ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В ЗАДАЧАХ ДИФРАКЦИОННОЙ ОПТИКИ

Стенограмма научного сообщения на совместном семинаре ИСОИ РАН и Института компьютерных исследований СГАУ 11 апреля 2006 года В.В. Котляр

Институт систем обработки изображений РАН,

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева

Рассмотрены методы численного моделирования задач дифракционной оптики, включающие методы разностного решения систем уравнений Максвелла для задач дифракции электромагнитного излучения на элементах микро-оптики, методы конечных и граничных элементов, модовые методы решения задач дифракции света на периодических структурах типа дифракционных решеток и фотонных кристаллов, а также методы расчета собственных мод оптических волноводов с неоднородной поперечной структурой (фотонных волноводов).

Если характерные размеры препятствия на пути света сравнимы с длиной волны, то для адекватного описания дифракции света на препятствии требуется строго решать задачу, которая, в конечном счете, сводится к решению системы уравнений Максвелла (СУМ). Условно методы решения СУМ можно разделить на три группы методов (слайд 1): разностные методы решения дифференциальных уравнений, модовые методы решения интегральных и дифференциальных уравнений, и метод конечных и граничных элементов для решения интегральных уравнений. Особняком стоит метод решения задач на собственные значения и собственные функции для дифференциальных или интегральных операторов. Перечисленные методы в настоящее время применяются для решения следующих задач оптики: расчета и анализа микрооптики, в том числе микрооптики на алмазных пленках; расчета субволнового антиотражающего покрытия; анализа дифракции света на одномерных и двумерных дифракционных решетках, фотонных кристаллах; расчета градиентной микрооптики, анализ пространственных мод оптических волноводов и волокон, расчета силы и момента силы, действующей на микрообъект со стороны электромагнитного поля.

Наиболее универсальным считается метод разностного решения СУМ (слад 2). Он применим для анализа дифракции произвольной электромагнитной волны на диэлектрических, металлических и анизотропных микрообъектах. Причем данный метод позволяет промоделировать временную эволюцию электромагнитного импульса в произвольной неоднородной среде. Начиная с 1997 года, в ИСОИ РАН исследования по численному решению СУМ под руководством членакорреспондента РАН В.А. Сойфера проводит к.ф.-м.н. Д.Л. Головашкин. Первоначальная постановка задачи была двухмерная: анализ дифракции цилиндрической или плоской волны на диэлектрическом цилиндре неограниченной длины и с произвольным сечением, например, цилиндрическая линза.

История проблемы численного решения СУМ начинается с работы S.K.Yee (1966), в которой была преложена оригинальная разностная схема (слайд 3). Наибольший вклад в исследования по численному решению СУМ, начиная с 1975 года, внес А. Taflove. В статьях западных ученых метод решения СУМ называется — FDTD (finite-difference time-domain). Работы по применению этого метода анализа дифракции на элементах микро-оптики, в том числе дифракционной, начались с 1994 года.

Разностная схема Yee является условноустойчивой, а корректное введение излучения в расчетную область осуществляется с помощью метода полного и рассеянного полей (слайд 4). Исследования Головашкина Д.Л. привели к разработке новой, абсолютной устойчивой, разностной схемы для решения СУМ и позволили модернизовать метод введения излучения в расчетную область (слайд 5).

Метод разностного решения СУМ широко применяется в задачах дифракции электромагнитных волн в широком диапазоне спектра, начиная с радиоволн (радиолокация), волн видимого диапазона (микро-оптика, фотонные кристаллы) и кончая рентгеновскими волнами (слайд 6). Из-за больших объемов памяти и времени расчета трехмерных дифракционных задач на компьютере, обычно ограничиваются отношением размера объекта к длине волны от 1 до 100.

Более подробно рассмотрим задачи, которые решались с помощью этого метода в ИСОИ РАН. Для эффективного использования пропускающих дифракционных оптических элементов (ДОЭ) для СО₂-лазера, изготовленных методом лазерной абляции на алмазных пленках миллиметровой толщины, требуется использовать методы понижения отражения энергии (слайд 7). Так как показатель преломления алмаза равен 2,4, то от передней поверхности пленки будет отражаться около 17% лазерного света. Поэтому актуальным является произвести расчет субволнового антиотражающего периодического микрорельефа. Метод разностного решения СУМ был модернизирован для рас-

чета задачи дифракции на пропускающих дифракционных решетках с произвольным профилем микрорельефа на одном периоде. Расчеты показывали, что подбором параметров рельефа решетки можно добиться существенного снижения доли отраженного лазерного излучения.

