

55. Li J, Pendry J B *Phys. Rev. Lett.* **101** 203901 (2008)
56. Ma Y G et al. *Nature Mater.* **8** 639 (2009)
57. Ландау Л Д, Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Электродинамика сплошных сред* (М.: Физматлит, 2001) [Landau L D, Lifshitz E M, Pitaevskii L P *Electrodynamics of Continuous Media* (Oxford: Pergamon Press, 1984)]
58. Bergman D J, Stockman M I *Phys. Rev. Lett.* **90** 027402 (2003)
59. Коган Б Я, Волков В М, Лебедев С А *Письма в ЖЭТФ* **16** 144 (1972) [Kogan B, Volkov V, Lebedev S *JETP Lett.* **16** 100 (1972)]
60. Plotz G, Simon H J, Tucciarone J M *J. Opt. Soc. Am.* **69** 419 (1979)
61. Сударкин А Н, Демкович П А *ЖТФ* **59** (7) 86 (1989) [Sudarkin A, Demkovich P *Sov. Phys. Tech. Phys.* **34** 764 (1989)]
62. Tredicucci A et al. *Appl. Phys. Lett.* **76** 2164 (2000)
63. Avrutsky I *Phys. Rev. B* **70** 155416 (2004)
64. Ramakrishna S A, Pendry J B *Phys. Rev. B* **67** 201101 (2003)
65. Lawandy N M et al. *Nature* **368** 436 (1994)
66. Lawandy N M *Appl. Phys. Lett.* **85** 5040 (2004)
67. Lawandy N M *Proc. SPIE* **5924** 59240G (2005)
68. Protsenko I E et al. *Phys. Rev. A* **71** 063812 (2005)
69. Sarychev A K, Shvets G, Shalaev V M *Phys. Rev. E* **73** 036609 (2006)
70. Sarychev A K, Tartakovsky G *Proc. SPIE* **6320** 63200A (2006)
71. Sarychev A K, Tartakovsky G *Phys. Rev. B* **75** 085436 (2007)
72. Sarychev A K, Pukhov A A, Tartakovsky G, in *Progress in Electromagnetics Research Symp. (PIERS), August 27–30, 2007, Prague, Czech Republic* (2007) p. 95; *PIERS Online* **3** 1264 (2007)

PACS numbers: **02.70.** – с, 42.25.Fx, 42.70.Qs
DOI: 10.3367/UFNr.0179.2009091.1027

Применение метода матрицы рассеяния для расчёта оптических свойств метаматериалов

Н.А. Гиппиус, С.Г. Тиходеев

В докладе рассматривается применение формализма матрицы рассеяния для расчёта собственных частот, радиационных ширин и распределения полей квазиволноводных мод в фотонно-кристаллических слоях (ФКС) с конечной толщиной.

В настоящее время исследуются одномерно-периодические (1D) или двумерно-периодические (2D) слои фотонных кристаллов, вертикальная геометрия которых может быть произвольно сложной [1–3]. Такие ФКС оказались весьма интересными и перспективными структурами: они могут быть изготовлены современными методами послойной литографии; их оптические свойства представляют практический интерес в связи с потенциальной интегрируемостью с микроэлектроникой.

Здесь следует отметить, что фотонно-кристаллические слои являются, по существу, дифракционными решётками. Дифракционные решётки играют чрезвычайно важную роль в оптике и её приложениях. Поэтому их история, конечно, является значительно более старой, чем термин "фотонный кристалл".

Первая дифракционная решётка была создана и исследована американским астрономом Д. Риттенхаусом в 1786 г. [4]. (Любопытная история создания первой дифракционной решётки изложена в заметке [5].) Однако это открытие осталось незамеченным, и создателем дифракционной решётки (в 1821 г.) в большинстве курсов оптики и энциклопедий считается Фраунгофер [6]. В 1902 г. Вуд [7] экспериментально обнаружил узкополосные особенности в спектрах отражения металлических дифракционных решёток, называемые с тех пор аномалиями Вуда. Различают два типа аномалий Вуда.

