РОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
"КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

На правах рукописи

Дейнега Алексей Вадимович

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Специальность 01.04.05 — оптика

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
кандидат физико-математических наук
доцент Потапкин Б. В.

Москва 2010

Оглавление

Введение **4**

1 Развитие метода решения уравнений Максвелла в конечных разностях **12**

1.1 Обзор литературы 12

1.2 Метод подсеточного сглаживания 24

1.3 Итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую структуру 31

1.4 Выводы 40

2 Применение шаблонного метапрограммирования для эффективной реализация FDTD **42**

2.1 Контурный подход к дискретизации уравнений Максвелла . 43

2.2 Код как совокупность взаимодействующих компонент 47

2.3 Стадии расчета 49

2.4 Оптимизация использования памяти 54

2.5 Проведение параллельных расчетов 57

3 Металлические фотонные кристаллы как источники светового излучения **62**

3.1 Обзор литературы 62

2.6 Выводы 61

3.2 Оптимизация излучательных характеристик металлических фотонных кристаллов в видимом диапазоне 76

3.3 Учет внешней матрицы, необходимой для фиксации фотонного кристалла 87

3.4 Выводы 90

4 Антиотражающие текстурированные покрытия 91

4.1 Обзор литературы 91

4.2 Численное моделирование текстурированных покрытий во всем диапазоне размеров текстуры 119

4.3 Кремниевые текстурированные покрытия 130

4.4 Выводы 138

5 Заключение 140

5.1 Основные результаты и выводы работы 140

5.2 Благодарности 143

Литература 144

Введение

Диссертация посвящена численному моделированию оптических свойств наноструктурированных материалов, а именно, в ней исследуются следующие вопросы:

- Возможность применения металлических фотонных кристаллов в качестве новых высокоэффективных источников света.
- Оптимизация размеров и формы антиотражающих нанотекстурированных покрытий.

Основным используемым численным методом является метод решения уравнений Максвелла в конечных разностях (Finite-Difference Time-Domain, FDTD). Для расчетов применяется специально написанная параллельная программа, включающая в себя ряд новых оригинальных численных методов, которые также описываются в данной диссертации.

Актуальность работы. Наноструктурированные материалы представляют собой новый тип материалов, характеризующийся малым размером (характерный размер порядка нескольких сотен нанометров и менее) и сложной организацией составляющих его элементов. Наноматериалы обладают уникальными физическими свойствами, что позволяет им находить применение во многих промышленных областях: в вычислительной технике, энергетике, медицине и т. д. [1]

К наноматериалам относятся фотонные кристаллы [2], представляющие собой структуры с периодически меняющейся в пространстве диэлектрической проницаемостью. Оптические свойства фотонных кристаллов сильно отличаются от оптических свойств сплошных сред: электромагнитные волны в фотонном кристалле имеют зонный спектр и координатную зависимость, аналогичную блоховским волнам электронов в обычном

кристалле. Перераспределение плотности фотонных состояний в фотонном кристалле приводит к изменению спектра их теплового излучения [3]. Внутри запрещенной зоны плотность фотонных состояний равна нулю, и излучение электромагнитных волн подавлено. Вне запрещенной зоны интенсивность этого излучения непосредственно связана с плотностью фотонных состояний и может сильно варьироваться на разных частотах. На основании этого в литературе было высказано предположение о возможности использования металлических фотонных кристаллов в качестве высокоэффективных источников видимого света [3], излучение которых было бы подавлено в инфракрасном диапазоне, что позволило бы добиться существенно большей световой отдачи по сравнению с обычными лампами накаливания. Однако до сих пор не было проведено какого-либо детального исследования практического осуществления такой возможности. В частности, не было изучено влияние неизбежных при изготовлении фотонных кристаллов дефектов, а также роли внешней матрицы, необходимой для фиксации составляющих фотонный кристалл элементов. В связи с этим становится актуальным исследование излучательных характеристик металлических фотонных кристаллов при высоких температурах и возможности создания на их основе высокоэффективных источников света.

Еще одним примером практического использования наноматериалов являются текстурированные антиотражающие покрытия. Интерес к ним особенно возрос в последнее время, а именно, появилась масса новых работ по успешному изготовлению антиотражающих нанотекстурированных покрытий (см., напр., [4]), используемых, в частности, в солнечной энергетике. Параллельно активно ведется теоретическое исследование оптических свойств текстурированных покрытий (см., напр., [5]). Отметим, что в имеющихся работах, как правило, либо отдельно рассматриваются длинно- или коротковолновый предельные случаи, либо видимый диапазон для размеров составляющих текстуру элементов порядка нескольких сотен нанометров. В это же время является актуальным единое исследование текстурированных поверхностей во всем диапазоне длин волн. Такое исследова-

ние позволило бы установить, каков должен быть размер составляющих текстуру элементов, чтобы для заданного диапазона длин волн отражение было бы минимальным.

В этой работе основным используемым численным методом является метод решения уравнений Максвелла в конечных разностях (англ. - Finite-Difference Time-Domain method, FDTD) [6]. Выбор этого метода вызван присущей ему высокой параллельной эффективностью, что позволяет применять его для расчета больших задач на кластерных вычислительных системах.

Как и всякий другой разностный метод, FDTD сталкивается с проблемой неточного отображения на прямоугольную вычислительную сетку тел, обладающих произвольной формой поверхности. Решение этой проблемы особенно значимо для моделирования исследуемых в данной работе фотонных кристаллов и текстурированных поверхностей. Одним из наиболее удачных способов ее решения является метод подсеточного сглаживания [7]. Однако этот метод в его первоначальной постановке может применяться только для диэлектриков, в связи с чем актуальна его модификация, которая позволила бы расширить его на дисперсные среды.

Исследование оптических свойств наноматериалов включает в себя получение спектров прохождения и отражения от периодических структур при падении на них плоской волны. Их расчет FDTD для случая нормального падения предполагает применение периодических граничных условий. В случае наклонного падения периодические граничные условия содержат временной сдвиг, что затрудняет их применение. В литературе было предложено несколько методов для решения этой проблемы, однако у каждого из них есть свои недостатки: нестабильность для углов близких к 90^0, увеличение объема используемой памяти и т. д. В связи с этим актуальна разработка альтернативного метода, который был бы лишен недостатков предыдущих. Такой метод позволил бы эффективно исследовать излучательные характеристики фотонных кристаллов, а также антиотражающие свойства текстурированных покрытий при любом угле падения.

Цель работы состоит в 1) исследовании излучательных характеристик металлических фотонных кристаллов, а также возможности их практического применения в качестве источников света с высокой селективностью излучения в видимом диапазоне; 2) исследовании антиотражающих свойств текстурированных покрытий во всем диапазоне размеров составляющих текстуру рассеивателей, а также установлении оптимального размера для заданного диапазона длин волн; 3) дальнейшем развитии метода FDTD, включающем, в частности, разработку метода подсеточного сглаживания для дисперсных сред и метода расчета наклонного падения плоской волны на периодическую структуру.

Научная новизна работы.

1. Впервые исследованы излучательные характеристики вольфрамовых фотонных кристаллов типа прямого опала, погруженных в керамическую матрицу. Найдены геометрические параметры фотонного кристалла (период решетки порядка нескольких сотен нанометров, фактор заполнения по вольфраму порядка нескольких процентов), при которых в случае отсутствия поглощения во внешней матрице КПД источника света на основе фотонного кристалла оказывается выше в несколько раз по сравнению с обычными лампами накаливания. Показано, что у рассмотренных составляющих матрицу термоустойчивых материалов (оксид гафния) сильное поглощение при высоких температурах приводит к существенному снижению эффективности светового источника на основе фотонного кристалла, вплоть до значения КПД лампы накаливания. Сделан вывод о том, что для создания высокоэффективного источника света на основе фотонного кристалла необходим поиск материалов со слабым поглощением при высоких температурах.

2. Впервые исследовано влияние дефектов в фотонном кристалле (неупорядоченности по расположению и разброса по размерам составляющих фотонный кристалл элементов) на его излучательную способность. Показано, что их наличие приводит к уменьшению величины излучения в видимом диапазоне при сохранении подавления излучения в инфракрас-

ном диапазоне. Получено количественное согласие результатов расчетов с результатами специально поставленного эксперимента.

3. Впервые проведено систематическое сравнительное исследование антиотражающих свойств текстурированных покрытий во всем диапазоне размеров составляющих текстуру рассеивателей по отношению к длине волны. Установлено, что ключевым фактором, влияющим на оптимальный размер составляющих текстуру рассеивателей, является характер замощения подложки их основаниями. В случае полного замощения наименьшее значение отражения достигается при макроскопических размерах рассеивателей, а в случае неполного - оптимальный размер имеет порядок длины волны.

4. Впервые установлены асимптотические зависимости величины отражения от геометрических параметров текстурированной поверхности для длинно- и коротковолнового пределов. В случае полного замощения подложки основаниями составляющих текстуру рассеивателей в длинноволновом пределе отражение уменьшается с увеличением высоты рассеивателей степенным образом, а в коротковолновом - экспоненциальным; в случае неполного замощения в длинноволновом и коротковолновом пределах величина отражения выходит на постоянное значение.

5. Предложен новый подход программной реализации метода решения уравнений Максвелла в конечных разностях (FDTD), основанный на интегральном представлении уравнений Максвелла. В рамках этого подхода написана параллельная программа на языке программирования C++. В ходе ее написания реализован ряд оригинальных решений: оптимизация использования памяти с помощью упаковки используемых в разностных уравнениях коэффициентов; увеличение производительности посредством разбиения алгоритма обновления сеток на основной цикл, поддающийся векторизации, и специализированные поправки к нему; увеличение параллельной эффективности путем балансировки доменов. Специально проведенные тесты продемонстрировали линейный характер масштабируемости программы вплоть до тысячи вычислительных ядер. Программа находится

в открытом доступе в интернете (http://fdtd.kintechlab.com).

6. В рамках метода FDTD впервые предложен и реализован алгоритм подсеточного сглаживания для дисперсных сред, позволяющий существенно уменьшить величину численной ошибки, связанной с неточным отображением тел, обладающих произвольной формой поверхности, на прямоугольную вычислительную сетку. Его применение приводит к увеличению порядка точности метода FDTD по сравнению с обычным „лестничным“ приближением.

7. Впервые предложен и реализован итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую структуру в численном расчете FDTD. С его помощью можно получать результаты во всем диапазоне углов от 0^0 до 90^0, а также наблюдать реальное поведение поля во времени. Помимо этого, он лишен таких недостатков предложенных ранее методов, как неустойчивость при отвесных углах падения и увеличение требуемого размера сетки. Особенностью метода является то, что получение решения для одного угла требует нескольких отдельных итераций-экспериментов.

Положения, выносимые на защиту.

1. Геометрические параметры вольфрамовых фотонных кристаллов типа прямого опала, при которых КПД источника света на основе фотонных кристаллов выше в несколько раз по сравнению с обычными лампами накаливания.

2. У рассмотренных термоустойчивых материалов (оксид гафния), используемых в матрице, необходимой для фиксации элементов фотонного кристалла, сильное поглощение при высоких температурах приводит к существенному снижению КПД светового источника на основе фотонного кристалла, вплоть до значения КПД лампы накаливания.

3. Асимптотические зависимости величины отражения от геометрических параметров текстурированной поверхности для длинно- и коротковолнового пределов.

4. Ключевым фактором, влияющим на оптимальный размер составляющих текстуру рассеивателей, является характер замощения подложки их основаниями: в случае полного замощения наименьшее значение отражения достигается при макроскопических размерах рассеивателей, а в случае неполного - оптимальный размер рассеивателей имеет порядок длины волны.

5. Параллельная программа FDTD, которая может использоваться для предсказательного моделирования в разнообразных оптических приложениях.

6. Новые численные методы в рамках FDTD: метод подсеточного сглаживания для дисперсных сред и итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую структуру.

Практическая ценность работы.

1. Найдены геометрические параметры вольфрамовых фотонных кристаллов типа прямого опала, при которых КПД источника света на основе фотонного кристалла оказывается выше в несколько раз по сравнению с обычными лампами накаливания.

2. Установлено, что для создания высокоэффективных источников света на основе фотонного кристалла необходим поиск материалов со слабым поглощением при высоких температурах.

3. Найдена оптимальная геометрия текстурированной поверхности, при которой достигается наименьшая величина отражения для заданного диапазона длин волн.

4. Показано, что для достижения малых значений отражения в видимом диапазоне наиболее эффективным решением являются нанотекстурированные покрытия.

5. Разработана параллельная программа FDTD, которая может использоваться для предсказательного моделирования в самых разнообразных оптических приложениях: при моделировании оптических свойств фотонных кристаллов, при расчете антиотражающих свойств текстурированных покрытий и т. д. Программа находится в открытом доступе в интер-

нете.

6. Предложены и реализованы численные методы, позволяющие существенно увеличить быстродействие и точность расчетов FDTD.

Личный вклад автора. Автором были самостоятельно получены все результаты для антиотражающих свойств текстурированных поверхностей. Автором получены основные результаты для излучательных характеристик вольфрамовых фотонных кристаллов типа прямого опала.

Автор внес решающий вклад при написании параллельной программы, реализующей метод FDTD, а также при реализации итерационного метода для расчета наклонного падения плоской волны на периодическую структуру. Автором был самостоятельно предложен и реализован метод подсеточного сглаживания для дисперсных сред.

Достоверность результатов. Достоверность расчетов обеспечивается системой многократных проверок имеющегося кода, а также путем сравнения полученных с помощью него результатов с результатами, полученными другими методами и с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были доложены на научно-технических конференциях „The International Conference on Computational Science and Its Applications“ (Малайзия, Kuala Lumpur, 2007), „Conference on Computational Physics“ (Бразилия, Ouro Preto, 2008), „Conference on Computational Physics“ (Тайвань, Kaohsiung, 2009), „Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях“ (Москва, 2009), „VII Курчатовская молодежная научная школа“ (Москва, 2009). 52-ая научная конференция МФТИ (Москва, 2009).

Реализованная программа FDTD стала призером на конкурсе „Максимальная масштабируемость“, проведенном в рамках РОСНАНОФОРУМА-2009 компаниями Intel и "Роснано".

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 5 работ в реферируемых научных изданиях [8–12], 1 в нереферируемом научном издании [13] и тезисы российских и международных конференций.

1. Развитие метода решения уравнений Максвелла в конечных разностях

1.1. Обзор литературы

Моделирование оптических свойств наноматериалов требует непосредственного численного решения уравнений Максвелла. Одним из наиболее популярных предназначенных для этого методов является метод решения уравнений Максвелла в конечных разностях (англ. - Finite-Difference Time-Domain method, FDTD) [6]. Базовый алгоритм этого метода был предложен Кейном Йи в 1966 г. [14]. Однако имеющуюся в данный момент популярность FDTD приобрел только в 90х гг. прошлого столетия, когда он стал основным для численного моделирования самых разных оптических приложений. В это же время начало экспоненциально расти и число публикаций, посвященных дальнейшему развитию этого метода.

Существует целый ряд причин, обуславливающих популярность FDTD:

- Реализуя явную разностную схему, FDTD не сталкивается со сложностями, связанными с ресурсозатратными матричными операциями, и является простым в программировании и отладке;
- FDTD удобен при задании сложных геометрических объектов, а также анизотропных, дисперсных и нелинейных сред;
- Естественно присущая методу высокая параллельная эффективность позволяет применять его для расчета больших задач на кластерных вычислительных системах;
- В FDTD существует возможность как для анализа зависимости оптических характеристик исследуемой структуры от длины волны, так

и для моделирования нестационарных процессов;

- FDTD предоставляет возможность наблюдать реальное поведение полей во времени, что можно осуществить путем сохранения рассчитываемых данных на каждой временной итерации и последующей их визуализации.

В основе FDTD лежит простая и элегантная схема дискретизации уравнений Максвелла, записанных в дифференциальной форме. Сетки для электрического и магнитного полей смещены по отношению друг к другу на половину шага дискретизации по каждой из пространственных переменных и по времени. Конечно-разностные уравнения позволяют определить электрические и магнитные поля на данном временном шаге на основании известных значений полей на предыдущем, и при заданных начальных условиях вычислительная процедура дает эволюционное решение во времени от начала отсчета с заданным временным шагом. После окончания расчета имеется возможность рассчитать оптические характеристики рассматриваемой структуры для широкого диапазона длин волн с помощью применения дискретного преобразования Фурье к записанной истории распространения электромагнитного поля.

В следующем параграфе мы более подробно изложим содержание базового алгоритма FDTD.

1.1.1. Алгоритм Йи

В отсутствие свободных зарядов уравнения Максвелла в дифференциальной форме имеют вид:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\nabla \times \vec{E} - \vec{M}, \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \nabla \times \vec{H} - \vec{J}, \tag{1.2}$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0, \tag{1.3}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \tag{1.4}$$

где $\vec{E}$ и $\vec{H}$ - напряженности электрического и магнитного полей, $\vec{D}$ - электрическая, $\vec{B}$ - магнитная индукция, $\vec{J}$ - плотность электрического тока, $\vec{M}$ - ее магнитный аналог, который мы включили для общности некоторых используемых далее выражений.

В целях простоты изложения мы ограничим рассмотрение только изотропными, недисперсными и линейными среды. Тогда вектора $\vec{E}$ и $\vec{D}$, $\vec{H}$ и $\vec{B}$ связаны следующими соотношениями:

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{E} = \varepsilon_r\varepsilon_0\vec{E}, \quad \vec{B} = \mu\vec{H} = \mu_r\mu_0\vec{H}, \tag{1.5}$$

где ε, ε_r, μ, μ_r - абсолютные и относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, ε_0 и μ_0 - электрическая и магнитная постоянные.

Плотность электрического и магнитного токов представим в виде:

$$\vec{J} = \vec{J}_{source} + \sigma\vec{E}, \quad \vec{M} = \vec{M}_{source} + \sigma^*\vec{H}, \tag{1.6}$$

где $\vec{J}_{source}$ - плотность тока свободных источников, σ - электропроводность, $\vec{M}_{source}$ и σ^* - их магнитные аналоги.

Подставив соотношения (1.5), (1.6) в первую пару уравнений Максвелла (1.1),(1.2), получим

$$\frac{\partial\vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu}\nabla\times\vec{E} - \frac{1}{\mu}\left(\vec{M}_{source} + \sigma^*\vec{H}\right), \tag{1.7}$$

$$\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\nabla\times\vec{H} - \frac{1}{\varepsilon}\left(\vec{J}_{source} + \sigma\vec{E}\right). \tag{1.8}$$

Согласно алгоритму Йи [6,14], уравнения Максвелла дискретизуются с использованием центрального разностного отношения для приближения пространственной и временной производных. Для этого сеточные узлы, в которых хранятся компоненты электрического и магнитного полей, смещены по отношению друг к другу на половину сеточного шага по каждой из пространственных переменных (Рис. 1.1). В результате те узлы, которые соответствуют компонентам полей $\vec{E}$ расположены таким образом, что каждая компонента $\vec{E}$ окружена четырьмя компонентами $\vec{H}$, и наоборот.

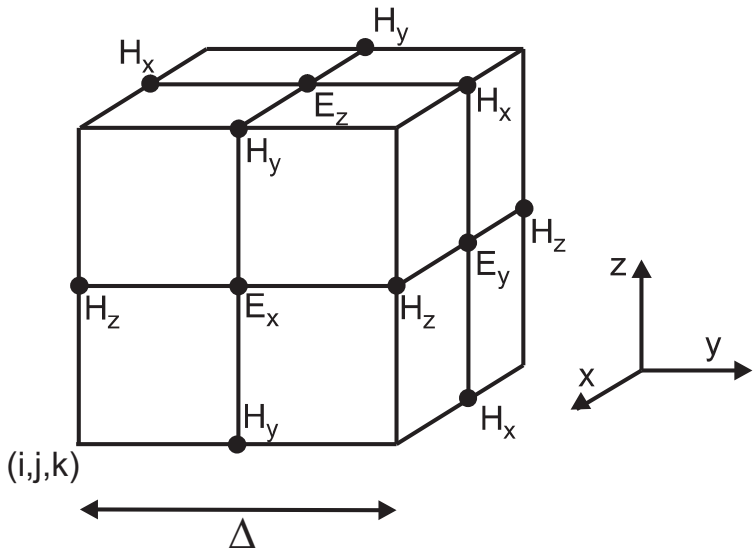

Рис. 1.1. Положения сеточных узлов для компонент электрического и магнитного полей на сетке Йи.

Согласно алгоритму Йи соответствующие компонентам $\vec{E}$ и $\vec{H}$ узлы сдвинуты относительно друг друга по времени на половину временного шага (в качестве примера это продемонстрировано на Рис. 1.2 для одномерной сетки Йи). Для расчета значений поля $\vec{E}$ на $n + 1/2$-ом временном шаге используются значения поля $\vec{H}$ на n-ом. Аналогичным образом значения поля $\vec{H}$ на $n+1$-ом шаге рассчитываются с использованием значений поля $\vec{E}$ на $n+1/2$-ом шаге. Эта процедура продолжается до тех пор, пока расчет не будет закончен.

Прежде чем получить конкретные разностные уравнения, используемые в алгоритме Йи, введем следующие обозначения. Будем ставить в соответствие каждому сеточному узлу три целых числа i, j и k, определяющих положение этого узла в пространстве как

$$(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z), \tag{1.9}$$

где Δx, Δy и Δz суть сеточные шаги по соответствующим направлениям. Будем обозначать произвольную сеточную функцию u как

$$u(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = u^n_{i,j,k}, \tag{1.10}$$

где Δt - шаг по времени, а n - текущий временной шаг.