Были проведены исследования по дифракции плоской электромагнитной волны на цилиндрических микро-линзах, как рефракционных, так и дифракционных (4- и 2-ступенчатых) (слайд 8). Диаметр таких линз составлял десятки длин волн, и фокусное расстояние было сравнимо с радиусом линзы. Были получены зависимости дифракционной эффективности микро-линз и осевое смещения фокальной точки от числа уровней квантования.

При изготовлении ДОЭ по методу микролитографии и при травлении подложки возникают технологические погрешности. Например, вместо прямоугольного профиля микрорельефа получается трапецевидный, или между двумя соседними «элементарными ячейками» травления возникает непротравленный участок (слайд 9). Локальное применение метода разностного решения СУМ (только к одному участку микрорельефа) позволило определить зависимость изменения световой энергии нулевого порядка дифракции от размеров «элементарных ячеек» травления.

Решение СУМ для трехмерной задачи дифракции требует большого объема компьютерных вычислений. Так, если рассмотреть микро-линзу диаметром 10^2 длин волн, то расчетный объем будет 106 кубических длин волн, а необходимое число отсчетов для решения такой задачи с приемлемой точностью составит 3x10¹⁰. Для решения задачи (неявных разностных уравнений) на такой сетке отсчетов требуется разработка параллельных алгоритмов (слайд 10). Были разработаны параллельные алгоритмы реализующие решение неявных разностных уравнений по схеме встречных прогонок. По сравнению с известными параллельными алгоритмами (декомпозиция данных, циклическая редукция, метод Миренкова) разработанные алгоритмы требуют выполнения меньшего в 1,5-3 раза числа арифметических операций (слайд 11).

Во многих задачах дифракции рассматривается монохроматический свет. Решение таких задач связано с решением уравнения Гельмгольца. Если ограничить рассмотрение только периодическими объектами, например, одномерными или двумерными дифракционными решетками, трехмерными фотонными кристаллами, то решать уравнение Гельмгольца в этом случае удобно с помощью метода связанных волн (rigorous coupled wave – RCW) (слайд 12). Впервые этот метод применил к анализу объемных голограмм в 1969 году Н. Коgelnik. Для анализа дифракционных решеток метод связанных волн применили в 1981 году М. Моharam, Т. Gaylord.

Метод связанных волн (МСВ) основан на представлении электромагнитного поля в однородных областях пространства до периодического объекта и после него в виде линейной комбинации плоских волн (слайд 13). Для непериодического ограниченного объекта вместо линейной комбинации плоских волн нужно использовать — непрерывное разложение по плоским волнам в виде Фурье-интеграла. В области объекта решаются уравнения Максвелла методом Фурье-преобразования. Для нахождения неизвестных коэффициентов в рядах Фурье с помощью граничных условий формируется система линейных алгебраических уравнений. МСВ развивается в ИСОИ РАН с 1994 года д.ф.-м.н. Л.Л. Досколовичем.

МСВ, в его двумерной реализации, позволяет относительно быстро рассчитывать трехмерные поля дифракции на элементах микро-оптики, например, рассчитывать дифракцию плоской линейно-поляризованной волны на бинарной микролинзе, радиус которой сравним с фокусным расстоянием, и составляет несколько длин волн (слайд 14).

МСВ позволяет также решать задачи дифракции на двумерных решетках из магнитного и анизотропного материалов. Например, можно решить задачу расчета бинарных антиотражающих структур с различными типами отверстий, как для диэлектрического материала, так и для металла (слайд 15). При решении такой задачи можно найти значения параметров отверстий в слое, при которых коэффициент отражения равен нулю.

Кроме задач анализа дифракции электромагнитной волны на элементах микро-оптики МСВ используется в задачах синтеза или расчета многопорядковых дифракционных решеток или микро-ДОЭ, обладающих заданными характеристиками (слайд 16). Такая обратная задача решается, как правило, градиентным методом оптимизации. При этом критерием, подлежащим оптимизации (например, минимизации) является среднеквадратичное отклонение рассчитанных интенсивностей порядков дифракции от заданных.