Дифракционные аномалии, или аномалии Рэлея [8], возникают при открытии (с возрастанием частоты падающего света) новых дифракционных каналов; пороговая частота открытия канала характеризуется тем, что возникающий дифрагированный луч параллелен поверхности решётки (см. также работу [9]). Резонансные аномалии связаны с возбуждением резонансных мод в решётке: поверхностных плазмонов, квазиволноводных (Фабри – Перо) мод — в зависимости от типа структуры. Качественные закономерности поведения таких резонансов впервые были проанализированы, насколько нам известно, Фано [10]. Спустя 20 лет Фано в знаменитой работе [11] проанализировал общие закономерности поведения дискретного уровня на фоне континуума; возникающие несимметричные резонансы теперь принято называть резонансами Фано. Резонансные аномалии Вуда относятся как раз к такому типу резонансов.

В связи с важностью эффекта резонансного оптического отклика дифракционных решёток для множества приложений, включая, например, лазеры с распределённой обратной связью, оптические фильтры и поляризаторы, этой теме было посвящено огромное количество исследований. В основе большинства методов лежит разложение рассеянного поля дифракционной решётки по пространственным фурье-гармоникам (плоским волнам), впервые предложенное Рэлеем [8]. После создания компьютеров были развиты весьма мощные методы расчёта оптических спектров произвольно сложных дифракционных решёток. Отметим в связи с этим важную работу Хесселя и Олинера [12], развитие формализма матрицы рассеяния в работах Невьера [13, 14]. Мощные методы расчёта были развиты Шестопаловым [15] и Никольским [16], но, к сожалению, они практически не известны современным исследователям, работающим в этой области.

Удобный метод построения матрицы рассеяния для 1D- или 2D-ФКС с произвольно сложной структурой поперёк слоя был развит в работах [17, 18]. Авторы распространили на электродинамику метод построения матрицы рассеяния [19] для расчёта электронного туннелирования в сложных гетероструктурах. Метод матрицы рассеяния позволяет эффективно устранить численные неустойчивости, возникающие в методе матриц переноса из-за наличия экспоненциально убывающих и экспоненциально возрастающих линейно независимых решений. Этот метод позволяет построить матрицу рассеяния на плоскости комплексной частоты [20] и развить эффективные приближённые описания фотонных резонансов в таких структурах.

Необходимо отметить, что применение метода матрицы рассеяния для метаматериалов представляет определённые сложности вследствие плохой сходимости рядов Фурье для металло-диэлектрических структур. В последнее время нам удалось значительно улучшить сходимость метода [21], используя правила факторизации Ли [22] и метод адаптивного пространственного разрешения Гране [23], дополнив последние специальным криволинейным преобразованием координат, согласованным с формой интерфейса металл – диэлектрик.

Моды в плоском волноводе, как известно, имеют действительные собственные энергии Ω , а соответствующие распределения полей являются локализованными вблизи волноводного слоя и экспоненциально затухают

вне волновода. Однако в случае периодической модуляции волновода происходит связывание мод с континуумом в вакууме и подложке и у квазиволноводных мод появляется конечная радиационная ширина. Только волноводные моды с энергиями, меньшими всех дифракционных порогов, остаются незатухающими [24]. Пространственные распределения электромагнитных полей квазиволноводных мод, рассчитанные при собственной комплексной частоте моды, оказываются экспоненциально расходящимися при $z \rightarrow \pm\infty$. Хотя, на первый взгляд, такие решения представляются лишёнными физического смысла, детальный анализ показывает, что это не так [15, 25]. Эти нарастающие при $z \rightarrow \pm\infty$ решения имеют физический смысл затухающих во времени собственных колебаний поля в волноводе, причём распространяющиеся в вакуум и подложку решения оказываются конечными, так как их экспоненциальное пространственное возрастание оказывается скомпенсированным затухающим во времени распадом собственной моды $\exp(-|\text{Im } \Omega| t)$. Пространственно-временная зависимость решения, пропорциональная $\exp[|\text{Im } \Omega|(z - ct)/c]$, описывает распространение фронта затухающего во времени решения.