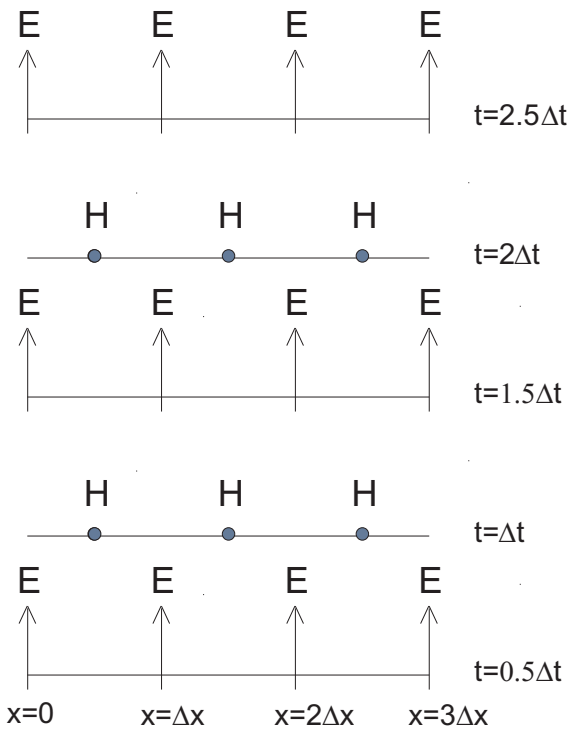

Рис. 1.2. Развертка одномерной сетки Йи по времени: узлы, соответствующие электрическому и магнитному полям, сдвинуты друг относительно по пространству и по времени на половину шага.

Как уже упоминалось, в алгоритме Йи для аппроксимации присутствующих в уравнениях Максвелла производных используется центральное разностное отношение. Так, для производной по координате x в точке $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$ в момент времени $n\Delta t$ имеем

$$\frac{\partial u}{\partial x}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = \frac{u^n_{i+1/2,j,k} - u^n_{i-1/2,j,k}}{\Delta x} + O\left[(\Delta x)^2\right]. \qquad (1.11)$$

Аналогично для производной по времени t

$$\frac{\partial u}{\partial t}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = \frac{u^{n+1/2}_{i,j,k} - u^{n-1/2}_{i,j,k}}{\Delta t} + O\left[(\Delta t)^2\right]. \qquad (1.12)$$

Применяя эти приближения для производных, участвующих в проекции закона Ампера на ось x

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\left[\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - (J_{source,x} + \sigma E_x)\right], \qquad (1.13)$$

получаем

$$\varepsilon_{i,j+1/2,k+1/2}\frac{E_x|^{n+1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}-E_x|^{n-1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}}{\Delta t}$$

$$=\frac{H_z|^n_{i,j+1,k+1/2}-H_z|^n_{i,j,k+1/2}}{\Delta y}-\frac{H_y|^n_{i,j+1/2,k+1}-H_y|^n_{i,j+1/2,k}}{\Delta z} \tag{1.14}$$

$$-J_x|^n_{i,j+1/2,k+1/2}-\sigma_{i,j+1/2,k+1/2}E_x|^n_{i,j+1/2,k+1/2}.$$

Стоящие в правой части (1.14) переменные берутся на временном шаге n, включая поле E_x. Поскольку для значения E_x в момент времени n данных на сетке нет, нужно для него пользоваться каким-либо приближением. Хорошим выбором является усреднение по соседним временным слоям:

$$E_x|^n_{i,j+1/2,k+1/2}=\frac{E_x|^{n+1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}+E_x|^{n-1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}}{2}. \tag{1.15}$$

Положим $\Delta=\Delta x=\Delta y=\Delta z$. Тогда после подстановки (1.15) в (1.14), мы можем явно выразить E_x на $n+1/2$ шагу:

$$E_x|^{n+1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}=C_{a,E_x}|_{i,j+1/2,k+1/2}E_x|^{n-1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}$$

$$+C_{a,E_x}|_{i,j+1/2,k+1/2}\begin{pmatrix} H_z|^n_{i,j+1,k+1/2}-H_z|^n_{i,j,k+1/2} \\ +H_y|^n_{i,j+1/2,k}-H_y|^n_{i,j+1/2,k+1} \\ -J_x|^n_{i,j+1/2,k+1/2}\Delta \end{pmatrix}, \tag{1.16}$$

где

$$C_a|_{i,j,k}=\left(1-\frac{\sigma_{i,j,k}\Delta t}{2\varepsilon_{i,j,k}}\right)\left(1+\frac{\sigma_{i,j,k}\Delta t}{2\varepsilon_{i,j,k}}\right)^{-1}, \tag{1.17}$$

$$C_b|_{i,j,k}=\left(\frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j,k}\Delta}\right)\left(1+\frac{\sigma_{i,j,k}\Delta t}{2\varepsilon_{i,j,k}}\right)^{-1}. \tag{1.18}$$

.

Мы получили разностное уравнение, соответствующее проекции закона Ампера на ось x, которое вместе с пятью оставшимися аналогичными разностными уравнениями и формируют алгоритм Йи.

Выбор значений Δx, Δy, Δz обуславливается геометрией задачи и спектральным составом излучения. Можно дать следующую рекомендацию: на характерный размер объекта (радиус шариков, толщину экрана и т. п.) должно приходится не менее нескольких сеточных шагов, а на характерную длину волны - от десяти и больше. Величина значения Δt ограничена сверху условием Куранта

$$\Delta t < \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)}^2 + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}, \tag{1.19}$$

выполнение которого необходимо для устойчивости разностной схемы.

В этом параграфе мы рассмотрели реализацию алгоритма Йи для случая, когда среда характеризуется не зависящими от частоты скалярными значениями ε, μ, σ, σ^*. Численное моделирование анизотропных, дисперсных и нелинейных сред требует модификации этого алгоритма и применения вспомогательных разностных уравнений [6, 15, 16].

Отметим также, что численная схема FDTD не предполагает возможности табличного задания зависимости диэлектрической проницаемости от частоты. Однако в FDTD можно задать эту зависимость в виде произвольного числа членов в форме Друде и Лоренца:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \sum_{p=1}^{N_D} \frac{\Delta\varepsilon_p \omega_p^2}{i\omega\gamma_p + \omega^2} + \sum_{p=1}^{N_L} \frac{\Delta\varepsilon_p \omega_p^2}{\omega_p^2 - 2i\omega\gamma_p - \omega^2}. \tag{1.20}$$

1.1.2. Применение FDTD для моделирования оптических свойств наноматериалов

Перечислим „основных участников“ численного эксперимента FDTD.

Материальные тела, оптические свойства которых мы исследуем. Если составляющая тело среда изотропна, недисперсна и линейна, то, как мы уже показали, задание материального тела заключается в принятии коэффициентами (1.17), (1.18) соответствующих значений в тех узлах сетки, которые содержатся внутри тела.

Источник электромагнитной волны. Самый простой способ задания источника заключается в задании временной зависимости величины J_{source} в (1.16). Такой тип источника обычно используется при моделировании диполей. Для генерации плоской волны более удобен другой тип источника, реализуемый с помощью метода полного и рассеянного поля (total-field / scattered-field method) [6, 17].

Детекторы, снимающие поля на сетке в течение всего численного эксперимента. Детекторам не отвечают какие-то реальные тела в пространстве, под ними подразумевается лишь то, что мы записываем значения полей в каких-то точках внутри вычислительного объема в файл. По окончании расчета на основании этого файла можно будет восстановить ход численного эксперимента.

Детекторы могут размещаться в произвольном месте вычислительного объема и не привязаны к сетке. Значения полей на них получаются путем интерполяции по соседним сеточным узлам.

Обычный сценарий численного эксперимента FDTD выглядит так:

- Внутри вычислительного объема, задаваемого размером используемой сетки, помещаются материальные тела, источник и детекторы. На границе вычислительного объема должны быть заданы граничные условия, обычно, периодические или поглощающие. Поглощающие граничные условия, как правило, присутствуют хотя бы по одному направлению.

- Источник генерирует конечную во времени электромагнитную волну, спектральный состав которой должен покрывать интересующий нас диапазон частот. Далее, волна падает на тела, перерассеивается на них, и через какое-то время уходит в поглощающие граничные условия. История распространения волны фиксируется детекторами.

- С помощью преобразования Фурье записанные на детекторах значения полей переводятся в частотное представление. Далее, обрабатывая их (например, интегрируя поток энергии поля через какую-либо

поверхность), мы получаем интересующие нас оптические характеристики рассматриваемой структуры тел.

Поясним некоторые использованные нами понятия.

Метод полного и рассеянного поля используется для моделирования бесконечно удаленного источника плоской волны. Этот метод основан на линейности уравнений Максвелла и вытекающего из них принципа суперпозиции. А именно, мы предполагаем, что измеряемое (полное) поле $\vec{E}_{total}$ и $\vec{H}_{total}$ может быть представлено в виде суммы

$$\vec{E}_{total} = \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{scat}, \quad \vec{H}_{total} = \vec{H}_{inc} + \vec{H}_{scat}. \tag{1.21}$$

$\vec{E}_{inc}$, $\vec{H}_{inc}$ соотвествует полю падающей волны, которая предполагается известной во всех точках пространства в любой момент времени. Это та волна, которая распространялась бы в пространстве, если бы в нем не существовало никаких тел. $\vec{E}_{scat}$, $\vec{H}_{scat}$ соответствует рассеянной волне, представляющей собой результат взаимодействия падающей волны с телами. Значение рассеянной волны заранее неизвестно.

Разностные уравнения FDTD могут независимо применяться как для полного поля, так и для падающего или рассеянного полей. Как показано на Рис. 1.3, это позволяет разбить вычислительный объем на две области: область полного поля, в которой рассчитывается полное поле, и область рассеянного поля, в которой рассчитывается рассеянное поле. Эти две области разделяет виртуальная граница, которая служит для генерации плоской волны в область полного поля. Разностные уравнения, используемые для расчета компонент поля в прилегающих к этой границе сеточных узлах, отличаются от исходных наличием дополнительных слагаемых, в которых учитывается значение поля падающей волны.

Для устранения нефизичного переотражения электромагнитной волны от границы вычислительного объема и моделирования таким образом ухода волны на бесконечность в FDTD должны использоваться особые **поглощающие граничные условия**. В настоящее время наиболее успешной реализацией этих условий является помещение вдоль границы

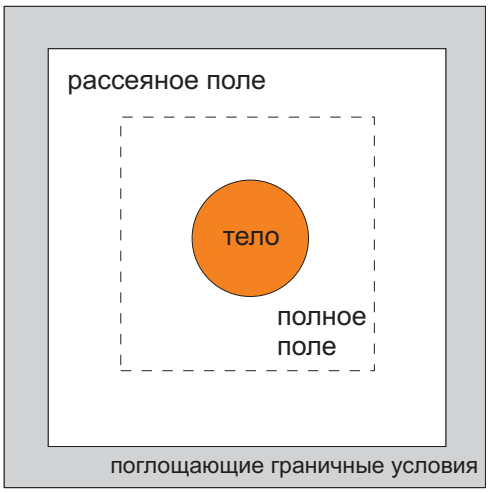

Рис. 1.3. Схема численного эксперимента FDTD с использованием метода полного и рассеянного поля.

вычислительного объема тонкого слоя специального материала, называемого идеально согласованным слоем (Perfectly Matched Layer - PML) [6]. Этот материал в идеале полностью поглощает все падающие на него волны без какого-либо отражения независимо от угла падения и длины волны.

Понятие идеально согласованного слоя (PML) было введено Дж.-П. Беренгером в 1994 году [18]. Работа такого слоя основывалась на разбиении исходных полей $\vec{E}$ и $\vec{H}$ на две компоненты, для каждой из которых должны решаться свои уравнения. В последствие были предложены усовершенствованные формулировки PML эквивалентные первоначальной формулировке Беренгера. Так, в одноосном PML (Uniaxial PML) [19, 20] используется анизотропный поглощающий материал, что позволяет не вводить дополнительные переменные и остаться в рамках исходных уравнений Максвелла. Однако одноосный PML, как и PML в формулировке Беренгера, не удобны тем, что в них отсутствует поглощение затухающих волн, что не позволяет помещать PML близко к рассеивающим телам. Этого недостатка лишен оборотный PML (Convolutional PML) [21, 22], основанный на аналитическом продолжении уравнений Максвелла в комплексную плоскость таким образом, что их решение экспоненциально затухает. CPML также удобнее в ограничении бесконечных проводящих и дисперсных сред. Помимо этого математическая формулировка CPML обладает большей наглядностью и

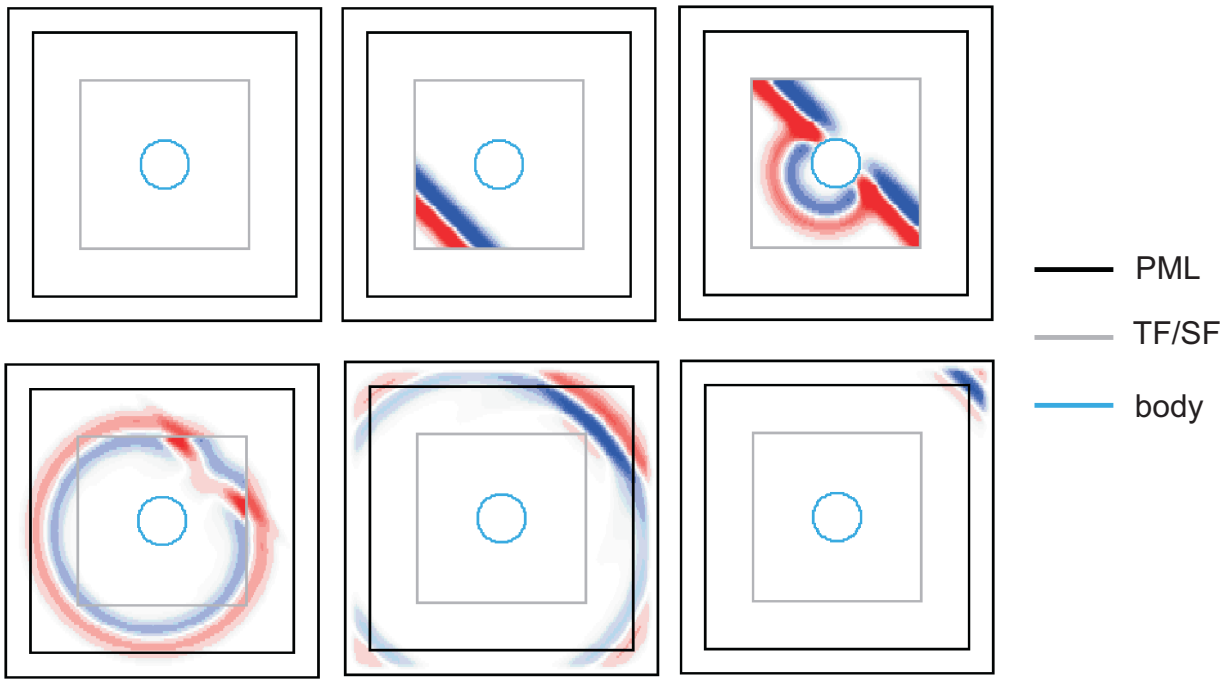

Рис. 1.4. Моделирование с помощью FDTD рассеяния плоской волны на шаре.

доступностью для понимания.

В качестве иллюстрации мы хотим показать ход численного моделирования рассеяния плоской волны на шаре, в котором используются метод полного и рассеянного поля и поглощающие граничные условия (Рис. 1.4). Этот эксперимент интересен тем, что он позволяет сравнить результаты FDTD с известным аналитическим решением этой задачи (решение Ми [23]). Такое сравнение будет приведено в параграфе 1.2.

FDTD может применяться не только для конечных (как на Рис. 1.4), но и для бесконечных периодических структур. Для их моделирования используются периодические граничные условия по одному или по нескольким направлениям. В частности, фотонно-кристаллические пластинки и антиотражающие покрытия, рассматриваемые в главах 3,4, являются планарными периодическими структурами: они периодичны по двум направлениям и имеют ограниченную протяженность по оставшемуся направлению. Реальные экспериментальные образцы, конечно, имеют ограниченный размер и по первым двум направлениям, но поскольку этот размер существенно больше их протяженности по непериодическому направлению, влиянием конечности образца с хорошей степенью точности можно пренебречь.

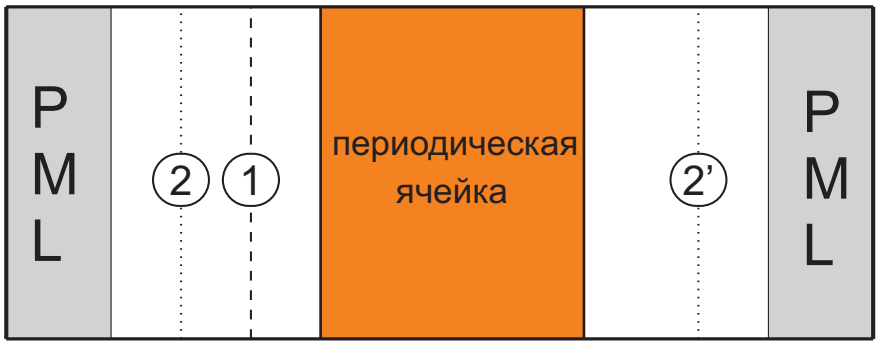

Рис. 1.5. Схема численного эксперимента FDTD для расчета спектров прохождения и отражения планарной периодической структуры в случае нормально падения. 1 – генерирующая электромагнитный импульс граница между областями полного (справа от 1) и рассеянного (слева от 1) поля; 2, 2' - плоскости, в которых расположены детекторы для измерения отраженной и прошедшей волны соответственно.

В практических приложениях, как правило, наиболее интересны спектры прохождения и отражения от рассматриваемых структур. Для их получения в случае нормального падения в FDTD используется следующий численный эксперимент (Рис. 1.5). Граница между областями полного и рассеянного поля генерирует плоскую волну в форме ограниченного по времени импульса, который падает на структуру (на Рис. 1.5 этот импульс генерируется на границе 1 и движется слева направо). Часть падающего импульса отражается от структуры, пересекает плоскость, в которой находятся детекторы, меряющие отраженную волну (плоскость 2 на Рис.1.5), и поглощается задним слоем PML. Другая часть проходит сквозь структуру, пересекает плоскость, в которой расположены детекторы, меряющие прошедшую волну (плоскость 2' на Рис. 1.5), и поглощается передним слоем PML. Численный эксперимент продолжается до тех пор, пока сигнал не выйдет из вычислительного объема. Время выхода сигнала зависит от конкретной геометрии эксперимента. При увеличении продольной протяженности структуры это время увеличивается по причине увеличения расстояния, которое должен пройти сигнал, чтобы из нее выйти. Время выхода сигнала зависит также и от оптических свойств исследуемой структуры, например, при наличии поглощения оно меньше.

По окончании эксперимента записанные детекторами значения полей

$\vec{E}(t)$, $\vec{H}(t)$ переводятся в частотное представление с помощью дискретного преобразования Фурье. Далее, рассчитывая среднее значение вектора Пойнтинга по времени $\vec{S}(\omega)$ на каждом из детекторов по формуле [23]

$$\vec{S}(\omega) = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\left((\vec{E}(\omega) \times \vec{H}(\omega)^*\right), \tag{1.22}$$

мы можем посчитать средний поток энергии $W(\omega)$, проходящий через поверхность A, на которой расположены детекторы:

$$W(\omega) = \int\limits_A \vec{S}(\omega) d\vec{A}. \tag{1.23}$$

Нормируя поток энергии прошедшей и отраженной волны на падающий импульс, мы получаем интересующие нас спектры прохождения $T(\omega)$ и отражения $R(\omega)$. Поглощение вычисляется как $A(\omega) = 1 - T(\omega) - R(\omega)$.

Описанию численного эксперимента в случае наклонного падения будет посвящен параграф 1.3.

1.2. Метод подсеточного сглаживания

Как и в любом другом разностном методе, в FDTD существует проблема неточного отображения границы тела на вычислительную сетку. В непосредственной близости от границы двух сред уравнения Максвелла должны решаться с учетом граничных условий для векторов $\vec{E}$ и $\vec{H}$. Любая кривая поверхность, разделяющая соседние среды и геометрически не согласованная с сеткой, будет искажаться эффектом „лестничного приближения“. В результате порядок точности FDTD понижается с изначального второго до первого.

Для решения данной проблемы были предложены различные методы. Первая группа методов основана на изменении способа дискретизации уравнений Максвелла с той целью, чтобы сетка максимально соответствовала рассматриваемой геометрии. Например один из таких методов заключается в увеличении разрешения сетки в тех областях пространства, где расположены тела со сложной геометрической структурой [24]. Также

можно видоизменять разностные уравнения в узлах сетки, находящихся вблизи границы между соседними телами [25]. Более радикальным шагом является введение нерегулярной неортогональной сетки, которая полностью согласовывалась бы с рассматриваемой геометрией [26]. Такая сетка автоматически генерируется программой, которая следит за расстановкой всех тел в пространстве. Общим недостатком упомянутых методов является увеличение объема требуемой памяти и порой существенное снижение производительности.