Для решения задач дифракции электромагнитной волны на микрообъектах применяются не только дифференциальные методы, которые были рассмотрены до этого, но и интегральные методы. Они основаны на решении интегральных уравнений, как правило, линейных интегральных уравнений Фредгольма второго рода (слайд 17). Это методы конечных и граничных элементов в постановке Ритца или Галеркина, это метод прямого сведения интегрального уравнения к линейной системе алгебраических уравнений или использование алгоритма быстрого преобразования Фурье для итеративного решения интегрального уравнения типа свертки. Решением задач дифракции методом конечных элементов (МКЭ) под руководством д.ф.-м.н. В.В. Котляра в ИСОИ РАН, начиная с 1999 года, занимались к.ф.-м.н. Д.В. Нестеренко, к.ф.м.н. М.А. Личманов и к.ф.-м.н. А.Г. Налимов.

МКЭ применялся при анализе дифракции плоской волны на цилиндрических дифракционных микролинзах (слайд 18). Отличительной особенностью решения дифракционных задач интегральными методом, является то, что нет необходимости в разработке специальных поглощающих условий на границе области расчета, типа граничных условий Беренгера. Кроме того, после нахождения поля дифракции внутри элемента микрооптики и в малой окрестности вокруг него, с помощью того же интегрального преобразования можно найти световое поле в любой другой точке пространства.

МКЭ был применен также для анализа дифракции электромагнитной волны на диэлектрических неоднородных микро-цилиндрах с произвольной формой сечения, например, на неоднородной микролинзе Лунеберга (слайд 19). При этом для ТМ-поляризации нагруженное интегральное уравнение Фредгольма второго рода решалось с помощью сведения к линейной системе алгебраических уравнений, размерность которой равна NxN, где N — число узлов двумерной сетки отсчетов.

Для быстрого численного решения дифракционных интегральных уравнений, которые, как правило, включают свертку искомой функции поля с функцией Грина задачи (с фундаментальным решением), был разработан итеративный метод, использующий алгоритм быстрого дискретного преобразования Фурье (слайд 20). Этот метод позволяет, в отличие от других вариантов МКЭ, всего за несколько секунд (около 100 итераций) рассчитать двумерное поле дифракции на сетке отсчетов 128х128. Этот метод применялся для расчета проекций вектора силы, действующей со стороны сходящегося непараксиального цилиндрического гауссового пучка на диэлектрический микроцилиндр, радиус поперечного сечения которого (цилиндра) сравним с длиной волны и радиусом перетяжки гауссового пучка (слайд 21). Было показано, что при определенных параметрах пучка и микро-цилиндра, возможен оптический захват, то есть имеется точка вблизи перетяжки гауссового пучка, в которой сила равна нулю.

Обычно задачу дифракции рассматривают как задачу прохождения падающей электромагнитной волны через однородный или неоднородный, ограниченный или неограниченный, периодический или непериодический, объекты. Если измениться падающее поле, то задачу дифракции нужно будет решать заново. Но можно поступить по другому. Рассчитать один раз конечное число собственных мод объекта, а далее, для любой падающей на данный объект волны, решать более простую задачу: разложение поля падающей волны по электромагнитным модам данного объекта. Так обычно поступают в задачах расчета поперечных про-

странственных мод неоднородных по сечению волноводов (слайд 22). Интерес к анализу распространения света в волноводах с неоднородным сечением возрос после 1996 года, когда были открыты фотонно-кристаллические волноводы.

В ИСОИ РАН работы по расчету электромагнитных мод волноводов ведутся с 2003 года под руководством д.ф.-м.н. В.В. Котляра аспиранткой Я.О. Шуюповой. Был разработан метод разностного решения системы векторных уравнений Гельмгольца для неоднородных по поперечному сечению волноводов. Расчет собственных мод и собственных чисел (констант распространения) волновода при этом сводится к решению линейной задачи на собственные вектора для квадратной матрицы, размерность которой равна удвоенному числу узлов сетки отсчетов (слайд 23).

