

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра математики

На правах рукописи

Домбровская Жанна Олеговна

**Особенности распространения электромагнитных волн через
диэлектрические метапленки и слоистые среды**

01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики
05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф. Боголюбов А.Н.

Москва – 2019

Посвящается моей семье

Введение	6
1 Актуальность	6
2 Цель и задачи	7
3 Научная новизна	8
4 Положения, выносимые на защиту	9
5 Теоретическая и прикладная значимость	9
6 Достоверность результатов	11
7 Методы и методология	11
8 Личный вклад автора	12
9 Структура и объем работы	12
10 Публикации	12
11 Апробация результатов	16
12 Соответствие работы паспортам специальности	18
ГЛАВА 1. Моделирование распространения излучения через структуры на основе метаповерхностей	19
1.1 Проблема	19
1.2 Метаповерхности и методы их моделирования	20
1.2.1 Метаповерхности	20
1.2.2 Задачи оптимизации резонансных структур	21
1.2.3 Методы решения прямой задачи	22
1.3 Численное моделирование методом FDTD	24
1.3.1 Схема Йе и ее свойства	24
1.3.2 Задание источника излучения и граничных условий	26
1.3.3 Слоистые среды	29
1.3.4 Жесткие задачи электродинамики	31
1.4 Физические модели метапленок из сферических частиц	32
1.4.1 Рассеяние света сферическими частицами (теория Ми)	34

1.4.2	Эффективная граница раздела (модель Кустера-Холловея)	38
1.4.3	Решетка взаимодействующих индуцированных диполей (модель Евлюхина)	40
1.4.4	Модель Симовского.....	42
1.4.5	Модель Бабичевой	43
1.5	Оптимизация параметров метапленок.....	44
1.5.1	Многоэкстремальность	44
1.5.2	Методы минимизации	46
ГЛАВА 2. Моделирование слоистых сред методом FDTD		48
2.1	Распространение электромагнитного импульса через диэлектрическую среду	48
2.1.1	Постановка одномерной задачи	48
2.1.2	Разностная схема Йе	49
2.1.3	Немонотонность схемы Йе	51
2.2	Алгоритм повышения точности вычислений	52
2.2.1	Процедура сгущения сеток	52
2.2.2	Рекуррентное уточнение решения	53
2.3	Тестовые расчеты	54
2.3.1	Физическая постановка задачи	54
2.3.2	Однородная среда	55
2.3.3	Слоистая среда	57
2.3.4	Апостериорное исследование	59
2.4	Жесткие задачи электродинамики	60
2.4.1	Слоистые диэлектрические среды	60
2.4.2	Границы раздела «диэлектрик-металл»	63
2.4.3	Обобщения	64
	Основные результаты главы.....	65
ГЛАВА 3. Моделирование метапленок из сферических частиц		67
3.1	Применимость и точность известных физических моделей	68

3.1.1 Модель Евлюхина	68
3.1.2 Модель Кустера-Холловея	75
3.2 Замена метапленки однородным слоем	77
3.2.1 Замыкание системы уравнений	79
3.2.2 Пример	80
Основные результаты главы	82
ГЛАВА 4. Оптимизация метапленки на подложке	83
4.1. Постановка задачи	83
4.1.1 Ограничения на геометрические параметры	84
4.1.2 Безотражательное покрытие	85
4.1.3 Прямая задача	86
4.2 Штрафная функция	87
4.3 Процедура оптимизации	90
4.3.1 Сходимость итераций	91
4.3.2 Влияние штрафа	93
4.3.3 Выбор степени штрафного слагаемого	95
4.4 Результаты оптимизации	97
4.4.1 Модифицированная модель Симовского	97
4.4.2 Модель Бабичевой	98
4.4.3 Диапазон длин волн	101
4.4.4 Сравнение с тонкой пленкой	102
Основные результаты главы	103
Заключение	105
Список литературы	107

Введение

1 Цель и задачи

Целью диссертационной работы является разработка эффективных и высоконадежных алгоритмов моделирования устройств интегральной фотоники. Это требуется для исследования новых эффектов в таких устройствах, а также оптимизации структур, которые могут использоваться в том числе для разработки приборов, основанных на новых физических принципах.

В ходе работы были поставлены и решены следующие задачи.

1. Разработать процедуру, позволяющую проводить расчеты неоднородных и слоистых сред методом конечных разностей во временной области (FDTD) с высокой гарантированной точностью $\sim 0.1-0.01\%$ (чтобы обеспечить такую точность уже на умеренных сетках, требуются численные алгоритмы с порядком точности не меньше второго). Построить апостериорную оценку фактической точности для этого метода с помощью процедуры сгущения сеток и метода Ричардсона. Исследовать схему Йе на монотонность. Провести тестовые расчеты задачи о прохождении волны через плоскую диэлектрическую границу раздела.
2. Разработать критерий применимости дипольного приближения для моделирования прозрачного диэлектрического шара с высоким постоянным показателем преломления. Провести критический анализ и исследовать, насколько точны существующие физические модели метапленки из сферических частиц в однородной непоглощающей среде.
3. Сформулировать постановку задачи о безотражательном покрытии на основе метапленки с учетом ограничений на допустимое множество ее геометрических параметров. Разработать подход, повышающий надежность алгоритма минимизации отражения от структуры.

4. Спроектировать безотражательное покрытие на основе метапленки из сферических частиц, расположенных на полубесконечной диэлектрической подложке, в дальноволновом среднем ИК-диапазоне. В качестве материалов метаатомов и подложки использовать теллурид свинца и германий, соответственно. Сравнить полученный спектр отражения со спектром однослойного тонкопленочного покрытия из «Иртрана»-2 на такой же подложке.
5. Разработать модель, позволяющую заменить метапленку однородным тонким слоем для диапазона длин волн, расположенного далеко от резонанса.

2 Актуальность

Современный эксперимент становится все более технологичным и изучает все более сложные эффекты. Для этого требуются все более чувствительные детектирующие приборы. Например, для спектроскопических экспериментов требуются линзы со сверхвысоким разрешением, сверхточные спектрографы (особенно с временной разверткой), новые фазовые и амплитудные модуляторы. Востребована разработка новых просветляющих покрытий, поглотителей, зеркал. Перспективной является разработка приборов, основанных на новых физических принципах, в частности, с использованием метаматериалов.

Наиболее просты в изготовлении и перспективны двумерные метаматериалы (метаповерхности). Для указанных приложений требуется разработка метаповерхностей с заданными свойствами (просветление, максимальное поглощение, полное отражение и т.д.), то есть решение обратной задачи. Последняя требует многократного решения прямой задачи, то есть расчета отклика метаматериала с заданными свойствами.

Перечисленные задачи достаточно трудны, их не удастся решить стандартными методами. Требуется разработка специализированных алгоритмов (как численных, так и аналитических). Поэтому построение и исследование таких алгоритмов является актуальным.

3 Научная новизна

Для метода конечных разностей во временной области предложен подход, позволяющий кардинально уменьшить погрешность расчета (до $10^6 - 10^9$ раз в зависимости от задачи) и многократно повысить порядок точности (до 4 – 6). К задачам электродинамики этот подход ранее не применялся. Было проведено исследование свойств схемы Йе и показано, что она является немонотонной. Это особенно проявляется при расчете слоистых сред. Впервые показано, что и в этом случае рекуррентное уточнение решения позволяет значительно уменьшить немонотонность, многократно повысить порядок точности и значительно уменьшить количественную погрешность (количественные параметры этого улучшения приведены выше).

Впервые получены границы применимости дипольного приближения для оптически прозрачного диэлектрического шара. Положения электрического и магнитного дипольных резонансов описываются соотношениями между длиной падающей волны, радиусом шара и его показателем преломления.

Предложена оригинальная модель описания метапленки при помощи эквивалентного однородного слоя. Рассмотрены границы ее применимости. Показано, что толщина этого слоя является частотно зависимой. Проведен ряд вспомогательных исследований применимости и точности известных моделей метапленки.

Поставлена и решена задача проектирования безотражательного покрытия на основе метапленки из сферических частиц на подложке. Впервые корректно учтены ограничения на геометрические параметры, связанные с процессом изготовления структуры, применимостью физической модели и др. Учет указанных ограничений приводит к задаче на условный экстремум, которая методом штрафных функций сводится к задаче на безусловный экстремум. Предложена новая штрафная функция, учитывающая специфику задачи оптимизации диэлектрических метаповерхностей. Эта функция является

бесконечно гладкой, и поэтому допускает использование алгоритмов оптимизации высокого порядка с разностным вычислением градиента.

Проведена оптимизация безотражательного покрытия на основе метаповерхности из сферических частиц PbTe на германиевой подложке. Получены оптимальные геометрические параметры фильтрующего элемента с резонансной передаточной функцией.

4 Положения, выносимые на защиту

1. Применение рекуррентных уточнений по методу Рундсона и адаптивных квазиравномерных сеток позволяет значительно уменьшать немоноктонность схемы Йе и повышать точность расчета по этой схеме на 6-9 порядков.
2. Учет положения дипольных резонансов, естественных ограничений на радиус и период расположения метаатомов и границ применимости аналитических моделей позволяет построить алгоритмы проектирования метапленок, обладающие повышенной надежностью.
3. Метапленка из сферических частиц PbTe на подложке из Ge является фильтрующим элементом с резонансной передаточной функцией при оптимальном выборе параметров, обеспечивающем практически нулевое отражение на фиксированной длине волны из диапазона 9-11 мкм.
4. В нерезонансном случае изотропная метапленка оптически эквивалентна однородному тонкому слою, толщина которого монотонно возрастает с увеличением длины волны.

5 Теоретическая и прикладная значимость

Методы и подходы, предложенные в диссертации, могут использоваться при разработке устройств интегральной фотоники с использованием слоистых сред и метаповерхностей и исследовании новых физических эффектов в таких устройствах. Такие устройства могут использоваться при разработке приборов, основанных на новых физических принципах.

Предложенный в диссертации алгоритм для повышения эффективности метода FDTD позволяет проводить расчеты слоистых сред с апостериорным контролем погрешности и получать высокую точность (не менее 3 – 4 верных знаков уже на умеренных сетках с числом узлов 300-500). Предложенные подходы позволили уменьшить фактическую погрешность расчета до 10^6 – 10^9 раз (в зависимости от решаемой задачи) по сравнению с исходной схемой Йе. Метод FDTD является чрезвычайно популярным инструментом численного расчета задач электродинамики. Поэтому кардинальное улучшение точности этого метода, полученное в диссертации, может быть непосредственно использовано при прямом численном моделировании диэлектрических структур прямоугольной геометрии.

Разработанный подход к оптимизации полностью диэлектрических метаповерхностей на подложке может быть использован при создании метаповерхностей с заданными спектральными свойствами (просветляющих и безотражательных покрытий, зеркал, фазовых и амплитудных решеток и т.д.). Такие метаповерхности непосредственно применяются как конструкционные элементы в приборах нового поколения. При этом использование аналитических формул для решения прямой задачи позволяет кардинально уменьшить трудоемкость расчетов, а штрафная функция, предложенная в диссертации, значительно улучшает надежность работы алгоритмов оптимизации.

Данный подход применен к оптимизации безотражательного покрытия на основе метаповерхности из сферических частиц PbTe на германиевой подложке. Получены оптимальные геометрические параметры для фильтрующего элемента с резонансной передаточной функцией. Этот результат может непосредственно использоваться для разработки усовершенствованных балометрических матриц тепловизоров, ИК-телескопов и т.д.

Большинство аналитических моделей димеров, периодических метаплаенок и более сложных структур построены в рамках дипольного приближения. Простой и конструктивный критерий применимости последнего, предложенный в

диссертации, может эффективно быть использован для верификации этих моделей и определения границ их применимости.

6 Достоверность результатов

Достоверность проведенных численных расчетов гарантируется тем, что все они выполнены на многократно сгущающихся сетках с апостериорной оценкой точности по Ричардсону и контролем фактического порядка точности. Фундаментальные теоремы теории разностных схем гарантируют, что в ходе такого расчета решение может быть найдено с точностью вплоть до ошибок компьютерного округления.

Достоверность использованных моделей обеспечивается сопоставлением с наилучшими известными моделями и тщательным исследованием частных случаев. При этом контролируется выполнение ограничений на параметры задачи, которые обусловлены границами применимости дипольного приближения, лежащего в основе всех этих моделей. Полученные результаты для положения дипольных резонансов согласуются с ранее известными экспериментальными данными.

7 Методология и методы исследования

Основным методом исследования, проведенного в данной диссертационной работе, было математическое моделирование. Использовались аналитический и численный подходы. При разработке аналитических моделей использовались традиционные методы теоретической физики. При разработке и исследовании математических алгоритмов использовались стандартные подходы вычислительной математики. Большое внимание уделялось обоснованию сходимости методом сгущения сеток и построению оценок фактической точности. Все полученные результаты могут быть использованы как методы разработки усовершенствованной экспериментальной техники, основанной на новых физических принципах.

8 Личный вклад автора

Все результаты получены лично. В частности, диссертант самостоятельно разработала подход, существенно повышающий надежность алгоритма оптимизации метаповерхности, а также построила модель замены метапленки эффективным однородным слоем. Кроме того, диссертанту принадлежит разработка деталей алгоритмов, их программная реализация, проведение вычислительных экспериментов и расчеты конкретных задач. Руководителю принадлежит общая постановка задачи и обсуждение получаемых в процессе работы над диссертацией результатов.

9 Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации составляет 116 страниц, в том числе 30 рисунков и 3 таблицы. Список литературы включает 116 пунктов на 10 страницах.

10 Публикации

Материалы диссертации опубликованы в 10 печатных работах в журналах, индексируемых RSCI, Scopus и Web of Science. Они удовлетворяют Положению о присуждении ученых степеней МГУ имени М.В.Ломоносова. Также по теме диссертации опубликовано 9 печатных работ в других изданиях. Перечень наиболее важных работ приведен ниже.

Публикации в изданиях, индексируемых RSCI, Web of Science, Scopus

1. Dombrovskaya Zh. O., Zhuravlev A. V. Investigation of the possibility of metafilm modeling as a conventional thin film // Appl. Phys. A. Mater. – 2017. – V. 123, No 1. – P. 27. – 5 p.
DOI: 10.1007/s00339-016-0642-2

2. Dombrovskaya Zh. O., Zhuravlev A. V., Belokopytov G. V., Bogolyubov A. N. Phonon-polariton meta-atoms for far infrared range // *Physics of Wave Phenomena*. – 2016. – V. 24, No 2. – P. 96-102.
DOI: 10.3103/S1541308X16020023
3. Домбровская Ж. О., Боголюбов А. Н. Повышение точности одномерной схемы Ёе методом сгущения сеток // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. – 2017. – Т. 81, № 1. – С. 117-121.
DOI: 10.7868/S0367676517010112
[Dombrovskaya Zh.O., Bogolyubov A.N. Accuracy improvement of 1D Yee's scheme by mesh thickening method // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 81:1 (2017), 106–109.
DOI: 10.3103/S1062873817010117]
4. Рыбина А. В., Домбровская Ж. О., Боголюбов А. Н. Дипольный отклик диэлектрического шара // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. – 2018. – Т. 82, № 11. – С. 1516-1519.
DOI: 10.1134/S0367676518110200
[Rybina A.V., Dombrovskaya Zh.O., Bogolyubov A.N. Dipole response of a dielectric sphere // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 82:11 (2018), 1379.
DOI: 10.3103/S1062873818110205]
5. Домбровская Ж. О., Журавлев А. В., Белокопытов Г. В., Боголюбов А. Н. Обратная задача восстановления характеристик мета-атома по измеренному прохождению и отражению метапленки // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. – 2015. – Т. 79, № 12. – С. 1709-1711.
DOI: 10.7868/S0367676515120157
[Dombrovskaya Zh.O., Zhuravlev A.V., Belokopytov G.V., Bogolyubov A.N. Inverse problem for recovering of meta-atom characteristics by transmittance and reflectance of a metafilm // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 79:12 (2015), 1496–1498.

DOI: 10.3103/S1062873815120151]

6. Боголюбов А. Н., Белокопытов Г. В., Домбровская Ж. О. Моделирование спектральных зависимостей для двумерных фотонно-кристаллических систем // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. – 2013. – № 5. – С. 8-13.

<http://vnu.phys.msu.ru/file/2013/5/13-5-08.pdf>

[Bogolubov A.N., Belokopytov G.V., Dombrovskaya Z.O. Modeling of spectral dependences for 2D photonic crystal waveguide systems // Moscow University Physics Bulletin. **68**:5 (2013), 344–350.

DOI: 10.3103/S0027134913050044]

7. Домбровская Ж. О. Проектирование изотропной полностью диэлектрической метаповерхности на подложке // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии. (Электронный научный журнал). – 2017. – Т. 18, № 4. – С. 455-462.

http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2017/v18r438.html

8. Домбровская Ж. О. Метод конечных разностей во временной области для кусочно-однородных диэлектрических сред // Моделирование и анализ информационных систем. – 2016. – Т. 23, № 5. – С. 539-547.

DOI: 10.18255/1818-1015-2016-5-539-547

9. Домбровская Ж.О., Журавлев А.В. Моделирование изотропной метапленки с помощью тонкой пленки с частотно зависимой толщиной // Ядерная физика и инжиниринг. – 2017. – Т. 8, № 1. – С. 96-100.

10. Белокопытов Г. В., Боголюбов А. Н., Домбровская Ж. О., Терехов Ю. Е. Расчет электродинамических характеристик метапленки. Экспериментально-аналитический подход // Физические основы приборостроения. – 2015. – Т. 4, № 1. – С. 5-11.

http://jfop.ru/archive_issues/43-fizicheskie-osnovy-priborostroeniya-2014-t4-1.html

Другие публикации

11. Dombrovskaya Zh. O., Rybina A. V., Belov A. A., Bogolyubov A. N. All-dielectric metasurface filters for mid-infrared range // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – V. 1092. – P. 012023. – 4 p.
DOI: 10.1088/1742-6596/1092/1/012023
12. Домбровская Ж. О., Боголюбов А. Н. Немонотонность схемы FDTD при моделировании границ раздела между диэлектриками // *Ученые записки физического факультета Московского Университета*. – 2017. – № 4. – С. 1740302. – 5 с.
<http://uzmu.phys.msu.ru/file/2017/4/1740302.pdf>
13. Dombrovskaya Zh. O., Zhuravlev A. V. Is it possible to replace an isotropic metafilm by a homogeneous layer? // *11th International Congress on Engineered Materials Platforms for Novel Wave Phenomena (Metamaterials)*. – Marseille, France, 28-31 August, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 85-87.
DOI: 10.1109/MetaMaterials.2017.8107847
14. Dombrovskaya Zh. O., Zhuravlev A. V. Possibility of isotropic metafilm representation by an equivalent homogeneous layer // *Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS)*. – St. Petersburg, Russia, 22-25 May, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 3365-3367.
DOI: 10.1109/PIERS.2017.8262338
15. Dombrovskaya Zh. O., Bogolyubov A. N. High order FDTD computations using mesh thickening // *Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS)*. – St. Petersburg, Russia, 22-25 May, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 453-455.
DOI: 10.1109/PIERS.2017.8261783
16. Dombrovskaya Zh. O., Bogolyubov A. N. Effective FDTD modeling of microwave ceramics // *Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS)*. – St. Petersburg, Russia, 22-25 May, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 2732-2733.
DOI: 10.1109/PIERS.2017.8262216

17. Dombrovskaya Zh. O. Algorithm for bianisotropic metafilm design problem // 9th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials). – Oxford, UK, 7-10 September, 2015. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 58-60.
DOI: 10.1109/MetaMaterials.2015.7342521
18. Домбровская Ж.О., Боголюбов А.Н. Анализ точности и сходимости одномерной схемы Йе методом сгущения сеток // Ученые записки физического факультета Московского Университета. – 2016. – № 3. – С. 163112 – 3 с.
<http://uzmu.phys.msu.ru/abstract/2016/3/163112/>
19. Dombrovskaya Z. Research of spectral characteristics for photonic crystals with fractal defects // 6th International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Submillimeter Waves (MSMW). – Kharkov, Ukraine, 23-28 June, 2013. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 611-613.
DOI: 10.1109/MSMW.2013.6622158

11 Апробация результатов

Основные результаты диссертации докладывались на 3 научных семинарах физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова:

- 1) семинар «Математические методы в естественных науках» кафедры математики (2018, 2017, 2016);
- 2) семинар лаборатории нанооптики и метаматериалов кафедры квантовой электроники (2017);
- 3) семинар лаборатории колебательных систем с нелинейными диэлектриками кафедры физики колебаний (2018, 2013);

и на 28 научных конференциях. Ниже перечислены наиболее важные из них.

- Международный конгресс «Artificial Materials for Novel Wave Phenomena – Metamaterials» (2017 Марсель, Франция; 2015 Оксфорд, Великобритания).
- Международная конференция «Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics META» (2016 Малага, Испания).
- Международная конференция «International conference on metamaterials and nanophotonics METANANO» (2018 Сочи, Россия)
- Международный симпозиум «Progress In Electromagnetics Research Symposium – PIERS» (2017 Санкт-Петербург, Россия).
- Международная конференция «International Conference Mathematical Modeling in Applied Science – ICMMAS» (2017 Санкт-Петербург, Россия).
- Международная конференция «Days on Diffraction» (2015 Санкт-Петербург, Россия).
- Международные конференции «Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации – ARMIMP» (2015, 2014, 2012 Суздаль, Россия).
- Международная школа-конференция «Математика, физика, информатика и их приложения в науке и образовании» (2016 Москва, Россия).
- Международные конференции «Ломоносов» (2018, 2017, 2013, 2012 Москва, Россия).
- Всероссийские школы-семинары «Волны» имени проф. А.П. Сухорукова (2018, 2017, 2016, 2015, 2013 Москва, Россия).
- Симпозиум «Numerical Methods for Problems with Layer Phenomena» (2016 Москва, Россия).

- Конференции «Ломоносовские чтения» (2018, 2017, 2016 Москва, Россия).

12. Соответствие работы паспортам специальности

В части построения и исследования моделей физических явлений и процессов, возникающих при распространении электромагнитных волн через границы раздела сред и метаповерхности, исследования возможности применения построенных моделей к разработке новой экспериментальной техники диссертация соответствует паспорту специальности 01.04.01 – «Приборы и методы экспериментальной физики» (пункты 2-4 Положений, выносимых на защиту).

В части построения и исследования усовершенствованных математических методов содержание диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (пункт 1 и частично пункт 2 Положений, выносимых на защиту).

ГЛАВА 1 Моделирование распространения излучения через структуры на основе метаповерхностей

1.1 Проблема

Современный эксперимент становится все более технологичным и изучает все более сложные эффекты. Для этого требуются все более чувствительные детектирующие приборы.

Например, в спектроскопических экспериментах нужны линзы со сверхвысоким разрешением, сверхточные спектрографы (особенно со временной разверткой), новые фазовые и амплитудные модуляторы и т.д. Для повышения точности таких экспериментов широко применяют просветление оптических систем, для этого на поверхности линз наносят различные дополнительные покрытия. Для разработки лазеров (особенно рентгеновских) требуются зеркала, способные обеспечить практически полное отражение в заданном диапазоне. Существующие спектрометрические приборы имеют достаточно хорошую разрешающую способность (до 10000), однако требования к точности такого оборудования быстро возрастают.

Возможности традиционных детекторов ограничены, поэтому перспективной выглядит разработка приборов, основанных на новых физических принципах. Одним из актуальных направлений является использование метаматериалов [1-5]. Наиболее просты в изготовлении и перспективны двумерные метаматериалы (метаповерхности). Они уже сейчас используются для улучшения разнообразных измерительных устройств (биосенсоров, газоанализаторов, спектрометров), линз со сверхразрешением, светодиодов,

голограмм нового поколения и др. Метаматериалы широко используются при разработке технических систем: например, наноразмерных антенн, безотражательных покрытий, поглотителей, зеркал, фазовых и амплитудных масок и др.

Для указанных приложений актуальна разработка метаматериалов с заданными свойствами (просветление, максимальное поглощение, полное отражение и т.д.), то есть решение обратной задачи. Последняя требует многократного решения прямой задачи, то есть расчета электродинамического отклика метаматериала с заданными свойствами. Перечисленные задачи достаточно трудны, их не удастся решить стандартными методами. Требуется разработка специализированных алгоритмов (как численных, так и аналитических). Дадим обзор существующих методов моделирования метаповерхностей.

1.2 Метаповерхности и методы их моделирования

1.2.1 Метаповерхности

Метаматериалами называют искусственно структурированные композитные материалы. В это понятие включают большое количество различных физических объектов. Например, это структуры, образованные из резонансных частиц, размер которых меньше либо сопоставим с длиной волны падающего излучения. К метаматериалам относятся структуры, в которых между частицами возникает сильное электромагнитное взаимодействие. Это приводит к большому коллективному отклику [6].

В настоящее время наиболее широко применяются двумерные метаматериалы (метаповерхности), так как они значительно проще в изготовлении, чем трехмерные. Метаповерхность представляет собой периодический массив (слой) частиц, расположенных на подложке или в некоторой среде. Если показатель преломления частиц больше, чем у

окружающей среды, то такая метаповерхность называется метапленкой; в противном случае – метаэкраном [7]. Частицы, составляющие метаматериал, называются метаатомами. Они могут иметь форму сферы, диска, призмы, пирамиды и т.п.

Первоначально рассматривали структуры, составленные из металлических частиц [8-11], так как металлы обладают отрицательной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon < 0$. Однако такие частицы нагреваются под действием электромагнитного излучения, возникают большие потери энергии [12, 13].

В настоящее время особое внимание уделяется исследованию диэлектрических структур [4, 14-16]. Их принципиальным преимуществом является отсутствие джоулевых потерь. Другим важным эффектом является появление сильного магнитного отклика [17, 18], сопоставимого по величине с электрическим. Такой магнитный резонанс возникает, если структура изготовлена из вещества с большим показателем преломления, и метаатомы имеют размеры, близкие к длине волны. Таким образом, фотоника диэлектриков с высоким показателем преломления вызывает большой интерес.

Между метаатомами и подложкой возникают интерференционные эффекты. Они могут приводить к полной или частичной компенсации отражения от структуры на одной длине волны или в диапазоне длин волн [19, 20]. Кроме того, можно добиться усиления или, напротив, почти полного поглощения падающего излучения. Поэтому использование метаматериалов для улучшения различных оптических приборов является перспективным направлением.

1.2.2 Задачи оптимизации резонансных структур

Проектирование функциональных покрытий на основе метаповерхностей сводится к определению таких параметров структуры, которые обеспечивают заданные спектральные свойства метаповерхности. Это обратная задача. Решение обратных задач происходит по следующей схеме [21]. Выдвигают гипотезу о значениях параметров структуры и при этих параметрах рассчитывают ее отклик.

Если он не соответствует требуемому, то параметры структуры направленно изменяют. Такая процедура повторяется многократно.

Поэтому актуальна разработка как алгоритмов непосредственно проектирования, так и эффективных методов расчетов прямой задачи. Последние могут быть либо численными, либо аналитическими.

Задача оптимизации геометрических параметров структуры является экстремальной (например, требуется найти минимум либо максимум отражения). Однако отклик метаповерхности на подложке имеет резонансный характер, поэтому экстремумов может быть несколько, то есть решение не единственно. Для устранения нефизичных ответов необходимо сформулировать корректную постановку, основанную на подробном анализе физической модели метапленки. Это сводится к введению ограничений на множество допустимых значений параметров и постановке задачи на условный экстремум.