Другая группа методов основывается на введении эффективной диэлектрической проницаемости ε вблизи границы между телами. Рассмотрим некоторый контрольный объем $\delta x \times \delta y \times \delta z$, окружающий выбранный узел сетки, и предположим, что он содержит границу раздела между двумя средами со значениями диэлектрической проницаемости ε_1 и ε_2. Тогда граничные условия для векторов $\vec{E}$ и $\vec{D}$ могут быть реализованы на сетке путем ввода тензора обратной диэлектрической проницаемости в форме [7, 27–29]:

$$\hat{\varepsilon}^{-1} = \mathbf{P} < \varepsilon^{-1} > + (\mathbf{1} - \mathbf{P}) < \varepsilon >^{-1}, \tag{1.24}$$

где $\mathbf{P}$ - это матрица $P_{ij} = n_i n_j$ соответствующая проектору на вектор нормали $\vec{n}$ к границе между двумя средами, а $<>$ есть усреднение по объему. Выражение (1.24) в рамках FDTD было впервые получено в работе [27] для двумерного случая, но в ней использовались только диагональные элементы матрицы $\mathbf{P}$.

Различные методы введения эффективной диэлектрической проницаемости могут рассматриваться как аппроксимации (1.24). Наиболее простым является применение усредненного по объему или по контуру значения $< \varepsilon >$ [30]. Другие аппроксимации (такие как формула Канеды [31] или VP-EP формула [27]) учитывают направление вектора $\vec{n}$. Однако любое частичное использование (1.24) не повышает порядок точности по сравнению с лестничным приближением. Точное выражение (1.24) было использовано в [7, 28, 29], в частности в [7] было показано, что применение тензора (1.24) приводит ко второму порядку точности.

До сих пор метод введения эффективной диэлектрической проницаемости применялся только к диэлектрическим средам. Мы развили схему, предложенную в [7,28,29] также и для случая проводящих и дисперсивных сред.

Рассмотрим произвольный объем, внутри которого пролегает граница между двумя различными средами с зависящей от частоты диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{1,2}(\omega)$. Выпишем закон Ампера в частотном представлении, используя выражение (1.24):

$$-i\omega\vec{E} = \mathbf{P}\left[\frac{f_1}{\varepsilon_1(\omega)} + \frac{1-f_1}{\varepsilon_2(\omega)}\right](\nabla\times\vec{H}) + \frac{\mathbf{1}-\mathbf{P}}{f_1\varepsilon_1(\omega)+(1-f_1)\,\varepsilon_2(\omega)}(\nabla\times\vec{H}) \tag{1.25}$$

где f_1 есть доля объема, занимаемая средой с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1(\omega)$. Чтобы решить (1.25) во временном представлении, представим $\vec{E}$ как сумму следующих трех вспомогательных векторов:

$$\vec{E} = \vec{E}^1 + \vec{E}^2 + \vec{E}^3, \tag{1.26}$$

$$-i\omega\varepsilon_1(\omega)E_k^1 = f_1\sum_{j=1}^{3} P_{kj}(\nabla\times\vec{H})_j, \tag{1.27}$$

$$-i\omega\varepsilon_2(\omega)E_k^2 = (1-f_1)\sum_{j=1}^{3} P_{kj}(\nabla\times\vec{H})_j, \tag{1.28}$$

$$-i\omega\left[f_1\varepsilon_1(w)+(1-f_1)\varepsilon_2(w)\right]E_k^3 = (\nabla\times\vec{H})_k - \sum_{j=1}^{3} P_{kj}(\nabla\times\vec{H})_j. \tag{1.29}$$

Полученные уравнения для $\vec{E}^m$ могут быть решены во временном представлении традиционным для FDTD путем. Например, если зависимость диэлектрической проницаемости от частоты представляется в виде суммы произвольного числа членов Друде или Лоренца, эти уравнения могут быть решены методом вспомогательных дифференциальных уравнений [32]. Если зависимость диэлектрической проницаемости от частоты дана в виде экспериментальной таблицы, то ее можно аппроксимировать необходимым числом членов Друде или Лоренца.

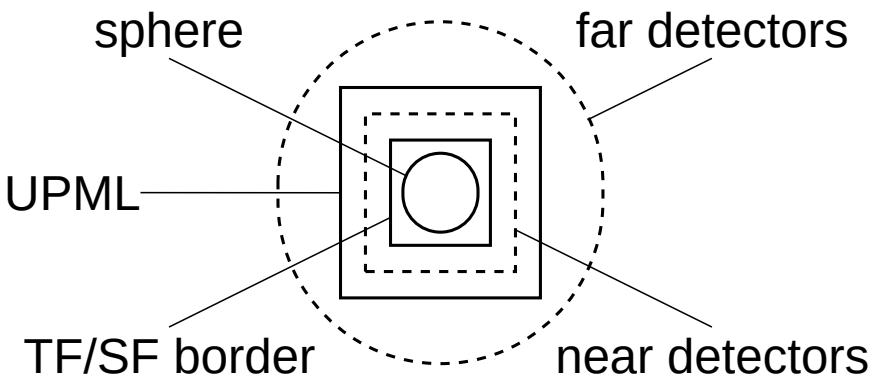

Рис. 1.6. Геометрия численного эксперимента FDTD (масштаб не сохранен).

Мы реализовали описанный метод в качестве составной части написанной нами библиотеки EMTL, о которой пойдет речь в главе 2. Вычисление вектора нормали $\vec{n}$ к границе между двумя средами и расчет доли объема f_1 происходят на начальной фазе работы во время рассмотрения тел, пересекающих контрольный объем, содержащий в себе центр обновляемого контура. Этот контрольный объем обычно представляет собой параллелепипед, равный по объему ячейке Йи. Вспомогательные вектора $\vec{E}^m$ всегда перпендикулярны нормали к плоскости сеточного контура, вследствие чего для каждого такого контура требуется только одна скалярная проекция $\vec{E}^m$. Диагональные компоненты $P_{kj}(\nabla \times \vec{H})_j$, $j = k$ вычисляются во время общей процедуры обновления значений в узлах сетки, в то время как недиагональные компоненты $j \neq k$ получаются путем линейной интерполяции значений поля $\vec{H}$ по смежным узлам сетки. Добавление недиагональных слагаемых, временной шаг для вспомогательных переменных (1.27)-(1.29) и их сложение (1.26) происходит после общей процедуры обновления сетки, образуя таким образом специальную „сглаживающую поправку“.

Для проверки работы изложенного метода мы сравнили полученные с помощью него результаты для рассеяния плоской волны на сфере с результатами, полученными с помощью теории Ми [23, 33]. Геометрия соответствующего численного эксперимента изображена на (Рис. 1.6). Расчет проводился на сетке Йи. Центр сферы находился в центре ячейки Йи. Для генерации падающего на сферу волнового импульса использовался

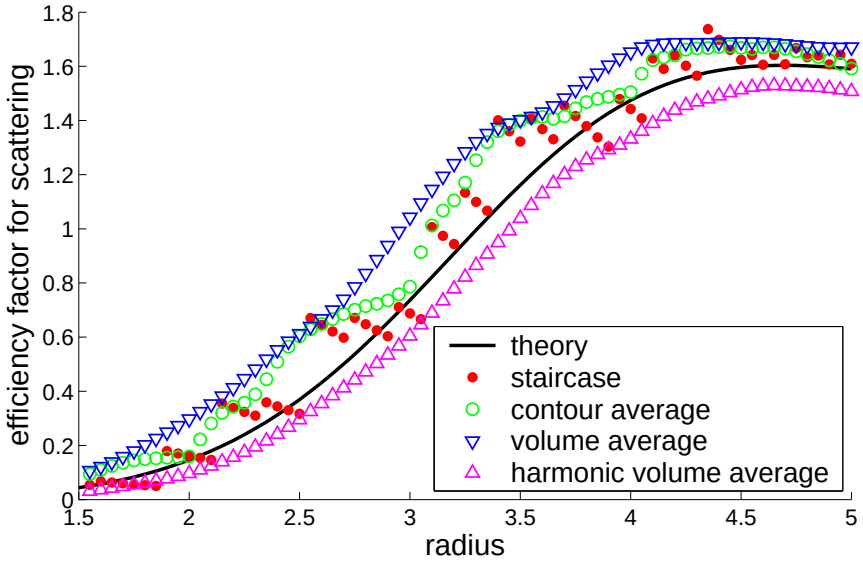

Рис. 1.7. Зависимость фактора эффективности рассеяния Q_{sca} от радиуса проводящей сферы с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 4\varepsilon_0$ и проводимостью $\sigma = 2$ на длине волны $\lambda = 25$.

метод общего и рассеянного поля. На границе сетки были заданы поглощающие граничные условия в форме одноосного идеально согласованного слоя (Uniaxial Perfectly Matched Layer, UPML). Вокруг сферы размещались „ближние“ детекторы, которые образовывали замкнутую поверхность. Для получения значений поля на виртуальных „дальних“ детекторах, расположенных на значительном расстоянии от сферы, применялся метод преобразования ближних полей в дальние [6, 34]. Значения полей на дальних детекторах использовались для сравнения с решением Ми.

Мы проводили тестирование следующих методов:

- лестничное приближение, в котором значение диэлектрической проницаемости берется в центре сеточного контура;
- усреднение диэлектрической проницаемости по контуру или по объему;
- усреднение обратной диэлектрической проницаемости, которое соответствует $\mathbf{P} = \mathbf{1}$ в (1.25);
- VP-EP метод [27], который был нами реализован для проводящих и дисперсивных сред;

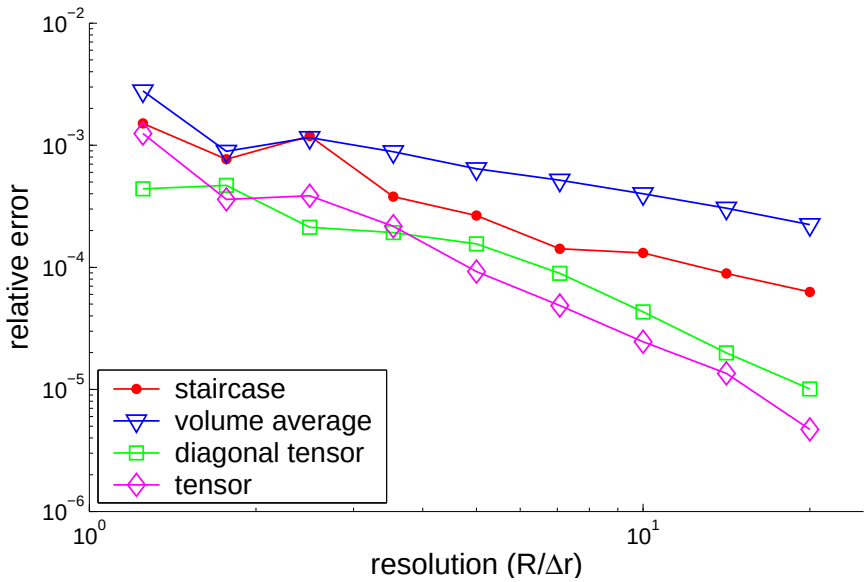

Рис. 1.8. Зависимость относительной погрешности расчета Q_{sca} от разрешения сетки. Условия эксперимента те же, что и для Рис. 1.7.

- собственно применение полного выражения (1.24).

В первой серии тестов мы рассматривали рассеяние плоской волны на проводящей сфере ($\varepsilon = 4\varepsilon_0$, $\sigma = 2$) при различных значениях ее радиуса (Рис. 1.7). Шаг сетки по пространству равнялся $\Delta r = 1$. Для сравнения с теорией Ми мы выбрали фактор эффективности рассеяния, который определяется как сечение рассеяния, нормированное на площадь проекции рассеивателя на плоскость, расположенную перпендикулярно направлению падения (для сферы фактор эффективности рассеяния есть $Q_{sca} = S/(4\pi r^2)$, где S - сечение рассеяния).

Ступенчатый характер полученной зависимости Q_{sca} при разных радиусах сферы для лестничного приближения и усреднения по контуру обусловлен ступенчатым характером изменения коэффициентов в разностных уравнениях в случае пересечения сферой нового сеточного контура при увеличении ее радиуса. Для усреднения по объему полученная кривая является более гладкой. Отсюда можно сделать вывод, что усреднение по объему важно для распознавания очень маленьких объектов, но не приводит к увеличению точности для объектов большего размера. Заметим, что точки, соответствующие результатам для прямого и обратного усреднения

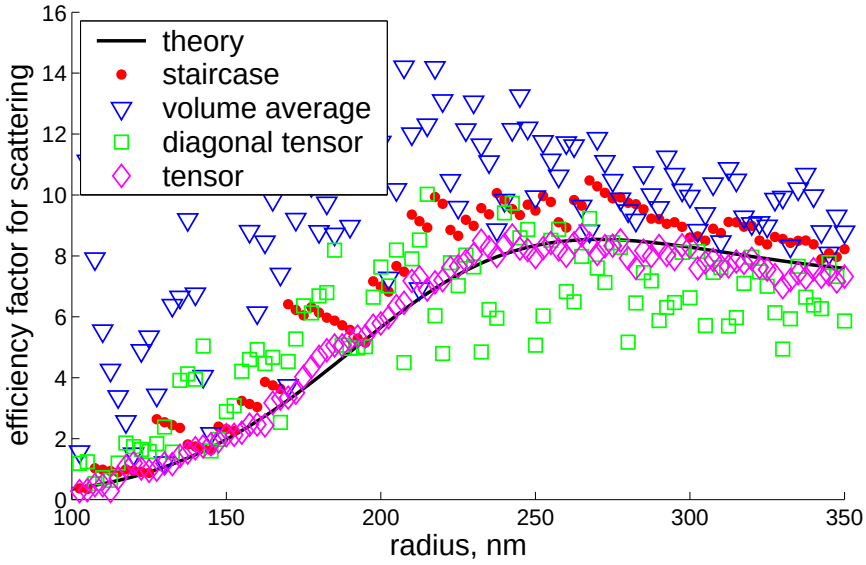

Рис. 1.9. Зависимость фактора эффективности рассеяния Q_{sca} от радиуса для свинцовой сферы, $\lambda = 1.5 \quad \mu$m.

$< \varepsilon >^{-1}$ и $< \varepsilon^{-1} >$, расположены по разные стороны от теоретической кривой. Таким образом, применение тензора обратной диэлектрической проницаемости представляет оптимальную комбинацию обоих способов усреднения (на Рис. 1.7 результаты для метода VP-EP и собственно тензорного метода не различимы от теоретических). Сравнение точности разных методов при различном разрешении сетки $1/\Delta r$ представлено на Рис. 1.8, откуда можно видеть, что использование тензора обратной диэлектрической проницаемости приводит к увеличению порядка точности.

Во второй серии тестов мы рассматривали рассеяние плоской волны $\lambda = 1.5\mu m$ на свинцовой сфере, рассчитанное на сетке с шагом $\Delta r =$ 50 nm (Рис. 1.9, 1.10). Для диэлектрической проницаемости свинца мы использовали приближение Друде $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}$ с конкретными значениями параметров взятыми из [35]. Отметим, что на рассматриваемой длине волны действительная часть диэлектрической проницаемости свинца отрицательна: $\varepsilon \approx -81 + 18i$. Поскольку решение уравнений Максвелла существенно различается для областей с положительной и отрицательной диэлектрической проницаемостью, методы, не учитывающие направление границы раздела между соседними средами и основанные на частичной ап-

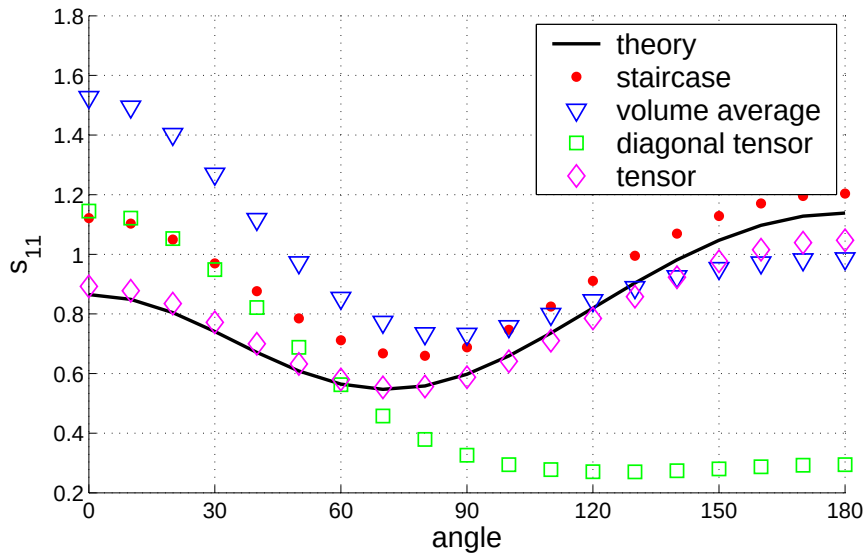

Рис. 1.10. Угловая зависимость элемента матрицы рассеяния S_{11} [23] для свинцовой сферы радиуса $r = 250$ nm, $\lambda = 1.5 \quad \mu$m.

проксимации выражения (1.24), показывают существенное снижение точности по сравнению методом, в котором примененяется тензор обратной диэлектрической проницаемости.

В этой параграфе мы продемонстрировали успешную реализацию метода подсеточного сглаживания для проводящих и дисперсивных сред. Было показано, что учет недиагональных элементов тензора обратной диэлектрической проницаемости критичен для корректного отображения границы тела на сетку.

1.3. Итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую структуру

Одной из задач, для которой может успешно применяться метод FDTD, является моделирование оптических свойств планарных периодических структур. Такие структуры периодичны по двум направлениям и имеют ограниченную протяженность по оставшемуся третьему направлению (фотонно-кристаллические пластинки, массивы антенн и т. д.). Для получения спектров прохождения и отражения таких структур в методе FDTD генерируется падающая на структуру плоская волна в форме ограничен-

ного по времени импульса, которая распадается после взаимодействия со структурой на прошедшую и отраженную волны.

Поле в рассматриваемой волне $\vec{F}(\vec{x},t)$ в любой точке $\vec{x}$ и в любой момент времени t должно удовлетворять следующему условию:

$$\vec{F}(\vec{x},t) = \vec{F}\left(\vec{x}+\vec{a}, t+(\vec{u}\vec{a})/c\right), \tag{1.30}$$

где $\vec{u}$ - единичный вектор, определяющий направление падения плоской волны, а $\vec{a} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2$, $m_{1,2} \in \mathbf{Z}$ - комбинация векторов примитивных трансляций двумерной решетки $\vec{a}_{1,2}$, которые задают периодичность структуры по двум направлениям.

В случае нормального падения направление, задаваемое вектором $\vec{u}$, перпендикулярно плоскости периодичности структуры ($\vec{u}\vec{a} = 0$). Вычислительный объем FDTD в этом случае может быть ограничен одной элементарной ячейкой, на границах которой применяются периодические граничные условия

$$\vec{F}(\vec{x}_b,t) = \vec{F}(\vec{x}_b+\vec{a}_b,t), \tag{1.31}$$

означающие, что в выходящих за границу вычислительного объема точках $\vec{x}_b$ значения поля полагаются равными значениям в точках у противоположной относительного периодического направления границы $\vec{x}_b+\vec{a}_b$ ($\vec{a}_b = \pm\vec{a}_{1,2}$ для четырех периодических границ).

Если волна по отношению к плоскости периодичности структуры падает наклонно, в граничные условия должен быть включен временной сдвиг

$$\delta t_b = (\vec{u}\vec{a}_b)/c = \pm a_{1,2}\sin\theta_{1,2}/c, \tag{1.32}$$

где $\theta_{1,2}$ есть величина угла падения в плоскости, образованной соответствующим направлением трансляции двумерной решетки и нормалью к ней. В зависимости от положения рассматриваемой границы вычислительного объема применяемый временной сдвиг может быть как положительным, так и отрицательным, а, следовательно, значения полей в противоположных приграничных точках должны браться либо из прошлого, что реали-

зуемо путем записи их в буфер на этапе расчета, либо из будущего, что проблематично.

Для решения этой проблемы в литературе было предложено несколько различных методов, которые можно условно разделить на три группы. В первой группе вводятся новые переменные, выражаемые через поля $\vec{E}$ и $\vec{H}$ таким образом, чтобы устранить временную задержку между элементарными ячейками. В новых переменных уравнения для всех элементарных ячеек эквивалентны, и к ним применимы периодические граничные условия. Однако эти уравнения отличны от уравнений Максвелла, и для их решения требуется написание новых алгоритмов, отличных, например, от алгоритма Йи. Наиболее удачными алгоритмами дискретизации этих уравнений оказались алгоритм введения дополнительных сеток [36] и алгоритм разделения полей [37]. В обоих этих алгоритмах вводятся дополнительные переменные, что приводит к увеличению объема требуемой памяти. Более весомым их недостатком является увеличение времени расчета, которое обусловлено уменьшением максимального для устойчивости метода значения $\Delta t/\Delta x$ при увеличении угла падения. Для углов близких к 90^0 требуемое максимальное отношение $\Delta t/\Delta x$ стремится к нулю, а расчет становится невозможным.