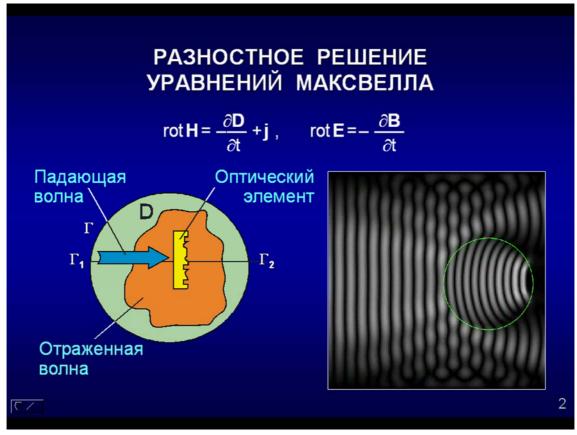
Разностным методом удается посчитать с приемлемой точностью несколько первых электромагнитных мод оптических волноводов, в том числе, фотонно-кристаллических, на сетке отсчетов 100х100 (слайд 24). Недостатком данного метода является то, что для увеличения сетки отсчетов в поперечном сечении волновода ограничивается объемом оперативной памяти компьютера. Кроме того, в этом дискретном методе моды волновода всегда будут представлять собой дискретную матрицу чисел. Аналог данного метода был предложен в 2004 году R. Yang.

Также был разработан метод расчета электромагнитных мод волноводов, основанный на локальном представлении мод в виде линейной комбинации известного аналитического базиса синусоидальных мод. Метод называется — метод согласованных синусоидальных мод (слайд 25). Первая его реализация была предложена в 1993 году А. Sudbo. Задача нахождения пространственных мод оптических волноводов сводится к решению нелинейной матричной задачи на собственные вектора и собственные числа. Наша модернизация метода заключается в том, что нелинейная задача на собственные значения матрицы решается итеративно с помощью метода Крылова.

Методом согласованных синусоидальных мод были рассчитаны первые несколько пространственных мод для модели круглого ступенчатого оптического волокна (слайд 26). Если волокно — слабое, то применима скалярная версия метода согласованных синусоидальных мод. Если волновод полый (в оболочке имеются отверстия в материале волновода, расположенные в шахматном порядке) (слайд27), то применяется полная векторная версия метода. Для дырочных волноводов было показано, что все рассчитанные первые моды локализованы внутри коры (сердечника) волновода и почти (меньше процента энергии) не приникают в область оболочки, состоящей из дырок.



Слайд 1



Слайд 2

КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА (СУМ)

История вопроса

- Предложены разностные схемы с половинным шагом для решения СУМ (S.K. Yee.1966).
- 2. Развит FDTD (finite-difference time-domain) метод для решения электромагнитных задач: дифракция на цилиндре (A. Taflove, 1975).
- 3. Граничные условия (G. Mur, 1981; J.P. Berenger, 1994).
- 4. Введение излучения в расчетную область (метод полного и рассеянного полей) (R. Fisher, 1980).
- 5. Монографии (K.S. Kunz, 1993; A. Taflove, 1995 (2-oe 2000, 3-e-2005)).
- 6. Применение к микрооптике: дифракция на сферической линзе (R.W. Ziolkowski, 1994), металлической решетке (R.W. Ziolkowski, 1995), цилиндрической линзе в волноводе (Д.Л. Головашкин, В.А. Сойфер, 1997), диэлектической решетке (H. Ichikawa, 1998), радиально-симметричном ДОЭ (D.W. Prather, 1999), 3D ДОЭ (D.W. Prather, 2000), металлическом шаре (J.T. Krug, 2002), объемной диэлектрической решетке (E. Glytsis, 2002), а также для волноводов (S. Chu, 1989) и фотонных кристаллов.
- 7. Caйт www.fdtd.org