Кроме того, предварительный анализ зависимости отклика метапленки от варьируемых параметров показывает, что имеются участки крайне медленного изменения (практически горизонтальные плато), на которых стандартные методы минимизации нередко дают сбои. Актуальна разработка подходов, позволяющих сделать решение экстремальной задачи единственным и улучшить надёжность работы алгоритмов оптимизации.

1.2.3 Методы решения прямой задачи

Аналитические методы подразумевают использование некоторой физической модели. Они относятся к сверхбыстрым, так как решение сводится к расчету по явной формуле. Физические модели позволяют получить достаточно много информации о качественном (и нередко количественном) поведении решения. Эта информация оказывается исключительно полезной при уточнении деталей численных методов и анализе полученных результатов. Однако все такие модели являются приближенными и имеют определенные границы

применимости. Так, модели метапленки на подложке, которая обеспечивала бы физическую точность не хуже 1%, на данный момент не предложено.

Большинство моделей метаповерхностей построено в рамках дипольного приближения, то есть каждый метаатом заменяется парой из электрического и магнитного диполей (например, [22-25]). Встает вопрос о правомерности и точности такой замены. Кроме того, для учета переотражений от подложки, на которой располагается структура, изотропная метапленка заменяется эквивалентным однородным тонким слоем, т.е. фиктивной границей раздела. Однако даже в нерезонансном случае возможность такого перехода была показана лишь при фиксированной длине волны [26]. Для диапазона длин волн этот вопрос остается открытым.

Численные методы более универсальны, чем аналитические, но одновременно значительно более трудоемки. Они основаны на той или иной аппроксимации первопринципных уравнений (в данном случае таковыми являются уравнения Максвелла) и дальнейшем решении полученной алгебраической системы. Наиболее популярен метод конечных разностей во временной области (FDTD – finite-difference time-domain) [27]. Разработано большое количество явных и неявных схем [28, 29]. Наиболее употребительна явная схема Йе [30], лежащая в основе многих коммерческих пакетов. По существу, это схема «с перешагиванием» («leap-frog»). Ее основным достоинством является малая трудоёмкость.

Однако шаблон схемы Йе занимает более одной ячейки сетки (то есть эта схема не является компактной). Поэтому для нее особую трудность представляют задачи в слоистых средах, когда параметры среды являются разрывными. Если разрывна только диэлектрическая проницаемость ε , а магнитная восприимчивость μ непрерывна (либо наоборот, непрерывна ε , а μ испытывает разрыв), то расчет провести удастся, но на границах раздела сред точность расчетов сильно снижается. Это неоднократно отмечалось в литературе [31, 32].

До настоящего момента оценка точности расчетов методом FDTD производилась лишь для задач, для которых известно точное решение (например, [33]). В прикладных задачах, где точное решение неизвестно, расчеты дают информацию о качественном поведении решения, однако получить количественную оценку точности не удастся.

При проведении расчетов на сгущающихся сетках конечно-разностные методы позволяют получить решение с точностью вплоть до ошибок округления компьютера, которая определяется разрядностью чисел и обусловленностью задачи. Для погрешности численного расчета можно построить асимптотически точную оценку методом Ричардсона [34], которая имеет строгое математическое обоснование [35]. Однако в электродинамических задачах метод сгущения сеток ранее не применялся. Актуальна разработка подходов для расчетов слоистых диэлектрических сред методом FDTD, позволяющих проводить вычисления с высокой гарантированной точностью.

1.3 Численное моделирование методом FDTD

Для решения нестационарных уравнений Максвелла широко применяется метод конечных разностей во временной области (FDTD). Данный метод позволяет моделировать объекты со сложной геометрией из различных материалов: диэлектрических, магнитных, дисперсных, нелинейных, анизотропных. Поэтому он является одним из популярнейших численных алгоритмов для решения нестационарных задач фотоники и плазмоники. Наиболее употребительна явная схема Йе. Она реализована в большом количестве программных комплексов (как коммерческих Lumerical [36], OptiWave [37] и др., так и свободно распространяющихся, например, Meep [38]).

1.3.1 Схема Йе и ее свойства

В основе метода FDTD лежит дискретизация системы вихревых уравнений Максвелла для компонент напряженностей электрического $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и магнитного $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ полей

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot}\mathbf{H} = \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} \quad (1.1)$$

по конечно-разностной схеме Йе. Здесь $\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ – векторы электрической и магнитной индукции, плотность сторонних токов $\mathbf{J} = \mathbf{J}(t)$ считается заданной величиной в некоторой точке рассматриваемой области.

Согласно оригинальному алгоритму Йе, используются три сетки: две пространственные для электрического $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и магнитного $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ полей и одна общая по времени t . Поля смещены по отношению друг к другу на половину шага дискретизации по пространству и по времени. Поэтому схема Йе является схемой «с перешагиванием». Сетки обычно выбираются равномерными с мелким шагом или кусочно-равномерными.

В случае однородной среды схема Йе обладает вторым порядком аппроксимации по пространству и по времени [39, 40]. Она явная и поэтому является условно устойчивой. Схема сходится со вторым теоретическим порядком точности $p_{\text{th}} = 2$ на прямоугольных равномерных и неравномерных сетках при выполнении условия Куранта [41]

$$c_0\tau \sqrt{\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2}} \leq 1, \quad (1.2)$$

где τ – шаг сетки по времени, h_x , h_y и h_z – шаги по пространству в направлениях x , y и z соответственно, $c_0 = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ – скорость распространения света в вакууме, ε_0 и μ_0 – диэлектрическая проницаемость и магнитная восприимчивость вакуума.

Отметим, что случай равенства в (1.2) пригоден только для задач, в которых имеется только одно пространственное направление. Для двумерных и трехмерных задач схема становится неустойчивой из-за анизотропии численной дисперсии, и рекомендуется брать коэффициент 0.5, как это делается, например, в [42]. Анизотропия проявляется как результат того, что излучение, рассеянное под различными углами, распространяется с разной скоростью. Это принципиальный дефект, присущий всем методам данного класса.

Одним из способов уменьшения численной дисперсии, возникающей в двумерных и трехмерных задачах, является повышение порядка точности алгоритма. В работах [43, 44] был предложен модифицированный метод FDTD: пространственные производные аппроксимировались центральными разностями с четвертым порядком точности. Однако такой подход является искусственным и сложным в реализации даже при моделировании распространения сигнала в свободном пространстве.

Схема Йе непосредственно задействует вихревые уравнения Максвелла. При этом строго доказано, что дивергентные уравнения также выполняются. Поэтому в [29] эта схема была названа консервативной.

Однако при этом не учитывается то, что поля **E** и **H** смещены друг относительно друга на половину шага по пространству и по времени. Изменение поля **E**, произошедшее в целом пространственном узле, вызывает изменение поля **H** в полуцелом узле. Последний должен находиться на расстоянии, не превосходящем $c\tau/2$. В противном случае будет нарушен принцип причинности, то есть изменение поля **E** будет распространяться со скоростью больше скорости света.

Величина дисбаланса, очевидно, составляет $O(h + \tau)$. Неконсервативные схемы, в которых дисбаланс стремится к нулю при уменьшении шага, называются почти консервативными. Однако для схемы Йе дисбаланс оказывается существенно больше погрешности аппроксимации, которая есть $O(h^2 + \tau^2)$. Это

снижает ценность неявных схем, которым посвящен большой объем литературы. Однако на свойствах явной схемы неконсервативность не сказывается, так как для нее условие Куранта и так должно быть выполнено. Поэтому явная схема Йе является полностью консервативной.

1.3.2 Задание источника излучения и граничных условий

Самым простым способом моделирования источника электромагнитного излучения является непосредственное задание плотности тока \mathbf{J} из (1.1). Заметим, что зачастую источник задается не с помощью \mathbf{J} , а с помощью электрического поля \mathbf{E} (например, [42]). Однако такое задание источника не является физически корректным и, как следствие, приводит к понижению порядка точности разностной схемы до первого.

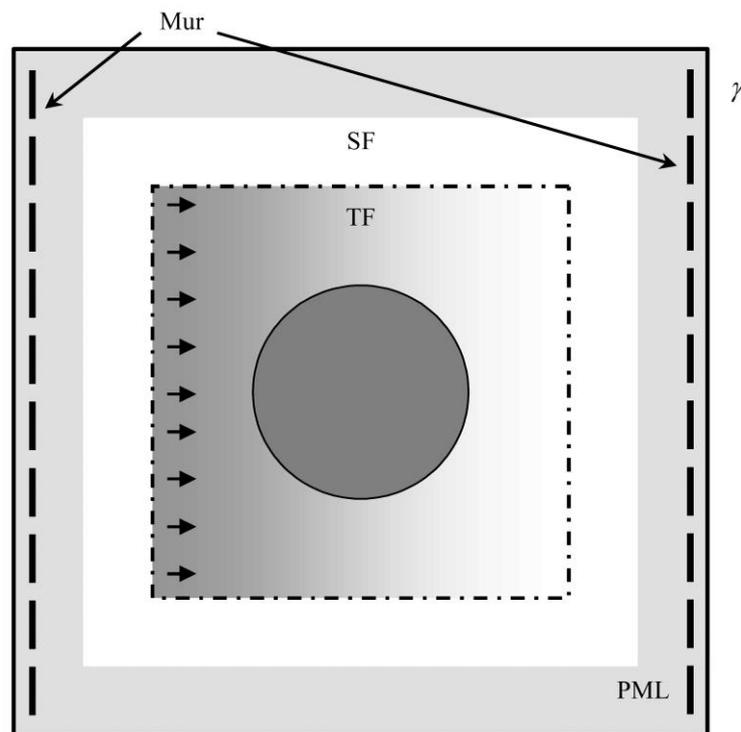


Рисунок 1.1. Схематическое изображение расчетной области. В качестве круга может быть рассмотрен объект произвольной формы. Падающее поле – плоская волна, направление ее распространения обозначено стрелками

При расчете рассеяния плоской волны, падающей на изучаемую структуру, обычно используется техника разделения вычислительной области на две подобласти – полного и рассеянного полей (TF/SF – total-field/scattered-field) (см. рисунок 1.1) [27]. Полное поле состоит из суммы поля падающей волны и рассеянного излучения, а рассеянное поле – только из рассеянного излучения. При этом падающая волна не взаимодействует с внешней границей γ расчетной области. На этой границе ставятся условия, имитирующие уход волны на бесконечность. Таким образом, метод TF/SF позволяет в численном эксперименте создать аналогичные натурному эксперименту условия, при которых отсутствует обратное воздействие рассеянного излучения на источник (генератор сигнала), то есть интерференция между отраженной и падающей волнами.

Для выделения единственного решения задачи с локальными источниками в неограниченной области должны быть поставлены условия, соответствующие требованию отсутствия источников поля на бесконечности. В нестационарном случае имитация «открытых границ» производится с помощью поглощающих граничных условий (ABCs – absorbing boundary conditions) или идеально согласованного слоя (PML – perfectly matched layer) [45]. Первые условия в разностном представлении являются условиями Мура [46]. Они крайне просты и позволяют добиться полного поглощения поля везде, кроме углов расчетной области. В связи с этим их возможно использовать только в одномерных задачах. PML, напротив, не обеспечивает нулевой коэффициент отражения от границ расчетной области даже при введении большого числа поглощающих слоев, но может быть использован и в многомерных задачах.

«Профиль потерь» складывается из отражений от первого слоя PML и переотражений от границ слоев в силу погрешности конечно-разностной дискретизации, а также из отражения от последнего слоя, на границе γ которого обычно ставится однородное условие Дирихле. Отметим, что для повышения эффективности расчетов возможна комбинация условий Мура и слоев PML.

Использование PML сводится к добавлению в схему дополнительных множителей, зависящих от ширины поглощающей области, и обратно пропорциональных величине коэффициента отражения от границы γ . Обычно они ограничены некоторыми величинами, чтобы уменьшить отражения внутри PML. От слоя к слою потери растут по некоторому закону, на самом первом из слоев их выбирают минимальными с целью уменьшения отражения от границы раздела «воздух–PML».

Для уменьшения величины отражения от всей PML структуры на данный момент предложено несколько различных вариантов ее задания. В классическом варианте Беренгера каждая компонента электромагнитного поля разбивается на две [47]. При учете одноосной анизотропии среды такой PML можно трактовать как растяжение или сжатие координат, основанное на аналитическом продолжении уравнений Максвелла в комплексную плоскость таким образом, что их решение затухает, например, экспоненциально [48]. Также стоит упомянуть о подходе, в котором PML рассматривают как слои из некоторых гипотетических материалов [49-51]. Они превосходят по своим поглощающим способностям структурированные покрытия, используемые в безэховых камерах.

1.3.3 Слоистые среды

Особую трудность для конечно-разностных методов представляют задачи в слоистых средах, когда один из материальных параметров (диэлектрическая проницаемость ε или магнитная восприимчивость μ) или оба имеют разрывы. Известно, что при расчете по схеме Йе сильно неоднородных и, особенно, слоистых сред (например, диэлектрических границ раздела) точность расчетов сильно снижается. Порядок сходимости может уменьшаться до первого и ниже. Это неоднократно отмечалось в литературе (например, [31]).

Обычно для обеспечения аппроксимации разностной схемы границу раздела размывают, заменяя кусочно-постоянную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(x)$ некоторой гладкой функцией [52, 53]. Однако такой простой в реализации прием

все равно не позволяет добиться теоретического порядка сходимости. Более того, он может приводить к искажению электродинамических свойств изучаемой структуры.

В литературе предлагался подход, в котором второй порядок точности достигается с помощью переноса узла магнитного поля вблизи диэлектрической границы раздела [54, 55]. При этом точка разрыва попадает внутрь шаблона разностной схемы, что приводит к потере сходимости в норме C (имеет место лишь сходимость в норме L). Кроме того, при большом скачке ε шаг, примыкающий к границе раздела, становится настолько мелким, что аккуратное вычисление разностных производных требует повышенной разрядности. В работе [56] были проведены расчеты границы раздела сред, у которых диэлектрические проницаемости имеют разные знаки. Было показано, что использование усредненной $\varepsilon_{\text{eff}}(x)$ приводит к огромным ошибкам, причем фактический порядок точности оказывается $p < 1$.

Армента и Саррис предложили разбивать область на две части (domain-decomposition method) [56]. Этот метод заключается в добавлении слева и справа от границы раздела по дополнительному столбцу фиктивных ячеек. Расчеты производятся со значением $\varepsilon_{\text{left}}$ вплоть до фиктивной ячейки, находящейся справа от границы раздела, после чего вычисления продолжают с $\varepsilon_{\text{right}}$, начиная с левой фиктивной ячейки. Значения поля в последней берутся по непрерывности, что приводит к необходимости дополнительного сшивания компонент поля.

Построенная ими схема обеспечивает второй порядок точности при моделировании слоистых сред из любых дисперсионных материалов с постоянной магнитной восприимчивостью. Отметим, что идея введения фиктивных узлов не является новой и широко применяется в газодинамике [57]. Этот метод имеет неоспоримые преимущества по сравнению с методом усреднения. Но, во-первых, такая схема не является схемой сквозного счета (необходимо явно выделять границы раздела). Во-вторых, она пригодна только

для нормального падения волны на плоскую границу. В-третьих, при наличии нескольких границ возникают множественные переотражения волн. Для каждой из них описанную процедуру нужно проводить индивидуально. Это крайне усложняет расчет.

Таким образом, на данный момент не существует универсального подхода, позволяющего проводить расчеты слоистых диэлектрических сред методом FDTD с порядком точности выше первого. Более того, остается открытым вопрос о фактической погрешности проведенных вычислений, так как теоретические априорные оценки точности являются мажорантными. Если для какой-то конкретной задачи и удастся построить асимптотическую оценку, то на практике она зачастую оказывается недостижимой: для многомерных задач даже современные суперкомпьютеры не всегда могут обеспечить требуемую малость шага. Программа должна, одновременно с получением ответа, находить его погрешность.

1.3.4 Жесткие задачи электродинамики

В последние годы большое внимание уделяется наноструктурам из диэлектриков с высоким показателем преломления [58-60]. Важной особенностью таких частиц является наличие сильного магнитного отклика [17, 18]. Если размеры метаатомов сопоставимы с длиной волны падающего излучения, то возникает магнитный резонанс, величина которого сопоставима или превышает величину электрического резонанса.

Диэлектрические материалы с высоким показателем преломления имеют и ряд важных технических приложений. Характерным примером являются керамические материалы. Благодаря своим электродинамическим и механическим свойствам (в частности, почти нулевому температурному коэффициенту диэлектрической проницаемости) такие материалы используются в СВЧ-устройствах в качестве подложек для микросхем, базовых элементов и узлов.

При численном расчете таких задач возникают две принципиальные трудности. Первая обусловлена наличием границ раздела сред, то есть разрыва материальных параметров. В этих точках поля преломляются, то есть претерпевают излом. Чтобы преодолеть эту трудность, узел сетки поля E помещают в границу раздела сред. Тогда внутри шаблона разностной схемы параметры среды являются непрерывными, и удастся обеспечить аппроксимацию.

Вторая трудность связана с резким изменением частоты поля внутри областей с высоким показателем преломления по сравнению со свободным пространством. Чтобы получить разумную точность, в этих областях нужно выбирать достаточно подробные сетки: на один пространственный период решения должно приходиться не менее 5-7 узлов. Если контраст показателей преломления велик, то в оптически плотной среде нужно использовать чрезвычайно малый шаг. С другой стороны, применение такой же сетки для свободного пространства, очевидно, является неоправданным. Поэтому нужно использовать сетки, адаптированные к решению. Частоты полей резко меняются на границе раздела, поэтому адаптивную сетку можно строить априори (то есть до расчета, а не в ходе последнего). Это кардинально упрощает рассмотрение.

Традиционно в подобных задачах используют кусочно-равномерные сетки [61], [62], поскольку они допускают достаточно простой теоретический анализ и, в частности, построение априорных оценок сходимости. Такие сетки заведомо лучше равномерных, поскольку они обеспечивают малый шаг в оптически плотной среде и сравнительно крупный шаг в свободном пространстве.

Однако в точке перехода от крупного шага к малому точность может заметно ухудшаться. Так, использование сильно неравномерных сеток в схеме Йе проблематично. Если два соседних шага сильно различаются, то их необходимо согласовывать друг с другом, чтобы обеспечить второй порядок точности [54]. С другой стороны, отношение этих шагов должно быть адаптировано к контрасту показателей преломления. Эти требования могут оказаться противоречивыми. Таким образом, кусочно-равномерные сетки не оптимальны. Кроме того, для них

не гарантируется применимость метода сгущения сеток и справедливость оценок точности по Ричардсону.

1.4 Физические модели метапленок из сферических частиц

С начала 2000-х годов было предложено множество аналитических моделей для описания свойств метапленки. Многие авторы строили модели, в которых структура из метаатомов заменялась некоторым эквивалентным однородным слоем с совпадающим электродинамическим откликом (см., например, [25, 63-66]). Таким моделям уделяется значительное внимание, поскольку традиционная процедура объемного усреднения для метапленок неприменима. В то же время материальные параметры эквивалентного слоя можно рассматривать как эффективные параметры метапленки.

Однако в большинстве работ возникали существенные трудности: не удавалось найти все материальные параметры структуры, что приводило к неоднозначности в их определении. Кроме того, точность построенных моделей оказывалась настолько низкой, что электродинамические характеристики метапленки удавалось описать лишь на качественном уровне, причем только вдали от резонансов. Вопрос о правомерности и взаимной однозначности замены двумерного метаматериала однородным слоем до сих пор остается открытым.

Наиболее адекватное описание метапленки из сферических частиц было проведено в работах [22, 23] (модель Кустера-Холловея) и [25] (модель Евлюхина). Обе модели применимы лишь в дальневолновом приближении, так как в них каждый метаатом заменяется парой электрического и магнитного диполей, то есть по существу является точечным.

Подчеркнем, что модели Кустера-Холловея и Евлюхина применимы лишь для метапленки, внедренной в однородную среду. Однако на практике структура всегда находится на некоторой границе раздела (подложке). Обобщения

указанных моделей, учитывающие влияние подложки, были сделаны в работах [67, 68] (модель Симовского) и [19] (модель Бабичевой).

Эти модели были достаточно грубы, так как учет подложки сводился, по существу, к тривиальному суммированию откликов метапленки в воздухе и подложки. Взаимодействие метапленки и подложки фактически игнорировалось. Спектры метапленок удавалось описывать лишь на качественном уровне, для получения более точных результатов требовалась подгонка. Однако на данный момент это наиболее адекватные из предлагавшихся моделей, поэтому в диссертации используются именно они.

Прежде чем переходить к моделям метапленок, опишем способ расчета электродинамического отклика отдельных структурных элементов, являющихся сферическими частицами.

1.4.1 Рассеяние света сферическими частицами (теория Ми)

По отношению к падающему электромагнитному излучению любой метаатом является резонатором, в котором возбуждаются вынужденные колебания, даже если это не классический LC-контур, а сферическая частица (не важно металлическая или диэлектрическая). Задача дифракции поперечных волн на сферических частицах была подробно исследована в работе Ми [69], которая легло в основу оптики коллоидных сред [70, 71]. Последние несколько лет повышенный интерес к исследованию оптических полей в диэлектрических частицах связан с бурным развитием полностью диэлектрической фотоники и, в частности, двумерных метаматериалов, составленных из диэлектрических частиц.

Рассмотрим однородный изотропный изолированный шар радиуса r с показателем преломления n_{sph} , расположенный в однородной среде с показателем преломления n_{ext} . Пусть на него падает плоская электромагнитная волна. Согласно теории рассеяния Ми, поля внутри и снаружи шара могут быть разложены в ряд по векторным сферическим гармоникам, то есть по нормальным электромагнитным модам шара [72, 73].

Рассеянное электрическое поле представляется в виде разложения по сферическим гармоникам с коэффициентами a_m и b_m , которые называются электрическими и магнитными парциальными амплитудами, соответственно. Эти амплитуды выражаются через функции Бесселя-Риккати ψ_m , ζ_m и их производные ψ'_m , ζ'_m

$$a_m = \frac{n\psi_m(nx)\psi'_m(x) - \psi_m(x)\psi'_m(nx)}{n\psi_m(nx)\zeta'_m(x) - \zeta_m(x)\psi'_m(nx)}; \quad b_m = \frac{\psi_m(nx)\psi'_m(x) - n\psi_m(x)\psi'_m(nx)}{\psi_m(nx)\zeta'_m(x) - n\zeta_m(x)\psi'_m(nx)}, \quad (1.3)$$

где $n = n_{\text{sph}}/n_{\text{ext}}$ – относительный показатель преломления, $x = kr$ – параметр дифракции, k – волновое число в среде,

$$\psi_m(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} J_{m+1/2}(x); \quad \zeta_m(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_{m+1/2}^{(1)}(x), \quad (1.4)$$

$J_{m+1/2}$ и $H_{m+1/2}^{(1)}$ – функции Бесселя и Ханкеля первого рода полуцелых порядков. Традиционно a_1 и b_1 называют коэффициентами для электрического и магнитного диполей, соответственно, a_2 и b_2 – коэффициентами для электрического и магнитного квадруполей и т.д. Отметим, что если $n=1$, то есть частица «не отличается» от среды, все коэффициенты a_m и b_m обращаются в нуль, и переизлучения не возникает.

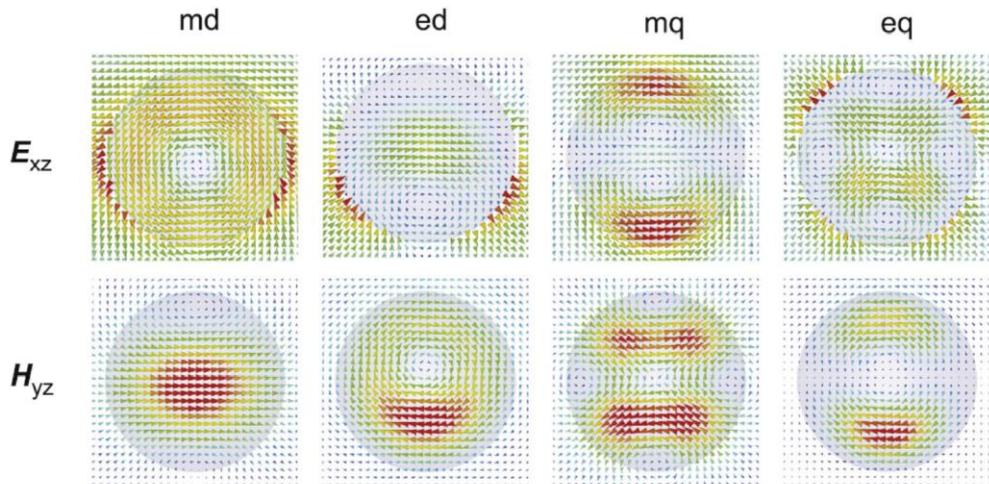


Рисунок 1.2. Электрические (верхний ряд) и магнитные (нижний ряд) поля низкочастотных мод сферической частицы, возбуждаемой плоской волной [4]. Обозначения md и ed соответствуют магнитному и электрическому диполям, mq и eq – магнитному и электрическому квадрупольям.

Если частота внешнего поля оказывается близка к одной из собственных частот частицы, то соответствующая амплитуда резко усиливается – имеет место резонанс. На рисунке 1.2 показаны электрические и магнитные поля четырех низкочастотных резонансов (электрического и магнитного дипольных и электрического и магнитного квадрупольных). Если рассматривать только дипольный отклик электрического либо магнитного типа, то можно ввести дипольные электрическую α_e и магнитную α_m поляризуемости шара. Они связаны с соответствующими амплитудами a_1 и b_1

$$\alpha_e = \frac{6\pi i}{k^3} a_1; \quad \alpha_m = \frac{6\pi i}{k^3} b_1. \quad (1.5)$$

Здесь и далее полагаем, что временная зависимость имеет вид $e^{-i\omega t}$.

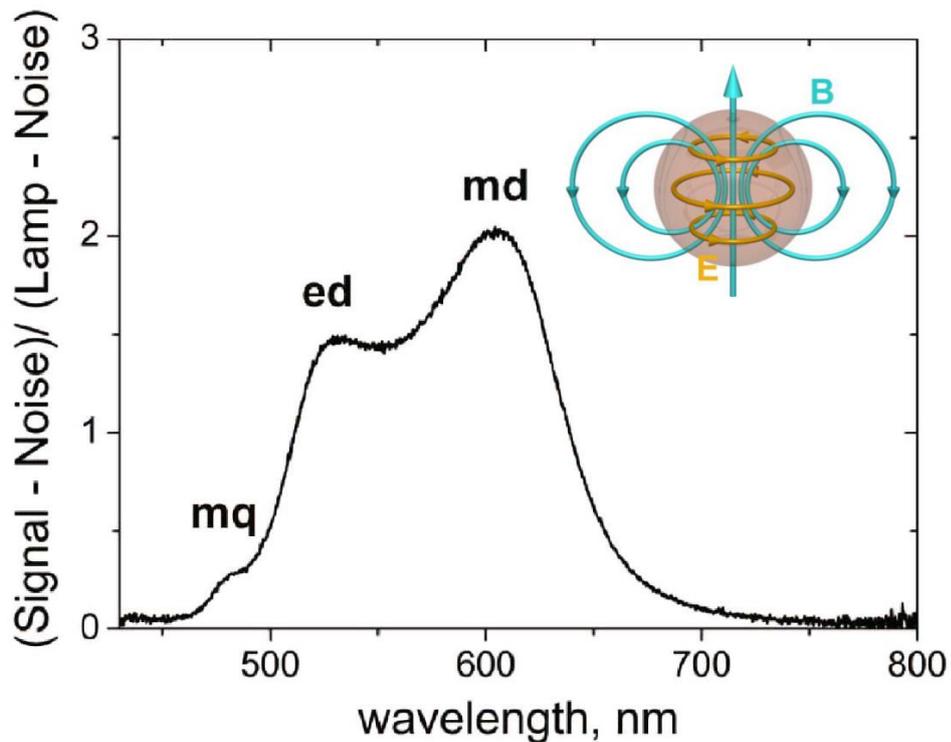


Рисунок 1.3. Спектр рассеяния кремниевой частицы радиусом $r \approx 75$ нм, расположенной на стеклянной подложке [18]. На кривой отмечены резонансы: md – магнитный дипольный, me –

электрический дипольный, m_q – магнитный квадрупольный. В правом верхнем углу схема распределения силовых линий полей, соответствующая резонансу md .