Другая группа методов основана на применение блоховских периодических граничных условий:

$$\vec{F}\left(\vec{x}_b, t\right) = \vec{F}\left(\vec{x}_b + \vec{a}_b, t + \delta t_b\right) = \vec{F}(\vec{x}_b + \vec{a}_b, t)\exp(j\alpha_b), \tag{1.33}$$

в которых временной сдвиг заменяется приращением фазы α_b. Такая замена допустима в случае падающей монохроматической волны частоты ω_0 (как это происходит в методе синусов и косинусов [38]), где фаза связана с углом(ами) падения с помощью соотношения $\alpha_b = \pm\omega_0 a_{1,2}\sin\theta_{1,2}/c$. Результаты численного эксперимента с использованием такой монохроматической волны относятся только к одной частоте и одному углу падения. Однако, в качестве падающей волны можно использовать пакет плоских волн, падающих под разными углами, но имеющих общее значение фазы

α_b, как это предлагается в методе спектрального FDTD [39]. Результаты такого эксперимента будут относится уже к диапазону пар (ω, θ). Недостатком описанных двух методов является то, что они фактически переходят в частотное представление, что лишает их тех преимуществ FDTD, которые являются следствием его работы во временном представлении.

Третья группа методов остается в пределах стандартного разностного алгоритма FDTD. Наиболее простым из них является метод многих ячеек [40], который основан на введении дополнительных ячеек в направлении, откуда приходит волна. На границе между исходной и первой дополнительной ячейкой применяются зависящие от времени периодические граничные условия. Крайняя граница последней дополнительной ячейки ограничивается поглощающими граничными условиями PML, что является источником численной ошибки, величина которой зависит от количества дополнительных ячеек и угла падения.

В методе углового цикла [6] также используются дополнительные ячейки. Сам метод основан на неодновременном обновлении значений полей на сетке, что позволяет получать эти значения из будущего, пользуясь значениями в соседних опережающих по времени ячейках. Недостаток этого метода в том, что он применим только для относительно небольших углов (в трехмерном случае допустимы только углы меньшие 35^0).

В этой главе мы предлагаем новый итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую планарную струкутру. Этот метод основан на итерационном приближении к искомому решению, удовлетворяющему условиям (1.30). Для моделирования падения плоской волны под выбранным углом требуется несколько (5-10) отдельных экспериментов, которые мы в дальнейшем будем называть итерациями, и дополнительная память для хранения данных, которые передаются от предыдущей итерации к последующей.

Геометрия численного эксперимента представлена на Рис. 1.11 (в целях простоты изложения мы рассматриваем двумерный случай с примитивными векторами трансляции решетки $a_1 = a$, $a_2 = 0$ и временным

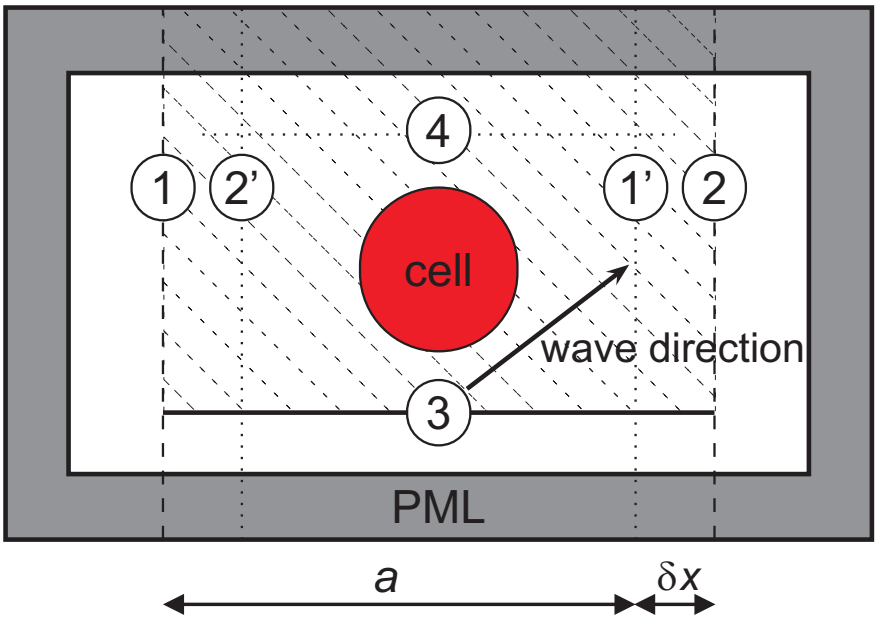

Рис. 1.11. Геометрия численного эксперимента. 1, 2 – генерирующие (TF/SF) границы, для которых в качестве источника берется сигнал, переносимый с точек образов $1'$, $2'$; 3 – TF/SF граница для генерации падающей плоской волны; 4 – детекторы для записи прошедшего сигнала.

сдвигом $\delta t = |\delta t_b| = a \sin\theta / c$). Мы используем метод общего и рассеянного поля (Total Field / Scattered Field Method, TF/SF) для генерации плоской волны в область общего поля (эта область заштрихована на Рис. 1.11). Как полное, так и рассеянное поле в искомом решении удовлетворяет условию (1.30). Зависящие от времени граничные условия TF/SF на границе 3 соответствуют падающей наклонно плоской волне и известны аналитически. Основная идея нового метода заключается в применении дополнительных граничных условий на границах 1 и 2, которые работают подобно границе TF/SF, где в качестве генерируемой волны используются значения полей в точках-образах на границах $1'$ и $2'$ ($\vec{x}_{1'} = \vec{x}_1 + \vec{a}$ и $\vec{x}_{2'} = \vec{x}_2 - \vec{a}$) с соответствующим временным сдвигом. Для отрицательного временного сдвига в прошлое могут быть использованы значения полей с текущей i-ой итерации, а для положительного сдвига в будущее мы используем значения полей, записанные на предыдущей $i-1$-ойитерации:

$$\vec{F}_i(\vec{x}_2, t) = \vec{F}_i(\vec{x}_{2'}, t - \delta t), \tag{1.34}$$

$$\vec{F}_i(\vec{x}_1, t) = \vec{F}_{i-1}(\vec{x}_{1'}, t + \delta t). \tag{1.35}$$

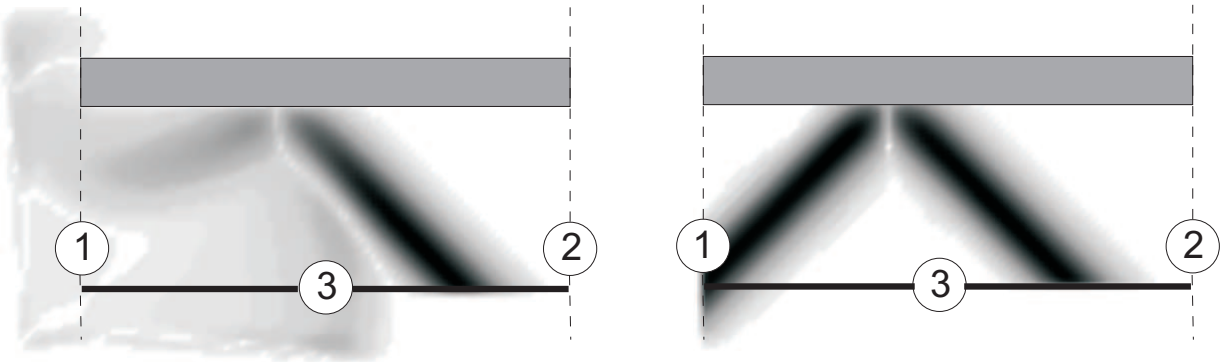

Рис. 1.12. Распределение электромагнитной энергии на первой и пятой итерации численного эксперимента с наклонным падением плоской волны на металлическую пластинку, $\theta = 45^0$. Падающая и отраженная волны отчетливо видны на пятой итерации.

Расстояние между границами 1 и 2 задается больше периода a на некоторое расстояние δx, равное нескольким сеточным шагам, для того чтобы разделить точки-образы и дополнительную границу TF/SF. Для записи значений $\vec{E}(\vec{x}_1, t)$ и $\vec{H}(\vec{x}_1, t)$ на границе 1 используется дополнительный буфер памяти размером $6NT/\Delta t$, где T - продолжительность одной итерации, Δt - шаг по времени, а $N = N_y N_z$ - количество сеточных узлов, приходящихся на границу 1 ($NT/\Delta t$ для каждой из трех компонент полей $\vec{E}$ и $\vec{H}$). Для границы 2 требуется буфер размера $6N\delta t/\Delta t$. Для $t < 0$ и $t > T$ поля в точках-образах полагаются равными нулю $\vec{F}_i(\vec{x}_{1',2'}, t) = 0$. На первой итерации в качестве граничного условия на границах 1 и 2 берется аналитическое значение для падающей плоской волны или нулевой сигнал. Как показали расчеты, выбор нулевого сигнала приводит к более быстрой сходимости метода для большинства рассчитываемых геометрий.

На Рис. 1.12 продемонстрирована сходимость итерационного метода к искомому решению. Как видно из рисунка, исчезновение рассеянного поля слева от границы 1 и справа от границы 2 свидетельствует о получении искомого численного решения. Для измерения отличия значения волны на текущей итерации от искомого решения может использоваться величина потока энергии в область рассеянного поля через границы 1 и 2 (Рис.1.13).

Для доказательства сходимости метода представим генерируемый на i-ой итерации на границах 1 и 2 сигнал в виде суммы $\vec{F}_i = \vec{F}_0 + \delta\vec{F}_i$, где

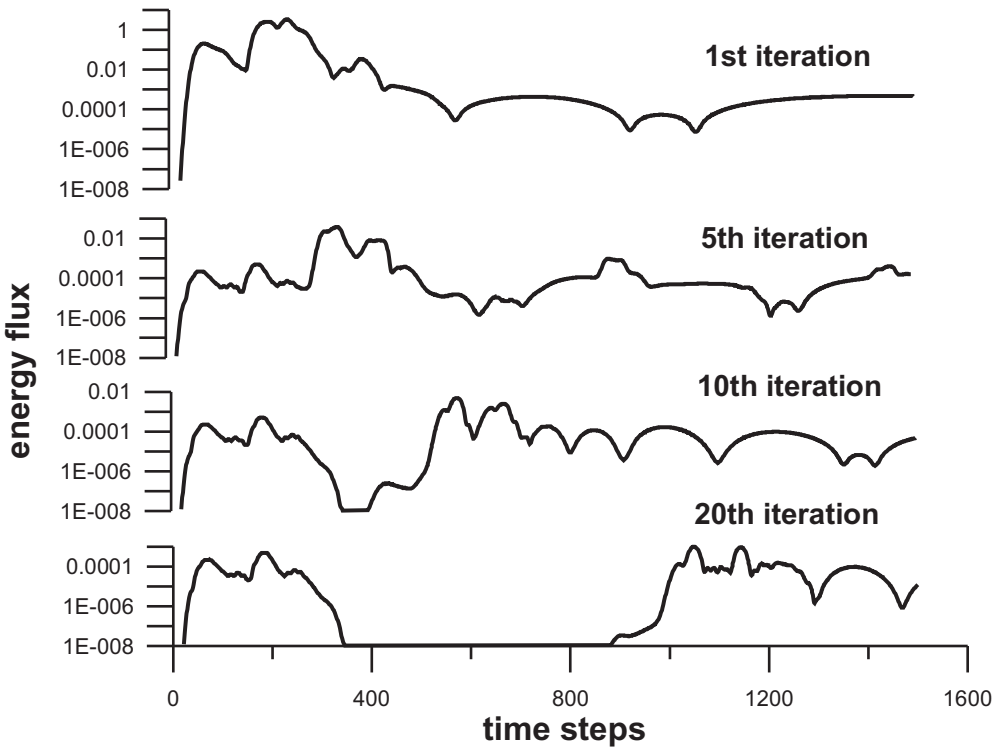

Рис. 1.13. Поток энергии через границы 1 и 2, соответствующий численной ошибке. Эксперимент соответствует Рис. 1.12.

$\vec{F}_0(\vec{x}_b, t)$ удовлетворяет условию (1.30), а $\delta\vec{F}_i$ есть сигнал-ошибка. По причине линейности уравнений Максвелла и операции временного сдвига по отношению к полям $\vec{F}_i(\vec{x}, t)$, а также вытекающего из линейности принципа суперпозиции, эволюция ошибки $\delta\vec{F}_i$ при увеличении i может рассматриваться отдельно от решения $\vec{F}_0(\vec{x}_b, t)$. На каждой следующей итерации сигнал-ошибка генерируется на периодической TF / SF границе с (а) временным сдвигом в будущее и (б) меньшей амплитудой, как это видно на Рис.1.13. Для непосредственного доказательства этого утверждения рассмотрим некоторый сигнал $\delta\vec{F}_i$, генерируемый границей 1 в течение некоторого интервала времени, начинающегося в $t = 0$. Тогда:

- Время, необходимое для того, чтобы сигнал распространился до точки-образа $1'$ не меньше $\delta t_{11'} = |\vec{x}_{1'} - \vec{x}_1|/c = a/c$. В результате этого сигнал-ошибка будет записан на $1'$ и перенесен на границу 1 с положительным временным сдвигом δt согласно соотношению (1.35), то есть общее время задержки равно $\delta t_1 = \delta t_{11'} - \delta t = a(1 - \sin\theta)/c$,

что для углов $\theta \neq 90^0$ больше нуля. Рассматриваемый сигнал также будет записан на границу $2'$ и возникнет на границе 2 на следующей итерации, но будет распространяться в противоположную сторону от направления к границам $1'$ и 1. На следующей итерации, по крайней мере, в течение временного интервала $[0, \delta t_1)$ на границе 1 сигнал-ошибка $\delta \vec{F}_{i+1}$ будет равен нулю. Эти же рассуждения применимы к границе 2, при этом временная задержка $\delta t_2 = \delta t_1 + 2\delta x/c$. Таким образом, любой генерируемый сигнал на границах 1 или 2 временной длительности T и содержащий в себе ошибку, не удовлетворяющую условию (1.30), будет отделен от этой ошибки по крайней мере за $n \approx T/\delta t_1$ итераций (за это число итераций ошибка запаздает на время T).

В приведенных рассуждениях мы предполагали, что аналитическая граница 3 не генерирует численной ошибки, что в общем случае не верно. На Рис.1.13 видны два ошибочных сигнала. Первый из них это небольшой стабильный во времени сигнал, который сопровождает падающую волну и связан с численной ошибкой метода TF/SF. Второй ошибочный сигнал постепенно запаздывает по времени при увеличении числа итераций и в конце концов отделяется от решения. Так, на Рис.1.13 уже на 20-ой итерации это сигналы оказываются полностью разделены по времени.

- По причине того, что генерируемый на границах 1, 2 сигнал-ошибка перерассеивается на структуре, некоторая его доля не попадает в точки-образы, а поглощается в PML, и в результате этого не появляется в последующих итерациях. Это приводит к убыванию сигнала-ошибки при увеличении числа итераций, причем скорость убывания зависит от геометрии и оптических свойств рассматриваемой структуры.

Мы реализовали описанный метод в качестве составной части библиотеки EMTL, о которой пойдет речь в главе 2. Метод был протестирован при

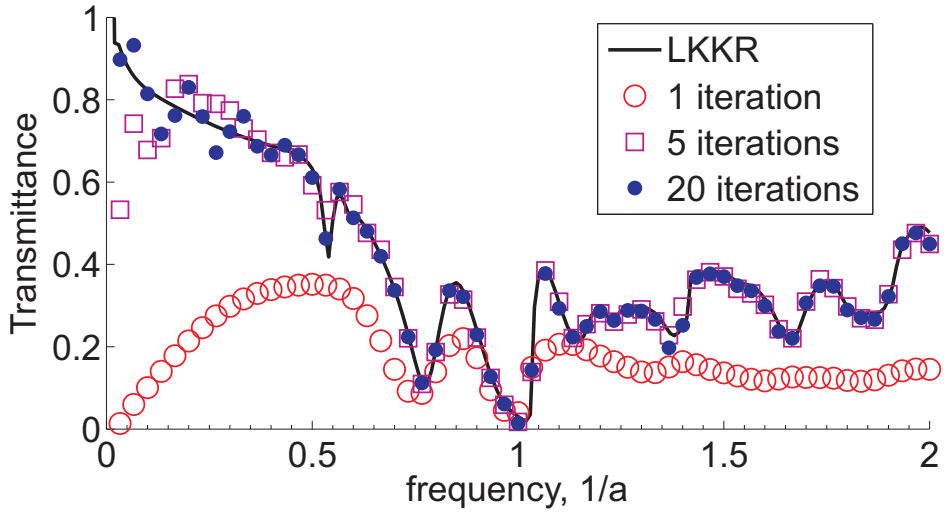

Рис. 1.14. Зависимость коэффициента прохождения однослойного фотонного кристалла, состоящего из упакованных в квадратную решетку металлических шариков ($\varepsilon = 4\varepsilon_0$, $\sigma = 2$, период решетки $a = 1$, радиус сфер 0.375) от частоты падающей волны, $\theta = 45^0$.

моделировании однослойного фотонного кристалла, состоящего из упакованных в квадратную решетку металлических шариков ($\varepsilon = 4\varepsilon_0$, $\sigma = 2$), на который падал ограниченный во времени волновой импульс с плоским фронтом. Период квадратной решетки полагался равным единице $a = 1$, радиус сферы 0.375, а шаг по сетке 0.05 ($c = \varepsilon_0 = 1$). Для уменьшения численной ошибки, связанной с неточным отображением границ шариков на сетку, использовался метод подсеточного сглаживания [7, 8].

На Рис. 1.14, 1.15 представлено сравнение результатов для спектра прохождения, полученных с помощью описанного метода и с помощью метода LKKR [41]. Результаты FDTD находятся в хорошем согласии с результатами LKKR уже после пяти итераций, для больших частот и малых углов падения результаты сходятся быстрее.

В заключение мы хотим отметить практические отличия нового метода от ранее предложенных методов. Новый метод лишен таких недостатков, как неустойчивость при отвесных углах падения, увеличение требуемого размера сетки, переход в частотное представление. С помощью нового метода может моделироваться падение плоской волны любой длительности по времени под произвольным углом, однако иногда это может потребовать увеличения требуемого объема памяти и числа итераций (а, следовательно,

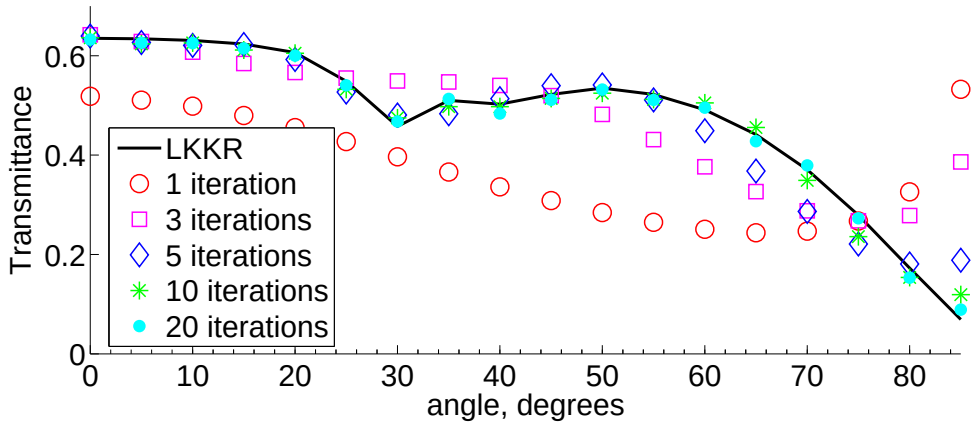

Рис. 1.15. Зависимость коэффициента прохождения однослойного фотонного кристала (параметры фотонного кристалла те же, что и для Рис. 1.14) от угла падения, $f = 0.6/a$.

и времени расчета). Поскольку обмен данных с буфером памяти не столь интенсивен, для него может быть использовано дисковое пространство.

1.4. Выводы

В рамках метода FDTD предложен и реализован алгоритм подсеточного сглаживания для дисперсных сред, позволяющий существенно уменьшить величину численной ошибки, связанной с неточным отображением тел, обладающих произвольной формой поверхности, на прямоугольную вычислительную сетку. Точность метода проанализирована путем сравнения полученных с его помощью результатов с аналитическим решением Ми задачи о рассеянии плоской волны на сфере. Показано, что его применение приводит к увеличению порядка точности метода FDTD по сравнению с обычным „лестничным“ приближением.

Предложен и реализован итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую структуру в численном расчете FDTD. С его помощью можно получать результаты во всем диапазоне углов от 0^0 до 90^0, а также наблюдать реальное поведение поля во времени. Особенностью метода является то, что получение решения для одного угла требует нескольких отдельных итераций-экспериментов. Точность метода проанализирована путем сравнения получаемых с помощью

него результатов с результатами, полученными с помощью слоевого метода Коринга-Кона-Ростокера.

2. Применение шаблонного метапрограммирования для эффективной реализация FDTD

В первоначальном узком смысле под FDTD подразумевалось использование базового алгоритма Йи для численного решения уравнений Максвелла. В современном более широком смысле FDTD включает в себя множество самых разнообразных возможностей: моделирование сред с дисперсными и нелинейными свойствами, применение различных типов сеток (помимо первично предложенной прямоугольной сетки Йи), использование методов постпроцессорной обработки результатов и т. д. Для реализации всех этих возможностей требуется написание больших параллельных программ, которые обладали бы высокой производительностью, были бы легко расширяемы и обладали доступным, читаемым кодом. К сожалению, распространённые некоммерческие программы FDTD (например, MEEP, XFDTD, CFDTD) лишены этих свойств и не предназначены для широкого круга задач. Это явилось причиной разработки собственной модели FDTD, которую мы будем в дальнейшем называть EMTL (Electromagnetic Template Library).