5/

3

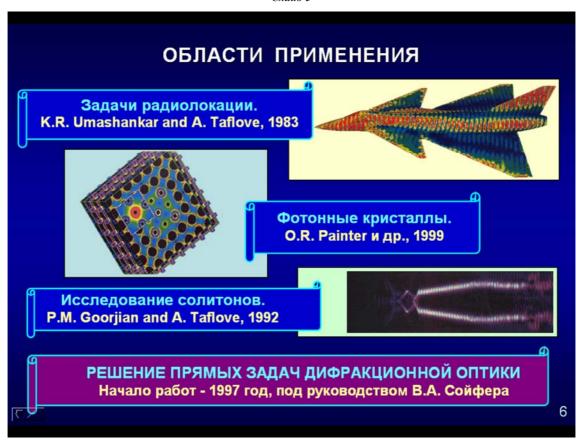
Слайд 3



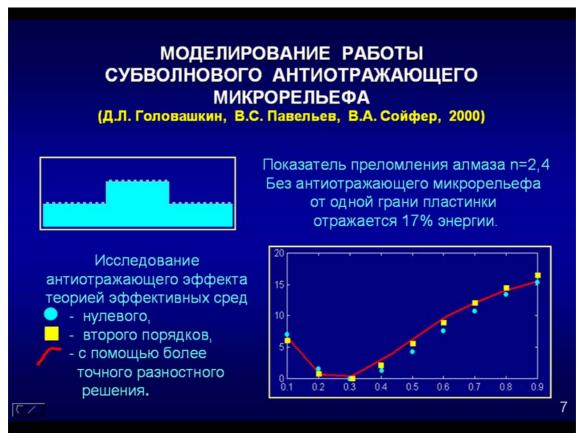
Слайд 4



Слайд 5



Слайд 6



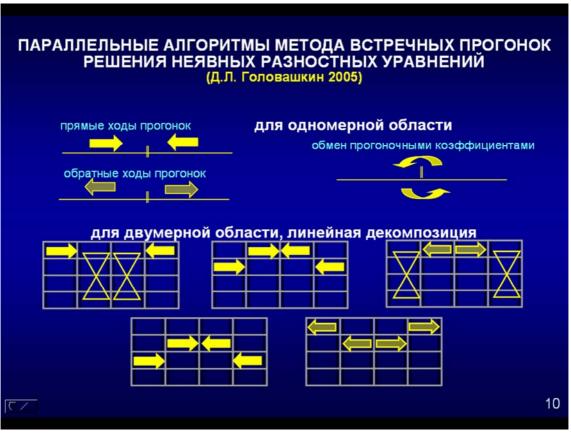
Слайд 7



Слайд 8



Слайд 9



Слайд 10



Слайд 11

ДИФРАКЦИЯ СВЕТА НА ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

История вопроса

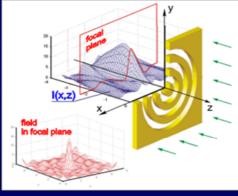
- 1. Метод связанных волн для объемных голограмм (H. Kogelnik, 1969)
- 2. Разработан RCWA (rigorous coupled-wave analysis) метод для анализа дифракции света на 2D и 3D периодических структурах (M.G. Moharam, T.K. Gaylord, 1981, 1983).
- 3. Модальный метод Фурье (FMM) (К.Кпор, 1978).
- Монографии (R. Petit, 1980; E. Popov, 1997).
- 5. Применение метода: дифракция на цилиндрических линзах (Т.К. Gaylord, 1996), решетке с конечным числом периодов (Т.К. Gaylord, 1997), 2D решетках и антиотражающих покрытиях (М.G. Moharam, 1994, P. Lalanne, 1997, L. Li, 1997), фотонных кристаллах (Е. Ророу, 2000).
- 6. Электромагнитный расчет решеток (Досколович Л.Л., 1994) и 2D ДОЭ (J. Turunen, 1993, N.Y. Chang, 2001).
- 7. Сайт www.gsolver.com, на котором есть программа для 3D моделирования периодических структур и их модового анализа.

12

Слайд 12

ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА ДОЭ

Новизна подхода: расчет и моделирование бинарных линз методом связанных волн



Геометрия задачи и распределения интенсивности (в плоскости XOZ и в фокальной плоскости)

Метод моделирования – RCW (rigorous coupled wave)

- 1. Поле перед и за ДОЭ представляется в виде интегралов по плоским волнам с амплитудами .
- 2. В области ДОЭ решаются уравнения Максвелла методом Фурьепреобразования.
- 3. Амплитуды компонент дифрагированного поля определяются из условия сшивки полей на границе ДОЭ.

$$rot \mathbf{H}(\mathbf{x}) = -ik_0 \varepsilon(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}),$$
$$rot \mathbf{E}(\mathbf{x}) = ik_0 \mu(\mathbf{x}) \mathbf{H}(\mathbf{x})$$