В теории дифракционных решёток традиционным является построение матрицы рассеяния как функции комплексной постоянной распространения [13, 14], а не комплексной частоты [15]. Сторонники такого подхода полагают, что, поскольку матрица рассеяния на плоскости комплексной частоты приводит к "нефизическим" экспоненциально возрастающим в пространстве решениям, этот метод является математически противоречивым. Такие нарастающие решения известны со времени работы Томсона [26], вычислившего излучение идеально проводящей сферы. (При этом почему-то не замечается то, что и при построении матрицы рассеяния как функции комплексной постоянной распространения такие экспоненциально возрастающие решения возникают с неизбежностью.) Это кажущееся математическое противоречие снимается при переходе к нестационарному рассеянию, например распаду: экспоненциальное нарастание по мере удаления от системы обрезается экспоненциально убывающим временным множителем, в итоге возникает движение распадного фронта с ограниченной амплитудой. Отметим также, что существенным преимуществом построения матрицы рассеяния на комплексной плоскости частоты является возможность использования соотношений причинности.

Собственные моды линейной системы являются нетривиальными решениями уравнения

$$\mathbf{V}_{\text{out}} = S(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{V}_{\text{in}}, \quad (1)$$

соответствующими нулевому вектору амплитуд входящих волн \mathbf{V}_{in} . Для того чтобы найти собственные частоты системы, необходимо определить матрицу рассеяния на комплексной плоскости. Принцип причинности обеспечивает отсутствие особенностей у матрицы рассеяния в верхней полуплоскости комплексных частот ω , однако S -матрица может иметь полюсы при $\omega = \Omega - i\gamma$, $\gamma \geq 0$, в том числе на действительной оси. Такие полюсы соответствуют распаду моды во времени $\propto \exp(-i\Omega t - \gamma t)$ при $t \rightarrow \infty$, и γ определяет их обратное время жизни. При $0 < \gamma \ll \Omega$ этим модам соответствуют резкие изменения в

спектрах пропускания фотонно-кристаллической структуры и сильное резонансное увеличение поля вблизи неё.

Для каждого заданного значения волнового вектора в плоскости \mathbf{k} S -матрица (1) как функция ω на комплексной плоскости может быть задана аналитическим продолжением с действительной оси ω , на которой она определяется однозначно [20]. Важно отметить, что аналитическое продолжение S -матрицы с действительной оси ω в нижнюю полуплоскость зависит от выбора отрезка оси, ограниченного точками открытия дифракционных каналов, с которого оно производится. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

Двумерная дифракционная решётка связывает падающую электромагнитную волну с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$,

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sin \vartheta \cos \varphi, \quad k_y = \frac{\omega}{c} \sin \vartheta \sin \varphi, \quad k_z = \frac{\omega}{c} \cos \vartheta, \quad (2)$$

со всеми брэгговскими гармониками на той же частоте ω и с волновыми векторами

$$\mathbf{k}_{\mathbf{G},a}^{\pm} = (k_{x,\mathbf{G}}, k_{y,\mathbf{G}} \pm k_{z,\mathbf{G},a}), \quad (3)$$

где

$$k_{x,\mathbf{G}} = k_x + G_x, \quad k_{y,\mathbf{G}} = k_y + G_y, \quad (4)$$

$$k_{z,\mathbf{G},a} = \sqrt{\frac{\omega^2 \varepsilon_a}{c^2} - (k_x + G_x)^2 - (k_y + G_y)^2}, \quad (5)$$

$a = v$ в вакууме ($\varepsilon_v = 1$) и $a = s$ в подложке,

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{d} (g_x, g_y, 0), \quad g_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

являются векторами обратной 2D-решётки. В дальнейшем используется следующее правило выбора знака квадратного корня: $\text{Re } \sqrt{A} \geq 0$ для всех комплексных A , и $\text{Im } \sqrt{B} > 0$ для $\text{Im } B = 0$, $\text{Re } B < 0$.

Для прозрачной непоглощающей подложки $\text{Im } \varepsilon_s = 0$. При этом условии брэгговские гармоники (3) являются в зависимости от частоты падающего света ω (действительное число) или распространяющимися ($\text{Im}(k_{z,\mathbf{G}}) = 0$), или экспоненциальными ($\text{Re}(k_{z,\mathbf{G}}) = 0$). В дальнейшем гармоники, которые экспоненциально нарастают (затухают) при удалении от фотонно-кристаллического слоя, будут именоваться экспоненциальными (нарастающими или затухающими). Их не следует путать с затухающими решениями для двумерного фотонного кристалла внутри запрещённой зоны. Если $k_{z,\mathbf{G},a}^2 > 0$, $a = v, s$, то соответствующие гармоники являются незатухающими распространяющимися решениями в вакууме и подложке. В случае $k_{z,\mathbf{G},v}^2 < 0$ и $k_{z,\mathbf{G},s}^2 > 0$ гармоники являются экспоненциальными в вакууме и распространяющимися в подложке. Наконец, если $k_{z,\mathbf{G},a}^2 < 0$, то соответствующие гармоники являются экспоненциальными с обеих сторон фотонно-кристаллического слоя.

