\frac{\pi|y|}{2L}\right)}$, (3) где L – фокусное расстояние, n_0 – показатель преломления на оптической оси z.

На рис. 1 представлены инвертированные распределения интенсивности поля дифракции TE- и TM-поляризованных волн на ЛМ размерами 3x3 мкм с распределением показателя преломления согласно (3). Длина волны составляла $\lambda = 1.5$ мкм, длина линзы равна фокусному расстоянию L = 3 мкм. Коэффициент преломления материала линзы $n_0 = 1.5$. Апертура линзы b = 3 мкм.

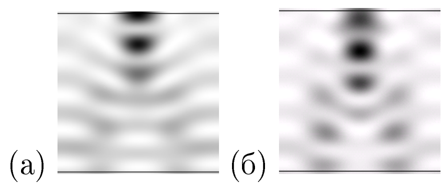


Рис. 1. Распределение интенсивности поля дифракции на ЛМ TE- (а) и TM- поляризованной (б) волн. Ось Z направлена вертикально.

3. Метод Фурье-мод (Rigorous Coupled Wave Analysis)

Метод Фурье-мод (в англоязычной литературе – Rigorous Coupled Wave Analysis) ориентирован на численное решение векторных уравнений Максвелла для случая периодических структур [4,5]. Метод использует два приближения: а) кусочно-постоянную аппроксимацию периодической структуры набором «бинарных слоев» (в каждом слое диэлектрическая (магнитная) проницаемость материала структуры не зависит от переменной z, ось Oz – перпендикулярна структуре); б) представление диэлектрической и магнитной проницаемостей материала в каждом слое отрезками рядов Фурье. В рамках метода электромагнитное поле в областях до и после структурой задается в виде суперпозиции плоских волн (порядков дифракции). В каждом слое структуры поле представляется в виде разложения по Фурье-модам. Вычисление Фурье-мод сводится к задаче на собственные значения. Последовательное наложение условий равенств тангенциальных компонент поля на границах слоев сводит определение амплитуд отраженных и прошедших порядков дифракции к решению системы линейных уравнений.

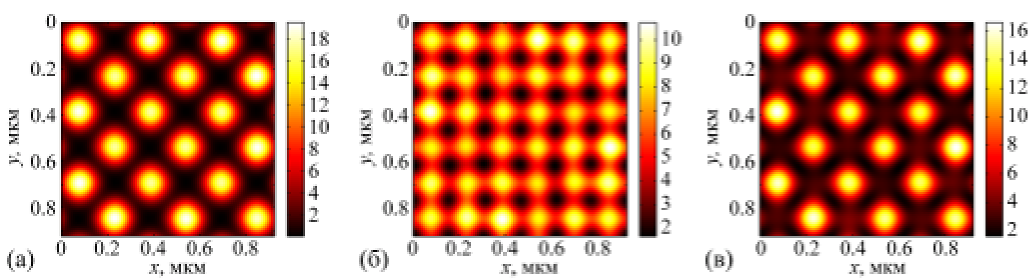


Рис. 2. Интерференционные картины ПЭВ (квадрат модуля электрического поля), формируемые на нижней границе металлического слоя в пределах одного периода решетки (920x920 нм) при длине волны 550 нм для линейной (а), круговой (б) и эллиптической (в) поляризации падающей волны.

Авторами работы создано программное обеспечение, реализующее современный вариант метода и адаптированное к параллельным и кластерным вычислениям. Программное обеспечение предназначено для расчета многопорядковых дифракционных решеток, поляризационных и спектральных фильтров, метаматериалов, периодических структур для формирования интерференционных картин затухающих и поверхностных электромагнитных волн (ПЭВ) с существенно субволновым периодом. В последнем случае структура состоит из диэлектрической дифракционной решетки с металлическим слоем на подложке. Решетка предназначена для возбуждения на нижней поверхности слоя набора ПЭВ, формирующих интерференционную картину. Основной областью применения таких структур является контактная нанолитография. На рис. 2 представлены результаты моделирования интерференционных картин ПЭВ, формируемых на нижней границе металлического слоя (Ag) при различных поляризациях падающей волны. Отметим, что периоды интерференционных картин в 4-6 раз меньше, чем период используемой дифракционной решетки.