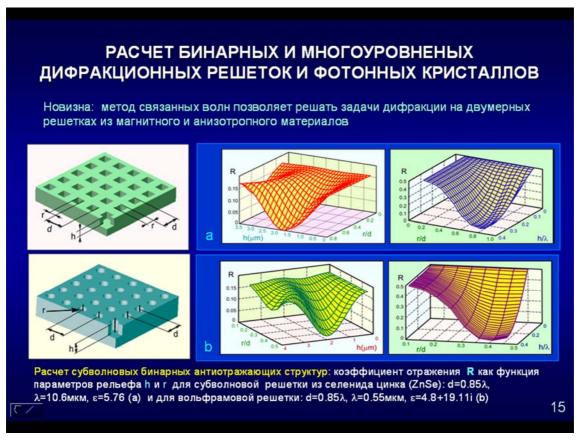
13

♥∠

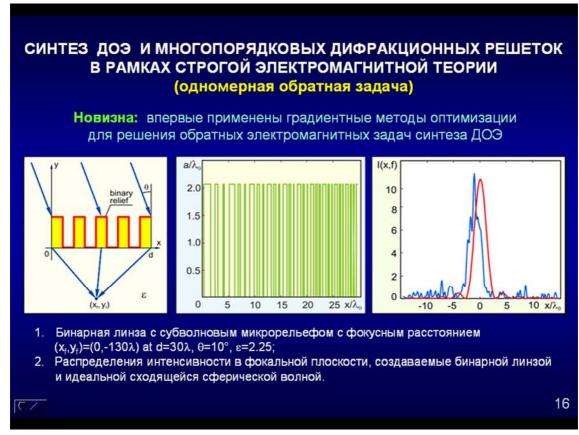
Слайд 13



Слайд 14



Слайд 15



Слайд 16

МЕТОД КОНЕЧНЫХ И ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В ОПТИКЕ

История вопроса

- 1. Метод конечных элементов (МКЭ) в оптике применялся для решения задач рассеяния (дальняя зона)
- 2. Монографии M.A. Morgan, 1990, J. Jin, 2002.
- 3. Для решения задач дифракции в ближней зоне МКЭ и метод граничных элементов (МГЭ) стал применяться позже: анализ дифракции в волноводах (К. Hayata, 1990), на решетках (D. Maystre, 1993), на цилиндрической линзе (Т.К. Gaylord, 1998), на ДОЭ (МКЭ- N. Gallagher, 1994, D.W. Prather, 1996, МГЭ Т.К. Gaylord, 2001, B. Gu, 2001).
- Наш вклад в МКЭ: метод Галеркина для МКЭ+МГЭ (Нестеренко Д.В.,2000), градиентные и многослойные элементы 2D микрооптики (интегральные уравнения решались в «лоб» с помощью СЛАУ, Личманов М.А., 2002), итеративный метод решения ингерального уравнения (Налимов А.Г., 2004).
- Б. В настоящее время для полного решения 3D задачи дифракции используют метод FDTD для расчета поля внутри элемента размером меньше, чем 10λх10λх10λ с дискретностью λ/30 за несколько часов, а поле вне элемента в любой заданной области рассчитывается с помощью интеграла Стреттона-Чу методом МКЭ (Torok P., 2006).