Типичный спектр рассеяния одиночной кремниевой сферической наночастицы показан на рисунке 1.3. Первым возбуждается магнитный дипольный резонанс (соответствует коэффициенту b_1) на длине волны, связанной с параметрами шара выражением $\lambda \approx 2rn$. При постепенном уменьшении длины волны магнитный дипольный резонанс ослабевает, и вместо него возбуждается электрический дипольный, затем магнитный квадрупольный, и т.д.

В видимом диапазоне это проявляется за счет изменения цвета рассеянного частицей излучения. Такой пример приведен на рисунке 1.4. На нем представлены фотографии, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа, и темнопольное изображение двух кремниевых наночастиц разных размеров [18]. Резонансы в них возбуждаются на разных длинах волн, в результате чего переизлучение от более крупной частицы приходится на зеленую часть спектра, а от более мелкой – на красную.

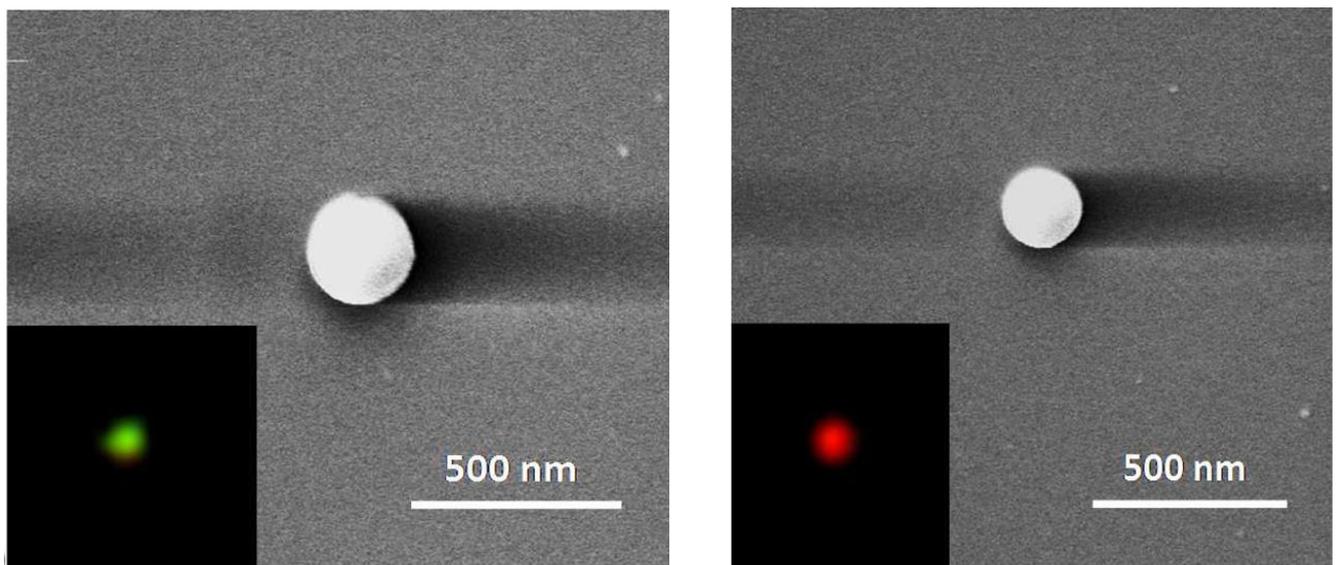


Рисунок 1.4. Фотографии кремниевых наносфер, полученные сканирующим электронным микроскопом [18]. В углах их изображения в темном поле.

Согласно теории Ми, наблюдаемые резонансы обладают свойством масштабируемости. Это означает, что отклик частиц зависит не от абсолютных значений их радиуса, длины волны или показателя преломления, а от их безразмерной комбинации $\lambda/(rn)$. Таким образом, эксперименты, проведенные в одном частотном диапазоне, можно использовать для анализа других диапазонов при условии, что размер частиц пропорционально изменен, а материал метаатомов по-прежнему остается диэлектриком, и в нем не возникает сильного поглощения.

Теорию Ми можно использовать для описания и несферических частиц. В них также возникает резонансный отклик, однако его частота теперь зависит не только от размера частиц, но и от их формы. При на одной и той же длине волны подающего излучения значительным становится не только дипольный член, но и квадрупольный и нередко октупольный. Такой аппарат уже разработан для некоторых геометрий частиц (например, [74]). Однако он приводит к достаточно громоздким выражениям, поэтому на практике для всех метаатомов, кроме сферических, чаще всего электромагнитный отклик рассчитывается численно.

Далее приводятся две модели метапленки в воздухе без учета подложки. Центральным вопросом этих моделей является тот или иной способ учета взаимодействия частиц друг с другом.

1.4.2 Эффективная граница раздела (модель Кустера-Холловея)

Эта модель построена в работах [22, 23]. Рассмотрим идентичные резонаторы, изготовленные из изотропного материала. Анизотропия допустима, но тогда главные оси кристалла должны быть ориентированы вдоль осей координат. При таких предположениях матрица поляризуемости будет диагональной. Пусть из таких резонаторов составлена метапленка с одинаковыми периодами по обоим направлениям, находящаяся в однородной среде. На эту метапленку падает плоская электромагнитная волна. Пусть период p структуры и размер $2r$ рассеивателей малы по сравнению с длиной волны

$$p, r \ll \lambda. \quad (1.6)$$

Тогда, согласно модели Кустера-Холловея, можно рассматривать такую решетку точечных диполей как однородно поляризованную поверхность (см. рисунок 1.5). Она описывается с помощью электрической χ_{es} и магнитной χ_{ms} компонент плотности поверхностной восприимчивости.

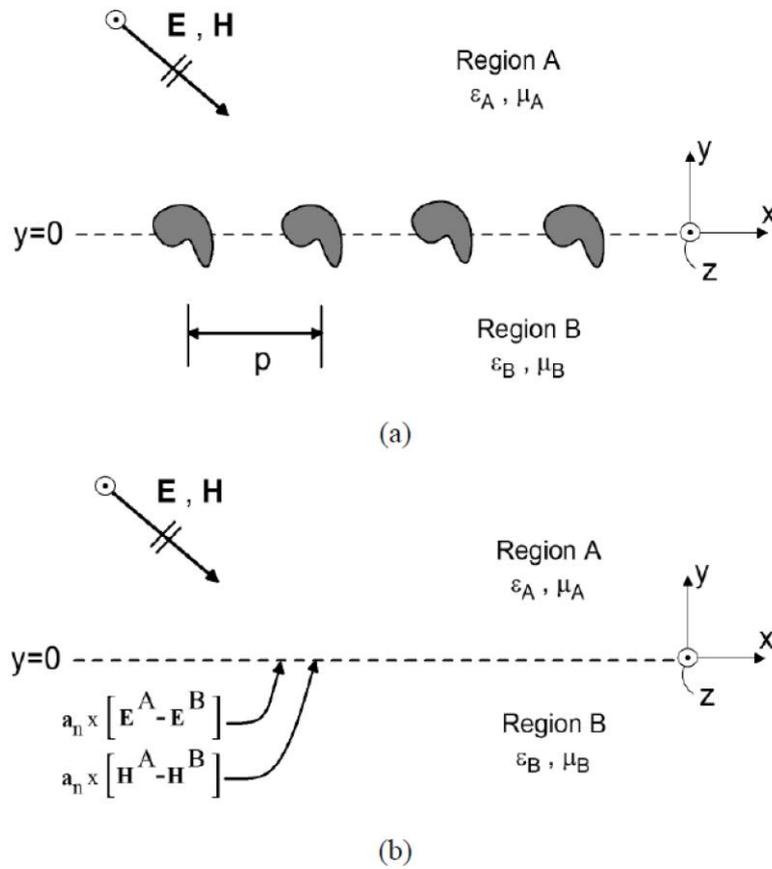


Рисунок 1.5. Замена метаплёнки эффективной границей раздела между средами А и В в модели Кустера-Холловея [76].

Таким образом, в данной модели используется гомогенизация метаплёнки, однако усреднение производится не по объёму, а по поверхности. Такой подход представляется довольно грубым, так как при сильном взаимодействии метаатомов распределение токов и зарядов по метаплёнке, очевидно, является неоднородным.

Для описания такой фиктивной границы раздела были получены граничные условия для векторов электромагнитного поля. Они выводились на основе соотношений из работы Идемена [75] и, по сути, обобщают хорошо известные граничные условия для полей на границе раздела диэлектриков.

Произведя «сшивание» полей над и под метапленкой, можно найти амплитудные коэффициенты прохождения T и отражения R :

$$R = \frac{i \frac{k_0}{2} (\chi_{es} - \chi_{ms})}{1 - \left(\frac{k_0}{2}\right)^2 \chi_{es} \chi_{ms} - i \frac{k_0}{2} (\chi_{es} + \chi_{ms})}; \quad T = \frac{1 + \left(\frac{k_0}{2}\right)^2 \chi_{es} \chi_{ms}}{1 + \left(\frac{k_0}{2}\right)^2 \chi_{es} \chi_{ms} - i \frac{k_0}{2} (\chi_{es} + \chi_{ms})}, \quad (1.8)$$

где k_0 – волновое число в воздухе. Коэффициент поглощения A связан с T и R соотношением $|A|^2 = 1 - |T|^2 - |R|^2$. Таким образом, зная χ_{es} и χ_{ms} , можно найти коэффициенты R и T .

1.4.3 Решетка взаимодействующих индуцированных диполей (модель Евлюхина)

Эта модель построена в следующих предположениях. Пусть материал, из которого изготовлены частицы, является однородным и изотропным. Периоды прямоугольной решетки диполей в разных направлениях могут быть неодинаковыми. Рассматривается только случай нормального падения плоской волны. Радиус частиц и периоды решетки малы по сравнению с длиной волны, а последняя мала по сравнению с расстоянием до точки наблюдения.

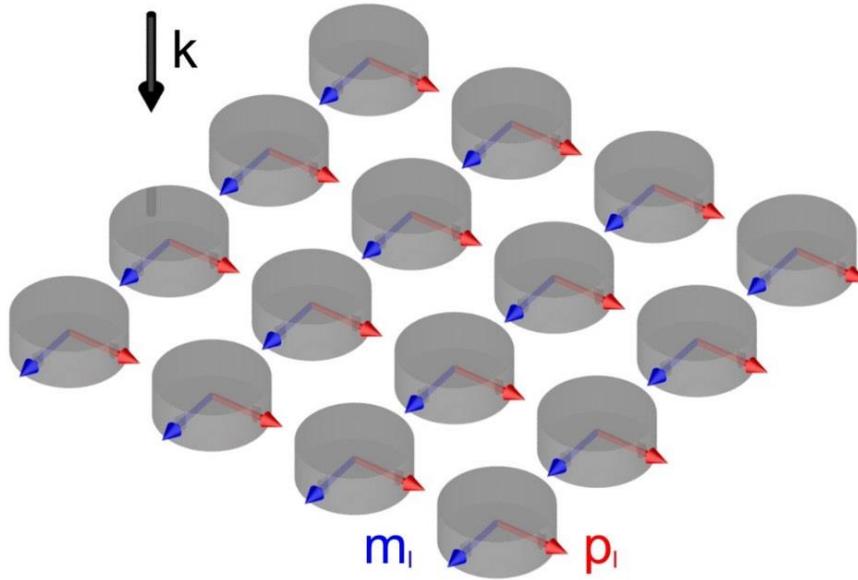


Рисунок 1.6. Решетка метаатомов, заменяемых совокупностью электрических (красные) и магнитных (синие) диполей [77]. m и p – магнитный и электрический дипольные моменты частиц соответственно; k – волновой вектор падающего излучения.

В модели Евлюхина [25] каждый метаатом заменяется совокупностью электрического и магнитного диполей (см. рисунок 1.6). Далее строится точное решение задачи о взаимодействующих точечных диполях. При этом учитывается взаимодействие диполей одного типа (электрических между собой и магнитных между собой) и «перекрестное» взаимодействие электрических диполей с магнитными. Таким образом, замена метаатома парой диполей является основным источником погрешности данной модели.

Особенно прост случай, когда периоды решетки совпадают. Тогда коэффициенты отражения и прохождения рассчитываются по формулам

$$R = \frac{ik_0}{2p^2}(\alpha_e^{\text{eff}} - \alpha_m^{\text{eff}}); \quad T = \frac{ik_0}{2p^2}(\alpha_e^{\text{eff}} + \alpha_m^{\text{eff}}), \quad (1.9)$$

где α_e^{eff} и α_m^{eff} – эффективные электрическая и магнитная поляризуемости, в которых учтено взаимодействие между частицами.

Модель применима для любых значений p и r в рамках дипольного приближения. Подход Евлюхина представляется наиболее адекватным, так как в

отличие от модели Кустера-Холлоуэя, в нем не производится гомогенизации структуры.

Однако имеется и ряд недостатков: 1) модель Евлюхина построена лишь для нормального падения волны на структуру; 2) модель не позволяет описывать метапленку на подложке; иными словами, метаатомы погружены в однородную среду. Поэтому она непригодна для расчета метапленки, расположенной на границе раздела (подложке).

Ниже описаны модели Симовского и Бабичевой, учитывающие наличие подложки. Основным вопросом в этом случае является учет взаимодействия частиц с подложкой.

1.4.4 Модель Симовского

Согласно подходу Симовского [67, 68], система «метапленка-подложка» рассматривается как эффективная граница раздела, на которой вектора электромагнитного поля претерпевают скачок. Для вывода величины скачка была предложена следующая процедура.

Пусть вместо метапленки на границе раздела воздух-диэлектрик лежит однородная диэлектрическая пластинка конечной толщины L . Предполагается, что материальные параметры пластинки выражаются через χ_{es}/L и χ_{ms}/L , где χ_{es} , χ_{ms} – компоненты плотности поверхностной восприимчивости метапленки, расположенной в воздухе. Решается задача о прохождении волны через систему «воздух-слой-подложка», и вычисляется итоговое изменение полей, обусловленное наличием этой системы. После этого делается предельный переход при $L \rightarrow 0$, это и дает требуемые граничные условия.

Такой подход имеет слабое место – адекватность перехода к допредельному тонкому слою. Однако сравнение с численными расчетами, демонстрирует удовлетворительную точность, данная модель позволяет разумно описать качественный характер спектра. Заметим, что принципиально неустранимым

источником ошибки в модели Симовского, как и в упоминавшейся ранее модели Кустера-Холлова, является грубая гомогенизация структуры.

При нормальном падении волны коэффициенты отражения R_s и прохождения T_s всей структуры имеют следующий вид:

$$R_s = \frac{(1+e)(1-\sqrt{\varepsilon}m) - (\sqrt{\varepsilon}-e)(1+m)}{(1-e)(1-\sqrt{\varepsilon}m) + (\varepsilon-e)(1-m)}, T_s = \frac{(1+e)(1+m) + (1-e)(1+m)}{(1-e)(1-\sqrt{\varepsilon}m) + (\varepsilon-e)(1-m)} \quad (1.10)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость подложки, $e = ik_0\chi_{es}/2$ и $m = ik_0\chi_{ms}/2$. Коэффициент поглощения метапленки на подложке A_s связан с R_s и T_s соотношением

$$|A_s|^2 = 1 - |R_s|^2 - \sqrt{\varepsilon} |T_s|^2. \quad (1.11)$$

Такой подход был разработан для произвольного угла падения волны, а также обобщен на случай подложки конечной толщины. Однако для расчета отклика всей системы нужно знать отклик метапленки в воздухе. В работах Симовского этот отклик рассчитывался численно, поэтому его модель можно назвать лишь полуаналитической. Это является другим весомым недостатком данного подхода.

1.4.5 Модель Бабичевой

Суть этой модели сводится к следующему [19]. Каждый метаатом заменяется парой электрического и магнитного диполей по модели Евлюхина. Вся метапленка заменяется фиктивной границей раздела, на которой расположены соответствующие точечные диполи. Эта граница проходит через центры сфер. Поэтому между ней и подложкой возникает воздушный зазор толщины r . Его можно рассматривать как интерферометр Фабри-Перо.

Падающая плоская волна амплитуды E_0 проходит через эти границы раздела последовательно. Чем больше скачок показателя преломления на каждой из границ раздела, тем сильнее искажается волна при ее прохождении. Благодаря

этому, в качестве напряженности волны, отраженной от всей структуры E_s^R , можно взять сумму напряженностей волн, отраженных от метапленки E^R и от подложки E_{substr}^R по отдельности

$$E_s^R = E^R + E_{\text{substr}}^R. \quad (1.12)$$

Здесь

$$E_{\text{substr}}^R = \frac{TR_{\text{substr}} e^{2ik_0 r}}{1 - RR_{\text{substr}} e^{2ik_0 r}} E_0, \quad (1.13)$$

а R_{substr} вычисляется по хорошо известной формуле $R_{\text{substr}} = (1 - \sqrt{\varepsilon}) / (1 + \sqrt{\varepsilon})$. При этом внутренние переотражения, то есть порядки интерференции выше первого, описывающие реальное взаимодействие метапленки с подложкой, не учитываются. Это сильно ограничивает точность модели.

Этот вывод был подтвержден результатами численного моделирования, проведенного самими авторами модели [19, 20]. Было показано, что между шариком и подложкой существует магнитоэлектрическая связь. Хотя эта связь и слаба, но она не является пренебрежимо малой и проявляется на частотах, расположенных между магнитной и электрической дипольными модами. Это приводит к усилению обоих дипольных резонансов [78].

Несмотря на указанные недостатки, модель Бабичевой позволяет успешно передать положение не только первого магнитного, но и первого электрического дипольного резонанса. Этого вполне достаточно для решения задачи оптимизации. На данный момент эта модель представляется наилучшей.

1.5 Оптимизация параметров метапленок

При разработке различных устройств (например, зеркал, безотражательных и просветляющих покрытий, фильтров) нужно добиться максимального либо минимального отклика метапленки на некоторой фиксированной длине волны либо в диапазоне длин волн. Целевой функцией может являться отражение,

поглощение, их комбинация и т.д. Как правило, материал, из которого изготовлены мета-атомы и подложка, известен. Поэтому требуется оптимизировать только геометрические параметры структуры: размеры частиц, период их расположения, толщину подложки и т.д. Число оптимизируемых параметров в таких задачах, как правило, невелико. Например, для метапленки из сферических частиц их всего два: радиус частиц и период их расположения.

1.5.1 Многоэкстремальность

Как отмечалось в разделе 1.2.1., отклик диэлектрической метапленки имеет резонансный характер, поэтому задача ее оптимизации является многоэкстремальной (и, тем самым, математически некорректной). Для преодоления этой трудности могут использоваться следующие подходы.

Ограничение области допустимых параметров. Пусть из физических соображений удалось определить диапазон параметров метапленки, в котором заведомо находится только один минимум целевой функции. Тогда необходимо формулировать задачу на условный экстремум с ограничениями типа неравенства. Такая задача чаще всего решается методом штрафных функций. Основной трудностью, очевидно, является отыскание требуемого диапазона параметров.

Метод Монте-Карло. Широко применяется следующая стратегия расчета [79]. Случайно генерируется набор псевдослучайных точек, покрывающий всю рассматриваемую область параметров. Каждая из этих точек используется как начальное приближение для метода минимизации (например, метода Ньютона). Минимизирующие последовательности, начинающиеся с разных начальных приближений, будут сходиться, вообще говоря, к разным локальным минимумам. Из полученных минимумов выбирают наименьший. Если число начальных точек достаточно велико, и они расположены достаточно плотно, то можно ожидать, что выбранный минимум действительно будет глобальным. Недостатком такого подхода является достаточно высокая трудоемкость (минимизацию нужно

проводить многократно); кроме того, нахождение глобального минимума не гарантируется.

Генетические алгоритмы. Некоторые методы этого класса (например, метод отжига [80, 81], метод роя частиц [82, 83]) позволяют непосредственно решать многоэкстремальные задачи без ограничения области допустимых параметров. Эти методы основаны на аналогиях с физическими процессами (например, метод отжига «имитирует» релаксацию незамкнутой термодинамической системы при ее «остывании»). Они являются эвристическими и не имеют строгого обоснования. Для них не всегда разработаны четкие алгоритмы по выбору параметров метода, и их требуется настраивать под каждую конкретную задачу. В результате метод может не сойтись либо сойтись к минимуму, который не является глобальным.

1.5.2 Методы минимизации

Задача оптимизации является простейшей обратной задачей. При решении обратной задачи, согласно подходу Свешникова-Ильинского [21], производится многократное решение прямой задачи с направленно изменяемыми оптимизационными параметрами. В нашем случае прямой задачей является расчет электродинамического отклика метапленки на подложке. Такую задачу целесообразно решать, используя аналитические формулы, полученные из физических моделей. Это кардинально сокращает время расчетов.

Для минимизации целевой функции удобнее использовать численные алгоритмы благодаря их эффективности и достаточной универсальности. Такой подход, использующий комбинацию численного и аналитического методов, широко применяется к оптимизации сложных структур, в частности, при проектировании многослойных покрытий с заданными свойствами [84, 85].

Методы минимизации целесообразно классифицировать по скорости сходимости. К методам нулевого порядка (не использующим производные целевой функции) относятся, например, метод Нелдера-Мида (для задач на

безусловный экстремум) и метод скользящего допуска (используемый в задачах на условный экстремум) [86]. Эти методы сходятся достаточно медленно, то есть для получения разумной точности требуется достаточно большое количество итераций.

Методы первого порядка требуют знания градиента минимизируемой функции. Это позволяет построить достаточно быстро сходящиеся итерационные процессы. Хорошо известными примерами являются различные методы сопряженных направлений: сопряженные градиенты, сопряженные невязки, симметризованные сопряженные градиенты и др. [87].

Особенно просто градиент вычисляется для квадратичных функционалов. Однако в оптике наноструктур такие задачи встречаются редко. Гораздо чаще целевая функция имеет сложный вид или может вовсе не выражаться в конечном виде. Тогда нахождение градиента оказывается нетривиальной проблемой. Случаи, когда его удастся найти явно, представляются скорее исключением, нежели правилом (см., например, [84]). Для решения этой проблемы применяют численный расчет градиента. Такой подход использован, например, в методе внутренней точки [88], реализованном во многих математических пакетах (в частности, Matlab).

ГЛАВА 2 Моделирование слоистых сред методом FDTD

Для исследования физических процессов в устройствах интегральной фотоники нужно решать векторную задачу электродинамики в слоистой среде. Большинство задач рассматривается в нестационарной постановке. Многие актуальные задачи сводятся к одномерным: например, прохождение излучения через фотонный кристалл, динамика поверхностных волн различного типа на поверхности фотонного кристалла и т.д. В главе 3 будет показано, что в ряде случаев метапленка из сферических частиц может быть заменена оптически эквивалентной тонкой пленкой (то есть одномерной слоистой структурой).

При численном решении задач в слоистых средах (особенно с большим контрастом показателей преломления) возникает ряд принципиальных математических трудностей. Они связаны с тем, что на границе раздела сред поля преломляются, и решение не является гладким. В известных численных методах это приводит к артефактам расчёта, которые резко снижают точность. В данной главе этим артефактам дано строгое математическое объяснение и предложены меры борьбы с ними. Рассмотрены конкретные примеры, показывающие преимущества предложенных подходов.

Материалы главы опубликованы в работах [89] – [95].

2.1 Распространение электромагнитного импульса через диэлектрическую среду

2.1.1 Постановка задачи

Рассмотрим распространение электромагнитных колебаний в непоглощающей диэлектрической среде, проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$ которой является

кусочно-непрерывной функцией. Изменение компонент напряженностей электрического $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и магнитного $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ полей описывается системой вихревых уравнений Максвелла. В случае нормального падения z -поляризованной волны на структуру, состоящую из плоскопараллельных диэлектрических слоев, система векторных уравнений (1.1) упрощается до двух скалярных

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} = \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t}, \quad \frac{\partial H_y}{\partial x} = \varepsilon(x)\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} + J_z \quad (2.1)$$

Здесь $(x, t) \in (0; a) \times (0; T]$, где $a > 0$ и $T > 0$. Для простоты выберем нулевые начальные условия

$$E_z|_{t=0} = 0, \quad H_y|_{t=0} = 0, \quad x \in (0; a), \quad (2.2)$$

что соответствует изначально невозмущенной области. В качестве граничных условий выберем поглощающие условия Мура [44]

$$\left(\frac{\partial E_z}{\partial t} - v \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial E_z}{\partial t} + v \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \Big|_{x=a} = 0, \quad t \in (0; T], \quad (2.3)$$

где v – скорость распространения света в среде. Условия (2.3) имитируют неограниченность области, то есть излучение может беспрепятственно уходить на бесконечность. Система уравнений (2.1) – (2.3) является полной математической постановкой одномерной задачи о распределении электромагнитного поля как внутри, так и вне слоистой диэлектрической среды.

2.1.2 Разностная схема Йе

Конечно-разностная аппроксимация на равномерной прямоугольной сетке $\omega_N \times \omega_S = \{x_n, 1 \leq n \leq N + 1\} \times \{t_s, 1 \leq s \leq S + 1\}$ с шагом h по пространству и шагом τ по времени записывается стандартным образом. Так как схема Йе явная, то компоненты электромагнитного поля на следующем временном слое выражаются через значения на текущем слое согласно шаблону с чередованием шагов (см. рисунок 2.1)

$$\begin{aligned}
H_y|_n^{s+1} &= H_y|_n^s - \frac{1}{\mu_0} \frac{\tau}{h} \left[E_z|_{n+1/2}^{s-1/2} - E_z|_{n-1/2}^{s-1/2} \right], \\
(n, s) &\in [1; N+1] \times [1; S+1], \\
E_z|_{n+1/2}^{s+1/2} &= E_z|_{n+1/2}^{s-1/2} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon|_{n+1/2}^{s-1/2}} \frac{\tau}{h} \left[H_y|_{n+1}^{s+1} - H_y|_n^{s+1} \right] - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon|_{n+1/2}^{s-1/2}} \tau J_z|_{n+1/2}^{s-1/2}, \\
(n, s) &\in [1; N] \times [1; S+1].
\end{aligned} \tag{2.4}$$

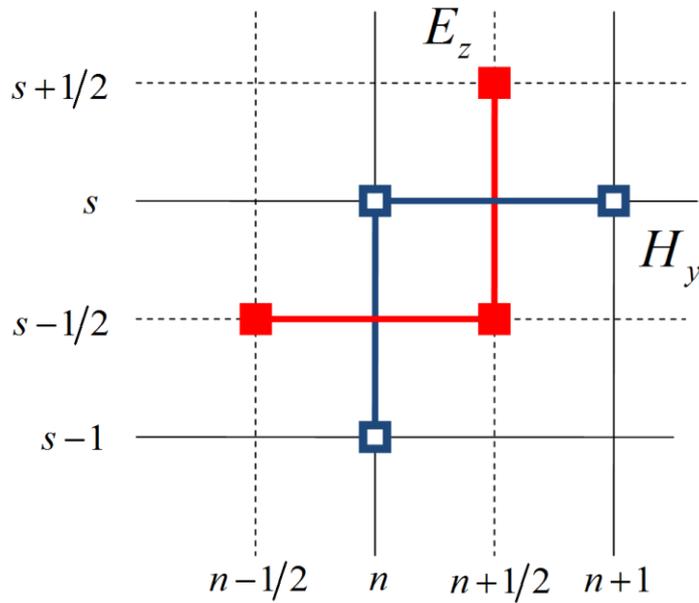


Рисунок 2.1. Шаблон для реализации схемы Йе в одномерном случае. Закрашенными маркерами помечены узлы, соответствующие E_z , незакрашенными – H_y .