4. Асимптотики для задач дифракционной оптики

Рассмотрим решение задачи дифракции на эталонном ДОЭ. Эталонный ДОЭ - это оптический элемент с показателем преломления следующего вида $n\left(x^1,x^2\right)=\Phi\left(g\left(x^1,x^2\right)\right)$, где $\Phi\left(x\right)$ функция с периодом 2π. Функция $g\left(x^1,x^2\right)$ имеет вид

$$g\left(x^1,x^2\right)=g\left(x_0\right)+\left(g_1,\left(x-x_0\right)\right)+0.5\left(x-x_0\right)^T M\left(x_0\right)\left(x-x_0\right),$$

где (,) - означает скалярное произведение 2-х векторов, g_1 - вектор первых производных функции в точке x_0, $M\left(x_0\right)$ - матрица вторых производных (Гесса). С помощью преобразования поворота функцию $g\left(x^1,x^2\right)$ можно привести к виду с разделяющимися переменными

$$g\left(y^1,y^2\right)=g\left(x_0^1,x_0^2\right)+\left(\chi_1 y^1+\chi_2 y^2\right)+0.5\left(\beta_1\left(y^1\right)^2+\beta_2\left(y^2\right)^2\right),\ g_1=Z\chi,\ \chi=\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}.$$

Поле на выходе ДОЭ в в точке $\left(x^1,x^2\right)$ имеет вид

$$\begin{pmatrix}E_{y_1}\\ E_{y_2}\end{pmatrix}=\sum_n\left(\gamma T^{n,1}e_{n1}-T^{n,2}e_{n2}\right)exp\left(ikng_0\right)exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right),$$

$$\gamma=\sqrt{\varepsilon-\left(n\chi_1\right)^2-\left(n\chi_2\right)^2},\ e_{n1}=\begin{pmatrix}n\chi_1\\ n\chi_2\end{pmatrix},\ e_{n2}=\begin{pmatrix}-n\chi_2\\ n\chi_1\end{pmatrix},$$

где r - расстояние от начала координат до точки на ДОЭ. Коэффициенты дифракции вычисляются с учетом дифракции электромагнитного излучения внутри ДОЭ. В отличии от [6] коэффициенты зависят не только от χ_i, которые определяют пространственную частоту локальной дифракционной решетки, но и от коэффициентов β_i при квадратичных членах.

В качестве примера рассмотрено применение асимптотического метода к расчету дифракции линейно поляризованного электромагнитного излучения на бинарном ДОЭ для фокусировки в кольцо.

5. Расчет векторных дифракционных интегралов

Для лазерных пучков, компоненты электрического поля которых представимы в виде следующей суперпозиции вихревых пучков:

$$\mathbf{E}_0\left(x,y\right)=\sum_{l=1}^{L}\mathbf{E}_l\left(r\right)exp\left(im_l\varphi\right),\ (4)$$

разработан быстрый алгоритм расчёта распространения, основанный на разложении по плоским волнам в модификации Мансурипура [7]:

$$\mathbf{E}\left(\rho,\theta,z\right)=k^2\sum_{l=1}^{L} i^{2m_l} exp\left(im_l\theta\right)\int_0^{\sigma_0}\mathbf{Q}_{m_l}\left(k\sigma\rho,\theta\right)\cdot\mathbf{P}_{m_l}\left(\sigma\right) exp\left[ikz\sqrt{1-\sigma^2}\right]\sigma d\sigma, \quad (5)$$

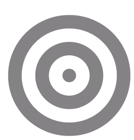
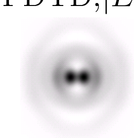
где $\mathbf{P}_m\left(\sigma\right)=\int_0^R \mathbf{E}_m\left(r\right) J_m\left(kr\sigma\right) rdr$,

$$\mathbf{Q}_m\left(s,\theta\right)=\begin{bmatrix} t_s B_m^{ss}\left(s,\theta\right)+t_p\gamma B_m^{cc}\left(s,\theta\right) & B_m^{sc}\left(s,\theta\right)\left(t_p\gamma-t_s\right) \\ B_m^{sc}\left(s,\theta\right)\left(t_p\gamma-t_s\right) & t_s B_m^{cc}\left(s,\theta\right)+t_p\gamma B_m^{ss}\left(s,\theta\right) \\ -t_p\sigma B_m^{c}\left(s,\theta\right) & -t_p\sigma B_m^{s}\left(s,\theta\right) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$B_m^c\left(s,\theta\right)=\frac{i}{2}\left[e^{i\theta}J_{m+1}\left(s\right)-e^{-i\theta}J_{m-1}\left(s\right)\right]$, $B_m^s\left(s,\theta\right)=\frac{1}{2}\left[e^{i\theta}J_{m+1}\left(s\right)+e^{-i\theta}J_{m-1}\left(s\right)\right]$,
$B_m^{sc}\left(s,\theta\right)=\frac{i}{4}\left[e^{i2\theta}J_{m+2}\left(s\right)-e^{-i2\theta}J_{m-2}\left(s\right)\right]$,
$B_m^{cc}\left(s,\theta\right)=\frac{1}{4}\left[2J_m\left(s\right)-e^{i2\theta}J_{m+2}\left(s\right)+e^{-i2\theta}J_{m-2}\left(s\right)\right]$,
$B_m^{ss}\left(s,\theta\right)=\frac{1}{4}\left[2J_m\left(s\right)+e^{i2\theta}J_{m+2}\left(s\right)+e^{-i2\theta}J_{m-2}\left(s\right)\right]$, $\gamma=\sqrt{1-\sigma^2}$, t_s, t_p - коэффициенты пропускания Френеля для TE- и TM-компонент, соответственно.