Таким образом, $k_{\mathbf{G},v}^+$ - и $k_{\mathbf{G},s}^-$ -гармоники на действительной оси ω , в зависимости от того, открыт или не открыт дифракционный канал, соответствующий вектору \mathbf{G} обратной решётки, представляют собой решения либо распространяющиеся в сторону фотонно-кристаллического слоя, либо экспоненциально возрастающие по мере удаления от него. Они образуют набор "сходящихся" волн.

На комплексной плоскости ω для "распространяющихся" гармоник, т.е. для $\text{Re} k_{z,G,a}^2 > 0$, стандартное определение комплексного корня в (5) имеет разрез под отрицательной действительной полуосью (т.е. при $\text{Re} k_{z,G,a}^2 < 0$) и осуществляет аналитическое продолжение $k_{z,G,a}$ в нижнюю полуплоскость, когда $k_{z,G,a}^2$ пересекает *положительную* действительную полуось, т.е. для открытых дифракционных каналов.

Однако такой разрез будет препятствовать аналитическому продолжению $k_{z,G,a}$ в нижнюю полуплоскость для закрытых дифракционных каналов. Поэтому для них необходимо выбрать разрез в определении квадратного корня по-другому, например провести разрез под *положительной* действительной осью, как это всегда делается в теории резонансов.

Поскольку вопрос о том, положительную или отрицательную действительную полуось пересекает $k_{z,G,a}^2$ при сдвиге ω в нижнюю комплексную полуплоскость, эквивалентен вопросу о том, открыт или не открыт G -дифракционный канал при данной энергии, выбор определений разрезов квадратного корня ограничивается сегментом действительной оси энергий, заключённым между соседними дифракционными порогами.

Распределение амплитуд исходящих волн может быть найдено из решения однородной линейной системы

$$RX = 0, \quad (7)$$

где $R \equiv S^{-1}$. Как хорошо известно, однородная система уравнений имеет нетривиальное решение только тогда, когда её определитель равен нулю. Поэтому, как правило, для нахождения дисперсионных кривых решаются скалярные уравнения, эквивалентные условию равенства нулю определителя обратной матрицы рассеяния как функции ω и \mathbf{k} . Однако при численных расчётах гораздо удобнее использовать метод линеаризации обратной матрицы рассеяния (вариант многомерного ньютоновского алгоритма), заключающийся в следующем.

Вместо того, чтобы решать *нелинейное* по частоте дисперсионное уравнение

$$\det R(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (8)$$

которое даёт спектры собственных мод $\omega(k)$ для линейной системы (7), следует вычислить в некоторой точке ω_0 (скажем, в точке, где получается какое-то состояние в приближении пустой решётки) обратную матрицу рассеяния и её производную по энергии:

$$R_0 = R(\omega_0), \quad R'_0 = \left. \frac{\partial R}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0}. \quad (9)$$

Тогда

$$R(\omega) \approx R_0 + (\omega - \omega_0) R'_0 \quad (10)$$

и вместо решения системы (7) можно в качестве первой итерации найти нетривиальные решения для линейной аппроксимации обратной S -матрицы (10):

$$(R_0 + (\omega - \omega_0) R'_0) X = 0. \quad (11)$$

Последнее уравнение, как видно, эквивалентно *линейной* задаче о собственных значениях

$$-(R'_0)^{-1} R_0 X = (\omega - \omega_0) X. \quad (12)$$

Вычислительные затраты на решение этой линейной задачи, как правило, меньше, чем на расчёт самой обратной матрицы рассеяния R . В результате находятся $4N_g$ собственных значений δ_j , которые дают приближённые значения для решений уравнения (7): $\Omega_j = \omega_0 + \delta_j$. Эти приближения тем точнее, чем ближе они к точке линейного разложения ω_0 , т.е. чем меньше δ_j .

Выбор точки линейного разложения для следующей итерации зависит от того, какую моду мы ищем и соответственно к какому из приближённых решений следует сдвигаться. Оказывается, что уже *трёх* итераций, как правило, достаточно для нахождения ближайшего собственного значения с относительной точностью лучшей, чем 10^{-5} .