Напомним, что в многомерных задачах для записи условий излучения используется так называемый идеально согласованный слой PML (Perfectly Matched Layer). Его можно трактовать как поглощающие стенки из некоторого гипотетического материала (как правило, слоистого). В одномерном случае использование PML не оправданно из-за избыточной трудоемкости по сравнению с условиями Мура (2.3). Разностная запись условий (2.2) и (2.3) производится аналогично (2.4). Важно отметить, что они должны быть аппроксимированы с порядком не ниже, чем порядок точности схемы (2.1). В противном случае, теоретический порядок сходимости схемы понизится.

Численное решение по схеме Йе точно удовлетворяет дивергентным уравнениям Максвелла $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$, $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ [29], поэтому на границе раздела не возникает нефизичных фиктивных источников излучения. В нашем случае диэлектрическую границу раздела необходимо поставить в узел E_z , то есть проницаемость ε вычисляется в полуцелых узлах сетки. В противном случае аппроксимации в норме C не будет. Будет иметь место лишь сходимость в норме L с дробным показателем.

2.1.3 Немонотонность схемы Йе

Важное свойство, которым должна обладать надежная схема – это монотонность. По определению, однородные разностные схемы, сохраняющие монотонность профиля разностного решения, называются монотонными. В работе Годунова [96] был впервые сформулирован критерий монотонности и доказано, что среди схем порядка точности выше первого для линейного однородного уравнения переноса с постоянной скоростью нет схем, удовлетворяющих условию монотонности.

В нашем случае в качестве «основного уравнения» выступает система уравнений Максвелла (1.1), которая представляет собой систему уравнений переноса (система уравнений гиперболического типа). Как следствие из теоремы Годунова, для нее справедливо следующее утверждение: двухслойная линейная монотонная схема для системы уравнений гиперболического типа не может иметь порядок точности $p \geq 2$.

Поэтому схема Йе, являющаяся двухслойной и обладающая вторым порядком аппроксимации, является немонотонной. При расчете неоднородных сред ее фактический порядок точности p оказывается меньше, чем $p_{th} = 2$. В разделе 2.3 проявление немонотонности схемы Йе показано на примере одномерной задачи о прохождении плоской электромагнитной волны через кремниевую пластинку.

В литературе (см, например, [50-56]) многократно отмечалось катастрофическое снижение точности схемы Йе вблизи границы раздела, однако причина этого явления оставалась неизвестной. Согласно сказанному выше, эта причина заключается в немонотонности схемы. Поэтому в прикладных расчетах целесообразно либо использовать монотонные схемы, либо рекуррентно повышать порядок точности при расчетах на сгущающихся сетках методом Ричардсона-Калиткина. Применение этого метода к расчетам по схеме Йе было впервые сделано в диссертации. Процедура позволяет существенно повысить точность вычислений. В отличие от ранее предлагавшихся подходов, метод сгущения сеток не требует модификации исходных FDTD уравнений и обеспечивает не только $p = p_{th}$, но также $p = 3, 4$ и более высоких порядков и позволяет получать точность вплоть до ошибок компьютерного округления.

2.2 Алгоритм повышения точности вычислений

2.2.1 Процедура сгущения сеток

Для простоты рассмотрим соответствующую процедуру на примере одномерной задачи. Обобщение на многомерный случай производится элементарно. Пусть проведены расчеты на достаточно большом числе равномерных или квазиравномерных сеток, сгущающихся в $r > 1$ раз.

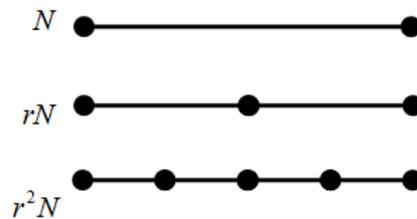


Рисунок 2.2. Расположение узлов при сгущении равномерной сетки

Выберем три соседние сетки с количеством шагов N , rN , r^2N (см. рисунок 2.2). Тогда всем узлам первой сетки x_n , $1 \leq n \leq N$, будут соответствовать

узлы x_m второй сетки и x_{r^2n} третьей сетки. В результате такого расчета получим набор численных решений; например, для электрического поля E_N, E_{rN}, E_{r^2N} .

Пусть из теоретического анализа разностной схемы нам известно, что последняя имеет порядок точности p_{th} . В частности, в линейных задачах он не ниже порядка аппроксимации, поэтому изначально выбирают $p = p_{th}$. Первая формула Ричардсона [97] дает апостериорную оценку погрешности R_{rN} сеточного решения E_{rN} в узлах x_n

$$R_{rN} = \frac{E_{rN} - E_N}{r^p - 1} + o(N^{-p}) \quad (2.5)$$

Эта оценка является не мажорантной, а асимптотически точной, так как на достаточно подробных сетках остаточный член $o(N^{-p})$ пренебрежимо мал.

Дополнительно производится анализ поведения эффективного порядка точности

$$\bar{p}_{r^2N} = \frac{\lg(R_{rN}/R_{r^2N})}{\lg r} \quad (2.6)$$

Если он монотонно стремится к p , то оценку погрешности можно производить поточечно. Если порядок точности заранее неизвестен, то аналогичные результаты можно получить с помощью метода Эйткена [97].

2.2.2 Рекуррентное уточнение решения

Решение на более подробной сетке может быть экстраполяционно уточнено в тех узлах, которые совпадают с узлами самой грубой из сеток. Это можно сделать по второй формуле Ричардсона [97]

$$\tilde{E}_{rN} = E_{rN} + R_{rN} + o(N^{-p}) \quad (2.7)$$

Такое уточнение эквивалентно расчету по схеме более высокого порядка точности. К нему можно снова применить формулы Ричардсона (2.5), (2.7).

Формулы m -ого уточнения на k -ой сетке имеют следующий вид:

$$R_k^{m-1} = \frac{v_k^{m-1} - v_{k-1}^{m-1}}{r^{p+2(m-1)} - 1}; \quad v_k^m = v_k^{m-1} + R_k^{m-1}; \quad \bar{p}_k^{m-1} = \frac{\lg(R_{k-1}^{m-1}/R_k^{m-1})}{\lg r}. \quad (2.8)$$

Отметим, что такие вычисления требуют лишь небольшого числа арифметических операций, но при этом позволяют существенно повысить порядок точности. При этом для каждого последующего сгущения необходима достаточно высокая гладкость решения.

2.3 Тестовые расчеты

2.3.1 Физическая постановка задачи

Рассмотрим плоскопараллельную пластину «воздух–кремний–воздух». Пусть на нее нормально падает плоская электромагнитная волна, имеющая гауссов профиль импульса, нормированный на единицу (см. рисунок 2.3). Обозначим центральную длину волны импульса через λ .

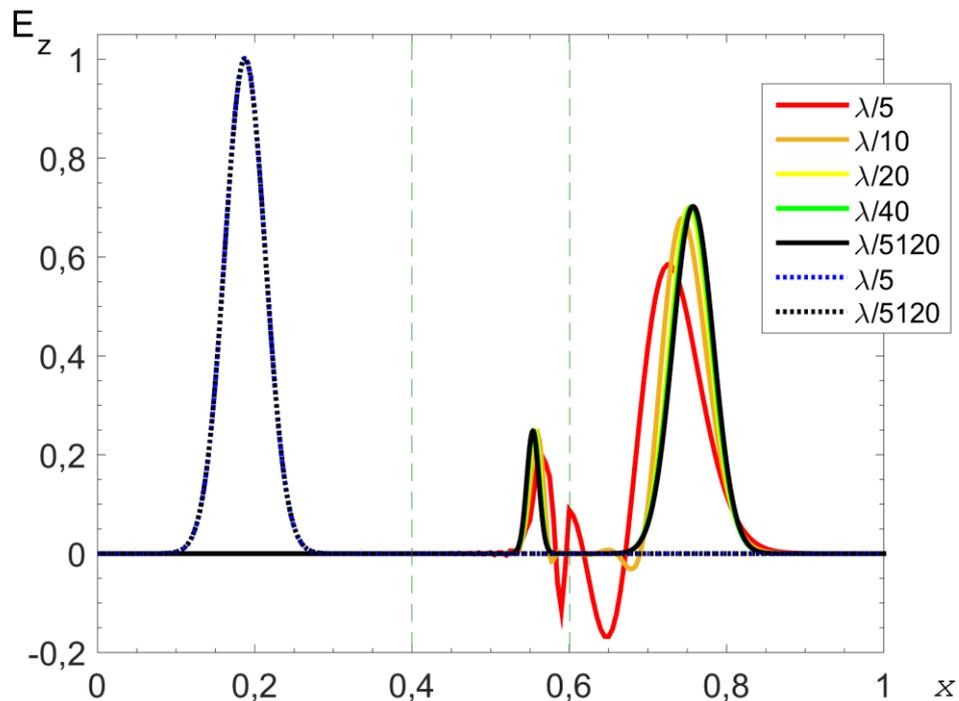


Рисунок 2.3. Зависимость электрической напряженности от координаты на сгущающихся сетках с учетом уточнения решения

Вычисления проводятся в диапазоне длин волн $0.6 - 1.4$ мкм на 64-разрядном персональном компьютере с применением метода Ричардсона-Калиткина. Диэлектрическая проницаемость пластинки из кристаллического кремния c-Si составляет примерно $\varepsilon=11.56$ [98]. Геометрические параметры задачи подобраны так, чтобы толщина пластинки равнялась 2λ .

2.3.2 Однородная среда

Пока импульс не достиг границы раздела, он распространяется в однородной среде. Его профиль в зависимости от координаты x для некоторого момента времени показан на рисунке 2.3 пунктирными линиями.

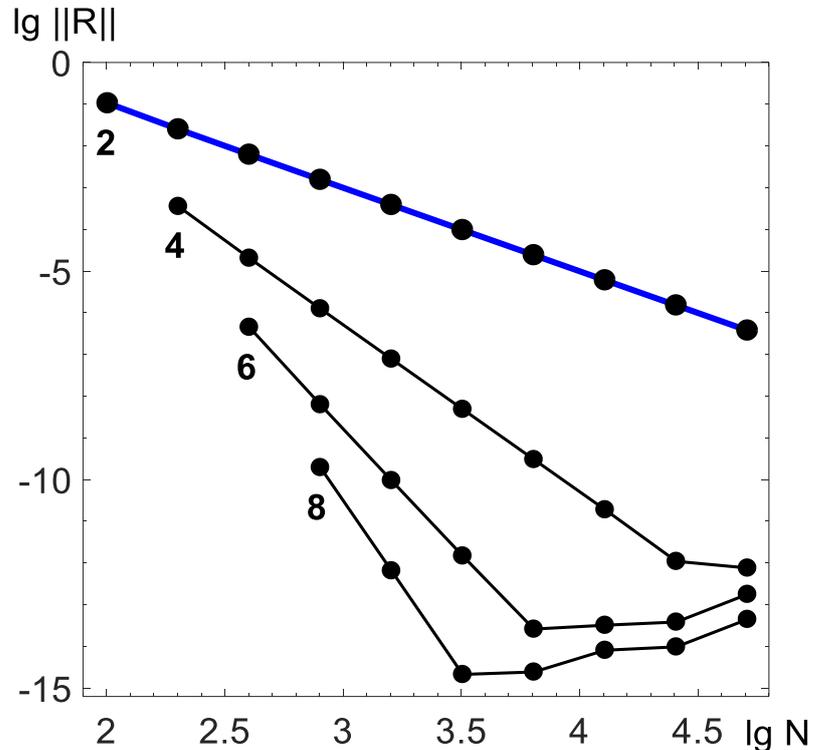


Рисунок 2.4. Погрешности решения в случае однородной среды. Цифры около линий – фактический порядок точности

На рисунке 2.4 приведены нормы S погрешностей решения $\|R\|$ в зависимости от числа шагов N в двойном логарифмическом масштабе. Синяя линия соответствует расчету по исходной схеме, черные – по ее рекуррентным

уточнениям. Видно, что регулярные участки кривых асимптотически выходят на прямые линии.

По скорости убывания погрешности были найдены эффективные значения порядка точности, которые приведены в табл. 2.1. Видно, что для исходной схемы при каждом сгущении сетки эффективный порядок точности \bar{p}_k^0 стремится к фактическому $p = 2$. Последний совпадает с теоретическим p_{th} . Заметим, что это стремление немонотонно (значение \bar{p}_k^0 может быть как больше, так и меньше p). По-видимому, это связано с немонотонностью схемы Йе, которое проявляется при распространении импульса даже в воздухе.

Таблица 2.1. Сравнение эффективных порядков точности для однородной среды (воздух) с их теоретическими значениями

k	h	N	\bar{p}_k^0	\bar{p}_k^1	\bar{p}_k^2	\bar{p}_k^3
1	$\lambda/5$	100	2.0739	–	–	–
2	$\lambda/10$	200	2.0197	4.1192	–	–
3	$\lambda/20$	400	2.0031	4.0295	6.1688	–
4	$\lambda/40$	800	1.9998	4.0062	6.0359	8.2052
5	$\lambda/80$	1600	2.0031	4.0029	6.0127	8.2716
6	$\lambda/160$	3200	1.9998	3.9996	5.8134	-0.1993
	p_{th}		2	4	6	8

Каждое рекуррентное уточнение повышает порядок точности на 2, так как ошибка в схеме Йе раскладывается в ряд только по четным степеням шага. На достаточно подробных сетках погрешности решений, полученных в результате рекуррентных уточнений, выходят на фон ошибок округления. Этот фон тем выше, чем больше N , поэтому избыточно подробные сетки выбирать не следует. Соответствующие значения \bar{p} , найденные по формуле (2.6), не являются

достоверными, они выделены красным. Из табл. 2.1 видно, что в данном примере целесообразно ограничиться шестым порядком точности.

2.3.3 Слоистая среда

Рассмотрим теперь ситуацию, когда электромагнитный импульс достиг пластинки, то есть распространяется в слоистой среде. Профили импульса $E_z(x)$ для этого случая показаны на рисунке 2.3 сплошными линиями. Для наглядности границы раздела «воздух–Si» и «Si–воздух» изображены зелеными штриховыми линиями. Здесь импульс уже вышел из пластинки (сплошные линии), причем отраженная волна успела уйти влево за пределы расчетной области. Видно, что на нескольких первых сетках вблизи границы раздела решение начинает сильно осциллировать, что свидетельствует о немонотонности разностной схемы. На достаточно подробных сетках немонотонность также имеет место, но амплитуда осцилляций значительно уменьшается.

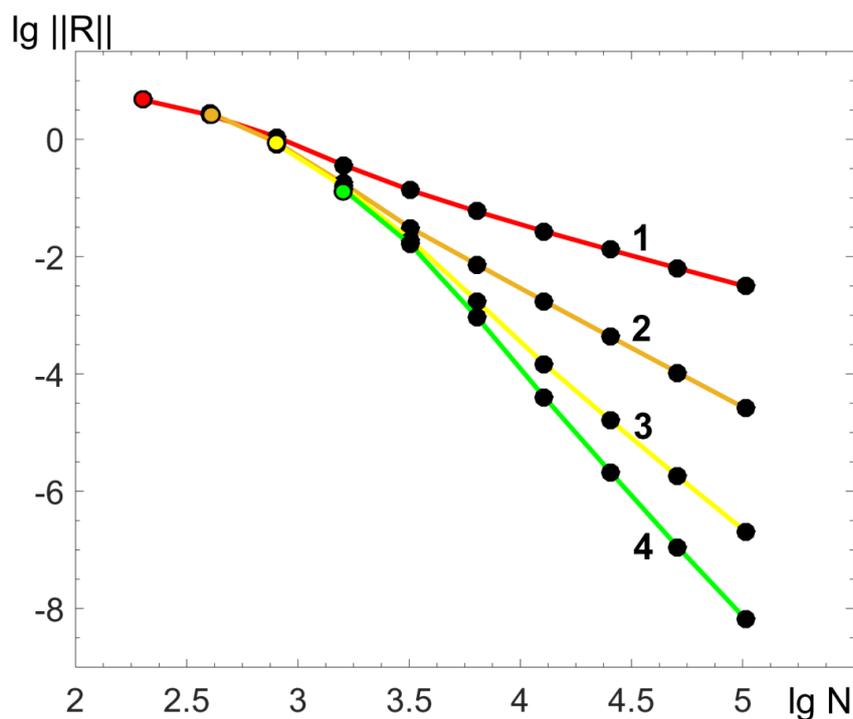


Рисунок 2.5. Погрешности решения в случае слоистой среды. Цифры около линий – фактический порядок точности. Цвета соответствуют легенде рисунку 2.3

На рисунке 2.5 приведены нормы C погрешностей решения $\|R\|$ для этого расчета в зависимости от числа шагов N в двойном логарифмическом масштабе. Регулярные участки кривых асимптотически выходят на прямые с углом наклона $\text{tg}\alpha = -p$. Фактический порядок точности p указан около каждой из линий. При отсутствии рекуррентных уточнений (красная кривая) он равен $p = 1$. Видно, что применение метода сгущения сеток повышает точность вычислений (оранжевая, желтая и зеленая кривые).

Таблица 2.2. Сравнение эффективных порядков точности для неоднородной среды (воздух-кремний-воздух) с их фактическими значениями

k	h	N	\bar{p}_k^0	\bar{p}_k^1	\bar{p}_k^2	\bar{p}_k^3
1	$\lambda/5$	100	0.8610	—	—	—
2	$\lambda/10$	200	1.2414	1.6935	—	—
3	$\lambda/20$	400	1.5866	2.3168	2.3834	—
4	$\lambda/40$	800	1.4244	2.5144	2.0230	3.1027
5	$\lambda/80$	1600	1.2128	2.0862	3.4880	4.1358
6	$\lambda/160$	3200	1.1228	2.0662	3.5445	4.5112
7	$\lambda/320$	6400	1.0564	2.0363	3.2356	4.2953
8	$\lambda/640$	12800	1.0298	2.0197	3.1525	4.2155
9	$\lambda/1280$	25600	1.0165	2.0098	3.0861	4.0395
	p		1	2	3	4

Эффективные порядки точности, найденные по скорости убывания погрешности, приведены в табл. 2.2. При наличии кремниевой пластинки наблюдается как увеличение, так и уменьшение значений эффективного порядка точности \bar{p} от сетки к сетке. Напомним, что при теоретической сходимости \bar{p} должен стремиться к фактическому только снизу, либо только сверху и не должен «перескакивать» через значение p . Значения, выделенные красным,

соответствуют нерегулярным участкам кривой сходимости. Немонотонность схемы Йе порождает не только не правильное качественное поведение численного решения, но и очень большую ошибку. В результате это приводит к тому, что порядки точности $\bar{p}_k^0 \rightarrow 1$, тем самым $p \neq p_{th}$.

Видно, что при проведении рекуррентных уточнений, эффективные порядки точности стремятся к фактическому значению, которое не совпадает с теоретическим. При этом с каждым уточнением значение p повышается лишь на единицу. В данном расчете не был достигнут фон ошибок округления, при необходимости порядок точности и саму точность вычислений можно еще повысить. Однако уже $p = 4$ вполне достаточно, чтобы проводить высокоточные расчеты.

Подчеркнем одну важную тонкость. Рекуррентные уточнения не делают схему монотонной в строгом смысле, но количественно значительно уменьшают нефизичные осцилляции. Это позволяет кардинально повысить точность расчета.

2.3.4 Апостериорное исследование

Проведение расчетов на сгущающихся сетках и апостериорный контроль точности по методу Ричардсона-Калиткина позволяют не только найти численное решение с высокой точностью, но и доказать существование единственного точного решения задачи в том классе функций, для которых исследовалась аппроксимация. Это можно сделать, опираясь на теоремы Рябенского-Филлипова [35]. Первая из этих теорем утверждает, что из аппроксимации и устойчивости вытекает разностной схемы. Согласно второй теореме, порядок точности не может быть меньше порядка аппроксимации. Содержание этих теорем общеизвестно. Третья теорема обосновывает оценки точности по методу Ричардсона. К сожалению, она малоизвестна. Четвертая теорема еще более нетривиальна. Приедем ее.

Теорема. *Если для задачи существует хотя бы одна корректная разностная схема, аппроксимирующая задачу на функциях $u(x,t)$ из класса U , то*

решение задачи в этом классе существует и единственно. Если сеточная правая часть непрерывна по h и по τ , то $u(x,t)$ непрерывно зависит от правых частей исходных дифференциальных уравнений.

Таким образом, расчеты на сгущающихся сетках могут быть удобным и эффективным аппаратом теоретического исследования.

2.4 Жесткие задачи электродинамики

2.4.1 Слоистые диэлектрические среды

Характерные трудности, возникающие при расчете слоистых сред с большим контрастом показателей преломления, были описаны в разд. 1.2.4. В диссертации предлагается кусочно-квазиравномерная сетка, обеспечивающая плавное, но достаточно быстрое уменьшение шага от крупного в свободном пространстве до малого внутри оптически толстой среды.

Квазиравномерные сетки. Напомним определение квазиравномерных сеток. Они были предложены Самарским и развиты Калиткиным и его учениками [97]. По определению, квазиравномерная сетка $\{x_j\}$ получается из равномерной сетки $\{\xi_j\}$, $\xi_j - \xi_{j-1} = \text{const}$ в результате преобразования, которое удовлетворяет следующим условиям:

- 1) $x(\xi)$ является гладкой функцией,
- 2) $x(\xi)$ монотонно возрастает,
- 3) $x(\xi)$ переводит сегмент $\xi \in [\alpha, \beta]$ в заданный отрезок $x \in [a, b]$.

Шаг квазиравномерной сетки определяется по формуле $h_j = \Delta\xi \cdot x'(\xi_{j+1/2})$, где $\Delta\xi$ – шаг по вспомогательной переменной ξ . Эта формула обобщает традиционное определение $h_j = x_{j+1} - x_j$. Заметим, что разность двух соседних шагов равна $\Delta h = h_j - h_{j-1} = O(h^2)$, то есть шаги меняются плавно. В этом заключается

принципиальная разница между произвольными неравномерными сетками и квазиравномерными сетками.

Адаптивная сетка. Главным вопросом является выбор подходящего преобразования $x(\xi)$, которое обеспечивает достаточно подробную сетку в областях, где поле меняется сильно, и грубую сетку в областях плавного изменения поля. В диссертации построена такая сетка для слоистых диэлектрических сред с кусочно-постоянной диэлектрической проницаемостью. Данный подход применим к многомерным задачам, но для простоты мы проиллюстрируем его на примере простейшей одномерной задачи.

Пусть плоская волна падает на границу раздела диэлектриков с показателями преломления n_l и n_r . Пусть волновое число в свободном пространстве равно k_0 . Пусть расчетная область есть $x \in [-a, a]$, и граница раздела соответствует $x = 0$. Для определенности будем считать, что $n_l < n_r$.

Для однородной среды естественно выбирать постоянный шаг $h_{l,r} \sim [Jk_0^2 a^2 \text{Re}n_{l,r}]^{-1}$, поскольку волновое число $k_0^2 \text{Re}n_{l,r}$ остается постоянным. При наличии границы раздела физическая картина меняется. Волна достигает границы раздела и частично отражается. Перед границей раздела амплитуда поля увеличивается. На границе поле преломляется, то есть **E** и **H** претерпевают излом. Справа от границы раздела волна распространяется с увеличенным волновым числом $k_0 \text{Re}n_r$. Тем самым, непосредственно вблизи границы раздела шаг должен плавно уменьшиться от h_l до h_r , то есть отношение шагов в точках $x=0$ и $x=-a$ должно равняться $\text{Re}n_r / \text{Re}n_l$. Указанным требованиям удовлетворяет следующее преобразование $x(\xi)$:

$$x(\xi) = \begin{cases} a \text{th}[c(\xi+1)(1+(\xi+1)^2/3)] - a, & -1 \leq \xi \leq 0; \\ h_r \xi, & 0 \leq \xi \leq \beta. \end{cases} \quad (2.9)$$

Здесь $\beta = a^2 k \text{Re}n_r$. Коэффициент c выбирается так, чтобы $x'(0) / x'(-1) = \text{Re}n_r / \text{Re}n_l$. Первое выражение в (2.9) построено на основе сетки,

предложенной в работе [99] для стационарного уравнения диффузии. Поясним основную идею построения этой сетки.

В упомянутой работе была дана новая трактовка структуры решения жестких задач. Традиционно в решении таких задач выделяют участок резкого изменения решения (называемый пограничным слоем) и участок, где решение меняется плавно (называемый регулярным). В работе [99] было показано, что в структуре решения следует выделять также область большой кривизны, расположенную между регулярным участком и пограничным слоем. Данная область была названа переходной зоной.

Для стационарных задач была построена квазиравномерная сетка, адаптированная к характерным масштабам задачи. Было показано, что эта сетка содержала примерно одинаковое число узлов в каждом из трех участков решения (регулярная часть, переходная область и пограничный слой), что позволило детально передавать все характерные особенности решения задачи.

Естественно, такую сетку целесообразно использовать для широкого класса жестких задач, решение которых содержит участки как очень резкого, так и сравнительно плавного изменения. В нашей задаче участком резкого изменения решения является область, соответствующая оптически плотной среде. Переходная зона, тем самым, приходится на область в непосредственной близости от границы раздела.

Заметим, что формально из-за преломления полей кривизну решения на границе раздела можно считать бесконечной. Однако любой шаг сетки должен иметь конечную величину (а не бесконечно малую).

Таким образом, в диссертации сетка, предложенная для эллиптических жестких задач, была обобщена на нестационарные гиперболические жесткие задачи, в которых волновое число может резко меняться из-за изменения материальных параметров среды.

Сравнение с известными сетками проведем на примере сетки, предложенной в [100]. Эта сетка имеет вид

$$x(\xi) = A + (B + C\xi)^\alpha. \quad (2.10)$$

Здесь A , B , C , α – настроечные параметры. Зависимость x от ξ для преобразований (2.9) и (2.10) представлена на рисунке 2.6. Видно, что сетка (2.10) избыточно увеличивает число узлов сравнительно далеко от границы раздела, где поля меняются достаточно плавно. В то же время шаг сетки (2.9) в этих областях еще достаточно велик. Поэтому сетка (2.9) обеспечивает более экономичный расчет.

