ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД РАСЧЁТА КВАЗИВОЛНОВОДНЫХ МОД ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЁТОК

Быков Д.А., Досколович Л.Л.
Институт систем обработки изображений РАН
Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет),

Аннотация

Предложен новый итерационный метод расчёта полюсов матрицы рассеяния. Метод учитывает вид матрицы рассеяния в окрестности полюса и основан на решении матричных уравнений с использованием спектральных разложений. На примере задачи расчёта мод металлодиэлектрической дифракционной решётки показано, что предложенный итерационный метод обладает высокой скоростью сходимости и является численно устойчивым при большой размерности матрицы рассеяния.

Ключевые слова: дифракционная решётка, полюс матрицы рассеяния, квазиволноводная мода.

Введение

Дифракционные микро- и наноструктуры с резонансными свойствами представляют большой интерес при создании современных элементов интегральной оптики и фотоники. Резонансные свойства таких структур проявляются в резком изменении спектров пропускания и отражения и, как правило, связаны с возбуждением собственных мод структуры. Моды структуры обычно описывают как полюсы аналитического продолжения матрицы рассеяния [1 – 3]. При этом матрица рассеяния рассматривается как функция комплексной частоты [1 – 3]. Такой подход к объяснению резонансных свойств дифракционных структур широко используется при описании оптических свойств дифракционных решёток [1 – 3] и фотонно-кристаллических структур [1 – 4].

Расчёт полюсов матрицы рассеяния – вычислительно сложная задача. В известных работах предложено несколько итерационных методов её решения. Самые простые методы заключаются в вычислении полюсов определителя матрицы рассеяния или полюсов её максимального собственного числа [4]. В работах [1 – 3] предложен более продвинутый подход, основанный на линеаризации обратной матрицы рассеяния. Указанные методы не всегда позволяют эффективно рассчитывать полюсы матриц рассеяния большой размерности [3]. Кроме того, указанные методы обладают достаточно низкой скоростью сходимости.

Матрица рассеяния

Дадим определение матрицы рассеяния на примере дифракционной решётки. Пусть решётка периодична по оси x с периодом d. Рассмотрим набор плоских волн, падающих на решётку сверху и снизу, причём x-компоненты волновых векторов падающих волн имеют вид:

$$k_{x,m} = k_{x,0} + \frac{2\pi}{d} m,\ \ m \in \mathbb{Z}. \tag{1}$$

Данный набор плоских волн при дифракции на решётке рассеется в набор отражённых и прошедших дифракционных порядков. При этом, согласно теореме Блоха–Флоке, x – компоненты волновых векторов дифракционных порядков также будут определяться формулой (1).

Матрица рассеяния решётки $\mathbf{S}$ связывает комплексные амплитуды волн, падающих на решётку и рассеянных решёткой:

$$\mathbf{S}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{I}_1 \\ \mathbf{I}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{T} \end{bmatrix}, \tag{1}$$

где $\mathbf{R}$ и $\mathbf{T}$ – векторы комплексных амплитуд отражённых и прошедших порядков дифракции, а $\mathbf{I}_1$ и $\mathbf{I}_2$ – векторы комплексных амплитуд волн, падающих на структуру сверху и снизу.

Расчёт полюсов матрицы рассеяния

Для заданных геометрии и материалов решётки матрица рассеяния $\mathbf{S}$ является функцией частоты и x-компоненты волнового вектора падающей волны с номером $m = 0$: $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\omega, k_{x,0})$. При описании резонансов в спектре пропускания или отражения решётки фиксируют направление падающей волны и рассматривают матрицу рассеяния как функцию частоты ω: $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\omega)$. При этом резонансам структуры соответствуют полюсы аналитического продолжения $\mathbf{S}(\omega)$[1 – 3].

В работах [1 – 4] предложен ряд итерационных методов, позволяющих находить полюсы матрицы рассеяния. К недостаткам данных методов можно отнести недостаточно высокую скорость сходимости. Кроме того, методы работ [1 – 3] являются численно неустойчивыми при большом размере матрицы рассеяния.