При написании EMTL использовалась техника шаблонного метапрограммирования, предполагающая написание одного и того же кода (шаблона) для реализации различных функций или классов (см., например, [42]). Шаблон представляет собой специальное описание параметризированной функции или родового класса, в которых информация об используемых в реализации типах данных преднамеренно остается незаданной. Типы используемых данных передаются через параметры шаблона. Шаблон позволяет одну и ту же функцию или класс использовать с различными типами данных без необходимости программировать заново каждую новую версию функции или класса. В качестве примера можно привести шаблон функции

сортировки: этот шаблон реализован для всех типов одинаково, единственным условием является наличие у этих типов операции сравнения.

Модель EMTL основана на выборе небольшого числа базовых компонент, которые используются в качестве параметров при программировании шаблонов высокоуровневых структур и алгоритмов. Основной базовой компонентой в модели является дискретизированный контур, входящий в разностный аналог уравнений Максвелла в интегральном представлении. Представляемая нами модель легко расширяема, в нее могут быть добавлены все возможности FDTD (метод полного и рассеянного поля, поглощающие граничные условия, алгоритмы для расчета дисперсных и нелинейных сред и т. д.) Также EMTL естественным образом приспособлена для проведения параллельных вычислений.

EMTL реализована в виде библиотеки шаблонов C++, которые могут быть использованы в качестве строительных компонент при создании конкретных численных приложений. Для реализации возможности проведения параллельных расчетов используется библиотека MPI (Message Passing Interface) [43].

Библиотека EMTL находится в открытом доступе в интернете (http://fdtd.kintechlab.com).

2.1. Контурный подход к дискретизации уравнений Максвелла

В качестве отправной точки для описания упомянутого в названии параграфа контурного подхода служит первая пара уравнений Максвелла в интегральной форме, которая в отсутствие зарядов и в случае изотропных, недисперсных и линейных сред (см. (1.5), (1.6)) имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_S \mu\vec{H}d\vec{S} + \int\limits_S \vec{M}d\vec{S} = -\int\limits_l \vec{E}d\vec{l}, \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_S \varepsilon\vec{E}d\vec{S} + \int\limits_S \vec{J}d\vec{S} = \int\limits_l \vec{H}d\vec{l}. \tag{2.2}$$

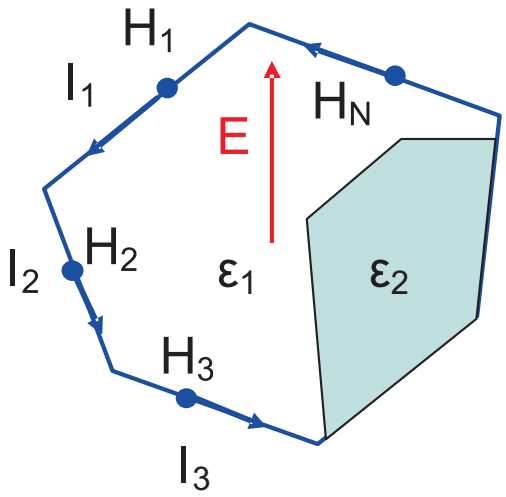

Рис. 2.1. **H**-контур, служащий для обновления поля **E**.

Рассмотрим некоторый контур, ограниченный выпуклым многоугольником (Рис.2.1). Аппроксимируем поверхностный и контурный интегралы в (2.1) и (2.2) следующим образом:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} perm_{1,2}\vec{F}^c_{1,2} + \vec{J}^c_{1,2} - loss_{1,2}\vec{F}^c_{1,2}\right)\vec{S} = \pm\sum_i \vec{F}^l_{2,1}\vec{l}_i, \tag{2.3}$$

где для электрических и магнитных постоянных используются обозначения $perm_1 = \varepsilon$, $loss_1 = \sigma$, $perm_2 = \mu$, $loss_2 = \sigma^*$. Поля $\vec{F}_{1,2} = \vec{E}, \vec{H}$ в (2.3) находятся по разные стороны от знака равенства: поле $\vec{F}^c$ и ток $\vec{J}^c$, измеряемые в центре контура и умножаемые на его площадь $\vec{S}$, находятся слева, а поле $\vec{F}^l$, измеряемое в центральных точках сторон контура и умножаемое ветора $\vec{l}$, находится справа.

Как это делалось в параграфе 1.1.1, используя для поля в левой части (2.3) центральное разностное отношение для производной по времени и линейную интерполяцию по соседним временным слоям

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{F}(t) = \frac{1}{\Delta t}\left[\vec{F}(t+\frac{1}{2}\Delta t) - \vec{F}(t-\frac{1}{2}\Delta t)\right], \tag{2.4}$$

$$\vec{F}(t) = \frac{1}{2}\left[\vec{F}(t+\frac{1}{2}\Delta t) + \vec{F}(t-\frac{1}{2}\Delta t)\right] \tag{2.5}$$

и явно выражая в (2.3) значение поля $\vec{F}^c$ на следующем временном шаге,

получаем:

$$\vec{F}^c_{1,2}(t+\frac{1}{2}\Delta t)\vec{S} = \alpha_{1,2}\vec{F}^c_{1,2}(t-\frac{1}{2}\Delta t)\vec{S} + \beta_{1,2}\sum_i \vec{F}^l_{2,1}(t)\vec{l_i} - \gamma_{1,2}\vec{J}_{source}\vec{S}, \quad (2.6)$$

где $\alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2}$, $\gamma_{1,2}$ - некоторые коэффициенты (для сетки Йи эти коэффициенты задаются выражениями (1.17), (1.18)).

Отметим, что для схем более высокого порядка точности по пространству или по времени также могут быть выписаны уравнения наподобие (2.3), в которых будет присутствовать большее количество опорных точек, используемое для разностной аппроксимации интегралов по пространству, или большее число "временных слоев".

В случае, когда контур пересекает границу между двумя различными средами (Рис. 2.1), для корректного задания электромагнитных свойств в левой части уравнения (2.3) необходимо использовать какое-либо приближение. Самое простое приближение соответствует заданию этих свойств в центре контура ("лестничное приближение"). Более точным является применение тензора обратной диэлектрической проницаемости, о котором речь шла речь в параграфе 1.2.

Массив данных в оперативной памяти, в котором хранятся значения полей на сетке, удобно представлять в виде многомерного вектора $\vec{M}$. Количество измерений этого вектора равно числу ячеек памяти в этом массиве, а значения компонент этого вектора равны записанным в этих ячейках значениям. Связь значений поля в точке $\vec{x}$ со значениями в ячейках памяти выражает следующее общее, пригодное для самых произвольных типов сеток соотношение:

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sum_{i\in I(\vec{x})} \vec{c}_i(\vec{x})\hat{L}_i(\vec{M}), \quad (2.7)$$

где $I(\vec{x})$ есть множество индексов (обычно небольшое), определяемое точкой $\vec{x}$, а $\vec{c}_i$ - интерполяционные коэффициенты (Рис.2.2). Операция $\hat{L}_i$ связывает i-ое слагаемые (i-ая точка на Рис.2.2) с массивом данных. Обычно эта операция ставит в соответствие каждой точке уникальную ячейку памяти: $\hat{L}_i(\vec{M}) = M_i$. Возможны более изысканные случаи, например, когда

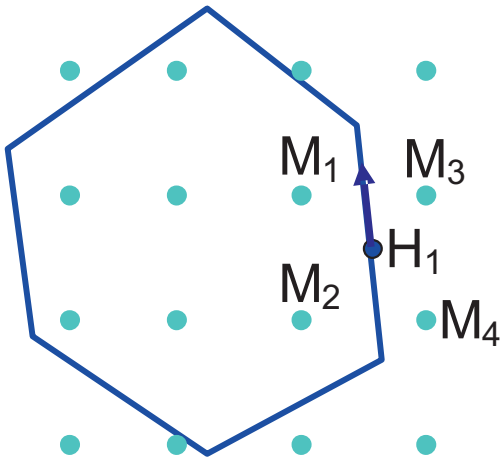

Рис. 2.2. Интерполяций значений поля на опорных точках контура по узлам сетки.

значения в точке получаются путем вычисления интерполяционных полиномов.

В качестве примера рассмотрим, как осуществляется линейная интерполяция на трехмерной ортогональной сетке $N_0 \times N_1 \times N_2$ с шагом по пространству Δx. В этом случае значение для интерполяции проекции поля на выбранное направление в произвольной точке используются 24 слагаемых: 8 вершин содержащего эту точку куба, задаваемого соседними узлами сетки, умножить на 3 компоненты поля для каждого узла. Если 3 компоненты поля нумеровать индексом k, а вершины куба нумеровать тройкой индексов m_0, m_1, m_2, принимающих значения либо 0, либо 1, то тогда в случае, когда данные для каждой компоненты хранятся в памяти вместе, множество индексов

$$I(\vec{x}) = \{i_{8k+4m_0+2m_1+m_2}\}_{k=0,1,2;\, m_0,m_1,m_2=0,1} \tag{2.8}$$

из (2.7) есть

$$i_{8k+4m_0+2m_1+m_2} = N_0N_1N_2k + N_1N_2(n_0+m_0) + N_2(n_1+m_1) + n_2 + m_2, \tag{2.9}$$

где приращение индекса в массиве данных на единицу соответствует изменению вдоль оси z ($j = 2$). Более подробно о способах хранения данных в памяти будет идти речь в параграфе 2.4.1.

Каждой компоненте ставится в соответствие уникальная ячейка па-

мяти:

$$\hat{L}_i(\mathbf{M}) = M_i. \tag{2.10}$$

Интерполяционные коэффициенты равны

$$\vec{c}_i(\vec{x}) = \vec{c}_{8k+4m_0+2m_1+m_2} = \vec{e}_k \prod_{j=0}^{2} \left((\frac{x_j}{\Delta g} - n_j)(-1)^{1-m_j} + 1 - m_j \right), \tag{2.11}$$

где $n_j = x_j \bmod \Delta x$ суть номера сеточных узлов, расположенных вблизи точки $\vec{x}$, а $\vec{e}_k$ - единичные вектора вдоль соответствующих направлений.

Выражение (2.7) может быть использовано как для суммирования входных значений поля перед обновлением выходного значения поля в (2.6), так и для помещения в память выходного значения поля. Пользуясь линейностью (2.6) и (2.7) по отношению к $\hat{L}_i(\vec{M})$, а также предполагая наличие линейности у операции $\hat{L}_i$, можно показать, что каждая ячейка памяти может обновляться явным образом через значения в остальных ячейках. Это позволяет на основании (2.6), (2.7) реализовать цикл обновления поля в самом общем виде, не зависящем от типа используемой сетки. Однако, с учетом организации конкретной сетки выражение (2.7) может быть сильно упрощено, в результате чего число входных и выходных слагаемых в (2.6) сократится. Например, в сетке Йи множество векторов $I(\vec{x})$ всегда равно одному, а для обновления значения поля по контуру можно пользоваться простым выражением (1.16), использующем лишь одну выходную и пять входных ячеек.

2.2. Код как совокупность взаимодействующих компонент

EMTL можно представить как совокупность взаимодействующих друг с другом компонент, причем базовые примитивные компоненты могут быть задействованы в качестве параметров шаблонов при построении компонент более высокого уровня. Такими базовыми компонентами являются контура, итераторы (они работают подобно итераторам из стандартной библиотеки шаблонов C++ [44]), множества интерполяционных коэффициентов, сетки и т. д. В целях увеличения производительности методы ба-

зовых компонент, постоянно вызываемые в основных внутренних циклах, реализованы в виде inline функций.

Базовыми геометрическими компонентами EMTL являются точки, контура (в форме выпуклых плоских многоугольников) и протяженные тела в пространстве. Тела могут обладать бесконечной протяженностью в одном или большем числе измерений. Например, многогранник, реализуемый в EMTL как совокупность плоскостей, может задаваться только одной плоскостью и представлять таким образом полупространство.

Соответствующие телам компоненты наследуют от своего базового класса `SpaceRegion` следующую функциональность:

- умение определять, находится ли определенная точка внутри тела;
- нахождение площади сечения телом заданного контура;
- нахождение точек пересечения поверхности тела заданным отрезком и определение нормали к поверхности в этих точках.

Последняя возможность используется в методах эффективной диэлектрической проницаемости, в которых учитывается направление нормали к границе между двумя средами.

Ключевым строительным блоком EMTL является сетка или класс `emMeshBlock`. Сетка задает совокупность контуров, участвующих в разностной схеме, организует размещение данных в памяти и определяет способ интерполяции значений поля по сеточным узлам в своих внутренних точках. Более подробно, сетка должна уметь:

- определять „контрольный объем“, внутри которого сетка знает и умеет возвращать значение поля;
- создавать интерполяцию в виде (2.7) для произвольной внутренней точки;
- возвращать итератор по всем $\vec{E}$- и $\vec{H}$-контурам, формирующим сетку;

- обеспечивать оптимизированный цикл обновления значений поля на сетке;
- в случае разбиения сетки на принадлежащие разным доменам подсетки или ее пересечения с сетками с более высоким приоритетом, вычленять множество неиспользуемых контуров, что необходимо экономии памяти.

В рамках указанных требований могут быть реализованы сетки самого разного типа, включая не ортогональные и неоднородные. Заметим, что совокупность контуров, формирующих сетку, должна быть согласована со второй парой уравнений Максвелла (1.3,1.4). Поскольку в EMTL это условие не проверяется, за него целиком отвечает создатель сетки.

Проведение численного расчета с использованием сетки и организация внутреннего устройства самой сетки рассматриваются в EMTL как две независимые задачи. Это позволяет реализовать многие процедуры EMTL в более общем виде, так что они могут выполнены с помощью произвольной сетки, а также с их комбинациями. Такой подход нашей модели естественную легкость добавления новых типов сеток.

2.3. Стадии расчета

В предлагаемой модели FDTD можно выделить следующие три стадии расчета:

- задание геометрии и вычисление всех участвующих в разностных уравнениях коэффициентов;
- собственно вычислительный цикл, сопровождаемый записью данных детекторами;
- анализ записанных данных.

2.3.1. Задание геометрии

На стадии задания геометрии происходит перебор всех контуров, формирующих сетки, используемые в данном численном эксперименте. На основании анализа расположения этих контуров относительно заданных тел рассчитываются коэффициенты в соответствующих разностных уравнениях. Эта процедура выполняется только один раз перед вычислительным циклом, и время, затрачиваемое на нее, существенно меньше времени, затрачиваемого на сам вычислительный цикл. Таким образом, производительность этой процедуры не столь важна, и ее можно реализовать в наиболее общем виде, не зависящем от внутреннего устройства используемых сеток. Для того, чтобы это было возможно, сетка должна предоставлять итератор по всем своим внутренним контурам, которые в свою очередь должны:

- быть плоскими и выпуклыми, что необходимо для правильной работы процедуры определения их пересечения с заданными телами;
- возвращать последовательность всех своих вершин;
- устанавливать соответствие между „опорными“ точками контура (центр контура и центральные точки его сторон) и соответствующими коэффициентами и индексами в массивах компоненты `emMeshBlock`;
- предоставлять некоторый "контрольный объем“, содержащий в себе данный контур.

Последнее свойство используется в методах эффективной диэлектрической проницаемости, в которых применяется усреднение диэлектрических свойств по объему.

Участвующие в задании геометрии компоненты помещаются в объект типа `emBlockContainer<mesh_type1,mesh_type2>`, через который осуществляется управление ходом численного эксперимента. Этот объект может включать в себя произвольное число сеток, каждая из которых должна принадлежать одному из двух заранее указанных типов.

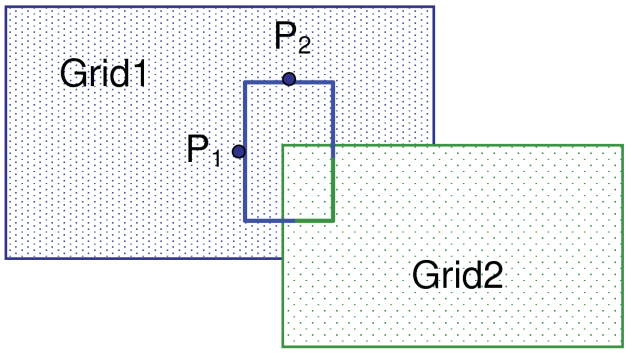

Рис. 2.3. Контур, пересекающий границу между двумя сетками.

Контейнер должен содержать ограничивающую область, для которой задаются соответствующие граничные условия. Эти условия определяют алгоритм действий, который применяется, когда определенный контур пересекает ограничивающую область, так что одна или несколько из его входных точек находятся снаружи ее. В случае периодических граничных условий значения полей в этих точках берутся с противоположной стороны ограничивающей области, в случае же „нулевых“ граничных условий - полагаются равными нулю. Если расчет ведется для одномерной или двумерной задачи, на дополнительные измерения накладываются периодические граничные условия, а размер вычислительного объема по этим измерениям сокращается до одного - двух контуров.

Каждой сетке ставится в соответствие целое число. Это число определяет приоритет обращения к той или иной сетке при их взаимном пересечении (как правило, сетки с большим разрешением обладают большим приоритетом). А именно, при запросе у контейнера значения поля в определенной точке пространства, если эта точка находится в области пересечения нескольких сеток, значение поля будет интерполироваться в первую очередь по узлам сетки, обладающей более высоким приоритетом. Сетки с более низким приоритетом используют значения полей, получаемые у сеток с более высоким приоритетом, в качестве входных точек своих контуров, которые расположены в области пересечения сеток (Рис. 2.3).

2.3.2. Основной и специализированный алгоритмы обновления сеток

Как правило, внешней средой, в которой находятся тела, является вакуум или диэлектрик. Поскольку, как правило, большая часть вычислительного объема приходится на внешнюю среду, выполнение алгоритма обновления полей для диэлектрика занимает большую часть общего времени расчета. Это означает, что несмотря на то, что для ее реализации может быть использован алгоритм общего вида, основанный на (2.6), (2.7), более эффективно применение сетками собственных специализированных алгоритмов, которые бы учитывали их внутреннее устройство.

Каждый такой алгоритм может быть организован последовательной обработки нескольких отдельных потоков данных. Сетке Йи соответствует минимальное число потоков: 5 для входных данных и 1 для выходных. Как правило, каждый раз, когда итератор по контурам достигает границы сетки, поток пересвязывается с другим адресом в памяти.

Моделирование дисперсных сред, источников, поглощающих условий и т. д. требует модификации базового алгоритма (2.6). Традиционном подходом является включение специализированных алгоритмов, реализующих всевозможные модификации (2.6), непосредственно в основной цикл. Каждому такому алгоритму ставится в соответствие одно из возможных значений некоторого флага. В основном вычислительном цикле этот флаг используются для определения того, какой именно алгоритм использовать для каждого контура.

В нашей модели каждый специализированный алгоритм выполняется отдельно от основного вычислительного цикла в виде так называемой поправки. Существуют поправки, которые выполняются до (изменение входных данных) и после (корректировка выходных данных) основного цикла. Например, пересылка данных между сетками в случае, когда эти сетки пересекаются, реализована в качестве поправки перед основным циклом. MPI пересылки между различными доменами требуют проведения поправ-

ки как до (инициализация MPI пересылок), так и после (завершение пересылок и обновление граничных контуров) основного цикла. Отделение поправок от основного вычислительного цикла необходимо для более эффективной реализации последнего, который освобождается от проверки дополнительных флагов и может быть векторизован.

Каждая поправка может быть реализована в виде общего, не зависящего от конкретного типа сетки алгоритма. Однако, если число контуров, к которым эта поправка применяется, достаточно велико, более эффективна реализация специализаций этих поправок для каждой из сеток. Примером такой ситуации является фотонный кристалл из плотно упакованных металлических шариков. Поскольку основную долю вычислительного объема занимает не диэлектрик, а дисперсная среда, в этом случае более эффективна разработка для каждой сетки специализированных поправок, учитывающих дисперсные свойства среды.

Как уже упоминалось в параграфе 1.1.1, максимально возможная величина шага по времени Δt в FDTD связана с шагом по пространству Δx и скоростью света c условием Куранта: $\Delta t \approx \Delta x/c$. По этой причине сетки различным пространственным разрешением должны обновляться с различным временным шагом.

В EMTL очередность обновления сеток определяется значением их временного шага. Сетка с наибольшим временным шагом обновляется первой, определяя текущее достигнутое значение времени. Оставшиеся сетки обновляются в очередности, определяемой количеством временных шагов необходимым им для достижения этого значения. При этом используется специальная "синхронизирующая поправка"для пересылок данных между сетками с различными значениями текущего момента времени. В таких пересылках от сетки может потребоваться знание значений поля на предыдущих временных шагах, для того чтобы осуществить интерполяцию по времени, запрашиваемую другой сеткой. В этом случае поправка, выполняемая перед основным циклом, сохраняет те значения поля, которые требуется в пересылках для других сеток, перед тем как они будут переписаны

на следующей временной итерации.

2.4. Оптимизация использования памяти

Последовательность контуров, к которым применяется та или иная поправка, определяется рассматриваемой геометрией и обычно содержит в себе некоторую закономерность. Помимо этого часто используемые поправками к разным контурам данные (например, коэффициенты в дополнительных разностных уравнениях) совпадают. Поэтому в целях экономии оперативной памяти в EMTL используется простой способ упаковки этих данных. Он основан на выделении линейно возрастающих подпоследовательностей в последовательности целых чисел. Каждая такая подпоследовательность заменяется на тройку чисел: целый код -1, величина приращения и число элементов в подпоследовательности. Этот способ упаковки достаточно прост, эффективен и не требует больших затрат при распаковке. Указанным способом могут кодироваться как последовательности итераторов контуров, так и последовательности индексов какого-либо массива данных (например, массива коэффициентов в разностных уравнениях).