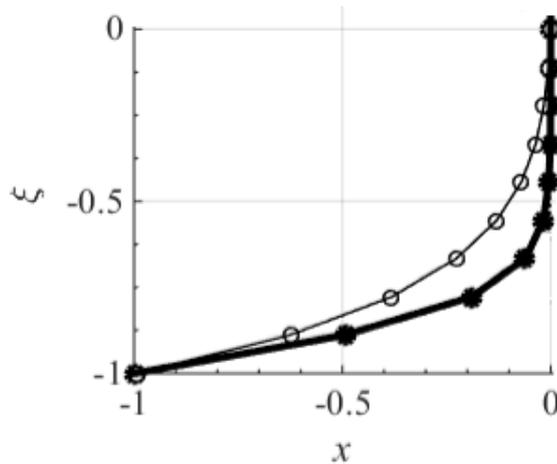


Рисунок 2.6. Сравнение преобразований $x(\xi)$, темные маркеры – (2.9), светлые – (2.10).

2.4.2 Границы раздела «диэлектрик-металл»

Амплитуда высокочастотного электромагнитного поля, проникающего в металл, невелика. В скин-слое амплитуда поля резко изменяется. Как известно, его толщина составляет $\sim 1/(k_0\sqrt{\varepsilon})$, где k_0 – волновое число в вакууме. Таким образом, в задаче присутствуют достаточно сильно различающиеся пространственные масштабы. Поэтому такие задачи также являются жесткими. В них также целесообразно использовать адаптивные сетки, но теперь малые шаги сетки должны быть адаптированы к толщине скин-слоя.

Для этой задачи сетка строится аналогично предыдущему пункту, но теперь сгущать сетку нужно с обеих сторон от границы раздела «диэлектрик-металл».

Здесь также было использовано преобразование $x(\xi)$ из работы [99]. Для отрезка $x \in [-a, a]$ итоговая сетка задается кусочно следующим образом:

$$x(\xi) = \begin{cases} a \left(\operatorname{th}[c(\xi + 1)(1 + (\xi + 1)^2)/3] - 1 \right), & \xi \in [-1; 0], \\ a \left(\operatorname{th}[c(\xi - 1)(1 + (\xi - 1)^2)/3] + 1 \right), & \xi \in [0; 1], \end{cases} \quad (2.11)$$

где c – управляющий параметр, который позволяет адаптировать шаг вблизи границы раздела к ширине пограничного слоя. Он выбирается так, чтобы

$$x'(0) = \frac{1}{1 + k_0^2 \sqrt{\varepsilon}} \quad (2.12)$$

2.4.3 Обобщения

Напомним, что схема Йе является консервативной, поэтому на границе раздела не возникает нефизичных фиктивных источников излучения. В нашем случае диэлектрическую границу необходимо поставить в узел электрического поля, то есть ε вычисляется в полуцелых узлах сетки. Такой подход относится к методам сквозного счета, так как в нем не нужно явно выделять границу раздела и сшивать поле по обе стороны от нее при помощи других методов. Предлагаемый подход удобен, единообразен и позволяет экономично решать задачи с произвольным количеством границ раздела. В последнем случае сетка, аналогичная (3.9), составляется из необходимого числа «кусков».

Метод без труда обобщается на случай неидеальных диэлектриков: точка разрыва удельной диэлектрической проводимости σ^e ставится в тот же узел, что и точка разрыва диэлектрической проницаемости ε . Аналогичным образом можно поступать и в задачах с магнитными границами раздела, когда ε непрерывна, а магнитная восприимчивость μ и удельная магнитная проводимость σ^m являются кусочно-непрерывными. Тогда в точки разрыва μ и σ^m нужно поставить узел сетки, относящейся к магнитному полю.

Предложенный метод можно непосредственно применять к многомерным задачам с прямоугольной геометрией, так как в этом случае многомерные сетки для полей строятся как декартово произведение одномерных.

Основные результаты главы

Показано, что точность расчетов по методу конечных разностей во временной области (FDTD) можно радикально повысить, проводя вычисления на сгущающихся сетках и рекуррентно уточняя решение по методу Ричардсона. Впервые для данного класса задач получена апостериорная асимптотически точная оценка погрешности сеточного решения.

Установлено, что катастрофическое снижение точности схемы Йе при расчетах неоднородных диэлектрических сред возникает из-за ее немонотонности. При этом фактический порядок точности схемы снижается до первого. Показано, что метод сгущения сеток позволяет улучшить точность на много порядков и многократно повысить порядок точности. Таким образом, экстраполяционное уточнение по формулам Ричардсона оказывается одним из способов построения «почти монотонных» схем.

Предложенные подходы проиллюстрированы на конкретных примерах. В качестве тестовых задач рассмотрено распространение нормированного гауссова импульса в свободном пространстве и через слоистую диэлектрическую среду (кремниевую пластинку, помещенную в воздухе). Проведены вычисления с многократным повышением порядка. Получено уменьшение фактической погрешности до $10^6 - 10^9$ раз (в зависимости от задачи).

Для жестких задач электродинамики (слоистые диэлектрические среды с большим контрастом показателей преломления, а также задачи со скин-слоями) предложены квазиравномерные сетки, обеспечивающие примерно одинаковое число узлов во всех характерных участках решения. Построенные сетки обеспечивают достаточно мелкий шаг в оптически плотной среде (или внутри

скин-слоя) и вблизи границ раздела сред, где велика кривизна решения. При этом шаг в свободном пространстве остается достаточно большим, что делает расчет экономичным. Поскольку построенные сетки являются квазиравномерными, для них применим метод сгущения сеток и оценки точности по методу Ричардсона.

Совокупность предложенных подходов позволяет существенно повысить точность расчетов электродинамических задач, возникающих при проектировании устройств интегральной фотоники и новой экспериментальной техники на их основе.

ГЛАВА 3 Моделирование метапленок из сферических частиц

При проектировании новых технических систем (в частности, экспериментальной техники, основанной на новых физических принципах) необходимо решать обратную задачу, то есть определять такие параметры системы, которые обеспечивали бы заданный отклик на внешнее воздействие. Решение обратной задачи сводится к многократному решению прямой задачи (то есть расчету отклика системы с некоторыми заданными параметрами).

Использование прямых численных расчетов в таких задачах исключительно трудоемко, более перспективным представляется решение прямой задачи с помощью аналитических моделей. Однако такие модели имеют границы применимости, за пределами которых точность резко падает. Поэтому для практики важно знать границы применимости наиболее употребительных моделей и оценки их точности.

В данной главе получены границы применимости дипольного приближения для оптически прозрачного шара. В отличие от известных ранее подходов, предлагаемый критерий дает также количественную оценку точности дипольного приближения. Показано, что положения электрического и магнитного дипольных резонансов такого шара описываются линейными соотношениями между длиной падающей волны, деленной на радиус шара, и показателем преломления материала. Исследованы границы применимости и дана оценка точности ряда известных моделей метапленки из сферических частиц в однородной непоглощающей среде.

Прямой численный расчет метапленки, состоящей из частиц сложной формы, исключительно сложен. Однако в ряде случаев такую метапленку можно заменить эквивалентным однородным тонким слоем, который является гораздо

более простой структурой. Для нее нетрудно провести прямой численный расчет, который позволяет учесть наклонное падение исходного пучка, его некогерентность и ряд других эффектов, учет которых в полностью аналитических моделях проблематичен.

Поэтому такой гибридный подход представляется перспективным (особенно при решении сложных обратных задач). Для его реализации нужна модель замены метапленки эквивалентным однородным тонким слоем. В диссертации такая модель построена для метапленки, составленной из сферических частиц.

Материалы главы опубликованы в работах [101] – [107].

3.1 Применимость и точность известных физических моделей

Использование аналитических формул, полученных в физических моделях, существенно повышает экономичность расчетов. Однако физические модели имеют ограниченную область применимости. Это приводит к тому, что параметры структуры могут изменяться лишь в некоторых ограниченных диапазонах. За пределами этих диапазонов модели быстро теряют количественную точность или вовсе становятся неприменимыми. Чтобы использовать некоторую модель, необходимо заранее знать границы этих диапазонов.

3.1.1 Модель Евлюхина

Погрешность модели. Как уже отмечалось, основным источником погрешности в модели Евлюхина является замена метаатома парой электрического и магнитного диполей. Поэтому модель применима тогда, когда справедливо дипольное приближение.

Покажем, что оно накладывает ограничения на период метапленки. В самом деле, излучение каждого метаатома содержит вклады от различных мультипольностей: дипольный, квадрупольный и т.д. Энергия соответствующих взаимодействий убывает с увеличением расстояния между частицами, причем основным слагаемым является диполь-дипольное взаимодействие (оно убывает медленнее остальных слагаемых).

С другой стороны, если частицы расположены достаточно близко, то энергия квадрупольных взаимодействий (квадруполь-диполь, квадруполь-квадруполь и т.д.) становится сопоставима с энергией диполь-дипольного взаимодействия. В этот момент дипольное приближение становится неприменимым.

В оригинальной работе [25] Евлюхин получил другую, косвенную оценку границы применимости своей модели. Она получена из требования неотрицательности поглощения $|A|^2$ метапленки, что дает следующее ограничение на период структуры:

$$p_{\min} = \sqrt{\frac{k_0}{2} \frac{|\alpha_e^{\text{eff}}|^2 + |\alpha_m^{\text{eff}}|^2}{\text{Im}(\alpha_e^{\text{eff}}) + \text{Im}(\alpha_m^{\text{eff}})}}. \quad (3.1)$$

Эта ограничение получено из соображений внутренней непротиворечивости модели и не позволяет оценить ее количественную точность. Иными словами, вопрос о том, сколь точна замена диэлектрического шара парой диполей, остается открытым.

Потребуем, чтобы дипольный вклад в рассеянное излучение на всем рассматриваемом частотном диапазоне был основным, то есть и составлял не менее 95% по мощности. Такой подход позволяет получить не только конкретные (количественные) ограничения на размеры частицы, но и достаточно разумную оценку точности ее замены электрическим и магнитным диполями.

Пример. Проиллюстрируем применение этого критерия на примере шара из теллурида свинца PbTe , находящегося в воздухе, для диапазона длин волн от 8 до

12 мкм. Зависимость показателя преломления данного материала описывается формулой из [108]

$$n(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{30.586\lambda^2}{\lambda^2 - 2.0494} - 0.0034832\lambda^2}. \quad (3.2)$$

Однако в рассматриваемом диапазоне дисперсия практически отсутствует, и $n(\lambda)$ можно с хорошей точностью считать константой $n \approx 5.65$ [109] (см. рисунок 3.1). Его мнимая часть составляет менее 1% от вещественной (и, тем самым, пренебрежимо мала) [108]. Поэтому поглощение материала можно не учитывать.

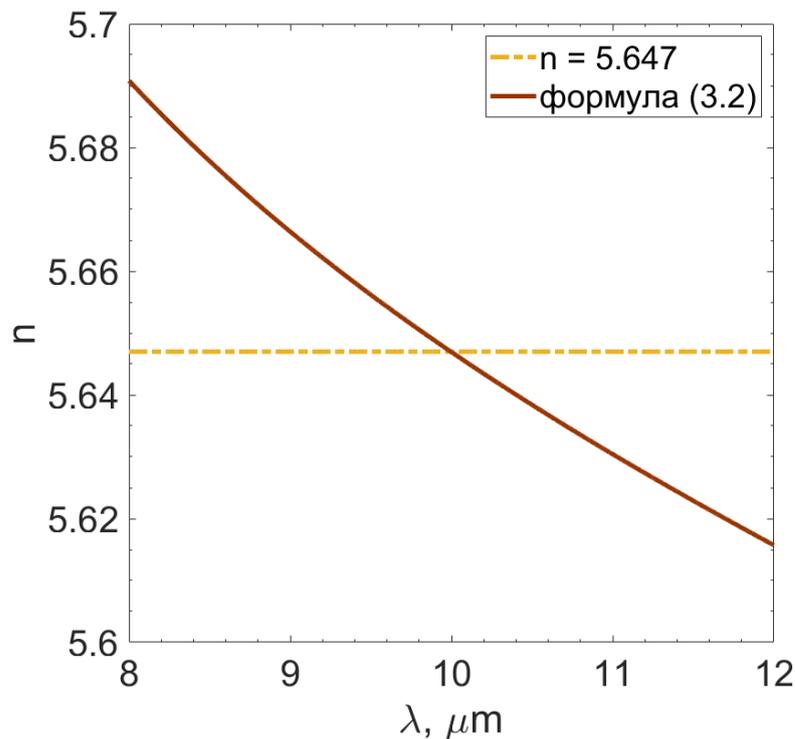


Рисунок 3.1. Зависимость показателя преломления РbТе от длины волны в диапазоне 8-12 мкм

На рисунке 3.2 показана зависимость сечения рассеяния частицы от ее радиуса r при постоянной длине волны $\lambda = 8$ мкм. Традиционно сечение строят в зависимости от длины волны, однако в данном случае график в таких координатах оказывается менее информативным.

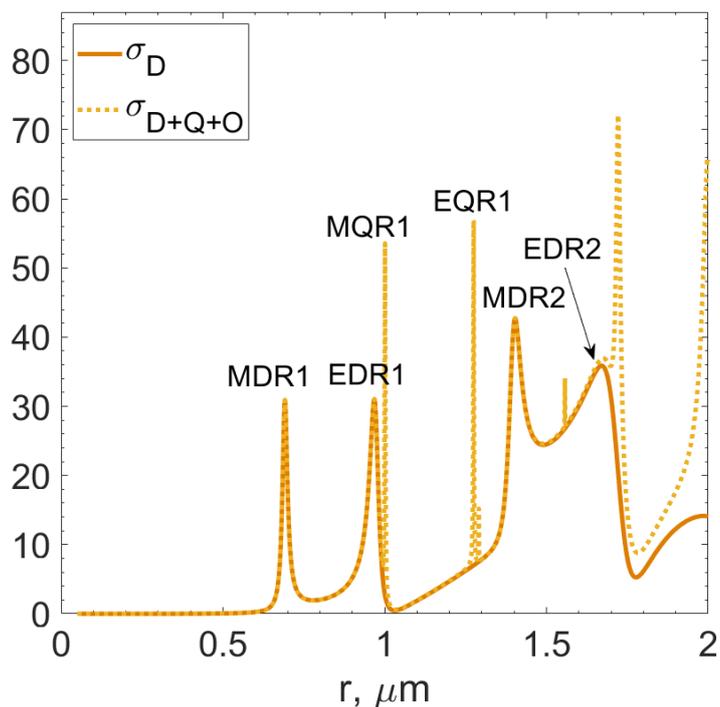


Рисунок 3.2. Зависимость сечения рассеяния (в единицах μm^2) от радиуса сферического метаатома при постоянной длине волны $\lambda = 8 \mu\text{m}$. Обозначения резонансов: MDR1 – первый магнитный дипольный, EDR1 – первый электрический дипольный, MQR1 – первый магнитный квадрупольный, EQR1 – первый электрический квадрупольный, MDR2 – второй магнитный дипольный, EDR2 – второй электрический дипольный. Сплошной линией отмечен дипольный вклад.

Видно, что сечение рассеяния носит резонансный характер, причем резонансы являются добротными. Левее всех расположен магнитный дипольный резонанс (MDR1), правее него возникает электрический дипольный резонанс (EDR1). Еще правее расположен магнитный квадрупольный резонанс (MQR1), а еще правее – следующие члены мультипольного разложения.

Поскольку резонансы являются добротными, то квадрупольные, октупольные и другие слагаемые вносят заметный вклад только вблизи соответствующего резонансного радиуса. Поэтому применимость дипольного приближения определяется положением первого магнитного квадрупольного резонанса: левее него приближение работает, а непосредственно вблизи него – уже нет.

На рисунке 3.3 представлено отношение дипольного сечения рассеяния σ_D к сумме основных слагаемых, входящих в сечение рассеяния (дипольный, квадрупольный и октупольный вклады, соответственно)

$$C = \sigma_D / (\sigma_D + \sigma_Q + \sigma_O) \quad (3.3)$$

Здесь выбрана длина волны $\lambda = 8$ мкм. Область, удовлетворяющая критерию применимости дипольного приближения (то есть $C \geq 0.95$), отчеркнута горизонтальной линией. Граница применимости дипольного приближения определяется первым пересечением указанной линии и графика $C(r)$. Это соответствует значению $\lambda/r = 8.16$.

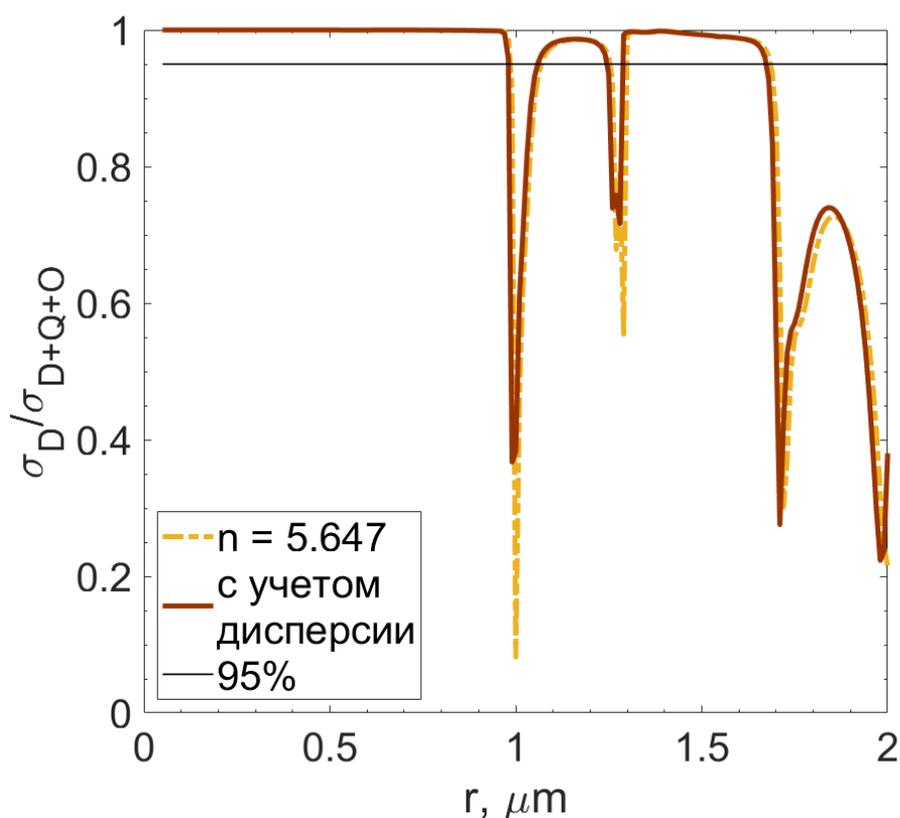


Рисунок 3.3. Критерий применимости дипольного приближения для $\lambda = 8$ мкм; штрихпунктирная линия – с учетом дисперсии по формуле (3.2), сплошная линия – для постоянного показателя преломления; горизонтальная линия – уровень 95%

Для сравнения была построена зависимость $C(r)$ с учетом дисперсии по формуле (3.2). В области применимости дипольного приближения результаты

отличаются по величине меньше, чем на 1%. Такое сравнение является представительным, так как для выбранной длины волны $\lambda = 8$ мкм отклонение показателя преломления от константы наибольшее в рассматриваемом диапазоне. Таким образом, замена показателя преломления на постоянный для исследуемого диапазона длин волн является правомерной.

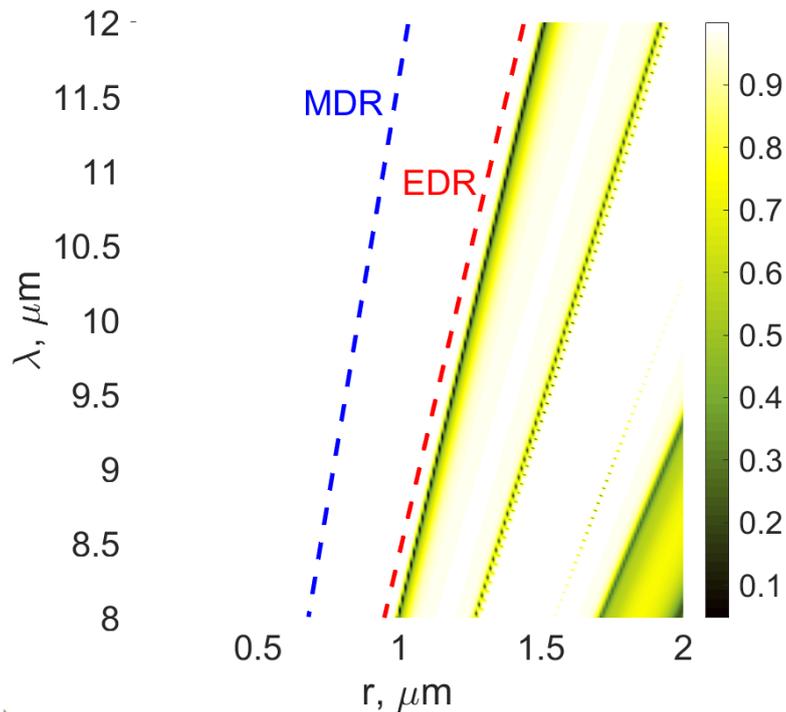


Рисунок 3.4. Зависимость отношения $C(r, \lambda)$ дипольного вклада в сечение рассеяния к полному сечению от радиуса r и длины волны λ . MDR и EDR – линии, на которых расположены соответственно магнитные и электрические дипольные резонансы при разных λ

На рисунке 3.4 показана зависимость $C(r, \lambda)$ от длины волны λ и линейного размера метаатома r . Белым выделены области, удовлетворяющие критерию применимости дипольного приближения. Пунктирными линиями показаны положения первых магнитного и электрического дипольных резонансов. Видно, что для обоих дипольных резонансов отношение λ/r постоянно. Для магнитного дипольного резонанса оно равно 11.56, а для электрического – 8.29.

В силу масштабируемости резонансов Ми, для конкретного n отношение длины волны падающего излучения к максимально допустимому размеру шара является постоянным; в данном примере оно составляет $r_{\max} \approx \lambda/8$. Проведя аналогичные вычисления для разных действительных показателей преломления от 3 до 10, было обнаружено, что λ/r практически линейно зависит от n (см. рисунок 3.5). Линия, приведенная на этом рисунке, является «пограничной». Дипольное приближение применимо выше этой линии.

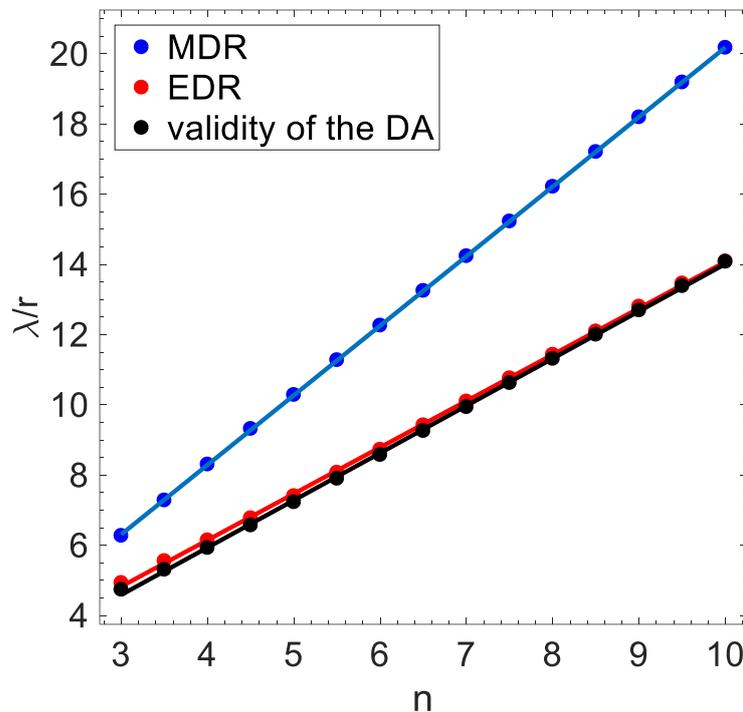


Рисунок 3.5. Применимость дипольного приближения (DA) и оценки резонансных радиусов (магнитного дипольного MDR и электрического дипольного EDR) для различных материалов

Таблица 3.1. Результаты аппроксимации

	Аппроксимация	Коэффициент корреляции
Положение магнитного дипольного резонанса	$\lambda/r = 1.98n + 0.37$	1
Положение электрического дипольного резонанса	$\lambda/r = 1.32n + 0.87$	0.9997
Применимость дипольного приближения	$\lambda/r = 1.35n + 0.55$	0.9996

Используя метод наименьших квадратов, аппроксимируем эту зависимость прямой и найдем ограничение сверху на радиус шара

$$r_{\max} \approx \lambda / (1.35n + 0.55). \quad (3.4)$$

Дипольное приближение применимо при $r \leq r_{\max}$. Аналогично были построены соотношения для описания положения первых электрического и магнитного дипольных резонансов. Уравнения этих прямых приведены в табл. 3.1. Количественным параметром, определяющим близость закона к линейному, является коэффициент корреляции. Из таблицы видно, что он практически равен 1. Заметим, что соотношение, полученное для положения магнитного резонанса, уточняет известное соотношение $\lambda \approx 2rn$ [18].

Замечания. Соотношение (3.4) правомерно лишь для недиспергирующих сред. В противном случае зависимость, представленная на рисунке 3.5, становится нелинейной, и требуется проводить исследование для $\lambda(r)$, аналогичное описанному выше. Наличие поглощения смягчает ограничения на r , то есть позволяет брать более крупные метаатомы.

Подводя итог, подчеркнем, что модель Евлюхина является точным решением задачи о скрещенных электрических и магнитных диполях, расположенных в узлах решетки метапленки. Точность модели определяется границами применимости дипольного приближения и при выполнении условия $r < r_{\max}$ составляет 5%. Такая точность вполне удовлетворительна, и модель может быть использована для дальнейших расчетов метапленок. Естественно, накладывая более жесткие ограничения на r и p , точность модели можно еще повысить.

3.1.2 Модель Кустера-Холловея

В главе 1 отмечалось, что по сравнению с моделью Елюхина, физическая точность модели Кустера-Холловея [22, 23] значительно ниже. Причина этого заключается в следующем.

Напомним, что в модели Кустера-Холлоуея производится усреднение поляризуемостей по поверхности метапленки. Этот подход правомерен, если частицы располагаются близко друг к другу, и на расстоянии порядка одного периода поляризуемости меняются незначительно. Такая ситуация аналогична усреднению в классической электродинамике, которое производится по объему вещества, макроскопически малому, но содержащему достаточно большое количество атомов или молекул.

С другой стороны, замена поляризуемостей средними их значениями не вносит большой погрешности, если частицы малы и расположены очень далеко друг от друга. Именно в таких предположениях изначально выводилась модель Кустера-Холлоуея. Однако в промежуточной ситуации, когда взаимодействие частиц сильно, и создаваемые ими поля достаточно сильно меняются на масштабах периода структуры, усреднение не является физически адекватным.