Рассмотрим метод, основанный на резонансном представлении матрицы рассеяния [2]:

$$\mathbf{S}(\omega) = \mathbf{A}(\omega) + \mathbf{L}\left(\omega\mathbf{I} - \mathbf{\Omega}_{\mathrm{p}}\right)^{-1}\mathbf{R}. \tag{3}$$

Здесь $\mathbf{A}(\omega)$ – нерезонансное слагаемое матрицы рассеяния; $\mathbf{\Omega}_{\mathrm{p}} \in \mathbb{C}^{r\times r}$ – диагональная матрица, составленная из комплексных частот мод структуры, $\mathbf{L} \in \mathbb{C}^{n\times r}, \mathbf{R} \in \mathbb{C}^{r\times n}$ – некоторые матрицы, причём

$r = \dim \mathbf{\Omega}_{\text{p}} = \operatorname{rank} \mathbf{\Omega}_{\text{p}}$ – количество мод структуры, $n = \dim \mathbf{S}$ – размер матрицы рассеяния.

Пусть имеется некоторое начальное приближение полюса $\omega = \omega_n$. Пренебрегая зависимостью нерезонансного слагаемого от частоты в (3), вычислим две первые производные $\mathbf{S}(\omega)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}'(\omega) &= -\mathbf{L}(\omega\mathbf{I} - \mathbf{\Omega}_{\text{p}})^{-2}\mathbf{R}, \\ \mathbf{S}''(\omega) &= 2\mathbf{L}(\omega\mathbf{I} - \mathbf{\Omega}_{\text{p}})^{-3}\mathbf{R}. \end{aligned} \tag{4}$$

Решая систему матричных уравнений (4) с использованием метода, предложенного в работе [5], получим:

$$\mathbf{\Omega}_{\text{p}} = \omega_n \mathbf{I} + 2\operatorname{diag}\operatorname{eig}(\mathbf{U}_r^* \mathbf{S}'(\omega_n) \mathbf{V}_r \mathbf{\Sigma}_r^{-1}), \tag{5}$$

где $\mathbf{U}_r \mathbf{\Sigma}_r \mathbf{V}_r^* = \mathbf{S}''(\omega_n)$ – компактное сингулярное разложение матрицы $\mathbf{S}''(\omega_n)$ ранга r; $\operatorname{diag}\operatorname{eig}\mathbf{Q}$ – диагональная матрица, составленная из собственных значений матрицы $\mathbf{Q}$. Выбирая минимальное по модулю собственное число в (5), окончательно получаем итерационную процедуру

$$\omega_{n+1} = \omega_n + 2\min\operatorname{eig}\left(\mathbf{U}_r^* \mathbf{S}'\left(\omega_n\right) \mathbf{V}_r \mathbf{\Sigma}_r^{-1}\right). \tag{6}$$

Выбор минимального по модулю собственного числа в (6) означает, что в качестве следующего приближения полюса ω_{n+1} выбирается приближение наиболее близкое к начальному ω_n.

Численный пример

В качестве примера были рассчитаны моды серебряной дифракционной решётки на волноводном слое (параметры решётки: период $d = 1000$ нм, толщина $h_{gr} = 50$ нм, ширина щелей $w = 200$ нм; толщина волноводного слоя $h = 800$ нм, диэлектрическая проницаемость материала слоя $\varepsilon = 5{,}5$). Для описания диэлектрической проницаемости серебра использовалась модель Лоренца–Друде [6], в качестве материала над и под структурой рассматривался воздух. Для расчёта матрицы рассеяния использовался метод фурье-мод [7, 1].