Для поправок, реализующих сложные алгоритмы (например, алгоритм обновления значений поля в CPML) и задействующих большое количество данных, последовательность "поправляемых"контуров может быть переформирована так, чтобы сократить объем запакованных данных и повысить таким образом эффективность использования кэша при распаковке.

2.4.1. Тестирование различных способов организации в памяти сеточных данных

Во всех разностных методах основной является процедура обновления массива сеточных данных. Для организации этого массива может использоваться принцип близости точек в пространстве: данные, соответствующие физическим свойствам в данной точке в пространстве, хранятся вме-

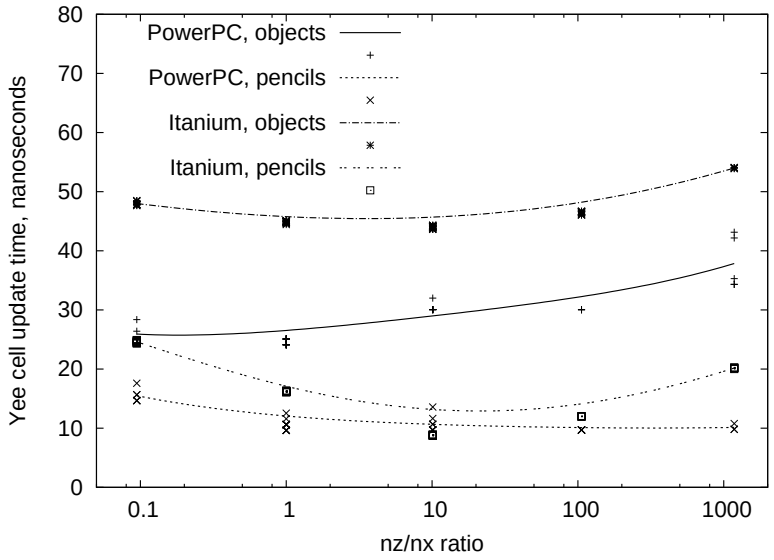

Рис. 2.4. Время, затрачиваемое на обновление одной ячейки Йи, для различных способов хранения сеточных данных в памяти и для разных размерностей сетки по трем направлениям (см. комментарий в тексте) в случае вакуумной задачи маленького размера (размер сетки 62 MB). Код был скомпилирован на архитектуре PowerPC с помощью компилятора IBM xlc 7.0 (-q64 -O5) и на архитектуре Itanium с помощью компилятора Intel icc 9.0 (-O3). Тесты проводились на кластере Межведомственного суперкомьютерного центра Российской Академии Наук (МСЦ РАН).

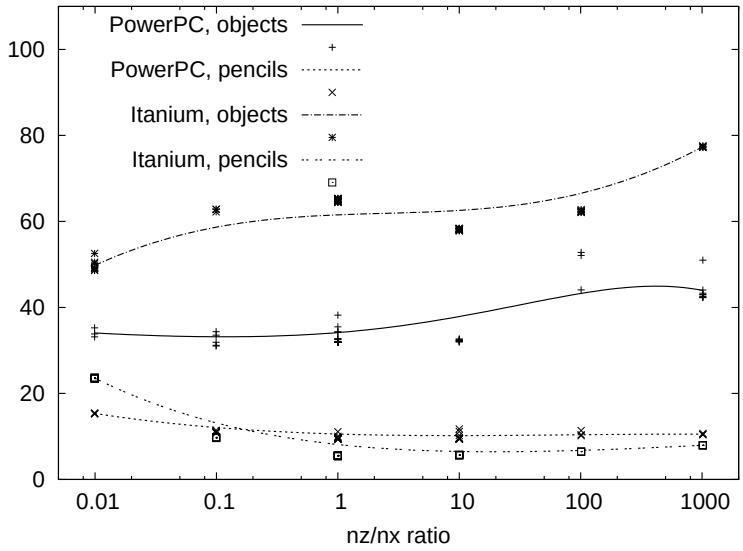

Рис. 2.5. Результаты тестов аналогичным тем, что представлены на Рис. 2.5, для задачи большого размера (размер сетки 1.3 GB)

сте.

Основная процедура часто состоит из нескольких циклов, причем в каждом цикле задействуется только некоторая совокупность физических свойств. В этом случае указанный способ хранения данных оказывается менее эффективным по причине того, что увеличивается величина приращения адреса при последовательном доступе к данным в ходе вычислительного цикла, что в свою очередь снижает эффективность использования кэша. В этом случае более разумно размещение данных в памяти согласно физическим свойствам, которые они представляют.

Поскольу в EMTL проведение расчета с использованием сетки и организация внутреннего устройства самой сетки отделены друг от друга, это позволяет отдельно исследовать эффективность двух указанных выше способов организации данных в памяти ("objects"и "pencils"на Рис. 2.4, 2.5). Для наших тестов были выбраны две ортогональные сетки Йи размером $nx \times ny \times nz$: в одной сетке в смежных ячейках памяти хранилось по 6 компонент полей $\vec{E}$ и $\vec{H}$, относящихся в одной ячейке Йи (Рис. 1.1), а в другой данные для каждой компонеты хранились вместе согласно (2.9). Для обоих случаев наиболее быстро меняющийся пространственный индекс соответствовал направлению z. Вариируя значение nz при постоянном размере

сетки и соблюдении условия $nx = ny$, мы измеряли время, затрачиваемое на обновление одной ячейки Йи. Для обеих архитектур (Itanium 2 и PowerPC 970), на которых производились тесты, второй способ хранения данных оказался эффективнее. Отметим, что величина nz/nx, определяющая количество пересвязываний обрабатываемого потока данных, также влияет на производительность, но в существенно меньшей степени.

2.5. Проведение параллельных расчетов

В EMTL поддерживается возможность проведения параллельных расчетов посредством разбиения вычислительного объема на домены. В качестве доменов могут использоваться произвольные объекты класса `SpaceRegion`. На стадии перебора контуров выявляются граничные контура, входные точки которых принадлежат не содержащим их домену или сетке. В "пересылочные поправки"для таких контуров записываются интерполяционные коэффициенты и индексы в соответствующих массивах данных, с помощью которых на каждом временном шаге определяется значение поля во входных точках таких контуров. Единственным отличием параллельных пересылок между доменами от пересылок между различными сетками внутри одного домена является то, что в первом случае данные пересылаются путем посылки MPI сообщения, а во втором используется прямое копирование данных в оперативной памяти.

Для разбиения вычислительного объема на домены можно использовать реализованный в EMTL алгоритм бисекции, в котором разбиение осуществляется посредством рекурсивного деления объема плоскостями. Разбивающая плоскость перпендикулярна направлению, вдоль которого протяженность объема максимальна. Размеры образуемых в результате бисекции объемов выбираются таким образом, чтобы каждому их них соответствовало одинаковое значение $\int\limits_{V_i} w(\vec{x})dV/n_i$, где n_i - число процессоров, приходящихся на i-ый объем, $w(\vec{x})$ - "трудозатратность"на единицу объема, которая может быть определена экспериментально для каждого типа

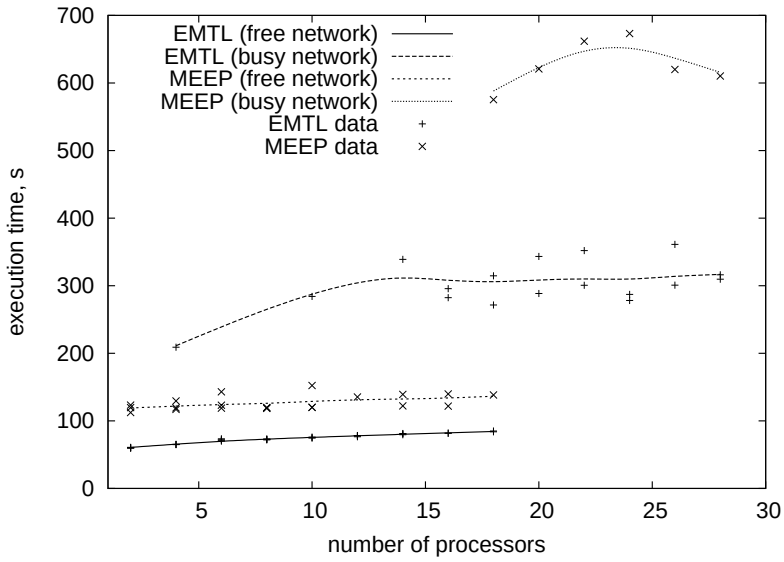

Рис. 2.6. Зависимость времени выполнения программы от числа процессоров в серии масштабируемых тестов на кластере ФМБФ МФТИ (Athlon MP 2400, Gigabit). Начальный размер задачи (сетка 140^3) масштабируется в одном измерении пропорционально числу процессоров. Количество временных итераций равно 100.

среды. Рекурсия продолжается до тех пор, пока число процессоров, приходящихся на каждый образованный в результате разбиений объем, не станет равным одному.

Алгоритм бисекции позволяет задавать извне число разбиений вдоль некоторого направления (включая нуль). В некоторых случаях это позволяет сократить число пересвязываний потоков данных во внутреннем цикле и оптимизировать таким образом эффективность использования кэша. Например, в случае прямоугольной сетки, когда соответствие между элементами сетки и индексами в массиве данных задается согласно (2.9), протяженность доменов вдоль направления z, которое соответствует наиболее быстро изменяющемуся индексу в массиве данных, выбирается максимально возможной, в то время как разбиение осуществляется по оставшимся двум измерениям.

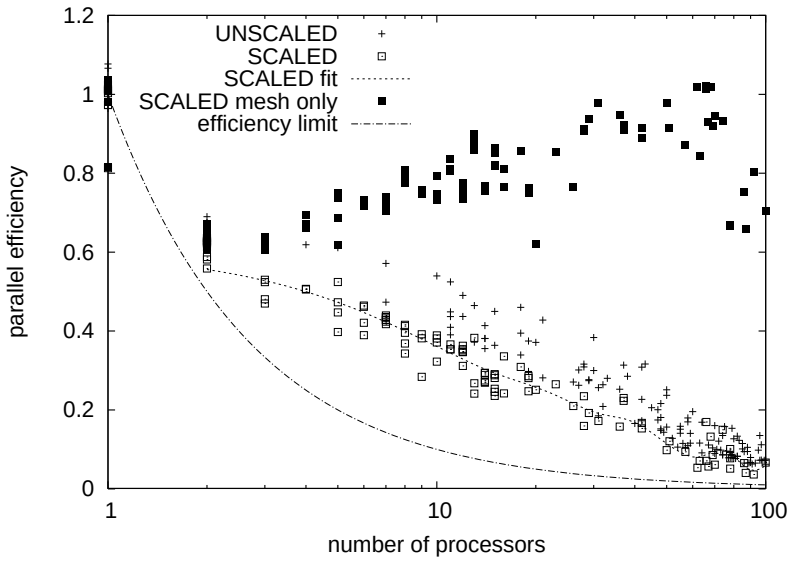

Рис. 2.7. Результаты для серии параллельных тестов на кластере МСЦ РАН (PowerPC 970, Myrinet). Базовый размер задачи равен 300×100^2. Эффективность основного вычислительного цикла (без учета параллельных пересылок) изображена залитыми квадратиками.

2.5.1. Измерение параллельной эффективности

С целью измерения параллельной эффективности нашего кода мы провели серию масштабируемых и немасштабируемых тестов на двух различных архитектурах (Рис. 2.6, 2.7). В немасштабируемых тестах измеряется зависимость времени работы программы $t(N)$ от числа процессоров N при сохранении размера сетки постоянным, при этом параллельная эффективность полагается равной $t(1)/Nt(N)$. В масштабируемых тестах размер сетки увеличивается пропорционально числу процессоров, а параллельная эффективность равна $t(1)/t(N)$.

Для сравнения мы использовали некоммерческую программу MEEP, разработанную в Массачусетском технологическом институте (MIT).

Как видно из Рис. (2.6) время выполнения программы на используемой архитектуре зависит от режима загруженности сети, а это означает, что пропускная способность сетевого коммутатора лимитирует сверху производительность программы. Отметим, что различие во времени выполнения для MEEP и EMTL находится в обратной зависимости от пропускной способности коммутатора, из чего следует, что оно связано главным об-

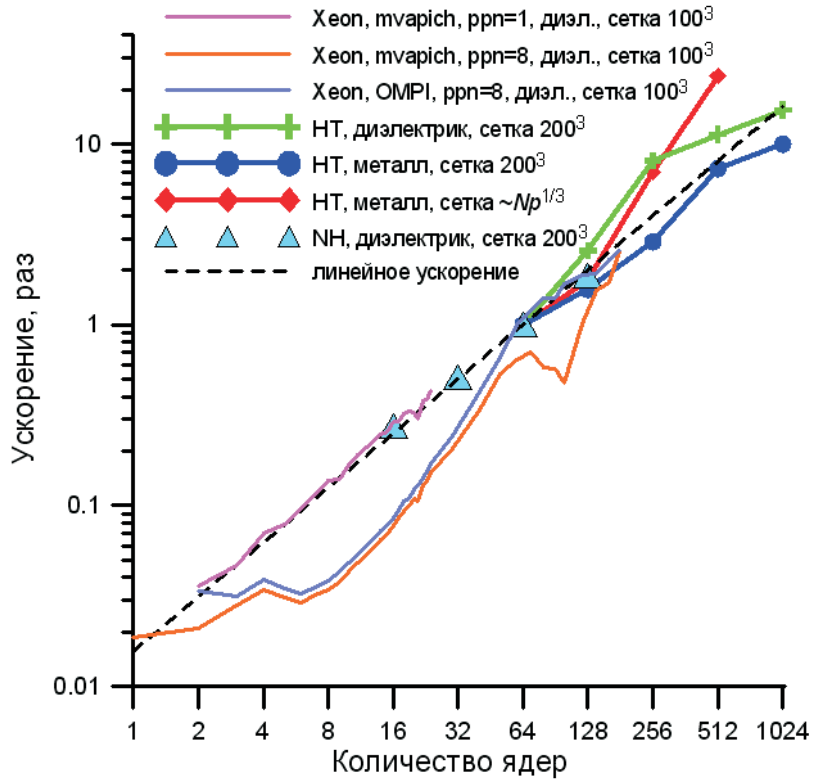

Рис. 2.8. Ускорение на единицу моделируемого объема для различных архитектур и реализаций MPI, нормировано на время исполнения на 64 ядрах. HT - Harpertown+Infiniband, HT - Nehalem+Infiniband (измерения в ИНТЕЛ), Xeon - кластер Т-платформы, узлы 2xXeon 5345 2.33 GHz 8 GB RAM, Infiniband.

разом со способом распараллеливания. Большой разброс, наблюдаемый в результатах другой серии тестов для типичной задачи на 1000 временных шагов (Рис. 2.7), также свидетельствуют о непосредственной зависимости времени работы программы от сетевой нагрузки системы.

При поддержке компании Intel были проведены тесты на системах Harpertown и Nehalem на большом числе вычислительных ядер (вплоть до тысячи). В этих тестах размер сетки полагался постоянным или зависел от числа процессоров таким образом, чтобы общий объем задачи сохранялся при его увеличении. Задача представляла собой численное решение уравнений Максвелла в диэлектрике и металле. Результаты тестов приводятся на Рис. 2.8, где показано ускорение на единицу моделируемого объема, характеризующее масштабируемость программы. Ускорение вычисляется относительно задачи, исполняемой на 64 процессорах при размере сетки

200^3. Оба типа тестов показали линейный или суперлинейный характер масштабируемости приложения. На этом же графике приведены результаты тестов на малом кластере, состоящем из 24 2-процессорных узлов с четырехядерными процессорами Xeon (2xXeon 5345 2.33 GHz 8 GB RAM). Из этих результатов следует, что характер производительности приложения зависит от архитектуры системы и реализации MPI.

2.6. Выводы

Предложен новый подход программной реализации метода решения уравнений Максвелла в конечных разностях (FDTD), основанный на интегральном представлении уравнений Максвелла. В рамках этого подхода написана параллельная программа на языке программирования C++. В ходе ее написания реализован ряд оригинальных решений: оптимизация использования памяти с помощью упаковки используемых в разностных уравнениях коэффициентов; увеличение производительности посредством разбиения алгоритма обновления сеток на основной цикл, поддающийся векторизации, и специализированные поправки к нему; увеличение параллельной эффективности путем балансировки доменов. Специально проведенные тесты показали, что быстродействие программы примерно в два раза выше, чем у программы MEEP, разработанной в Массачусетском технологическом институте. Также был продемонстрирован линейный характер масштабируемости программы вплоть до нескольких тысяч вычислительных ядер. Развитый при написании программы подход обеспечивает возможность расчета с одновременным использованием нескольких сеток, каждая из которых максимально приспособлена к соответствующей ей области моделируемой структуры. Это является особо важным при моделировании оптических свойств структур сложной формы с неоднородностями, много меньшими длины волны. Программа находится в открытом доступе в интернете (http://fdtd.kintechlab.com).

3. Металлические фотонные кристаллы как источники светового излучения

3.1. Обзор литературы

Фотонные кристаллы (ФК) представляют собой структуры, характеризующиеся периодическим изменением диэлектрической проницаемости в пространственных направлениях [2, 45–47]. В диапазоне длин волн, сравнимых с характерным размером изменения диэлектрической проницаемости, оптические свойства ФК сильно отличаются от оптических свойств сплошных сред. Распространение излучения внутри ФК благодаря свойству периодичности становится похожим на движение электрона внутри обычного кристалла под действием периодического потенциала. В результате электромагнитные волны в ФК имеют зонный спектр и координатную зависимость, аналогичную блоховским волнам электронов в обычном кристалле. При определенных условиях в зонной структуре ФК образуются щели, аналогично запрещенным электронным зонам в естественных кристаллах.

Перераспределение плотности фотонных состояний в ФК приводит к изменению спектра их теплового излучения [3]. Внутри запрещенной зоны плотность фотонных состояний равна нулю, и излучение электромагнитных волн подавлено. Вне запрещенной зоны интенсивность этого излучения непосредственно связана с плотностью фотонных состояний и может сильно варьироваться на разных длинах волн. На основании этого в литературе было высказано предположение о возможности практического использования ФК в качестве высокоэффективных источников видимого света [3, 48, 49]. Излучение в инфракрасном диапазоне (ИК) таких источников должно быть подавлено, что привело бы к увеличению световой отдачи по

сравнению с обычными лампами накаливания, примерно 95% излучения которых находится в ИК области, и лишь 5% приходится на видимый диапазон. В связи с этим становится актуальным исследование излучательных характеристик ФК при высоких температурах ($\sim 2400K$) и возможности создания на их основе источников света.

В настоящее время имеется лишь ограниченное число работ (см., напр., [48, 49]), в которых исследуется излучательная способность ФК в видимом диапазоне. Вместе с тем, значительная часть результатов, касающихся влияния геометрических параметров ФК на спектр его излучения, получена для ИК диапазона в рамках исследований возможности применения ФК для управления спектром теплового излучения (см. [50–58]). Это отразилось на характере данного литературного обзора. Вначале нашего изложения мы укажем на существующие методы расчета излучательной способности ФК. Затем мы изложим несколько имеющихся работ, в которых исследуется излучение ФК в видимом диапазоне. Далее значительная часть обзора будет посвящена работам, касающихся излучательной способности ФК в ИК диапазоне, поскольку полученные в этих работах результаты имеют общий характер.

Перейдем к способам расчета излучательной способности. Существующие способы можно разделить на две группы: прямые и косвенные [59,60]. Прямое вычисление излучательной способности тела предполагает его разбиение на маленькие излучающие объемы, учет поглощения и перерассеяния излученной каждым объемом энергии на остальных объемах и суммирование по всем объемам. Более подробное описание этого способа можно найти в работе [60], в которой рассчитывалось тепловое излучение нагретой пластинки помещенной на бесконечную подложку. Отметим также работу [61], в которой прямой подход был применен с использованием метода FDTD при исследовании двумерного ФК, состоящего из бесконечных стержней, упакованных в квадратную решетку.

Излучательная способность может быть также рассчитана косвенно с

помощью закона Кирхгофа [52,59]. Эквивалентность прямого и косвенного методов была численно продемонстрирована в работах [60, 61]. Поскольку в наших собственных расчетах применяется второй метод, мы опишем его подробнее.

Пусть имеется произвольное излучающее тело. Поток излучаемой им световой энергии, заключенной в частотном интервале $d\omega$ и телесном угле $d\Omega$, в направлении (θ, ϕ) через единичную площадку перпендикулярную к этому направлению, равен [52]

$$I(\omega, \theta, \phi, T) = \mathcal{E}(\omega, \theta, \phi, T) u(\omega, T) d\omega d\Omega, \tag{3.1}$$

где $\mathcal{E}(\omega, \theta, \phi, T)$ есть излучательная способность тела, а $u(\omega, T)$ есть спектральная плотность излучения абсолютно чёрного тела [62]

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \frac{1}{\exp\left(\hbar\omega/kT\right) - 1}. \tag{3.2}$$

Далее, поглощательная способность $\mathcal{A}(\omega, \theta, \phi, T)$ есть доля поглощаемой телом энергии при падении нее излучения, заключенного в частотном интервале $d\omega$ и телесном угле $d\Omega$, в направлении (θ, ϕ).