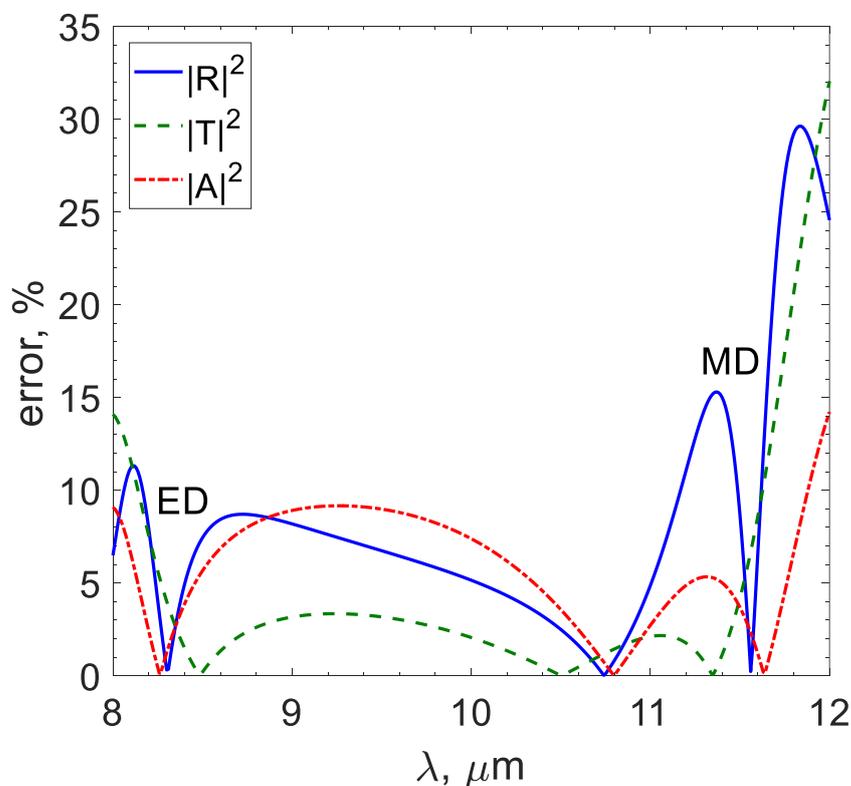


Рисунок 3.6. Относительная погрешность модели Кустера-Холлоуея. У линий отмечены положения магнитного дипольного MD и электрического дипольного ED резонансов

Найдем оценку точности этой модели, сравнивая ее с моделью Евлюхина (точность которой считаем известной из критерия применимости дипольного приближения). Пример такой оценки для отражения $|R|^2$, прохождения $|T|^2$ и поглощения $|A|^2$ изотропной метапленки приведен на рисунке 3.6.

Расчеты проводились для изотропной метапленки из PbTe с периодом структуры $p=4r$ и радиусом сферических частиц $r=0.987$ мкм. При таком размере метаатомов в рассматриваемом диапазоне длин волн от 8 до 12 мкм имеют место как магнитный MD, так и электрический ED дипольные резонансы. Из графиков видно, что относительная ошибка модели Кустера-Холлоуея в непосредственной близости резонансов менее 5%, а в остальном диапазоне составляет $\approx 10-20\%$ в зависимости от длины волны. Это связано с использованием гомогенизации при переходе от дипольных поляризуемостей к компонентам плотности поверхностной восприимчивости (1.7).

Справедливости ради отметим, что данная модель продолжает работать далеко за пределами формальных границ применимости. Так, в проведенных расчетах p и r были сопоставимы с длиной волны λ , однако модель позволяла разумно оценить характер спектра и определить его качественное поведение. Однако для решения прикладных задач (особенно, связанных с проектированием метапленок с заданными свойствами) такая точность является неудовлетворительной.

3.2 Замена метапленки однородным слоем

В отличие от трехмерных метаматериалов, метапленки имеют в z -направлении только один слой включений. Поэтому для них неприменима традиционная процедура объемного усреднения. В классической электродинамике она позволяла определить материальные параметры вещества, однако для метапленок этот вопрос требует разработки нетривиального подхода.

С другой стороны, в моделях Кустера-Холлоуея [22, 23] и Симовского [67, 68] при выводе обобщенных граничных условий для метапленки из сферических частиц, расположенных на подложке, ее структуру заменяют эффективным однородным слоем нулевой толщины. Вопросы о правомерности и взаимной однозначности подобной замены, а также о толщине эквивалентного однородного слоя, которым заменяется метапленка, остаются открытыми.

Из всего многообразия моделей гомогенизации метаповерхностей практический интерес представляют лишь те подходы, в которых материальные параметры могут быть непосредственно рассчитаны по коэффициентам R и T . В [110, 111] обсуждалась возможность замены метапленки из сферических частиц однородной пластинкой толщины L , расположенной как на рисунке 2.9. Было показано, что вдали от резонансов нормальные составляющие χ_{es} и χ_{ms} метапленки связаны с геометрическим и материальными параметрами пластинки следующим образом:

$$\chi_{es} = L(\varepsilon - 1); \quad \chi_{ms} = L(\mu - 1). \quad (3.5)$$

Здесь ε и μ – диэлектрическая проницаемость и магнитная восприимчивость соответственно. Все величины, кроме L , являются комплексными.

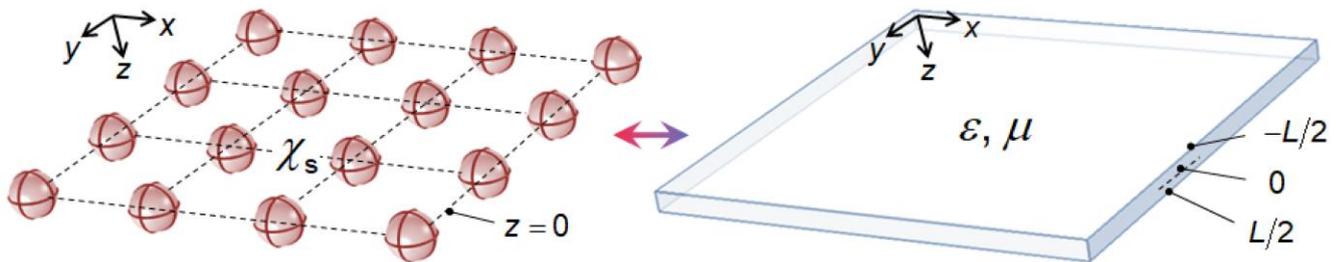


Рисунок 3.7. Схематическое изображение замены метапленки эквивалентным однородным слоем толщины L

Система (3.5) содержит 2 уравнения относительно 3 неизвестных. Из нее невозможно однозначно определить толщину L и материальные параметры ε и μ . Поэтому Холлоуей в указанной выше работе сделал вывод о произволе в

выборе параметров эквивалентной тонкой пленки. Покажем далее, как следует замкнуть данную систему уравнений.

3.2.1 Замыкание системы уравнений

Допустим, что существует однородная тонкая пленка, эквивалентная заданной изотропной метапленке. Под эквивалентностью будем понимать, что они имеют одинаковые электродинамические характеристики (коэффициенты отражения R , прохождения T и поглощения A) и компоненты плотности поверхностной восприимчивости χ_{es} и χ_{ms} . Для простоты ограничимся нормальным падением плоской волны на каждую из структур. Так как они имеют одинаковый отклик на внешнее излучение, то для описания метапленки можно использовать материальные параметры эквивалентной тонкой пленки. Найдем ее толщину L .

В нерезонансном случае могут быть использованы линейные выражения (3.5), связывающие материальные параметры метапленки и однородного слоя. Так как любой материал обладает некоторым поглощением, то систему (3.5) необходимо дополнить законом Бугера-Ламберта-Бэра, описывающим поглощение света в прозрачной среде [112]

$$I = I_0 e^{-L\delta}, \quad \delta = 2\text{Im}k \geq 0, \quad k = 2\pi n/\lambda. \quad (3.6)$$

Здесь I_0 и I – интенсивности падающего и прошедшего через слой излучения, δ – коэффициент поглощения, k – волновое число в веществе с показателем преломления $n = \pm\sqrt{\varepsilon\mu}$. Знак «-» перед корнем соответствует случаю метаматериала с отрицательным показателем преломления, у которого $\text{Re}\varepsilon < 0$ и $\text{Re}\mu < 0$, во всех остальных случаях берется знак «+».

Учитывая, что $I/I_0 = T$, перепишем (3.6) в более удобной форме

$$\ln T + \frac{4\pi}{\lambda_0} L \text{Im}n = 0. \quad (3.7)$$

Выразим ε и μ из (3.5)

$$\varepsilon = 1 + \frac{\chi_{\text{es}}}{L}; \quad \mu = 1 + \frac{\chi_{\text{ms}}}{L} \quad (3.8)$$

и подставим их в (3.7). После упрощений (3.7) будет иметь вид:

$$\ln T + \frac{4\pi}{\lambda_0} \sqrt{2} \sqrt{PQ - \chi_{\text{es}}\chi_{\text{ms}} + L\text{Re}(\chi_{\text{es}} + \chi_{\text{ms}}) - L^2} = 0, \quad (3.9)$$

$$P = \sqrt{|\chi_{\text{es}}|^2 + 2L\text{Re}\chi_{\text{es}} - L^2}, \quad Q = \sqrt{|\chi_{\text{ms}}|^2 + 2L\text{Re}\chi_{\text{ms}} - L^2}$$

Для вычисления χ_{es} , χ_{ms} применим следующий подход. При нормальном падении эти величины связаны с R и T достаточно простыми формулами, из которых нетрудно выразить χ_{es} и χ_{ms}

$$\chi_{\text{es}} = -\frac{2i R + T - 1}{k_0 R + T + 1}; \quad \chi_{\text{ms}} = -\frac{2i R - T + 1}{k_0 R - T - 1}. \quad (3.10)$$

Значения R и T найдем по модели Евлюхина. Вычисление χ_{es} и χ_{ms} через R и T является «обратной» задачей (хотя она решается на уровне аналитических формул). Соотношения (3.10) справедливы, если падающая, прошедшая и отраженная волны имеют одну поляризацию. Таким образом, все величины, входящие в (3.9), определены, и это равенство можно рассматривать как уравнение относительно L .

Уравнение (3.9) имеет достаточно сложный вид, и решить его аналитически не удастся. Поэтому будем искать решение численно. Удобно использовать методы, не требующие знания производной левой части (3.9). Поэтому был выбран метод дихотомии (деления отрезка пополам).

3.2.2 Пример

В качестве примера рассмотрим метапленку, элементы которой сделаны из РbТе. Будем считать, что они погружены в однородную среду с показателем преломления 1. Пусть радиус сферических частиц равен $r = 0.5$ мкм и сравнительно мал, а период структуры равняется $p = 3$ мкм, длина волны

падающего излучения $\lambda \in [8,12]$ мкм. Таким образом, радиус значительно меньше длины волны, а период сопоставим с ней. Такой случай является нерезонансным.

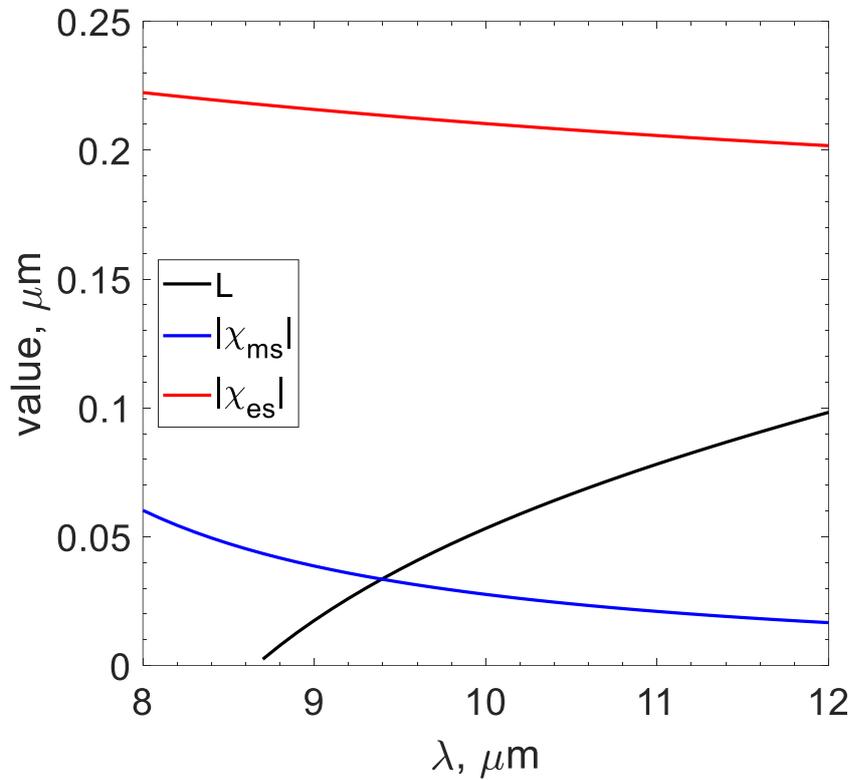


Рисунок 3.8. Толщина L эффективной тонкой пленки и нормальные компоненты плотности поверхностной восприимчивости метапленки

На рисунке 3.8 приведен результат вычисления толщины эквивалентного однородного слоя. Для наглядности на те же оси нанесены модули электрической $|\chi_{es}|$ и магнитной $|\chi_{ms}|$ компонент плотности поверхностной восприимчивости. Видно, что толщину удастся вычислить не при всех длинах волн, а именно, решение удалось построить только вдали от резонанса. Отсутствие решения означает, что заменить метапленку однородным слоем невозможно.

Из рисунка 3.8 видно, что там, где решение существует, оно зависит от длины волны. Это объясняется тем, что отклик метапленки зависит от длины волны, так как метаатомы могут рассматриваться как вторичные источники Гюйгенса. Кроме того, по мере приближения к резонансу толщина L

уменьшается. Это косвенно показывает правомерность рассмотрения резонансной метапленки как некоторой границы раздела нулевой толщины $L \rightarrow 0$. С другой стороны, вдали от резонансов найденная толщина оказывается сопоставимой с $|\chi_{es}|$, $|\chi_{ms}|$. Заметим также, что зависимость $L(\lambda)$ оказалась монотонной.

Зная L , по формулам (3.8) можно вычислить материальные параметры однородного слоя. В силу эквивалентности последнего исходной метапленке, их можно рассматривать как эффективные материальные параметры метапленки.

Основные результаты главы

Исследованы границы применимости и точность замены сферического диэлектрического метаатома парой электрического и магнитного диполей. Для шара из непоглощающего материала построена оценка его максимально допустимого радиуса, при котором применимо дипольное приближение. Эта оценка позволила определить точность модели Евлюхина.

Найдена оценка точности модели Кустера-Холлоуея в результате сравнения с моделью Евлюхина. Эта оценка составляет $\sim 10-20\%$. Поэтому модель Кустера-Холлоуея позволяет качественно описывать спектр метапленки, но использовать ее для количественных расчетов не удастся.

Предложена оригинальная модель замены метапленки однородным тонким слоем. Она основана на использовании закона поглощения Бугера. Модель справедлива, если размер частиц значительно меньше длины волны, то есть в нерезонансном случае. На конкретном примере показано, что такая замена возможна даже при $p < \lambda$. Показано, что толщина эквивалентного слоя оказывается частотно зависимой и малой по сравнению с размером структурных элементов метапленки.

Глава 4. Проектирование безотражательного покрытия на основе метапленки

В последние годы большое внимание уделяется исследованию возможности создания усовершенствованных функциональных покрытий на основе метаповерхностей. Например, для повышения чувствительности различных спектральных и детектирующих оптических приборов требуются просветляющие покрытия, для солнечных батарей и фотовольтаических элементов актуально создание покрытий с нулевым отражением и т.д.

Разработка таких функциональных покрытий сводится к оптимизации геометрических и материальных параметров метаповерхности (которая является простейшей обратной задачей). В диссертации предложены подходы, позволяющие существенно повысить надежность работы алгоритмов оптимизации. Эти подходы применены к конкретной задаче о безотражательном покрытии на основе метапленки из сферических частиц на подложке и показано, что такая метапленка может быть фильтрующим элементом с резонансной передаточной функцией.

Материалы главы изложены в работах [113] – [116].

4.1 Постановка задачи

Пусть частицы имеют сферическую форму, изготовлены из диэлектрика и расположены в узлах прямоугольной решетки, причем период их расположения в обоих направлениях одинаков. Пусть подложка является полубесконечной и также диэлектрической (см. рисунок 4.1).

В зависимости от конкретной постановки задачи требуется, чтобы обеспечивалось минимальное или максимальное отражение $|R_s|^2$, либо

прохождение $|T_s|^2$, либо поглощение $|A_s|^2$ либо их комбинация. Обычно заранее известен список материалов, из которых могут быть изготовлены частицы и подложка. В качестве параметров, подлежащих определению, выступают период структуры p и радиус метаатомов r .

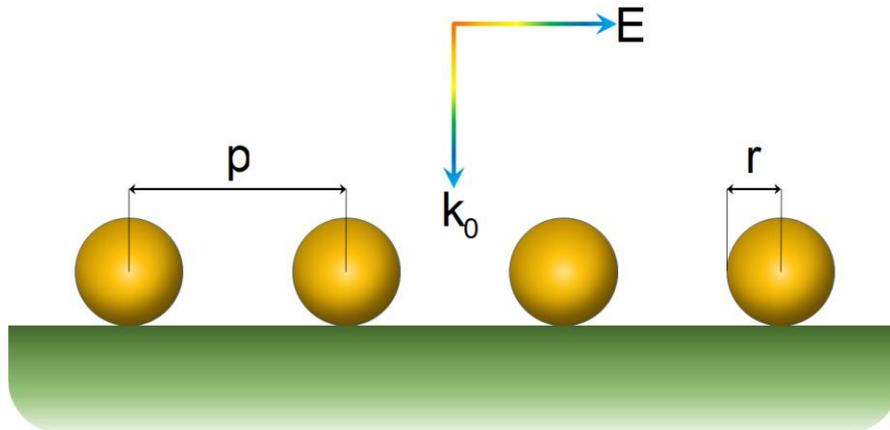


Рисунок 4.1. Схематическое изображение метаповерхности из сферических частиц на полубесконечной подложке. На структуру нормально падает электромагнитная волна

Задача оптимизации является простейшей обратной задачей. Общий подход к решению таких задач предложен Свешниковым и Ильинским [21]. В нашем случае прямой задачей является расчет электродинамического отклика метапленки на подложке. Эту задачу целесообразно решать, используя аналитические формулы, полученные из физических моделей. Использование прямого численного расчета может обеспечить более высокую точность, но потребует большого расхода вычислительных ресурсов. Для минимизации целевой функции удобнее использовать численные алгоритмы благодаря их эффективности и достаточной универсальности.

4.1.1 Ограничения на геометрические параметры

Из физического смысла задачи вытекает ряд ограничений на оптимизационные параметры. Эти ограничения бывают нескольких типов. Во-первых, очевидно, что геометрические параметры структуры являются

положительными величинами $p > 0$ и $r > 0$, а частицы не соприкасаются $p > 2r$. Во-вторых, существуют ограничения, связанные с процессом изготовления структуры. Так, радиус отдельных идентичных сферических частиц из диэлектрика крайне редко бывает менее $r_{\text{fabric}} : 50$ нм. Обычно они располагаются на подложке не вплотную, а с интервалом, равным диаметру частицы или более, поэтому $p \geq 4r$. В-третьих, следует учитывать условия, при нарушении которых используемая физическая модель становится неприменимой.

Используемые аналитические модели построены в рамках применимости дипольного приближения. Напомним, что это дает ограничение (3.4) на максимально допустимый радиус r_{max} сферической частицы. Для непоглощающих материалов он может быть найден из критерия, требующего, чтобы дипольный вклад в рассеянное излучение на всем рассматриваемом частотном диапазоне составлял не менее 95%. Соответствующая процедура описана в п. 3.1.1.

В качестве ограничения на p сверху представляется разумным выбрать $p \leq \lambda_{\text{max}}$, чтобы исключить из рассмотрения далеко расположенные друг от друга и, тем самым, слабо взаимодействующие метаатомы. Некоторые условия из перечисленных выше перекрываются, поэтому следует взять их пересечение.

4.1.2 Безотражательное покрытие

Пусть требуется минимизировать отражение $|R_s|^2$. Рассмотрим постановку задачи в двух случаях:

- 1) на фиксированной длине волны λ_* ,
- 2) в диапазоне длин волн $[\lambda_{\text{min}}, \lambda_{\text{max}}]$.

Фиксированная длина волны. Введем вектор $\mathbf{x} = \{p, r\}$, описывающий оптимизационные параметры структуры. Пусть E_2 есть двумерное векторное пространство. Обозначим допустимое множество через S_2

$$C_2 = \{\mathbf{x} \in E_2 : 4r \leq p \leq \lambda_{\max}, r_{\text{fabric}} \leq r \leq r_{\max}\}. \quad (4.1)$$

Здесь $r_{\max} \approx \lambda_*/(1.35n + 0.55)$ – максимальный радиус частиц, при котором дипольное справедливо дипольное приближение.

Тогда задача оптимизации безотражательной поверхности на одной длине волны заключается в том, чтобы определить вектор \mathbf{x} , который минимизирует функцию

$$|R_s(\mathbf{x}, \lambda_*)|^2 = \min, \quad \mathbf{x} \in C_2. \quad (4.2)$$

Диапазон длин волн. Чтобы получить минимальное отражение в диапазоне $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, выражение (4.1) необходимо проинтегрировать по длине волны на указанном отрезке

$$\int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} |R_s(\mathbf{x}, \lambda)|^2 d\lambda = \min, \quad \mathbf{x} \in C_2. \quad (4.3)$$

В качестве максимального радиуса следует взять $r_{\max} \approx \lambda_{\min}/(1.35n + 0.55)$. Такая оценка является «перестраховочной».

4.1.3 Прямая задача

В диссертации для решения прямой задачи используются аналитические модели. Как уже отмечалось, это позволяет существенно кардинально снизить трудоемкость расчета. Решение задачи оптимизации сводится к поиску минимума функции нескольких переменных достаточно сложного вида.

Были рассмотрены две модели: модель Симовского [67, 68] и модель Бабичевой [19]. Поскольку модель Симовского является лишь полуаналитической, была построена ее модификация, позволяющая проводить все вычисления полностью аналитически. Опишем эту модификацию.

Напомним, что в модели Симовского требуется знать матрицы поляризуемости метапленки в воздухе. В оригинальных работах [67, 68] эти матрицы рассчитывались численно. Чтобы сделать модель полностью аналитической, применим следующий подход. Найдем отражение R и

прохождение T в рамках модели Евлюхина и выразим через них χ_{es} и χ_{ms} по формулам (3.10). Напомним, что данные формулы справедливы, если падение волны на структуру является нормальным, а прошедшая, отраженная и падающая волны имеют одинаковую поляризацию. Полученные выражения для χ_{es} и χ_{ms} и будем использовать в модели Симовского. Тем самым, последняя становится полностью аналитической.

Заметим, что введение матриц поляризуемости подразумевает замену метапленки эквивалентной очень тонкой однородной пленкой, причем такая замена производится на каждой фиксированной длине волны.

4.2 Штрафная функция

Задачи (4.1), (4.2) и (4.1), (4.3) являются задачами на условный экстремум. Сведем их к задачам на безусловный экстремум методом штрафных функций. Традиционно используются кусочно-заданные штрафные функции: они равны нулю в допустимой области и быстро нарастают вне ее. Такие функции непрерывны и имеют непрерывную первую производную. Однако их вторая производная испытывает скачок на границе допустимой области. Это приводит к затруднениям, если градиент функции вычисляется разностно. Необходимость в этом возникает при использовании методов минимизации порядка выше нулевого (подчеркнем, что случаи, когда градиент удается вычислить аналитически, являются скорее исключениями).

Чтобы преодолеть указанную трудность, мы построили бесконечно гладкую штрафную функцию. Она учитывает ряд специфических особенностей задачи, описанных далее.

Фиксированная длина волны. Предварительный анализ поведения функции $|R_s|^2$, вычисленной как по модифицированной модели Симовского, так и по модели Бабичевой, показал, что эта функция очень сильно зависит от радиуса частиц и сравнительно слабо зависит от периода структуры. Характерный пример

такой зависимости приведен на рисунке 4.2 (использована модифицированная модель Симовского). При малых r значения $|R_s|^2$ практически не изменяются.

Наличие такого горизонтального плато, являющегося локальным минимумом, приводит к заикливаюнию вычислений и дальнейшему их срыву. На резонансных радиусах имеются глубокие овраги, в нашем случае только один из них будет находиться левее r_{\max} . Все эти лишние овраги можно откинуть, ограничив r рамками применимости дипольного приближения, однако такое ограничение не устраняет плато. Оно частично ограничивается условием $r > r_{\text{fabr}}$, однако при малых r , удовлетворяющих этому условию, рельеф функции все равно остается практически горизонтальным.

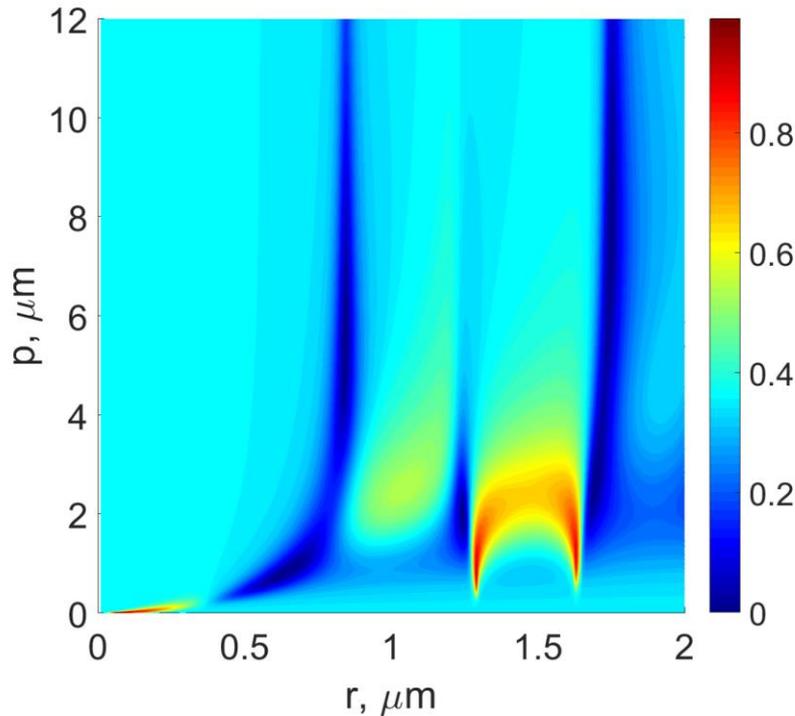


Рисунок 4.2. Зависимость $|R_s|^2$ от периода p и радиуса r на длине волны $\lambda_* = 10$ мкм по модифицированной модели Симовского

Обозначим штрафную функцию через $y(\mathbf{x})$. Она должна быть неотрицательной и заведомо превосходить целевую функцию $|R_s|^2$ за пределами допустимой области (4.1). Очевидно, по физическому смыслу $|R_s|^2 \leq 1$. Потребуем

$$y(\mathbf{x}, \lambda_*) \geq 1 \text{ при } r = r_{\text{fabr}}, r = r_{\text{max}}, p = 4r, p = \lambda_*. \quad (4.4)$$

При этом мы ожидаем, что минимум отражения будет вблизи радиуса, соответствующего магнитному дипольному резонансу r_0 (но точного совпадения с последним не будет). Поэтому целесообразно потребовать, чтобы $y(\mathbf{x}) = 0$ при $r = r_0$. Для величины r_0 возьмем результат из главы 2 $r_0 \approx \lambda_*/(1.98n + 0.37)$.