С использованием итерационной процедуры (6) рассчитывались частоты мод структуры в диапазоне $\operatorname{Re}\omega_{\text{p}} \in [1{,}0\times10^{15}\,\text{c}^{-1}; 1{,}8\times10^{15}\,\text{c}^{-1}]$. При этом рассматривались только высокодобротные моды ($|\operatorname{Im}\omega_{\text{p}}| \le 5\times10^{12}\,\text{c}^{-1}$). В качестве начального приближения выбиралась случайная точка из указанной области. При этом в качестве критерия остановки итерационной процедуры использовалось неравенство $\max\operatorname{svd}\mathbf{S}(\omega) \ge 10^{10}$, где $\max\operatorname{svd}$ – максимальное сингулярное число матрицы рассеяния.

Результаты расчётов показали, что при размере матрицы рассеяния 84×84 предложенный метод сходится в среднем за 2,78 итерации (в 2 раза быстрее метода из работ [1–3] и в 2,5 раза быстрее итерационного метода из работы [4]). При увеличении размера матрицы рассеяния до 804×804 метод сходится в среднем за 3,81 итерации (на 30% быстрее итерационного метода из работы [4]; метод из работ [1–3] не сходится).

Заключение

В работе предложен новый итерационный метод расчёта полюсов матрицы рассеяния. Метод учитывает вид матрицы рассеяния в окрестности полюса и основан на решении матричных уравнений с использованием спектральных матричных разложений. По сравнению с существующими методами предложенный итерационный метод обладает высокой скоростью сходимости и является численно устойчивым при большой размерности матрицы рассеяния.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке РФФИ (11-07-12036, 10-02-01391, 11-07-00153, 12-07-00495, 10-07-00553) и гранта президента РФ (НШ-4128.2012.9).

Литература

1. **Гиппиус, Н.А.** Применение метода матрицы рассеяния для расчёта оптических свойств метаматериалов / Н.А. Гиппиус, С.Г. Тиходеев // УФН. – 2009. – Т. 179, № 9. – С. 1027-1030.
2. **Gippius, N.A.** Resonant mode coupling of optical resonances in stacked nanostructures / N.A. Gippius, T. Weiss, S.G. Tikhodeev, H. Giessen // Opt. Express. – 2010. – Vol. 18, N 7. – P. 7569–7574.
3. **Weiss, T.** Advanced numerical and semi-analytical scattering matrix calculations for modern nano-optics: Ph. D. thesis / T. Weiss // Physikalisches Institut der Universitat Stuttgart, 2011.
4. **Felbacq, D.** Numerical computation of resonance poles in scattering theory / D. Felbacq // Phys. Rev. E. – 2001. – Vol. 64. – P. 047702.
5. **Hua, Y.** Matrix pencil and system poles / Y. Hua, T.K. Sarkar // Signal Processing. – 1990. – Vol. 21, N 2. – P. 195-198.
6. **Rakic, A.D.** Optical Properties of Metallic Films for Vertical-Cavity Optoelectronic Devices / A.D. Rakic, A.B. Djurisic, J.M. Elazar, M.L. Majewski // Appl. Opt. – 1998. – Vol. 37, N 22. – P. 5271-5283.
7. **Moharam, M.** Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings / M. Moharam, E. Grann, D. Pommet, T. Gaylord // J. Opt. Soc. Am. A. – 1995 – Vol. 12. – P. 1068-1076.

References

1. **Gippius, N.A.** The scattering matrix and optical properties of metamaterials / N.A. Gippius, S.G. Tikhodeev // Physics-Uspekhi. – 2009. – Vol. 52, N 9. – P. 1027-1030.
2. **Gippius, N.A.** Resonant mode coupling of optical resonances in stacked nanostructures / N.A. Gippius, T. Weiss, S.G. Tikhodeev, H. Giessen // Opt. Express. – 2010. – Vol. 18, N 7. – P. 7569–7574.
3. **Weiss, T.** Advanced numerical and semi-analytical scattering matrix calculations for modern nano-optics: Ph. D. thesis / T. Weiss // Physikalisches Institut der Universitat Stuttgart, 2011.
4. **Felbacq, D.** Numerical computation of resonance poles in scattering theory / D. Felbacq // Phys. Rev. E. – 2001. – Vol. 64. – P. 047702.
5. **Hua, Y.** Matrix pencil and system poles / Y. Hua, T.K. Sarkar // Signal Processing. – 1990. – Vol. 21, N 2. – P. 195-198.