Согласно закону Кирхгофа [63–65]

$$\mathcal{E}(\omega, \theta, \phi, T) = \mathcal{A}(\omega, \theta, \phi, T). \tag{3.3}$$

В случае плоскопараллельного ФК слоя поглощательная способность равна [52]

$$\mathcal{A}(\omega, \theta, \phi, T) = 1 - \mathcal{T}(\omega, \theta, \phi, T) - \mathcal{R}(\omega, \theta, \phi, T), \tag{3.4}$$

где $\mathcal{T}(\omega, \theta, \phi, T)$ есть доля прошедшей энергии, а $\mathcal{R}(\omega, \theta, \phi, T)$ - доля отраженной. В используемых нами выражениях подразумевается усреднение по обоим поляризациям света.

Отсюда получаем, что поток излучаемой ФК слоем световой энергии, заключенный в частотном интервале $d\omega$, через единичную площадку, параллельную плоскости ФК слоя, равен [52]

$$J(\omega, T) = \int\limits_{hemisphere} \left(1 - \mathcal{T}(\omega, \theta, \phi, T) - \mathcal{R}(\omega, \theta, \phi, T)\right) u(\omega, T) \cos\theta d\Omega, \tag{3.5}$$

где интегрирование ведется по телесным углам, задающим направление „наружу“ из ФК пластинки. Поток энергии во всем частотном диапазоне равен $\int J(\omega, T)d\omega$.

Человеческий глаз воспринимает только видимую часть спектра, при этом внутри этого диапазона его чувствительность неодинакова. Чувствительность глаза к излучениям различных длин волн характеризуется функцией видности. Значением этой функции на разных длинах волн является видность, т. е. величина, обратно пропорциональная энергетической мощности излучений, которые при оценке глазом воспринимаются как одинаковые. Эта функция имеет максимум на длине волны 555 нанометров, условно принимаемый за единицу [66].

Световой поток есть эффективный энергетический поток, приведенный к функции видности $V(\omega)$. Единицей светового потока является люмен. Световой поток, создаваемый источником монохроматического света мощности 1 Ватт на длине волны 555 нанометров, равен 683 люменам. Световой поток F произвольного источника выражается следующей формулой:

$$F = 683 \int V(\omega)W(\omega)d\omega, \tag{3.6}$$

где $W(\omega)$ - спектральная плотность излучения источника.

В нашем случае световой поток, излучаемой ФК слоем через единичную площадку, параллельную плоскости ФК слоя, равен

$$F(T) = 683 \int V(\omega)J(\omega, T)d\omega. \tag{3.7}$$

Светоотдача источника есть отношение светового потока к энергетической мощности всего потока. Максимальная светоотдача (683 люмен/ватт) достигается у монохроматического источника на длине волны 555 нанометров.

Световой КПД источника равен отношению его светоотдачи к ее максимально возможному значению 683 люмен/ватт. В нашем случае для КПД получаем

$$\text{КПД} = \frac{\int V(\omega)J(\omega, T)d\omega}{\int J(\omega, T)d\omega}. \tag{3.8}$$

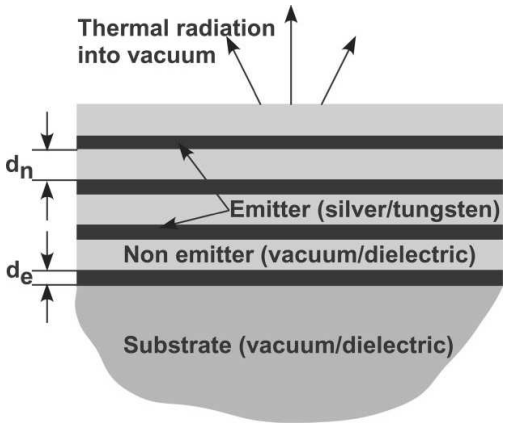

Рис. 3.1. Схематическое изображение одномерного ФК, исследуемого в работе [48].

Перейдем теперь к рассмотрению имеющихся работ, в которых исследуется излучательная способность ФК в видимом диапазоне.

Рассмотрим работу [48], в которой изучается излучательная способность одномерного металлического ФК, представляющего собой совокупность чередующихся пластинок (Рис. 3.1). Пластинки, с одной стороны, работают как источники излучения, а, с другой стороны, являются фильтрами теплового излучения. Материалом для излучающих пластинок служит серебро или вольфрам. Между пластинками имеется вакуумная или алюминиевая прослойка толщиной 10 нм. На Рис. 3.2 представлены полученные с помощью метода разложения по функциям Грина результаты для излучательной способности такого десятислойного одномерного ФК с различными значениями толщин используемых пластинок. Для сравнения приведена излучательная способность серебряной и вольфрамовой подложек. Как видно из приведенных на Рис. 3.2 графиков, одномерный ФК позволяет увеличить излучательную способность в видимом диапазоне, а изменение толщин пластинок позволяет регулировать характер зависимости излучательной способности от длины волны. Однако малый зазор между излучающими пластинами (10 нм) и малая температура плавления серебра ($1213K$) и алюминия ($933.5K$) не позволяют использовать предложенный авторами одномерный ФК для изготовления источников видимого света.

Перейдем к работе [49], в которой исследуются диэлектрические трех-

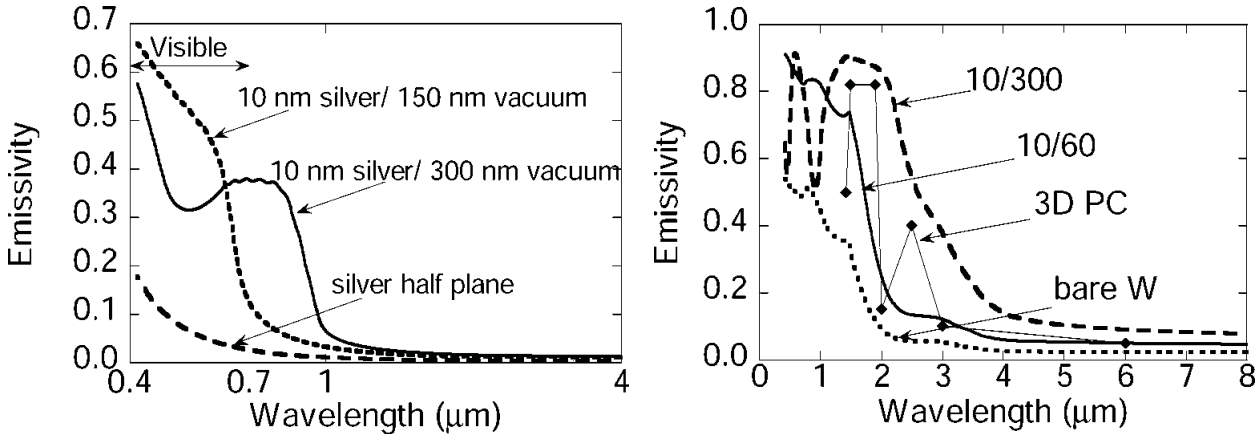

Рис. 3.2. Излучательная способность десятислойного одномерного ФК, изображенного на Рис. 3.1. Слева: ФК образован набором серебряных пластин и погружен в вакуум. Для сравнения приведена излучательная способность серебряной подложки. Справа: ФК образован чередующимися пластинами вольфрама и алюминия и помещен на диэлектрическую подложку $\varepsilon = 12$. Для сравнения приведена излучательная способность вольфрамовой подложки и ФК типа „поленница“ из [67].

мерные ФК типа прямого опала с алмазной решеткой, а также прямого и обратного опала с ГЦК решеткой. Авторы исследуют влияние диэлектрического ФК на спектр излучения абсолютно черного тела за счет изменения плотности фотонных состояний. При этом они показывают, что подбирая геометрические параметры ФК таким образом, чтобы плотность состояний в ИК области была минимальна, можно уменьшить излучение абсолютно черного тела в этом диапазоне. Отметим, что в рассматриваемой работе предполагается, что излучает не сам ФК, а погруженное в него абсолютно черное тело.

Как известно, опалы с алмазной решеткой и обратные опалы с ГЦК решеткой характеризуются наличием полной запрещенной зоны [2]. При помещении запрещенной зоны в ИК область, можно было бы добиться высокой селективности излучения в видимом диапазоне. Прямой ГЦК опал такой запрещенной зоной не обладает [2]. Несмотря на это, авторы численно показывают, что использование прямого ГЦК опала предпочтительней по причине присущей ему более низкой плотности состояний в низкочастотной области.

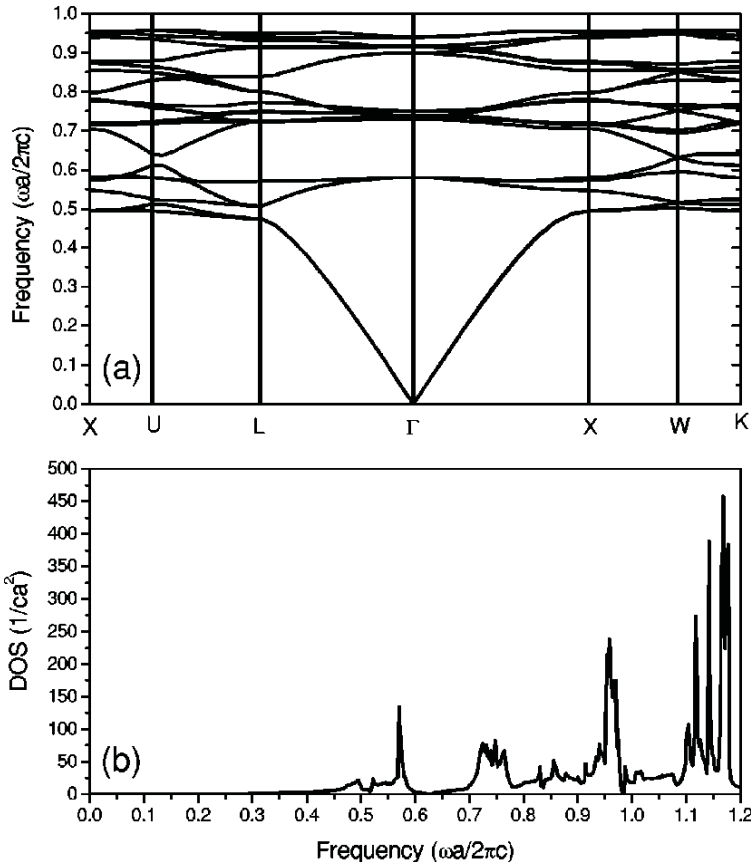

Рис. 3.3. (a) Зонная структура прямого ГЦК прямого опала с периодом a, образованного диэлектрическими сферами ($n = 3.6$) в вакууме. Фактор заполнения $f = 0.3$. (b) Соответствующая плотность фотонных состояний.

На Рис. 3.3 представлен расчет зонной структуры прямого ГЦК опала и соответствующая ему зависимость плотности состояний от частоты (фактор заполнения $f = 0.3$, коэффициент преломления материала, из которого изготовлен ФК, $n = 3.6$). Как видно из приведенного графика, на частоте $0.57(2\pi c/a)$ наблюдается пик плотности состояний, соответствующий имеющейся слабодисперсионной ветви зонной структуры ФК. Выбирая период ФК равным 0.35 и 0.3 мкм можно добиться положения указанного пика плотности состояний на длине волны 0.614 и 0.526 мкм соответственно (Рис. 3.4). При температуре $T = 2500K$ это приводит к тому, что доля излучения абсолютно черного тела в видимом диапазоне становится равной 10.9% и 10.6% соответственно, в то время как в вакууме эта доля равна 3%. Таким образом, применение диэлектрических ФК позволяет увеличить долю излучения абсолютно черного тела в видимом диапазоне примерно в

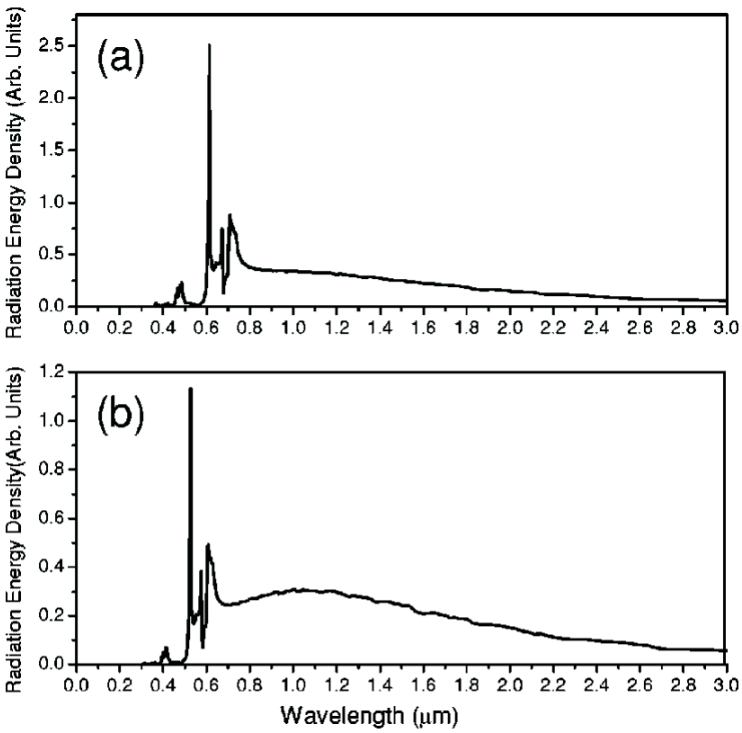

Рис. 3.4. Излучение абсолютно черного тела при $T = 2500K$, помещенного в ФК материал с параметрами из Рис. 3.3. (a) $a = 0.35$ мкм (b) $a = 0.3$ мкм.

3.5 раза при температуре $T = 2500K$. Отметим, что несмотря на ценность полученных в рассматриваемой работе результатов, в ней нет каких-либо конкретных практических предложений по использованию предлагаемого ФК в качестве нового источника света.

Как уже было сказано, имеется большое количество работ, посвященных исследованию излучательной способности ФК в ИК диапазоне. Эти работы стимулировались потребностями термофотовольтаики, которая представляет собой технологию непосредственного преобразования тепловой энергии излучения в электричество [68]. Применение ФК в структурах излучателей позволяет адаптировать спектр источника тепла к спектральной чувствительности термофотовольтаических ячеек и тем самым повысить КПД термофотовольтаического устройства [67]. Мы опишем результаты, полученные в некоторых из этих работ для различных типов геометрий ФК, поскольку они имеют общий характер.

Экспериментально и численно было установлено, что высокая селек-

тивность излучения может быть достигнута при использовании двумерных ФК, представляющих собой массивы пирамидальных рассеивателей [69] и прямоугольных [70, 71] или круглых [72] микрополостей.

Рассмотрим в качестве примера работу [53], в которой с помощью метода FDTD моделируются следующие структуры: вольфрамовая пластинки с цилиндрическими отверстиями, вольфрамовая пластинка с нанесенными на нее диэлектрическими цилиндрами и вольфрамовая пластинка с нанесенной на нее диэлектрической пластинкой, в которой проделаны круглые отверстия. На Рис. 3.5 представлено сравнение излучения последней указанной структуры, вольфрамовой пластинки и абсолютно черного тела для температур 1000K и 1200K. Мы видим, что излучение исследуемой структуры значительно превосходит излучение вольфрамовой пластинки во всем диапазоне длин волн, не превосходя при этом величину излучения черного тела. Положение пиков излучения не зависит от температуры. При этом увеличение температуры приводит к увеличению величины излучения во всем рассматриваемом диапазоне. Наблюдаемое изменение относительной высоты разных пиков при увеличении температуры можно объяснить сдвигом спектральной плотности мощности излучения абсолютно чёрного тела в коротковолновую область.

На Рис. 3.5 также представлены результаты для различных значений постоянной решетки при постоянной температуре 1200K. Для сравнения представлено излучение вольфрамовой пластинки и абсолютно черного тела. Мы видим, что увеличение постоянной решетки приводит к смещению положений пиков излучения в длинноволновую область. Авторы заключают, что контролируя величину постоянной решетки, можно увеличивать интенсивность излучения в выбранном диапазоне длин волн.

В Лаборатории Сандии экспериментально и численно исследовались вольфрамовые ФК типа „поленница“ (log-piles) [3, 67, 73, 74] с целью достижения высокой селективности излучения металлических фотонных кристаллов в ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне, одновременно с сильным подавлением излучения в среднем ИК диапазоне. В этих работах было

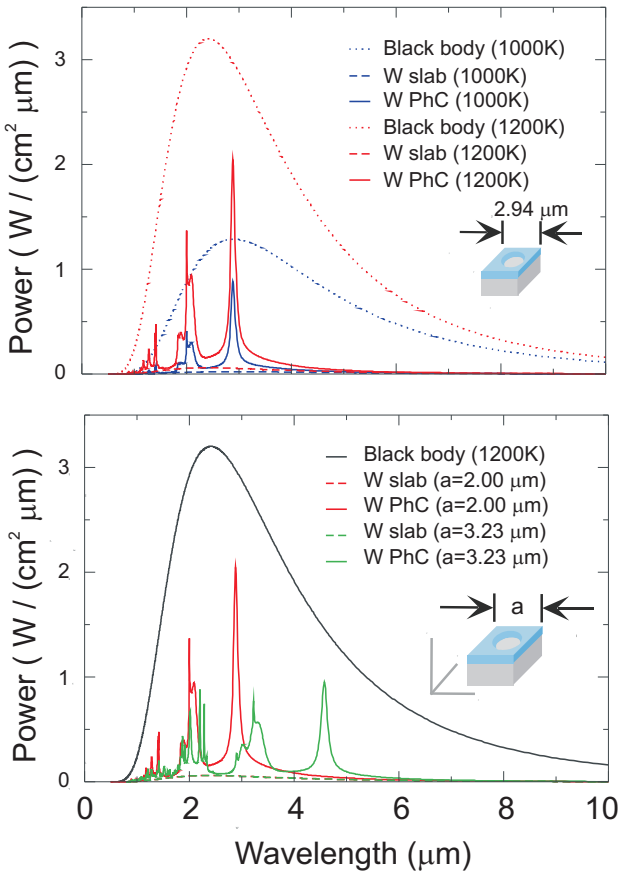

Рис. 3.5. Излучение структуры, состоящей из вольфрамовой пластинки и помещенной на нее диэлектрической пластинки с проделанными круглыми отверстиями. Тощина вольфрамовой пластинки a, толщина диэлектрической ($\varepsilon = 5$) пластинки $0.2a$, радиус отверстия $0.4a$. Сверху: излучение при двух различных температурах. $a = 2$ мкм. Снизу: излучение при температуре $T = 1200K$, a варьируется. На обоих графиках для сравнения приведено излучение вольфрамовой пластинки и абсолютно черного тела.

показано, что для таких ФК излучение в среднем ИК диапазоне сильно подавлено из-за наличия в спектре ФК полной фотонной щели.

Рассмотрим в качестве примера работу [73]. Исследуемая структура изображена на Рис 3.6. Расстояние между стержнями равно $a = 4.2$ мкм, ширина стержней $w = 1.2$ мкм, а их высота и, соответственно, толщина слоя $h \sim 1.5$ мкм. В работе численно исследуются три фактора, влияющие на поглощение ФК: период ФК, количество слоев и оптические свойства составляющего ФК материала. Полученные выводы можно применять к излучению ФК, поскольку оно непосредственно связана с поглощением по закону Кирхгофа.

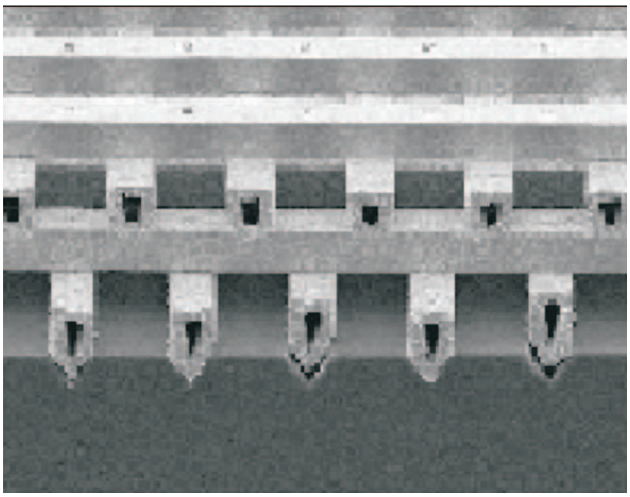

Рис. 3.6. Электронный снимок структуры, иследуемой в работе [73].

Зависимость поглощения от периода ФК обусловлена тем, что период определяет положение края зоны, которому соответствует максимальная плотность фотонных состояний и, следовательно, величина поглощения. Увеличение периода приводит к увеличению длины волны, соответствующей краю фотонной зоны, что иллюстрируется результатами численных расчетов на Рис. 3.7, где представлена зависимость отражения и поглощения ФК от длины волны для трех различных значений h: 1.5, 2.0 и 2.4 мкм.

Значению $h = 1.5$ мкм соответствует разрешенная фотонная зона на 5.8 мкм. На этой длине волны наблюдается пик поглощения 18%. Второй пик поглощения на 4.5 мкм определяется положением следующей разрешенной зоны. Между этими двумя пиками расположена вторая запрещенная зона.

Для $h = 2$ мкм первый и второй пики сдвигаются вправо (6.6 мкм и 5 мкм и соответственно). При этом первый пик сужается ($\Delta\lambda = 0.25$ мкм), а его амплитуда увеличивается и равна 37%. Вторая запрещенная зона, расположенная в районе $\lambda = 0.6$ мкм, выражена более ярко по сравнению со случаем $h = 1.5$ мкм.