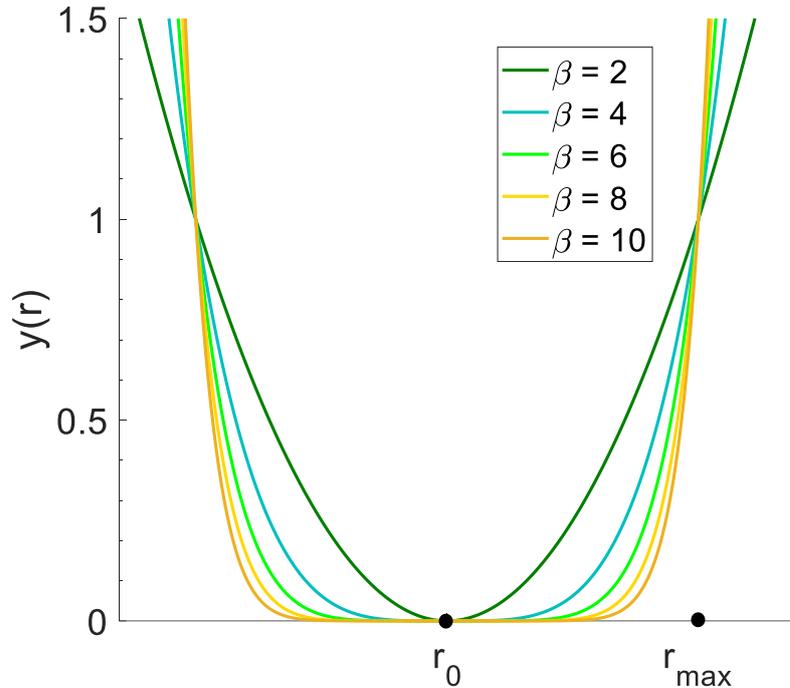


Рисунок 4.3. Штраф (4.5) при разных значениях степени β

Будем искать штрафную функцию в виде произведения $y(\mathbf{x}) = y_r(r)y_p(p)$. Построим функцию $y_r(r)$ в виде $y_r(r) = (Ar + B)^\beta$, где β – четное натуральное число. Возможны две ситуации.

(а) Пусть $r_{\text{max}} - r_0 < r_0 - r_{\text{fabr}}$ (то есть r_0 лежит ближе к r_{max} , чем к r_{fabr}). Тогда целесообразно выбрать

$$y_r(r) = \left(\frac{r - r_0}{r_{\max} - r_0} \right)^\beta. \quad (4.5)$$

Такая функция представляет собой желоб ширины $(r_{\max} - r_0)$ с центром при $r = r_0$, причем на стенке желоба (то есть при $r = r_{\max}$) имеем $y_r(r_{\max}) = 1$. Изменяя величину β , можно управлять наклоном стенок и пологостью дна: чем больше β , тем круче стенки и тем меньше $y_r(r)$ в допустимой области. Вид $y_r(r)$ при разных β показан на рисунке 4.3.

(б) Пусть теперь $r_{\max} - r_0 > r_0 - r_{\text{fabr}}$, (то есть r_0 лежит ближе к r_{fabr} , чем к r_{\max}).

Тогда выберем

$$y_r(r) = \left(\frac{r - r_0}{r_0 - r_{\text{fabr}}} \right)^\beta. \quad (4.6)$$

Вид такого $y_r(r)$ аналогичен рисунку 4.3. Какая из ситуаций (а) или (б) реализуется, мы можем определить априори (до расчета) и выбрать соответствующее $y_r(r)$.

Аналогично построим $y_p(p)$. Эта функция будет иметь следующий вид:

$$y_p(p) = \left(\frac{p - p_{\text{mid}}}{d_p} \right)^\beta. \quad (4.7)$$

Здесь $p_{\text{mid}} = (4r + \lambda_*) / 2$, $d_p = (\lambda_* - 4r) / 2$. Такое $y_p(p)$ имеет вид желоба, ориентированного вдоль прямой $p = p_{\text{mid}}$. Ширина желоба зависит от r подставляется так, чтобы на границе допустимых p выполнялось $y_p = 1$.

Задача о безотражательном покрытии на одной длине волны имеет вид

$$F^\beta[\mathbf{x}] = |R_s(\mathbf{x}, \lambda_*)|^2 + y(\mathbf{x}, \lambda_*) = \min. \quad (4.8)$$

Диапазон длин волн. Этот случай рассматривается полностью аналогично предыдущему. Здесь необходимо заменить $|R_s(\mathbf{x}, \lambda_*)|^2$ на соответствующий интеграл, а в штрафной функции (более точно, в y_p) заменить λ_* на λ_{\min} .

4.3 Процедура оптимизации

Проведем минимизацию отражения при фиксированной длине волны на основе модифицированной модели Симовского. Как будет показано ниже, эта модель достаточно груба (чтобы обеспечить разумную количественную точность, в исходной модели Симовского требуются громоздкие численные расчеты). Однако, во-первых, модифицированная модель является полностью аналитической. Во-вторых, уже в ней возникают описанные ранее принципиальные трудности, присущие рассматриваемым задачам. Поэтому к данному расчету следует относиться скорее как к представительному математическому тесту. Он используется, чтобы проиллюстрировать метод и показать достоинства предложенной штрафной функции.

Пусть метаатомы изготовлены из теллурида свинца PbTe ($n = 5.65$) и находятся на границе раздела «воздух-германий» (показатель преломления Ge равен 4). Поглощение обоих материалов в диапазоне длин волн $\lambda \in [8, 12]$ мкм пренебрежимо мало, так как их $\text{Im}n$ составляет менее 1% от $\text{Re}n$ [108]. Пусть $\lambda_* = 10$ мкм, что примерно соответствует температуре человеческого тела.

Множество допустимых параметров (4.1) имеет вид $p \in [4r, 12]$ мкм и $r \in [0.05, 0.9873]$ мкм. С помощью построенной нами штрафной функции задача на условный экстремум на этом множестве сводится к задаче на безусловный экстремум. Для решения последней использовалась стандартная функция `fmincon` пакета `Optimization Toolbox`, встроенного в `MATLAB`. В этой функции используется метод внутренней точки [88]. Это метод первого порядка, причем градиент целевой функции вычисляется разностно.

4.3.1 Сходимость итераций

В методе внутренней точки нужно задавать начальное приближение. Общепринятой стратегией его выбора является псевдослучайное разыгрывание

(метод Монте-Карло). Поскольку рельеф целевой функции имеет достаточно сложный вид, то количество итераций, необходимых для сходимости, сильно зависит от выбранного начального приближения. Если последнее оказалось неудачным, то количество итераций может быть очень большим.

В значительной части стандартных программ имеется ограничение на максимальное число вычислений функции (то есть на максимальное число итераций). Так, в функции `fmincon` по умолчанию возможно лишь 3000 вычислений функции. Этот прием позволяет предотвратить закливание. Однако из-за него расчет может останавливаться до достижения минимума.

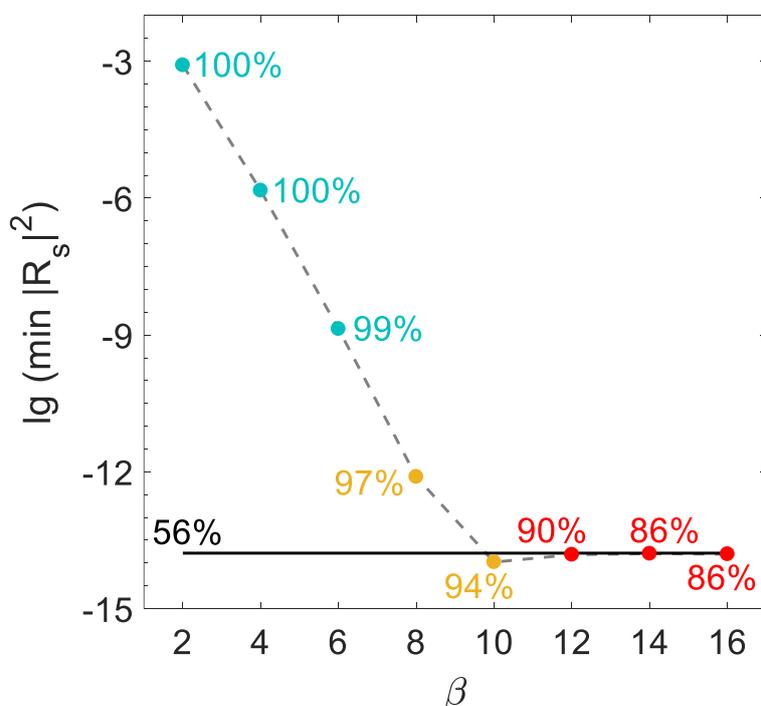


Рисунок 4.4. Значения минимума при использовании модифицированной модели Симовского; пунктир – расчет со штрафом при разных β , сплошная линия – расчет без штрафа. Цифры около точек – доля случайно разыгранных начальных приближений, при которых расчеты с помощью функции `fmincon` сходятся к минимуму в пределах числа итераций, заданных по умолчанию

На рисунке 4.4 около точек указана доля тех начальных приближений, для которых расчеты сошлись к минимуму. Для небольших значений β эта доля

составляет 100%. По мере увеличения β она уменьшается. Причина этого заключается в следующем.

Функция со штрафом (4.8) имеет довольно пологие участки между крутой стенкой при больших $(r - r_0)$ и минимумом (см. рисунок 4.5). Назовем эти участки «бортами» минимума. Они становятся все более пологими при увеличении β . На них требуется делать большее количество шагов, чем доступно по умолчанию. Расчет прерывается, и функция `fmincon` выдает ошибку. В этом случае рекомендуется брать последние найденные значения p и r и продолжать расчет с ними как с начальными приближениями. Поскольку эти борта пологи, но не горизонтальны, то расчет гарантированно сойдется к точке минимума.

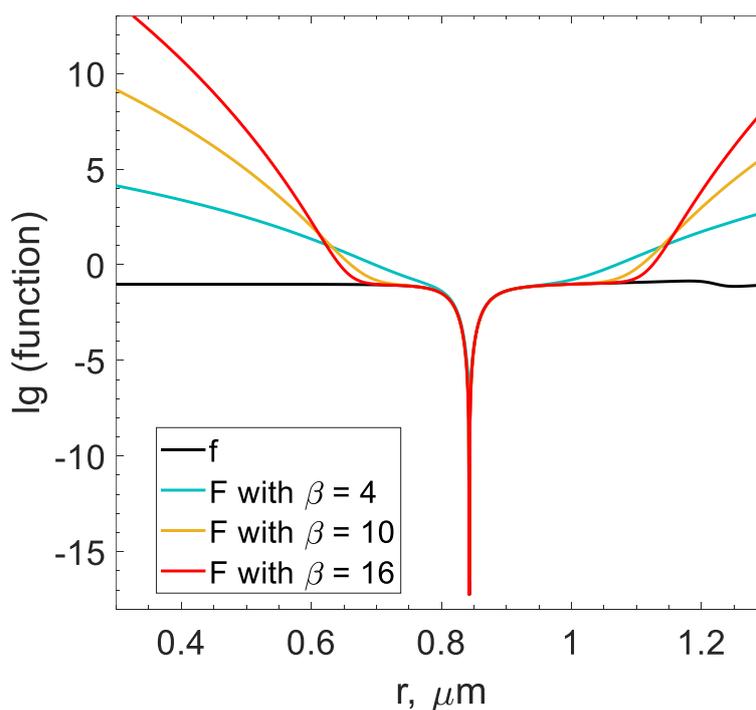


Рисунок 4.5. Зависимость целевой функции по модифицированной модели Симовского от радиуса r метаатомов при фиксированном периоде $p = 5.4676$ мкм структуры, черная линия – задача (4.2), цветные линии – задача (4.8) при разных степенях β

4.3.2 Влияние штрафа

Для демонстрации преимуществ предлагаемого подхода было проведено сравнение результатов минимизации с добавлением штрафа и без него (в последнем случае решалась задача на условный экстремум). Начальные приближения выбирались случайным образом: было проведено 10 расчетов, в каждом из которых разыгрывалось по 100 начальных точек. Их координаты имели гауссово распределение, среднее и среднеквадратичное отклонение равнялись r_0 для радиуса и $4r_0$ для периода. Каждое из этих начальных приближений использовалось для расчетов как со штрафом, так и без штрафа.

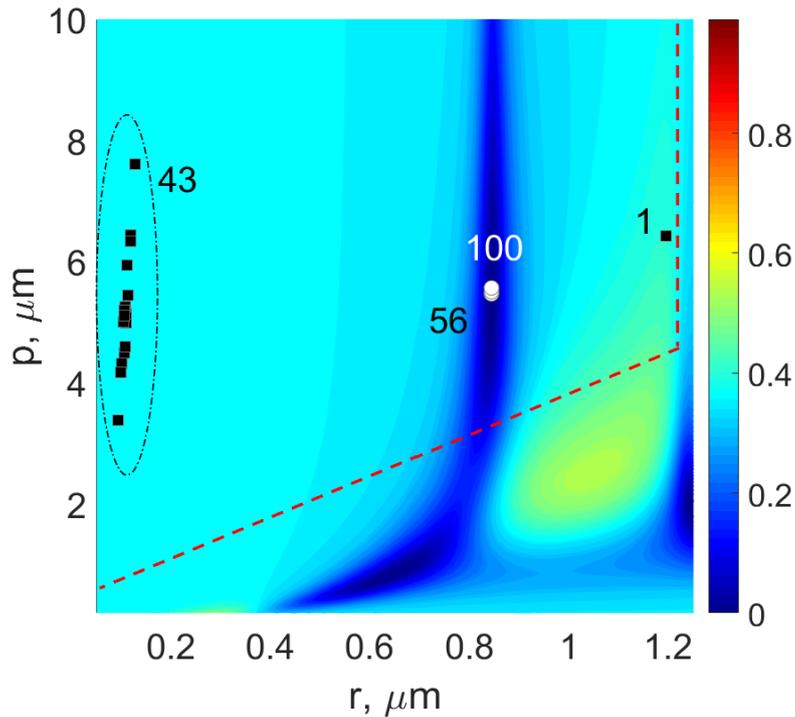


Рисунок 4.6. Вид целевой функции по модифицированной модели Симовского. Белые маркеры – минимумы (4.8), черные маркеры – минимумы (4.1), (4.2). Рядом с маркерами указано количество случайных розыгрышей. Красная линия – граница допустимой области.

На рисунке 4.6 показан график зависимости отражения от p и r и результаты одного из расчетов со 100 случайными розыгрышами. Красной линией отмечена область допустимых значений аргументов. Маркерами показаны результаты минимизации: светлыми – для функции со штрафом, темными – для функции без штрафа. Видно, что в первом случае все 100 точек сходятся к одному и тому же ответу, который является глобальным минимумом. Однако во втором случае 43 точки «застревают» на плато и не доходят до искомого минимума.

Таким образом, минимизация целевой функции без штрафа сложна, а результат очень сильно зависит от выбора начального приближения. Из-за наличия практически горизонтальных областей примерно в половине случаев вычисления не сошлись к минимуму. Напротив, при использовании штрафной функции удается уверенно найти желаемый глобальный минимум при использовании всего 7-10 псевдослучайных приближений. Таким образом, предложенная штрафная функция повышает надежность алгоритмов оптимизации и позволяет экономить вычислительные ресурсы.

4.3.3 Выбор степени штрафного слагаемого

Зависимость глубины минимума функции со штрафом F от β в задаче (4.8) представлена на рисунке 4.4. Для сравнения горизонтальной линией показана величина минимального из найденных значений в задаче без штрафа. Видно, что использование штрафа с небольшой степенью $\beta \in [2, 6]$ делает минимум более мелким. Это связано с тем, что центр штрафной функции r_0 не точно совпадает с минимумом функции $|R_s(\mathbf{x}, \lambda_*)|^2$, см. рисунок 4.4. По мере увеличения β «дно» штрафной функции становится все более пологим, и глубина минимума увеличивается. Начиная с $\beta = 10$, она практически не отличается от глубины минимума исходной функции $|R_s(\mathbf{x}, \lambda_*)|^2$.

При выборе значения β мы руководствовались следующими соображениями. Штраф вводится для того, чтобы заведомо устранить все локальные минимумы, не расположенные вблизи дипольных резонансов или между ними. Поэтому степень штрафного слагаемого должна быть такой, чтобы, с одной стороны, значение штрафа было больше 1 за пределами указанной области (все «лишние» минимумы автоматически исключаются из рассмотрения), а с другой стороны, введение штрафа не должно исказить целевую функцию внутри этой области.

Данным требованиям лучше всего удовлетворяет $\beta=10$. Отметим, что введение штрафа с такой степенью практически не сказывается на точности определения p и r , так как он имеет очень пологое дно и практически не искажает целевую функцию.

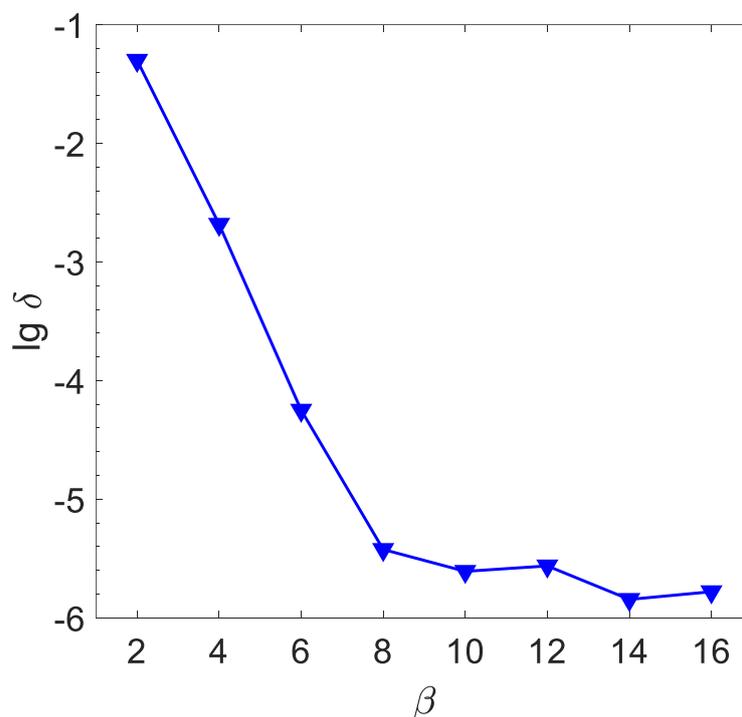


Рисунок 4.7. Ошибка нахождения минимума при разных степенях штрафа (используется модифицированная модель Симовского)

Определим ошибку решения данной задачи как расстояние между положениями минимумов в задачах (4.8) и (4.2)

$$\delta = \sqrt{(p - p(\beta))^2 + (r - r(\beta))^2}.$$

Здесь p и r являются координатами наилучшего результата минимизации в задаче (4.2), они дают почти нулевое отражение $|R_s|^2 \approx 8.0579 \cdot 10^{-15}$. Через $p(\beta)$ и $r(\beta)$ обозначены координаты минимума (4.8). На рисунке 4.7 приводится зависимость ошибки δ полученного решения задачи от степени β .

При низких степенях $\beta \in [2, 6]$ дно желоба $y(r)$ вблизи желаемого минимума недостаточно полого. Поэтому точность нахождения p и r невысока. Начиная с $\beta = 8$, ошибка вычислений δ практически совпадает с предустановленной точностью функции `fmincon`, которая составляет 10^{-6} .

4.4 Результаты оптимизации

4.4.1 Модифицированная модель Симовского

Результаты расчетов по модифицированной модели Симовского представлены на рисунке 4.8. Отражение $|R_{\text{substr}}|^2$ от полубесконечной подложки из Ge составляет 0.36. Использование метаповерхности из PbTe с оптимизированными геометрическими параметрами $p_{\text{opt}} = 5.4676$ мкм и $r_{\text{opt}} = 0.8430$ мкм обеспечивает нулевое отражение $|R_s|^2 \approx 1.0552 \cdot 10^{-14}$ на интересующей нас длине волны $\lambda_* = 10$ мкм. Из графика видно, что область малого отражения $|R_s|^2$ от метапленки на подложке находится между максимумом и минимумом отражения $|R|^2$ от метапленки в воздухе. Максимум соответствует магнитному дипольному резонансу при $\lambda = 9.81$ мкм, а минимум имеет место при $\lambda = 10.81$ мкм и также практически равен нулю $\min(|R|^2) \approx 2.8836 \cdot 10^{-10}$.

Для длин волн около 8 мкм отражение от всей структуры немного больше, чем только от подложки без метаповерхности. Это связано с тем, что радиус

сферических частиц не мал и электромагнитный отклик уже не является строго дипольным. По мере увеличения λ взаимодействие между метаатомами и подложкой возрастает настолько, что на $\lambda_* = 10$ мкм отражение отсутствует. При дальнейшем увеличении λ взаимодействие резко убывает и, следовательно, отражение от метаповерхности с подложкой стремится к отражению только от подложки, то есть влияние метаповерхности пропадает.

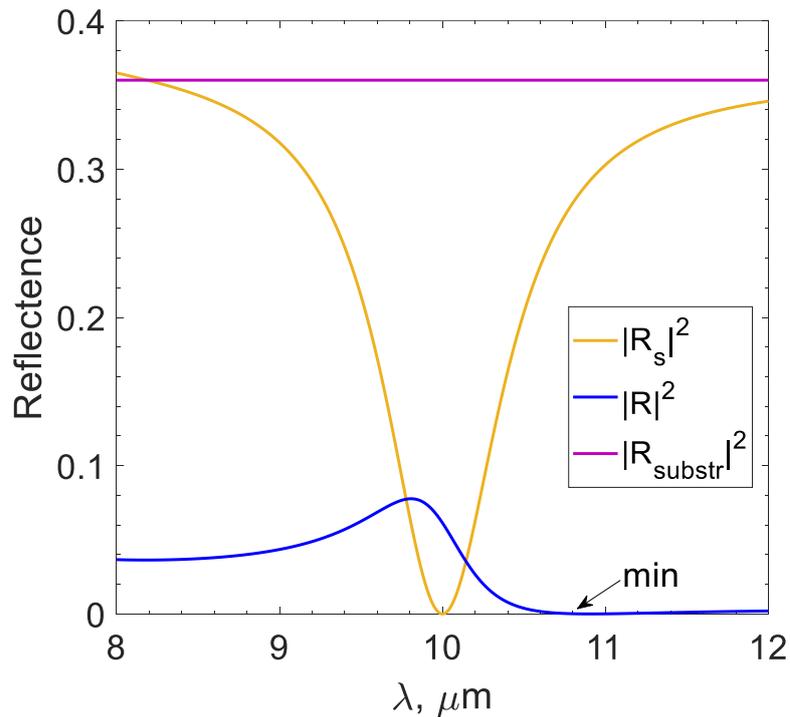


Рисунок 4.8. Отражение от метаповерхности на подложке $|R_s|^2$ по модифицированной модели Симовского, метаповерхности в воздухе $|R|^2$ по модели Евлюхина и отдельной подложки $|R_{\text{substr}}|^2$ в зависимости от длины волны λ при $p = p_{\text{opt}}$ и $r = r_{\text{opt}}$

4.4.2 Модель Бабичевой

Результаты. Были проведена аналогичная оптимизация на той же длине волны с использованием модели Бабичевой. В этом случае имеется три локальных минимума. Они приведены на рисунке 4.9 а и в таблице 4.1. Эти минимумы

возникают тогда, когда величины электрического и магнитного дипольных моментов совпадают, а фазы отличаются на π .

На рисунках 4.9 б-г показаны спектры отражения $|R(\lambda)|^2$, соответствующие полученным оптимальным геометрическим параметрам. Жирные участки кривых соответствуют диапазонам, в которых справедливо дипольное приближение. Жирными горизонтальными линиями показано отражение от границы раздела без покрытия. Из этих графиков видно, что минимумы отражения обусловлены разными причинами.

Таблица 4.1. Результаты оптимизации по модели Бабичевой.

Маркер	Фиолетовый	Синий	Красный
r_{opt} , мкм	0.656	0.879	1.094
p_{opt} , мкм	2.623	6.365	4.762
$ R_s ^2$	0.254	$1.659 \cdot 10^{-13}$	0.010

Минимум на рисунке 4.9. б обеспечивается близко расположенными нерезонансными частицам (фиолетовый цвет). На рисунке 4.9. в возникает взаимодействие между подложкой и метапленкой, размер частиц соответствует первому магнитному дипольному резонансу (синий цвет). На рисунке 4.9. г минимум возникает в силу магнитоэлектрического взаимодействия (красный цвет). Последнее соответствует случаю компенсации отражения в широком спектральном диапазоне. Ширина области малого отражения определяется положениями первых дипольных резонансов.

Таким образом, покрытие на основе метаповерхности ведет себя двояко. Оно позволяет получить нулевое отражение на выбранной длине волны, то есть работает как идеальный фильтр (рисунок 4.9. в). Либо это покрытие может играть роль широкополосного фильтра (рисунок 4.9. г). При этом видно, что границы

этого диапазона определяются положением электрического и магнитного дипольных резонансов.

Узкополосные безотражательные покрытия, обеспечивающие нулевое отражение от германиевой подложки на фиксированной длине волны среднего ИК-диапазона, могут быть полезны при разработке компактных фильтров для юстировки тепловизоров.

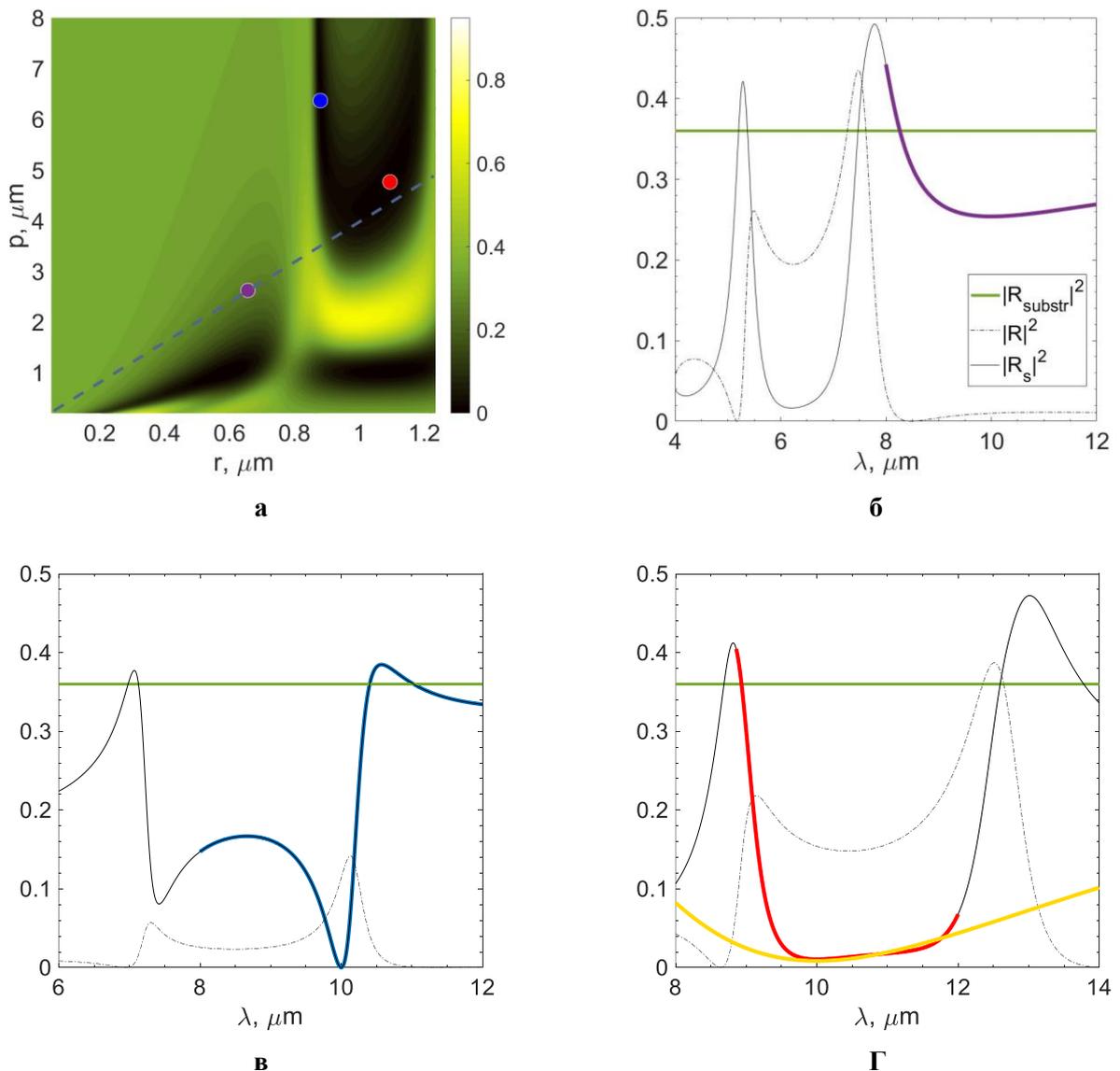


Рисунок 4.9. Вид целевой функции (а) и спектры отражения (б,в,г) подложки, метапленки в воздухе и метапленки на подложке (используется модель Бабичевой). Обозначения – см. текст.