Преимущества такого метода очевидны: вместо многократного громоздкого вычисления S -матрицы и поиска нулей нелинейной скалярной функции энергии $\det R(\omega, \mathbf{k})$, не содержащей информации о структуре моды, может осуществляться поиск с учётом структуры приближённых мод, который допускает практически полную автоматизацию.

Кроме того, "удалённые" собственные значения Ω_j и соответствующие векторы X_j позволяют судить о качественной структуре спектра и симметрии резонансных состояний, так как описанная процедура сохраняет все симметричные свойства S -матрицы.

Если X и Δ — собственные векторы и значения матрицы $-(R'_0)^{-1} R_0$, то по определению

$$-(R'_0)^{-1} R_0 X = X \Delta. \quad (13)$$

Выразив отсюда

$$R_0 = -R'_0 X \Delta X^{-1} \quad (14)$$

и подставив это выражение в (10), получим приближения для $R(\omega)$:

$$R(\omega) \approx R'_0 X (\omega - \omega_0 - \Delta) X^{-1}, \quad (15)$$

и для матрицы $S(\omega) = R^{-1}(\omega)$:

$$S(\omega) \approx X (\omega - \omega_0 - \Delta)^{-1} (R'_0 X)^{-1}. \quad (16)$$

Если теперь в качестве ω_0 выбрать найденную энергию резонанса кратностью n , то первые n значений $\Delta_{i,i}$ обратятся в нуль и соотношение (16) позволит явно выделить резонансную особенность в матрице рассеяния.

В заключение отметим, что в случае, когда аналитическое продолжение S -матрицы в нижнюю полуплоскость с выбранного сегмента действительной оси ω имеет полюсы, расстояния от которых до дифракционных порогов больше расстояния до действительной оси, при анализе оптических свойств системы в этом интервале энергий достаточно рассмотреть только аналитическое продолжение S -матрицы с выбранного сегмента. Например, в [27] этот подход был применён для анализа проявления симметрии ячейки в резонансных особенностях в спектрах отражения фотонно-кристаллических слоёв. Для иллюстрации возможности этого метода расчёта на рисунке показаны энергии и добротности квазиволноводных мод фотонно-кристаллического слоя, схематически изображённого на вставке рис. б (см. также

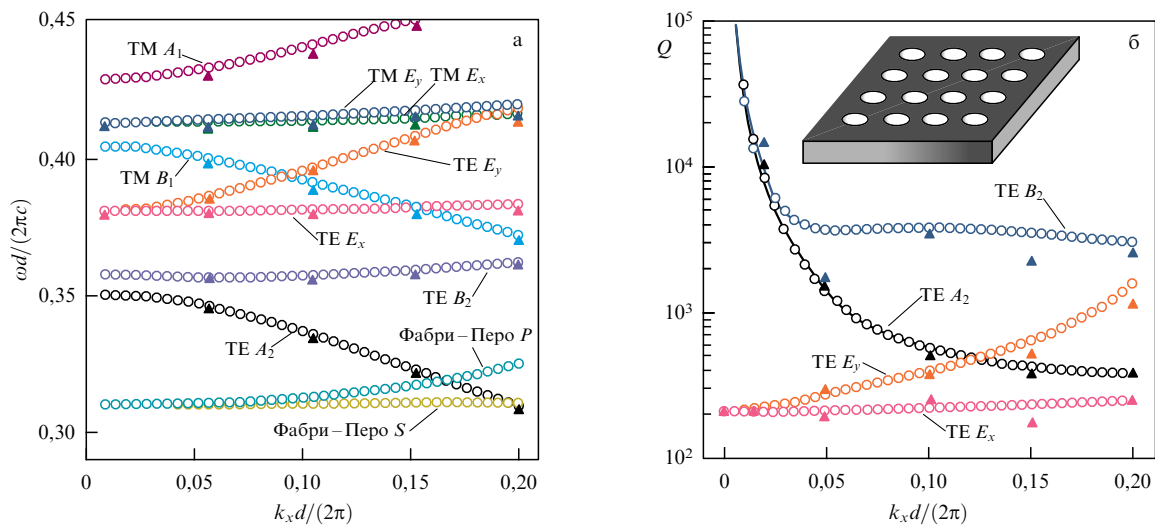


Рис. Энергии (а) и добротности (б) квазिवолноводных мод фотонно-кристаллического слоя, схематически представленного на вставке рис. б. Кружками показаны результаты расчёта описанным здесь методом линеаризации матрицы рассеяния, треугольниками — результаты вычислений методом конечных разностей во временной области (FDTD — Finite-Difference Time-Domain) [28].