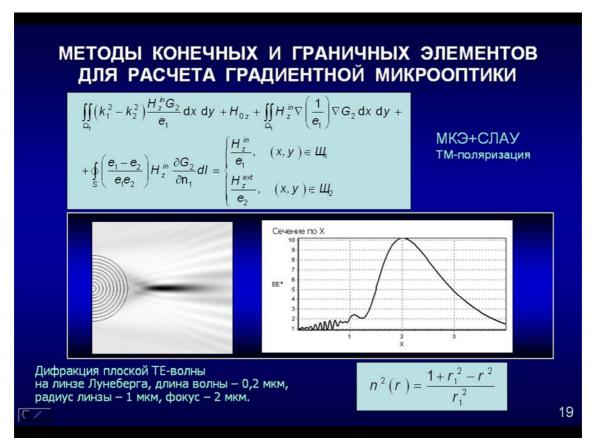
5/

17

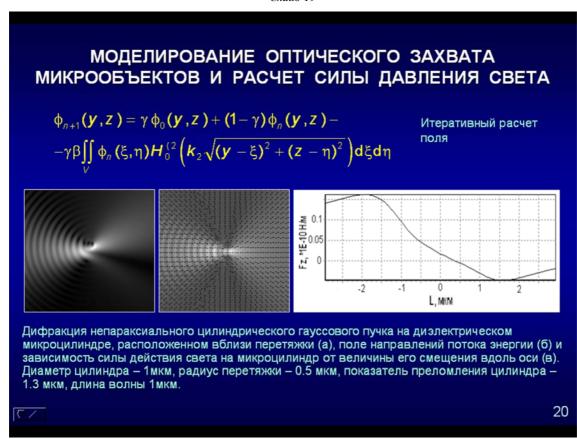
Слайд 17

МЕТОДЫ КОНЕЧНЫХ И ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ РАСЧЕТА МИКРООПТИКИ $\iint_{\Omega} \left(\frac{1}{p} \nabla [u \overset{sc}{_{\Omega}} (x,y) + u \overset{mc}{_{\Omega}} (x,y)] \nabla \gamma - q k^2 [u \overset{sc}{_{\Omega}} (x,y) + u \overset{mc}{_{\Omega}} (x,y)] \gamma \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \frac{\gamma}{p} \frac{d [u \overset{sc}{_{\Omega}} (x,y) + u \overset{mc}{_{\Omega}} (x,y)]}{dn} = 0 \qquad \text{Метод Галеркина}$ Дифракция плоской ТЕ-поляризованной волны на полутоновой, 4-х градационной и бинарной цилиндрических микро-линзах. Диаметр линзы – 8 мкм, фокусное расстояние – 5 мкм, длина волны света – 1 мкм.

Слайд 18



Слайд 19



Слайд 20

ДИФРАКЦИЯ ГАУССОВОГО ПУЧКА НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ЦИЛИНДРЕ С ЭЛЛИПТИЧЕСКИМ СЕЧЕНИЕМ



 $F_{z} = \frac{1}{8\pi} \oint_{S_{1}} \left\{ \frac{1}{2} \left[\left| H_{z} \right|^{2} - \varepsilon_{2} \left| E_{x} \right|^{2} - \left| H_{y} \right|^{2} \right] dS_{z} + \right.$ $\left. + \text{Re} \left(H_{z} H_{y}^{i} \right) dS_{y} \right\}$

Картина дифракции рассчитана с помощью быстрого итеративного решения интегрального уравнения Фредгольма второго рода, описывающего дифракцию электромагнитной волны на диэлектрических цилиндрических объектах.

Модуль проекции вектора Умова-Пойнтинга на оптическую ось. Большой и малый радиусы эллиптического сечения: 2 мкм и 1 мкм, радиус перетяжки – 0,5 мкм, длина волны – 1мкм, показатель преломления – 1,3.

5/

21

Слайд 21

РАСЧЕТ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ МОД ОПТИЧЕСКИХ НЕОДНОРОДНЫХ ПО СЕЧЕНИЮ ВОЛНОВОДОВ

История вопроса

- 1. Микроструктурированные или фотонные или полые волокна (J.C. Knight, P.S. Russel, 1996).
- 2. Методы расчета мод волноводов: метод эффективного показателя среды (J.C. Knight, 1997); метод плоских волн (A. Ferrando, 1999); метод мультипольного разложения (Maystre D., 2002); метод конечных элементов (D-U. Li, 2000); метод граничных элементов (D. Yervik, 2003); метод согласованных синусоидальных мод (Шуюпова Я., 2004); метод конечных разностей (G. Zhou, 2004); метод разложения по модам Гаусса-Эрмита (Monro T.M., 1999).
- На сайте (http://ab-initio.mit.edu/mpb/) есть программа

 МIT Photonics-Bends для расчета мод 3D периодических структур

 с помощью решения задачи на собственные значения для системы
 уравнений Максвелла (S.G. Johnson, 2001).