Сравнение с модифицированной моделью Симовского. Эта модель воспроизводит только минимум, соответствующий магнитному дипольному резонансу (рисунок 4.9. в). При этом оптимальный радиус разумно согласуется с результатом по модели Бабичевой (расхождение составляет 4%), а оптимальный период заметно отличается (отличие равно 14%). Этот результат ожидаем, так как (а) обе модели построены в не слишком точных приближениях, (б) отражение сильно зависит от радиуса частиц и сравнительно слабо – от периода их расположения. Поэтому расхождение оптимальных периодов может быть значительно больше расхождения оптимальных радиусов.

Модифицированная модель Симовского не воспроизводит два других минимума. Напомним, что один из них обусловлен магнитоэлектрическим взаимодействием частиц и подложки, другой – сильным взаимодействием близко расположенных нерезонансных частиц. Первый из этих факторов учитывался в оригинальной модели Симовского, однако для этого требовались достаточно громоздкие численные расчеты. Наша упрощающая модификация этой модели, призванная сделать ее полностью аналитической, не позволяет учесть магнитоэлектрическое взаимодействие. Для этого потребовалась бы модификация модели Евлюхина, однако это выходит за рамки диссертации.

Неучет второго фактора является принципиальным дефектом модели Симовского. Это связано с тем, что в этой модели метапленка рассматривается как эффективная граница раздела сред, причем в результате усреднения распределение зарядов и токов по этой границе становится однородным. Это фактически исключает из рассмотрения сильное взаимодействие частиц.

4.4.3 Диапазон длин волн

Для модели Симовского результаты полностью совпадают с описанными выше (см. рисунок 4.4 – 4.7), то есть не зависят от выбора λ_{\min} и λ_{\max} . Это связано

с тем, что минимум отражения только один, и за его пределами отражение только увеличивается, как и площадь под его графиком.

В модели Бабичевой минимумов отражения возможно несколько. Поэтому при изменении диапазона площадь под графиком отражения может как увеличиваться, так и уменьшаться. Был рассмотрен интервал от $\lambda_{\min} = 9$ мкм до $\lambda_{\max} = 11$ мкм, расположенный между двумя резонансами. Соответствующая целевая функция приведена на рисунке 4.10. Она качественно имеет тот же вид, что рисунок 4.9. г. Однако в допустимую область попадает только один минимум. Оптимальные значения геометрических параметров для указанного диапазона равны $r_{\text{opt}} = 1.037$ и $r_{\text{opt}} = 4.532$, а глубина минимума составляет 0.014. Данный минимум аналогичен «красному» минимуму на длине волны 10 мкм: он также обусловлен магнито-электрическим взаимодействием частиц с подложкой.

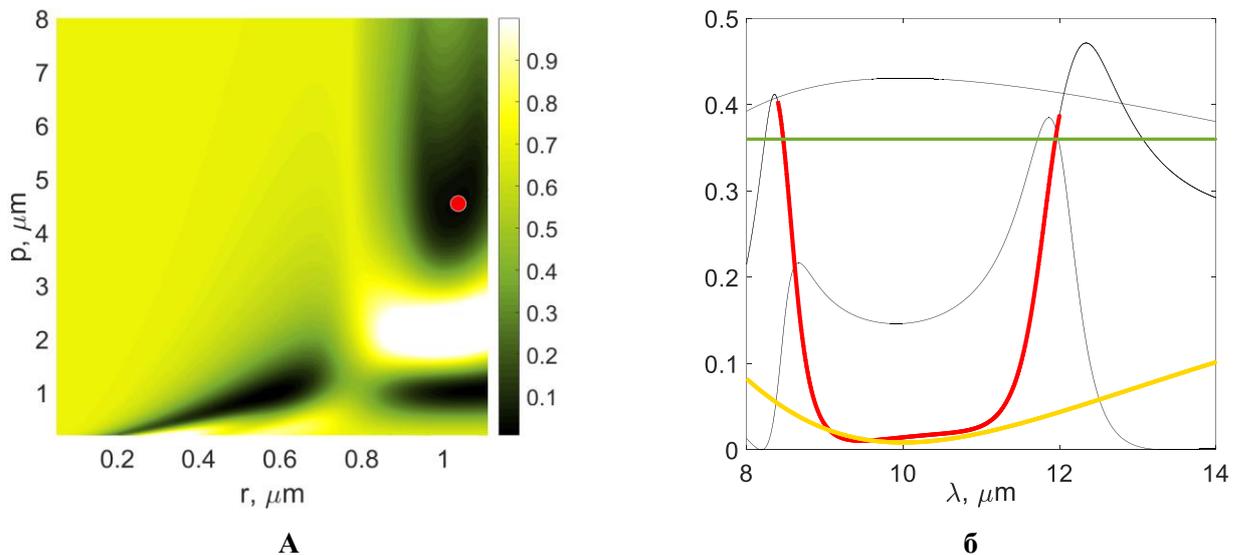


Рисунок 4.10. Вид целевой функции (а) и спектр отражения (б) при оптимизации в диапазоне длин волн (используется модель Бабичевой). Обозначения – см. рисунок 4.9.

4.4.4 Сравнение с тонкой пленкой

Для сравнения на рисунке 4.9. г и рисунке 4.10. б представлен спектр отражения от подложки, на которой расположена тонкая пленка из коммерческого

материала «Иртран»-2 (желтые кривые). Видно, что использование такого однослойного тонкопленочного покрытия не позволяет добиться полного подавления отраженного излучения ни на одной длине волны. Это связано с тем, что ее показатель преломления больше 2, а варьирование толщины недостаточно для получения желаемого результата. Представленные спектры соответствуют оптимальной толщине.

Тем не менее, тонкая пленка обеспечивает малое отражение во всем интересующем нас диапазоне от 8 до 12 мкм, что нельзя сказать о метапленке. Последняя ведет себя либо как идеальный фильтр (рисунок 4.9. в, синяя кривая), либо как неплохой широкополосный фильтр (рисунок 4.9. в и 4.10. б, красные кривые). Однако во втором случае в диапазоне работы фильтра отражение от структуры с метапленкой по величине не меньше, чем от структуры с тонкой пленкой.

При разработке безотражательного покрытия необходимо учитывать, что не всегда удастся найти материалы с необходимыми показателями преломления. Эта проблема обычно решается использованием многослойных структур, однако их сложно изготовить из-за необходимости непрерывного контроля толщины каждого из слоев в процессе производства. Применение метаповерхностей позволяет получить просветляющее покрытие с требуемым эффективным показателем преломления.

Основные результаты главы

В данной главе сформулирована математическая постановка задачи о безотражательном покрытии на основе метаповерхности. Рассмотрены два случая: одна длина волны и диапазон длин волн. Найдена область допустимых значений геометрических параметров структуры, которая, в частности, обеспечивает применимость дипольного приближения. Данная постановка задачи является новой.

При выполнении указанных ограничений прямую задачу удастся решать с использованием аналитических моделей, построенных в дипольном приближении. Учет ограничений приводит к задаче на условный экстремум. Последняя методом штрафных функций сводится к задаче на безусловный экстремум. Предложена гладкая штрафная функция, которая допускает применение методов минимизации высокого порядка с разностным вычислением градиента. Даны конкретные рекомендации по выбору параметров штрафной функции.

В качестве примера рассмотрена задача о безотражательной метаповерхности из сферических частиц РbТе, помещенных на полубесконечную подложку из Ge. Для такой структуры проведено сравнение моделей Симовского и Бабичевой. Эти модели дают различное количество и глубину минимумов отражения.

Проведено сравнение спектра отражения указанной метапленки на германиевой подложке и тонкой просветляющей пленки из материала «Иртран-2» на той же подложке. Метапленка позволяет получить нулевое отражение на заданной длине волны (чего не удастся добиться при использовании обычных тонких пленок), но диапазон малого отражения для нее оказывается уже. Таким образом, метапленка может использоваться как фильтрующий элемент с резонансной передаточной функцией. Ее применение перспективно для разработки усовершенствованных балометрических матриц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведем основные результаты диссертации.

1. Для метода конечных разностей во временной области предложен подход, позволяющий кардинально уменьшить погрешность расчетов и многократно повысить порядок точности. Этот подход позволяет одновременно с решением вычислять асимптотически точное значение его погрешности. Показано, что при наличии границ раздела сред стандартная схема Яе немонотонна. Показано, что в этом случае предложенный подход позволяет существенно уменьшить эту немонотонность. Предложены новые квазиравномерные сетки для слоистых диэлектрических сред с большим контрастом показателей преломления и для задач со скин-слоями.
2. Построен критерий применимости дипольного приближения для прозрачного диэлектрического шара с высоким постоянным показателем преломления. Найдены условия возникновения его первых дипольных резонансов. Исследованы границы применимости и дана оценка точности ряда известных моделей метапленки из сферических частиц в однородной непоглощающей среде. Для нерезонансного случая предложена модель замены изотропной метапленки оптически эквивалентным однородным тонким слоем с частотно зависимой толщиной.
3. Впервые поставлены и решены задачи проектирования безотражательного покрытия на основе метапленки для одной длины волны и в диапазоне длин волн. Сформулированы физически корректные ограничения на геометрические параметры метапленки. Предложен метод, значительно повышающий надежность работы алгоритмов оптимизации. Проведено моделирование безотражательного покрытия на основе метапленки из теллурида свинца для германиевой подложки в среднем ИК-диапазоне.

В заключение, хочу выразить глубокую благодарность моему научному руководителю доктору физико-математических наук, профессору Боголюбову Александру Николаевичу за чуткое руководство, мудрые советы, интересные задачи и возможность их реализовать. Также хочу поблагодарить кандидатов физико-математических наук Журавлева Антона Викторовича и Белова Александра Александровича за плодотворные обсуждения результатов и интересные идеи в ходе работы над диссертацией.

Огромное спасибо всей моей семье: родителям, особенно маме, мужу, сыну, брату, бабушке и дедушке, которые всячески мотивировали меня довести все до конца. Без вашей поддержки и понимания не состоялась бы эта научная работа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. L. Solymar, E. Shamonina. Waves in metamaterials. N.Y.: Oxford University Press, 2009.
2. S. B. Glybovski, S. A. Tretyakov, P. A. Belov et al. // Phys. Rep. – 2016 – V. 634 – P. 1.
3. H. Chen, A. J. Taylor, N. Yu // Rep. Prog. Phys. – 2016 – V. 79 – P. 076401.
4. M. Decker, I. Staude // J. Opt. – 2016 – V. 18, No 10. – P. 103001.
5. A. V. Kildishev, A. Boltasheva, V. M. Shalaev // Science. – 2013 – V. 339, No 6125 – P. 1232009.
6. N. Engheta, R. W. Ziolkowski. Metamaterials: Physics and Engineering Explorations – Wiley-IEEE Press, 2006.
7. C. L. Holloway, A. Dienstfrey, E. F. Kuester et al. // Metamaterials. – 2009 – V. 3, No 2 – P. 100.
8. M. Pelton, J. Aizpurua, G. Bryant // Laser Photon. Rev. – 2008 – V. 2, No 3 – P. 136.
9. J. A. Schuller, E. S. Barnard, W. Cai et al. // Nat. Mater. – 2010 – V. 9, No 3 – P. 193.
10. V. Giannini, A. I. Fernandez-Dominguez, S. C. Heck, S. A. Maier // Chem. Rev. – 2011 – V. 111, No 6 – P. 3888.
11. X. Fan, W. Zheng, D. J. Singh // Light Sci. Appl. – 2014 – V. 3 – P. e179.
12. P. R. West, S. Ishii, G. V. Naik // Laser Photon. Rev. – 2010 – V. 4 – P. 795.

13. J. B. Khurgin // *Nat. Nanotechnol.* – 2015 – V. 10 – P. 2.
14. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, M. L. Brongersma // *Science* – 2016 – V. 354 – P. 2472.
15. R. S. Savelev, S. V. Makarov, A. E. Krasnok, P. A. Belov // *Opt. Spectrosc.* – 2015 – V. 119. – P. 551.
16. I. Staude, J. Schilling, // *Nat. Photonics* – 2017 – V. 11 – P. 274.
17. A. B. Evlyukhin, S. M. Novikov, U. Zywietz et al. // *Nano Lett.* – 2012 – Vol. 12 – P. 3749.
18. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, Y. H. Fu et al. // *Sci. Rep.* – 2012 – V. 2 – P. 492.
19. V. E. Babicheva, M. I. Petrov, K. V. Baryshnikova, P. A. Belov // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2017 – V. 34, No 7 – P. D18.
20. K.V. Baryshnikova, M.I. Petrov, V.E. Babicheva, P.A. Belov // *Sci. Rep.* – 2016 – V. 6 – P. 22136
21. А. Г. Свешников, А. С. Ильинский // *ДАН СССР* – 1972 – Т. 204, № 5 – С. 1077.
22. E. F. Kuester, M.A. Mohamed, M. Piket-May, C.L. Holloway // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 2003 – V. 51, No. 10 – P. 2641.
23. C.L. Holloway, M.A. Mohamed, E.F. Kuester, A. Dienstfrey // *IEEE Trans. Electromagn. Comp.* – 2005 – V. 47. – P. 853.
24. Г. В. Белокопытов, А. В. Журавлев // *Физика волновых процессов и радиотехнические системы.* – 2008 – Т. 11, № 1 – С. 41.

25. A.B. Evlyukhin, C. Reinhardt, A. Seidel et al. // *Phys. Rev. B* – 2010 – V. 82, № 4 – P. 045404.
26. E. Saenz, P. Ikonen, R. Gonzalo, S. A. Tretyakov // *J. Appl. Phys.* – 2007 – V. 101 – P. 114910.
27. A. Taflove, S. C. Hagness. *Computational Electrodynamics: the Finite Difference Time-Domain Method*. Artech House, 2005.
28. A. Taflove, S.G. Johnson, A. Oskooi. *Advances in FDTD Computational Electromagnetics: Photonics and Nanotechnology*. Artech House, 2013.
29. Inan U.S., Marshall R.A. *Numerical Electromagnetics. The FDTD Method*. Cambridge University Press, 2011.
30. K.S. Yee // *IEEE Trans. Antennas. Propag.* – 1966 – V. 14 – P. 302.
31. A. C. Cangellaris, D. B. Wright // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1991 – V. 39, No 10 – P. 1518.
32. A. Christ, S. Benkler, J. Frohlich, N. Kuester // *IEEE Trans. Electromagn. Compat.* – 2006 – V. 48, No 2 – P. 264.
33. A. Taflove, M.E. Brodwin // *IEEE Trans. Microw. Theory Techniques* – 1975 – V. 23. – P. 623.
34. L. F. Richardson, A. Gaunt // *Philos. Trans. Royal Soc. A.* – 1927 – V. 226, No 636-646 – P. 299.
35. В.С. Рябенский, А.Ф. Филиппов. *Об устойчивости разностных уравнений*. М., Изд-во технико-теоретической литературы, 1956.
36. Lumerical <http://lumerical.com>
37. OptiWave Photonic Software <http://optiwave.com>

38. Meep <http://meep.readthedocs.io>
39. P.J. Monk // *Comput. Appl. Math.* – 1993 – V. 47. – P. 101. (1993).
40. J. Li, S. Shields // *Numer. Math.* – 2015 – V. 134, No. 4 – P. 741.
41. R. Courant, K. Friedrichs, H. Lewy // *Math. Annal.* – 1928 – V. 100 – P. 32.
42. D. M. Sullivan. *Electromagnetic simulation using the FDTD method.* IEEE Press, Hoboken, 2000.
43. D. M. Sullivan // *IEEE Microw. Guided Wave Lett.* – 1996 – V. 6, No. 2 – P. 97.
44. G. Mur // *IEEE Trans. Electromagn. Comp., EMC* – 1981 – V. 23, No. 4 – P. 377.
45. J. P. Berenger // *J. Comput. Phys.* – 1996 – V. 127 – P. 363.
46. P. Loh, A. F. Oskooi, M. Ibanescu et al. // *Phys. Rev. E.* – 2009 – Vol. 79 – P. 065601.
47. Z. S. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee, J. F. Lee // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1995 – V. 43, No. 12 – P. 1460.
48. R. W. Ziolkowski // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1997 – V. 45, No. 4 – P. 656.
49. F. L. Teixeira // *Radio Sci.* – 2003 – V. 38, No. 2 – P. 8014.
50. M. F.Hadi, M. Picket-May // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 1997 – V. 45 – P. 254.
51. K. Lan, Y. Liu, W. Lin // *IEEE Trans. Electromagn. Comp.* – 1999 – V. 41 – P. 199.
52. T. Hirono, Y. Shibata, W. W. Lui et al. // *IEEE Microwave Guided Wave Lett.* – 2000 – V. 10. – P. 359.
53. K. P. Hwang, A. C. Cangellaris // *IEEE Microw. Wireless Compon. Lett.* – 2001 – V. 11, No 4. – P. 158.

54. Q.X. Chu, H. Ding // *IEEE Trans. Magn.* – 2006 – V. 27 – P. 3141.
55. Q.X. Chu, H. Ding // *Microwave Opt. Techn. Lett.* – 2007 – V. 49, No. 12. – P. 3007.
56. R. B. Armenta, C. D. Sarris // *Proceedings of the IEEE MTT-S International* – 2012 – P. 978-1-4673-1088-8.
57. А.А. Самарский, Ю.П. Попов. Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука, 1992.
58. U. Zywietz, A. B. Evlyukhin, C. Reinhardt, B. N. Chichkov // *Nat. Commun.* – 2014 – V. 5 – P. 3402.
59. S. Jahani, Z. Jacob // *Nat. Nanotechnol.* – 2016 – V. 11 – P. 23.
60. A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, M. L. Brongersma, et al. // *Science* – 2016 – V. 354 – P. aag2472.
61. G. I. Shishkin // *Comp. Math. Math. Phys.* – 1992 – V. 3, No. 4 – P. 467.
62. G. Sun, M. Stynes // *Numer. Algorithms* – 1994 – V. 8, No 1 – P. 111.
63. D. R. Smith, D. Schurig, J. J. Mock // *Phys. Rev. E.* – 2006 – V. 74 – P. 036604.
64. T. Driscoll, G. O. Andreev, D. N. Basov et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2007 – V. 90. – P. 092508.
65. T. Driscoll, D. N. Basov, W. J. Padilla et al. // *Phys. Rev. B.* – 2007 – V. 75. – P. 115114.
66. P. Ikonen, E. Saenz, R. Conzalo et al. // *Metamaterials.* – 2007 – V. 1 – P. 89.
67. D. K. Morits, C. R. Simovski // *Phys. Rev. B* – 2010 – V. 82, No 16 – P. 165114.

68. M. Albooyeh, D. Morits, C. R. Simovski // *Metamaterials*. – 2011 – V. 5, No 4 – P. 178.
69. G. Mie // *Ann. Phys.* – 1908 – V. 330 – P. 377.
70. R. Fenollosa, F. Meseguer, M. Tymczenko // *Adv. Mater.* 2008 – V. 20 – P. 95.
71. E. Xifré-Pérez, R. Fenollosa, F. Meseguer // *Opt. Express* – 2011 – V. 19 – P. 3455.
72. C. F. Bohren, D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. N.Y.: Wiley, 1983.
73. М. Борн, Э. Вольф. *ОСНОВЫ ОПТИКИ*. М.: Наука, 1973.
74. P. D. Terekhov, K. V. Baryshnikova, Yu. A. Artemyev, et al. // *Phys. Rev. B*. – 2017 – V. 96 – P. 035443.
75. M. Idemen // *J. Phys. Soc. Japan*. – 1990 – V. 59, No 1 – P. 71.
76. C.L. Holloway, E.F. Kuester // *IEEE Trans. Antennas Propag.* – 2016 – V. 64, No. 11 – P. 4671.
77. I. Staude // *Presentation at EUPROMETA – 33rd Doctoral School on Metamaterials, 3-6 April 2017, University of Bordeaux, France*
78. A. E. Miroshnichenko, A. B. Evlyukhin, Yu. S. Kivshar, B. N. Chichko // *ACS Photonics* – 2015 – V. 2 – P. 1423.
79. И. М. Соболев. *Численные методы Монте-Карло*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1973.
80. A. Khachatryan, S. Semenovskaya, B. Vainshtein // *Sov.Phys. Crystallography* – 1979 – V. 24, No. 5 – P. 519.
81. A. Khachatryan, S. Semenovskaya, B. Vainshtein // *Acta Crystallographica* – 1981 – V. 37, No. A37 – P. 742.

82. J. Kennedy, R. Eberhart // Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks IV – 1995 – P. 1942
83. Y. Shi, R. Eberhart // Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary Computation – 1998 – P. 69.
84. В. Б. Гласко, А. Н. Тихонов, А. В. Тихонравов // Ж. вычисл. матем. матем. физ. – 1974 – Т. 14, № 1 – С. 135.
85. A. V. Tikhonravov, V. G. Zhupanov, V. N. Fedoseev, M. K. Trubetskov // Opt. Express – 2014 – V. 22, No. 26 – P. 32174.
86. Д. Химмельблау. Прикладное нелинейное программирование М.: Мир, 1975.
87. Н. Н. Калиткин, Е. А. Альшина. Численные методы. В 2 кн. Книга 1. Численный анализ. М.: Академия, 2013.
88. R. N. Byrd, M. E. Hribar, J. Nocedal // SIAM Journal on Optimization – 1999 – V. 9, No. 4 – P. 877.
89. Ж. О. Домбровская, А.Н. Боголюбов. Повышение точности одномерной схемы Йе методом сгущения сеток // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2017. – Т. 81, № 1. – С. 117-121.
90. Zh.O. Dombrovskaya, A.N. Bogolyubov. High order FDTD computations using mesh thickening // Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS). – St. Petersburg, Russia, 22-25 May, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 453-455.
91. Ж.О. Домбровская, А.Н. Боголюбов. Анализ точности и сходимости одномерной схемы Йе методом сгущения сеток // Ученые записки физического факультета Московского Университета. – 2016. – № 3. – С. 163112 – 3 с.

92. Ж.О. Домбровская, А.Н. Боголюбов. Немонотонность схемы FDTD при моделировании границ раздела между диэлектриками // Ученые записки физического факультета Московского Университета. – 2017. – № 4. – С. 1740302. – 5 с.
93. Ж. О. Домбровская. Метод конечных разностей во временной области для кусочно-однородных диэлектрических сред // Моделирование и анализ информационных систем. – 2016. – Т. 23, № 5. – С. 539-547.
94. Zh.O. Dombrovskaya, A.N. Bogolyubov. Effective FDTD modeling of microwave ceramics // Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS). – St. Petersburg, Russia, 22-25 May, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 2732-2733.
95. А. Н. Боголюбов, Г. В. Белокопытов, Ж. О. Домбровская. Моделирование спектральных зависимостей для двумерных фотонно-кристаллических систем // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. – 2013. – № 5. – С. 8-13.
96. С. К. Годунов // Матем. сб. – 1959 – Т. 47, № 89 – С. 271.
97. Н. Н. Калиткин, А. Б. Альшин, Е. А. Альшина, Б. В. Рогов. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.
98. Refractive index database <https://refractiveindex.info>
99. А. А. Белов, Н. Н. Калиткин // Матем. Моделирование – 2015 – Т. 27, № 11 – 47.
100. V. D. Liseikin. Layer resolving grids and transformations for singular perturbation problems, VSP BV, 2001.

101. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Zhuravlev. Investigation of the possibility of metafilm modeling as a conventional thin film // *Appl. Phys. A.* – 2017. – V. 123, No 1. – P. 27. – 5 p.
102. Ж.О. Домбровская, А.В. Журавлев. Моделирование изотропной метапленки с помощью тонкой пленки с частотно зависимой толщиной // *Ядерная физика и инжиниринг.* – 2017. – Т. 8, № 1. – С. 96-100.
103. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Zhuravlev. Is it possible to replace an isotropic metafilm by a homogeneous layer? // *11th International Congress on Engineered Materials Platforms for Novel Wave Phenomena (Metamaterials).* – Marseille, France, 28-31 August, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 85-87.
104. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Zhuravlev. Possibility of isotropic metafilm representation by an equivalent homogeneous layer // *Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS).* – St. Petersburg, Russia, 22-25 May, 2017. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 3365-3367.
105. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Zhuravlev, G. V. Belokopytov, A. N. Bogolyubov. Phonon-polariton meta-atoms for far infrared range // *Physics of Wave Phenomena.* – 2016. – V. 24, No 2. – P. 96-102.
106. А. В. Рыбина, Ж. О. Домбровская, А. Н. Боголюбов. Дипольный отклик диэлектрического шара // *Известия Российской академии наук. Серия физическая.* – 2018. – Т. 82, № 11. – С. 1516-1519.
107. Zh. O. Dombrovskaya, A. V. Rybina, A. A. Belov, A. N. Bogolyubov. All-dielectric metasurface filters for mid-infrared range // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2018. – V. 1092. – P. 012023. – 4 p.
108. F. Weiting, Y. Yixun // *Infrared Phys.* – 1990 – V. 30 – P. 371.
109. D. G. Baranov, D. A. Zuev, S. I. Lepeshov et al. // *Optica.* – 2017 – V. 4 – P. 814.

110. A. U. Bhoje. Ph.D. thesis. University of Colorado, 2004.
111. C. L. Holloway, E. F. Kuester, A. Dienstfrey // IEEE Antennas Wireless Propag. Lett. – 2011 – V. 10 – P. 1507.
112. С. А. Ахманов, С. Ю. Никитин. Физическая оптика. М.: Наука, 2004.
113. Ж. О. Домбровская. Проектирование изотропной полностью диэлектрической метаповерхности на подложке // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии. (Электронный научный журнал). – 2017. – Т. 18, № 4. – С. 455-462.
114. Ж. О. Домбровская, А. В. Журавлев, Г. В. Белокопытов, А. Н. Боголюбов. Обратная задача восстановления характеристик мета-атома по измеренному прохождению и отражению метапленки // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2015. – Т. 79, № 12. – С. 1709-1711.
115. Г. В. Белокопытов, А. Н. Боголюбов, Ж. О. Домбровская, Ю. Е. Терехов. Расчет электродинамических характеристик метапленки. Экспериментально-аналитический подход // Физические основы приборостроения. – 2015. – Т. 4, № 1. – С. 5-11.
116. Zh. O. Dombrovskaya Algorithm for bianisotropic metafilm design problem // 9th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials). – Oxford, UK, 7-10 September, 2015. – IEEE Xplore Digital Library. – P. 58-60.