[29]. С другой стороны, вблизи частоты отсечки квазिवолноводной моды полюсы матрицы рассеяния подходят близко к дифракционным порогам и начинают проявляться в спектральной зависимости элементов S -матрицы на соседних сегментах действительной оси ω . Такое поведение впервые было проанализировано в [30].

Таким образом, мы продемонстрировали весьма эффективный метод расчёта собственных частот, радиационных ширин и распределения полей квазिवолноводных мод в фотонно-кристаллических слоях с конечной толщиной, основанный на формализме матрицы плотности.

Работа частично поддержана грантами РФФИ и Президиума и ОФН РАН.

Список литературы

- Zengerle R J. *Mod. Opt.* **34** 1589 (1987)
- Labilloy D et al. *Phys. Rev. Lett.* **79** 4147 (1997)
- Astratov V N et al. *Phys. Rev. B* **60** R16255 (1999)
- Rittenhouse D. *Trans. Am. Philos. Soc.* **2** 202 (1786)
- Багбая И Д. *УФН* **108** 335 (1972) [Bagbaya I D. *Sov. Phys. Usp.* **15** 660 (1973)]
- Fraunhofer J. *Denkschr. König Akad. Wiss. München* **8** 1 (1821–1822)
- Wood R W. *Philos. Mag.* **4** 396 (1902)
- Lord Rayleigh. *Philos. Mag.* **14** 60 (1907)
- Болотовский Б М, Лебедев А Н. *ЖЭТФ* **53** 1349 (1967) [Boltovskii B M, Lebedev A N. *Sov. Phys. JETP* **26** 784 (1968)]
- Fano U. *J. Opt. Soc. Am.* **31** 213 (1941)
- Fano U. *Phys. Rev.* **124** 1866 (1961)
- Hessel A, Oliner A A. *Appl. Opt.* **4** 1275 (1965)
- Nevière M, in *Electromagnetic Theory of Gratings* (Ed. R Petit) (Berlin: Springer-Verlag, 1980) Ch. 5, p. 123
- Nevière M et al. *Electromagnetic Resonances in Nonlinear Optics* (Amsterdam: Gordon and Breach Sci. Publ., 2000)
- Шестопапов В П и др. *Резонансное рассеяние волн. Т. 1. Дифракционные решетки* (Киев: Наукова думка, 1986)
- Никольский В В, Никольская Т И. *Декомпозиционный подход к задачам электродинамики* (М.: Наука, 1983)
- Ager C D, Hughes H P. *Phys. Rev. B* **44** 13452 (1991)
- Whittaker D M, Culshaw I S. *Phys. Rev. B* **60** 2610 (1999)
- Ko D Y K, Inkson J C. *Phys. Rev. B* **38** 9945 (1988)
- Tikhodeev S G et al. *Phys. Rev. B* **66** 045102 (2002)
- Weiss T et al. *Opt. Express* **17** 8051 (2009)
- Li L. *J. Opt. Soc. Am. A* **13** 1870 (1996)
- Granet G. *J. Opt. Soc. Am. A* **16** 2510 (1999)
- Johnson S G et al. *Phys. Rev. B* **60** 5751 (1999)
- Базь А И, Зельдович Я Б, Переломов А М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М.: Наука, 1966) [Baz' A I, Zel'dovich Ya B, Perelomov A M. *Scattering, Reactions and Decay in Nonrelativistic Quantum Mechanics* (Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations, 1969)]
- Thomson J J. *London Math. Soc. Proc.* **15** 197 (1884)
- Gippius N A, Tikhodeev S G, Ishihara T. *Phys. Rev. B* **72** 045138 (2005)
- Fan S, Joannopoulos J. *Phys. Rev. B* **65** 235112 (2002)
- Tikhodeev S G et al. *Phys. Status Solidi C* **2** 795 (2005)
- Lampariello P, Frezza F, Oliner A A. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **38** 1831 (1990)