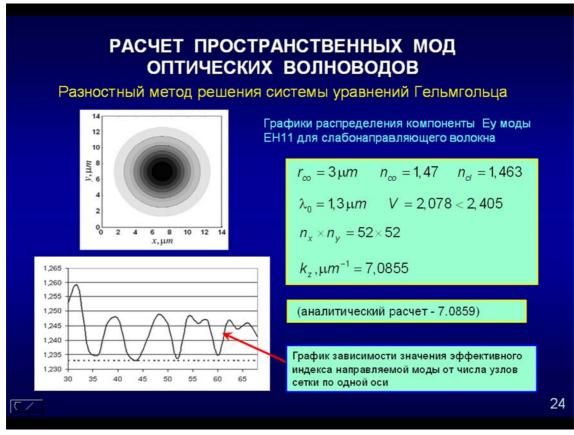
₹/

22

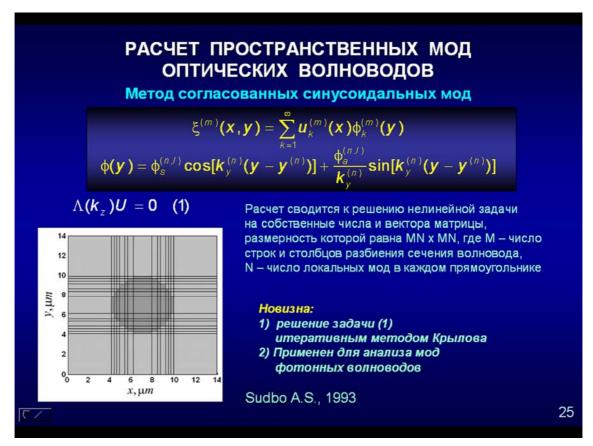
Слайд 22



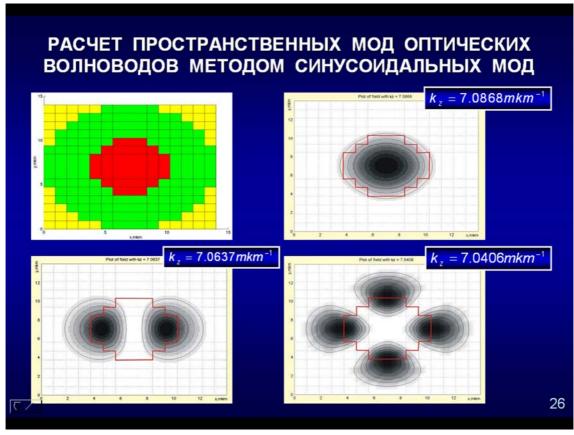
Слайд 23



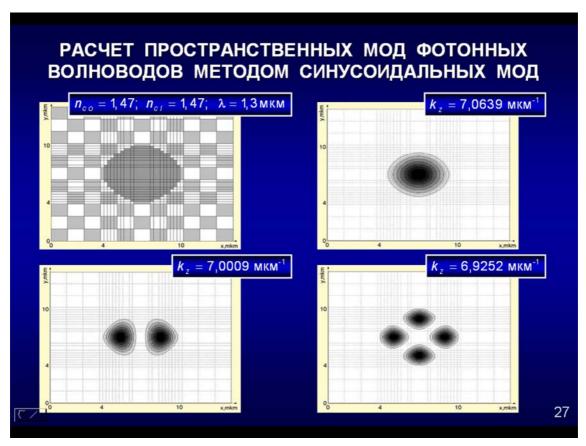
Слайд 24



Слайд 25



Слайд 26



Слайд 27

Numerical solution of Maxwell's equations in the diffractive optics problem

V.V. Kotlyar^{1,2}
¹Image Processing Systems Institute of the RAS,
²Samara State Aerospace University (SSAU)

Abstract:

The article addresses the methods of numerical modeling of diffraction optics tasks, including the methods of difference solution of systems of Maxwell equations for the tasks of diffraction of electromagnetic radiation on micro-optics elements, the methods of finite and boundary elements, the mode methods for solving the tasks of light diffraction on periodic structures like diffraction gratings and photonic crystals, and the methods for calculating the eigenmodes of optical waveguides with inhomogeneous transverse structure (photonic waveguides).

<u>Keywords</u>: Maxwell's Equation, Diffractive Optic, numerical modeling, micro-optic, modemethod, diffraction grating, photonic crystal, photonic waveguides

<u>Citation</u>: Kotlyar VV. Numerical Solution of Maxwell's Equations in the Diffractive Optics Problem. Computer Optics 2006; 29: 24-40.