В качестве примера рассмотрим в Таблице 1 дифракцию ограниченной плоской волны с линейной поляризацией на бинарном микроаксиконе радиусом 2,5λ на расстоянии 0,7λ.

Т а б л и ц а 1.

оптический элемент	расчет по (4)-(6): $\left\|E_x\right\|^2,\left\|E_y\right\|^2,\left\|E_z\right\|^2,\left\|E\right\|^2$	расчет методом FDTD,$\left\|E\right\|^2$
		
FWHM(-)	0,517λ 0,899λ	

Сравнение результатов моделирования дифракции на микроэлементах радиусом в не-сколько длин волн с помощью (4)-(6) и методом FDTD, показывает хорошее согласование при существенно меньших временных затратах.

6. Математическое моделирование оптического захвата и перемещения микрочастиц

В работе [8] на основании решения уравнений Максвелла получены формулы, позволяющие рассматривать силы, действующие на микрочастицу. Для проверки адекватности выведенных формул было промоделировано движение микрочастицы, представляющей собой эллипсоид вращения с полуосями 3,5мкм и 2,2мкм (вращение вокруг большей полуоси) в пучке Бесселя 5-го порядка. Показатель преломления микрочастицы 1,44, мощность пучка Бесселя 200мВт. В качестве среды была выбрана вода при комнатной температуре, для которой хорошо известны параметры вязкости. Для сравнения использовались экспериментальные результаты по круговому движению клетки дрож-жей (такого же размера) в пучке Бесселя 5-го порядка, той же мощности. Предполагается что массы реальной частицы (клетки дрожжей) и частицы в математической модели примерно одинаковы. Также не учитывалась сила сухого трения. При моделировании движения микрочастицы в световом пучке решалась система уравнений движения.

Результаты моделирования и натурного эксперимента по фазам движения через одинаковые промежутки времени приведены на рис.3 и находятся в хорошем соответствии.

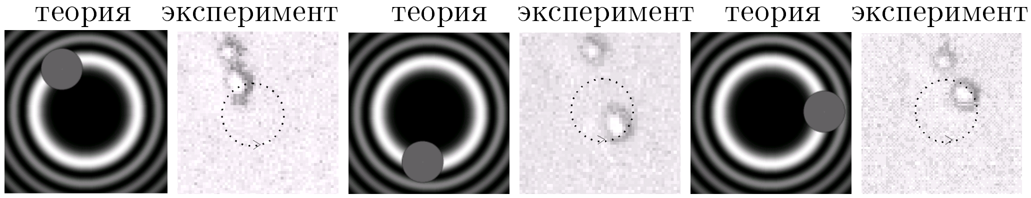


Рис. 3. Сравнение результатов моделирования и эксперимента.

Заключение

Уравнения Максвелла адекватно описывают широкий круг современных задач дифракционной нанофотоники: распространение лазерного излучения через фокусирующие ДОЭ, фотонно-кристаллические линзы и волноводы, плазмонные структуры, оптический захват и механическое перемещение кластеров наночастиц. Многообразие задач порождает и многообразие методов решения уравнений Максвелла: FDTD, RCWA, FEM, асимптотический подход и расчет векторных дифракционных интегралов. Доклад обобщает опыт авторов в расчете устройств дифракционной оптики и нанофотоники.

Список литературы

[1] Yee K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antennas Propag. 1966. AP-14. P. 302–307.

[2] Yu W., Mittra R., Su T., Liu Y., Yang H. Parallel Finite-Difference Time-Domain Method. Boston: Arthech House Publishers, 2006. 272 p.

[3] Микаэлян А. Л. Применение свойств среды для фокусирования волн // Доклады академии наук СССР. 1951. Вып. 81. С. 569-571.

[4] Moharam M.G., Pommet D.A., Grann E.B., Gaylord T.K. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach // JOSA A, 1995. N12(5). pp. 1077-1086.

[5] Lifeng Li New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings // JOSA A. 1997. Vol.14, N10., pp. 2758-2767.

[6] Грейсух Г.И., Ефименко И.М., Степанов С.А. Оптика градиентных и дифракционных элементов. М.: Радио и связь, 1990. 136 с.

[7] Mansuripur, M. Certain computational aspects of vector diffraction problems // J. Opt. Soc. Am. A. 1989. Vol. 6, No. 5. pp. 786-805.

[8] Скиданов Р.В. Расчет силы взаимодействия светового пучка с микрочастицами произвольной формы// Компьютерная оптика.2005. Вып. 28. С.18-21.