6. **Rakic, A.D.** Optical Properties of Metallic Films for Vertical-Cavity Optoelectronic Devices / A.D. Rakic, A.B. Djurisic, J.M. Elazar, M.L. Majewski // Appl. Opt. – 1998. – Vol. 37, N 22. – P. 5271-5283.

7. **Moharam, M.** Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings / M. Moharam, E. Grann, D. Pommet, T. Gaylord // J. Opt. Soc. Am. A. – 1995 – Vol. 12. – P. 1068-1076.

ITERATIVE METHODS FOR CALCULATING GRATING QUASIGUIDED EIGENMODES

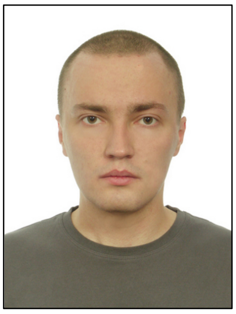
D.A. Bykov, L.L. Doskolovich
Image Processing Systems Institute of the RAS,
S.P. Korolyov Samara State Aerospace University (National Research University)

Abstract

A new iterative method for calculating the matrix poles is proposed. The method takes account of the scattering matrix form in the pole vicinity and relies upon solving matrix equations with use of spectral decompositions. Calculation of the modes of a metal-dielectric diffraction grating shows that the iterative method proposed has the high rate of convergence and is numerically stable for large-dimension scattering matrices.

Key words: grating, scattering matrix pole, quasiguided eigenmode.

Сведения об авторах



Быков Дмитрий Александрович, 1986 года рождения, в 2009 году с отличием окончил Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (СГАУ) по специальности «Прикладная математика и информатика». Кандидат физико-математических наук (2011 г.), научный сотрудник лаборатории дифракционной оптики Института систем обработки изображений РАН (ИСОИ РАН). Области научных интересов: нанофотоника, магнитооптика, плазмоника, электромагнитная теория дифракции.

E-mail: *bykovd@gmail.com* .

Dmitry Alexandrovich Bykov (b. 1986) graduated with honors (2009) from the Samara State Aerospace University (SSAU), majoring in Applied Mathematics and Computer Science. Candidate in Physics and Mathematics (2011). Currently he is a researcher in Diffractive Optics Laboratory of Image Processing Systems Institute of the RAS (IPSI RAS). His current research interests include nanophotonics, magneto-optics of nanostructured materials, plasmonics and electromagnetic diffraction theory.

Досколович Леонид Леонидович, 1966 года рождения, в 1989 году с отличием окончил Куйбышевский авиационный институт (КуАИ, ныне – Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва – СГАУ) по специальности «Прикладная математика». Доктор физико-математических наук (2001 год), профессор, работает ведущим научным сотрудником лаборатории дифракционной оптики Института систем обработки изображений РАН (ИСОИ РАН), профессором кафедры технической кибернетики СГАУ. Специалист в области дифракционной оптики, лазерных информационных технологий, нанофотоники.

E-mail: *leonid@smr.ru* .

Leonid Leonidovich Doskolovich (b. 1966) graduated with honors (1989) from the S.P. Korolyov Kuibyshev Aviation Institute (presently, Samara State Aerospace University named after S.P. Korolyov (SSAU)), majoring in Applied Mathematics. He received his Doctor in Physics & Mathematics (2001) degrees from Samara State Aerospace University. Leading researcher of the Image Processing Systems Institute of the RAS, professor at SSAU's Technical Cybernetics department. Current research interests include diffractive optics, laser information technologies, nanophotonics.