При дальнейшем увеличении высоты $h = 2.4$ мкм первый пик сдвигается вправо еще дальше ($\lambda \sim 7.4$ мкм), возрастает (амплитуда равна 48%) и сужается ($\Delta\lambda \sim 0.13$ мкм). Соответствующая ему разрешенная зо-

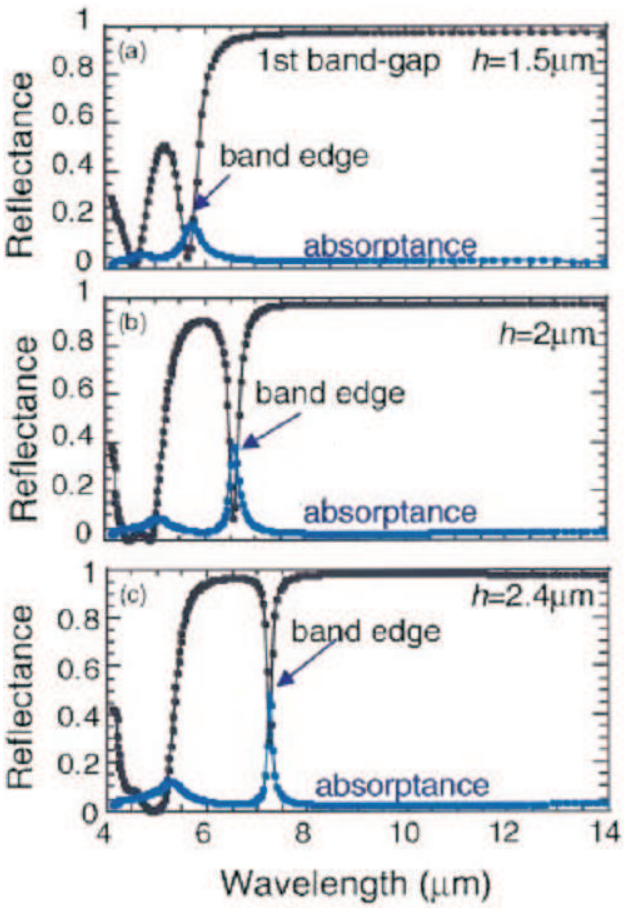

Рис. 3.7. Численно полученное отражение и поглощение для образцов на Рис. 3.6 с высотой стержня h: 1.5, 2.0 и 2.4 мкм. Расстояние между стержнями $a = 4.2$ мкм, ширина стержней $w = 1.2$ мкм.

на оказывается зажатой между первой и второй запрещенными зонами, что ведет к пологой дисперсионной зависимости волнового вектора от частоты и уменьшению групповой скорости света. Это в свою очередь приводит к увеличению времени взаимодействия света с поглощающим материалом и соответственно к увеличению поглощения.

Рассмотрим теперь зависимость величины пика поглощения от количества слоев N в ФК. Как видно из Рис. 3.8 слева, увеличение числа слоев приводит к росту пика поглощения. Для $N = 4$ его величина равна 18%. При увеличении N она возрастает и достигает 60% для $N > 12$. Величина пика никогда не достигает 100% по причине наличия конечного отражения от структуры. Зависимость величины пика от количества слоев имеет экспоненциальный характер, как будто бы ФК пластинка являлась

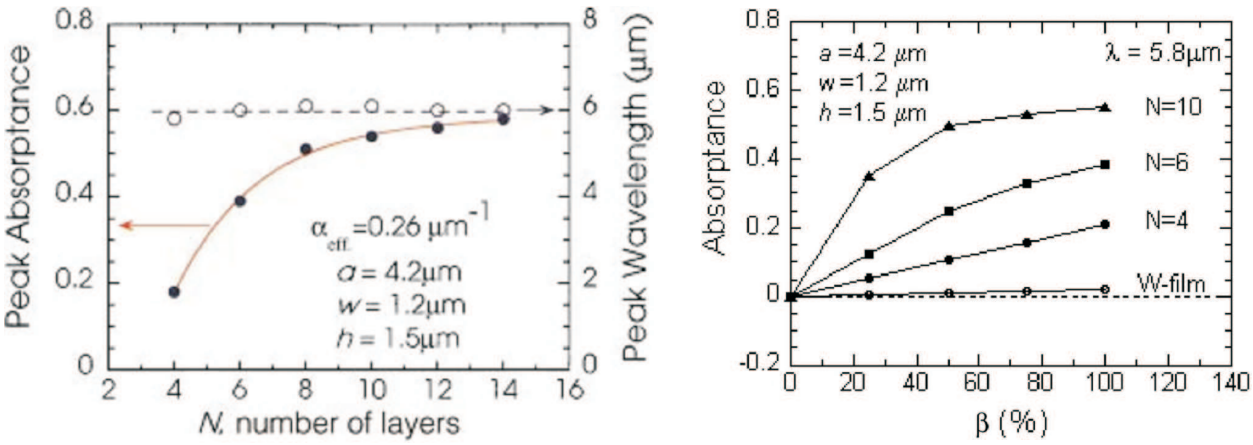

Рис. 3.8. Слева: численно полученные амплитуда и положение пика поглощения в зависимости от числа слоев N для образца на Рис. 3.6. Высота стержней $h = 1.5$ мкм. Приведена аппроксимация амплитуды пика экспоненциальной зависимостью $A(\lambda \sim 5.8 \text{ мкм}) = B_0 - B_1 \exp(-\alpha_{eff} H)$, где $H = Nh$. Справа: зависимость амплитуды пика поглощения от параметра β. Мнимая часть диэлектрической функции вольфрама полагается равной $\beta \mathrm{Im}(\varepsilon(\omega))$. Для обоих графиков расстояние между стержнями равно $a = 4.2$ мкм, ширина стержней $w = 1.2$ мкм, а их высота $h = 1.5$ мкм.

материалом с заданным коэффициентом затухания. Для иллюстрации этого на рис. 3.8 слева приведена аппроксимация измеренных данных экспоненциальной зависимостью $A(\lambda \sim 5.8 \text{ мкм}) = B_0 - B_1 \exp(-\alpha_{eff} H)$, где $H = Nh$. Отметим, что длина волны, на которой отмечается пик, практически не зависит от числа слоев N и равна $\lambda \sim 5.8$ мкм.

Величина пика поглощения также связана с присущим вольфраму поглощением. Для обоснования этого факта была выполнена серия расчетов с использованием мнимой части диэлектрической проницаемости вольфрама $\beta \mathrm{Im}(\varepsilon(\omega))$, где β изменяется от 0% до 100%, что соответствует отсутствию поглощения и действительно присущей вольфраму мнимой части $\mathrm{Im}(\varepsilon(\omega))$. На Рис. 3.8 справа представлена зависимость амплитуды пика от величины β. Для однородной пластинки величина пика при увеличении β линейно возрастает от 0 до 1.4%. Для $N = 4$ величина пика уже достигает 18%. Для $N = 6$ поглощение растет линейно вплоть до $\beta < 75\%$, а далее рост замедляется. Для $N = 10$ поглощение вначале быстро растет при $\beta < 50\%$, а дальше практически останавливается. Таким образом, величина пика по-

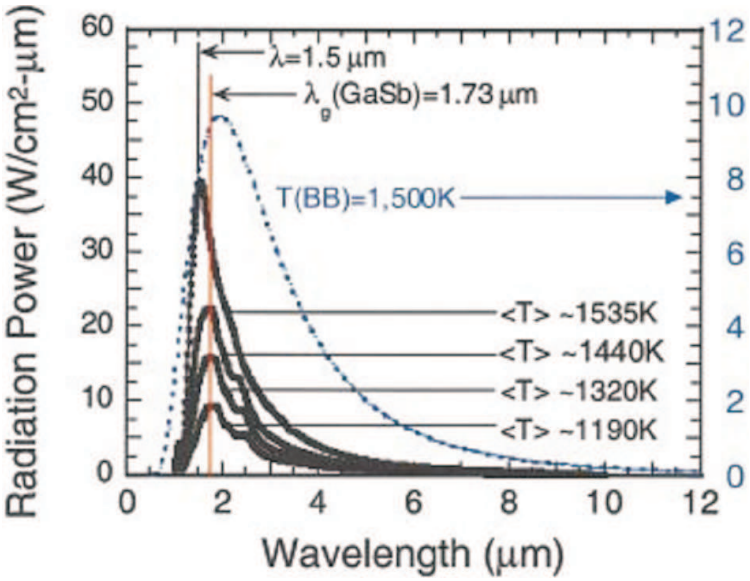

Рис. 3.9. Измеренное излучение для ФК образца типа „поленница“ из работы [67] при разных температурах.

глощения возрастает при увеличении параметра β, однако характер этого роста зависит от числа слоев N в ФК.

Рассмотрим теперь работу [67], в которой численно исследуется зависимость излучения от температуры на примере восьмислойного ФК образца типа „поленница“. Геометрия ФК та же, что и в предыдущей работе, расстояние между стержнями $a = 1.5$ мкм, ширина стержней $w = 0.5$ мкм, а высота $h \sim 0.75$ мкм. Результаты работы представлены на Рис. 3.9. В диапазоне $\lambda > 3$ мкм имеется полная фотонная щель, что объясняет низкую излучательную способность в этой области. При $T = 1190K$ имеются слабый пик поглощения на длине волны 2.8 мкм и более выраженный пик на длине волны 1.8. При увеличении температуры последний пик доминирует и сдвигается на длину волны 1.5 мкм. Таким образом, увеличение температуры приводит к увеличению амплитуды пика поглощения, что обусловлено смещением спектральной плотности мощности излучения абсолютно черного тела в коротковолновую область.

Подведем итоги литературного обзора. В имеющихся работах исследован характер влияния геометрических параметров ФК на спектр его из-

лучения. Рассматривались ФК разных геометрий: одномерные ФК, двумерные массивы рассеивателей и микрополостей, а также трехмерные ФК типа „поленница“. Показано, что на интенсивность излучения ФК влияют величина периода, количество слоев, оптические свойства используемого материала.

В то время как основная часть результатов получена для излучения ФК в ИК диапазоне, число работ для видимого диапазона довольно ограничено. Отметим также, что не было проведено какого-либо исследования практической возможности использования ФК в качестве источников видимого излучения. В частности, не было изучено влияние неизбежных при изготовлении ФК дефектов, а также роли внешней матрицы, необходимой для фиксации ФК элементов. Этому исследованию будут посвящены следующие параграфы.

3.2. Оптимизация излучательных характеристик металлических фотонных кристаллов в видимом диапазоне

В этом параграфе приводятся результаты проведенного нами численного исследования возможности использования ФК в качестве источников видимого излучения. Нашей целью является нахождение таких параметров ФК, для которого КПД$_{PC}$ был бы по крайней мере в несколько раз больше КПД$_{bulk}$ лампы накаливания (см. (3.8)).

В качестве материала ФК мы используем вольфрам (данные для диэлектрической проницаемости вольфрама при разных температурах взяты нами из работы [75]). Высокая селективность излучения вольфрама в видимом диапазоне выгодно отличает его от других металлов [76] и вместе с высокой температурой плавления ($3695K$) делает его наилучшим материалом для применения в качестве источника видимого излучения.

Отметим, что толщина вольфрамовой нити (~ 0.2мм), применяемой в лампах накаливания, существенно больше характерных длин волн, на которых происходит излучение. Поэтому для наших расчетов можно при-

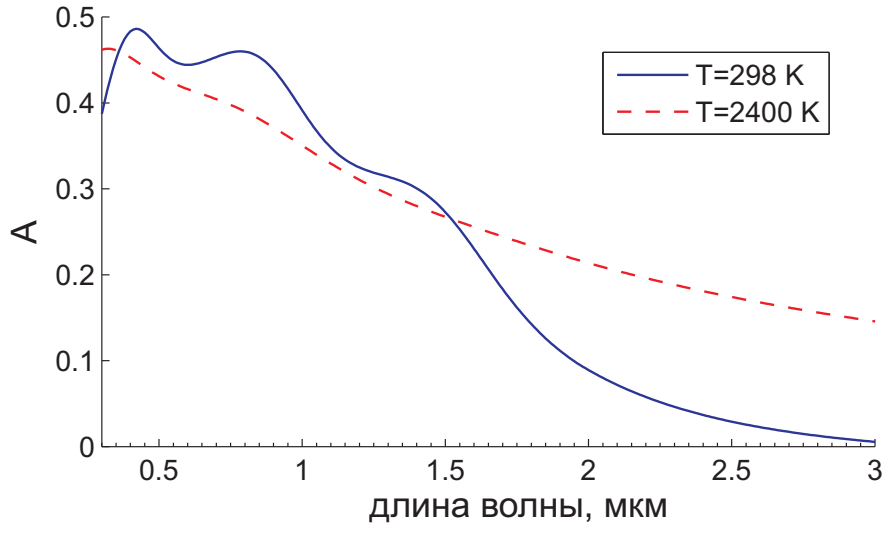

Рис. 3.10. Поглощение вольфрама при нормальном падении для температур $T = 298K$ и $T = 2400K$.

ближенно считать ее полубесконечным вольфрамовым слоем. Для такого слоя мы получили при $T = 2400K$, что КПД$_{bulk} = 1.6\%$, а световой поток, излучаемый через единичную площадку, $F_{bulk} = 3.7 \cdot 10^6$лм/м^2. Для того, чтобы ФК с искомыми оптимальными параметрами излучал достаточную энергию в видимом диапазоне, значение F_{PC} для него должно быть не менее, чем F_{bulk}.

Для расчета излучательной способности ФК мы будем пользоваться способом, предполагающим расчет поглощательной способности ФК и последующее применение закона Кирхгофа (см. параграф 3.1). При этом от нас потребуется рассчитывать поглощение ФК для различных углов падения с последующим интегрированием по ним. Отметим также, что поскольку при изготовлении ФК неизбежны производственные дефекты, нам необходимо иметь возможность учитывать их влияние. Это привело нас к выводу о том, что для численного исследования поставленной задачи наиболее подходит метод решения уравнений Максвелла в конечных разностях (FDTD), изложенный в параграфе 1.1. Это связано с тем, что присущая методу FDTD высокая параллельная эффективность позволяет использовать его для расчета больших трехмерных задач, в частности, моделировать наличие дефектов в реальных ФК образцах.

Для расчетов FDTD нами был реализован параллельный программный комплекс, организованный на основе библиотеке EMTL, принципы которой изложены в главе 2. Для моделирования оптических свойств ФК в случае наклонного падения был разработан специальный итерационный алгоритм, описанный в параграфе 1.3. Для наиболее точного учета формы рассеивателей, составляющих ФК, был реализован метод подсеточного сглаживания, изложенный в параграфе 1.2. Работа над программой велась при поддержке компании General Electric.

Для того, чтобы верифицировать используемую программу, в компании General Electric был проведен специальный эксперимент. Экспериментальный образец представлял собой вольфрамовый ФК монослой с периодом треугольной решетки $a = 0.55$ мкм. Поперечный размер рассеивающих элементов равнялся 0.2 мкм. Эксперимент проводился при комнатной температуре.

На Рис. 3.11 приведено сравнение спектра поглощения экспериментального образца ФК с численно полученным спектром для идеального вольфрамового ФК монослоя с $a = 0.55$мкм, $R = 0.1$мкм. Из представленного графика видно, что предсказанный при моделировании пик поглощения наблюдается экспериментально, и результаты качественно согласуются с экспериментом. Меньшая интенсивность пика в эксперименте связана с тем, что реальные образцы вольфрамового ФК имеют несколько существенных отличий от идеального опала: рассеивающие элементы имеют форму, напоминающую шаровые сегменты; имеется их дисперсия по размерам; кристаллическая решетка не является идеально упорядоченной. Все описанные особенности влияют на спектр поглощения ФК и требуют дополнительного учета при моделировании.

Форма рассеивающих элементов была учтена нами в явном виде. Далее мы опишем схему, используемую нами для моделирования неупорядоченности ФК.

Рассмотрим некоторый достаточно большой участок монослоя ФК (с

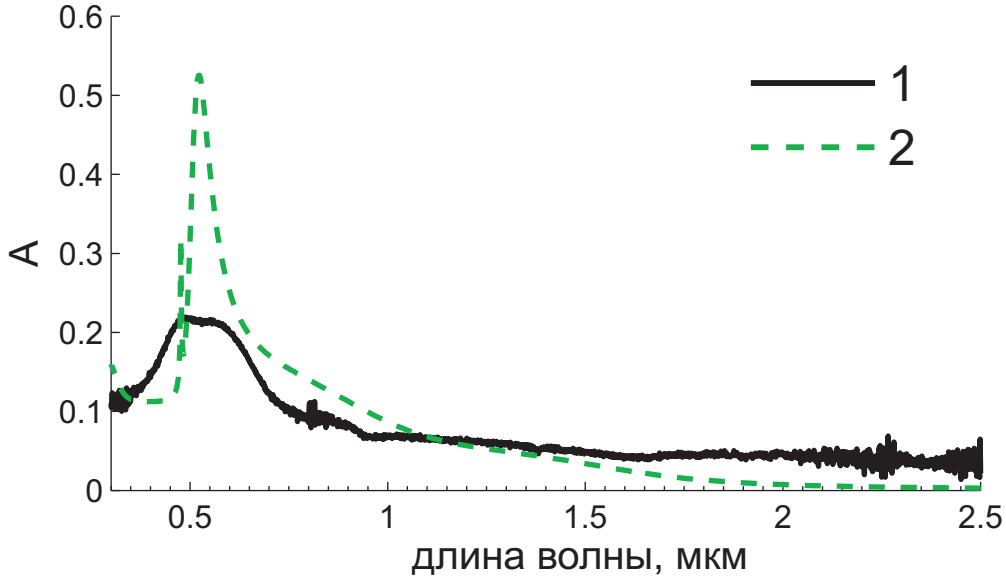

Рис. 3.11. Поглощение вольфрамового ФК при нормальном падении при комнатной температуре ($T = 298K$). Параметры ФК: $a = 0.55$мкм, $R = 0.1$мкм. 1 - экспериментальные данные; 2 - результаты численного расчета

поперечным размером в плоскости XY много большим константы решетки). Введем случайные смещения каждого элемента ФК относительно узла решетки:

$$\rho = \rho_{max}\eta, \quad \phi = 2\pi\eta, \tag{3.9}$$

где ρ - абсолютная величина смещения элемента ФК относительно узла решетки в монослое (в плоскости XY), ϕ - угол, задающий направление смещения, ρ_{max} - максимальное смещение элемента, а η - случайная величина в интервале [0,1]. Также введем случайные отклонения объема каждого элемента V от среднего значения V_0:

$$V = V_0 + \Delta V_{max}(2\eta - 1), \tag{3.10}$$

где ΔV_{max} - максимальное изменение объема элемента. Поместим полученную структуру в вычислительную ячейку и наложим по направлениям XY периодические граничные условия.

Заданная таким способом структура, являясь на малых ($\sim a$) масштабах случайно-неоднородной, на больших масштабах ($\gg a$) становится однородной, что приводит к самоусреднению ее свойств [77]. Поэтому достаточно провести всего лишь один численный эксперимент с заданными

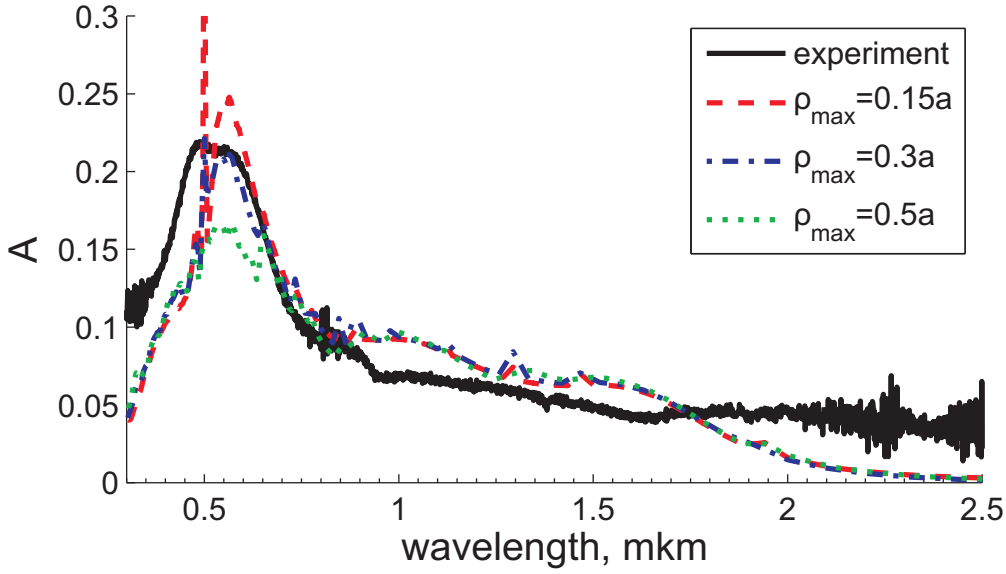

Рис. 3.12. Поглощение вольфрамового ФК монослоя при нормальном падении при комнатной температуре ($T = 298K$). Параметры ФК: $a = 0.55$мкм, радиус шаровых сегментов 0.1 мкм. Сравнение результатов эксперимента с результатами расчета с учетом разброса элементов по размерам и неупорядоченности решетки ФК при разных значениях величины максимального смещения элемента ФК относительно узла решетки ρ_{max} (см. текст).

параметрами ρ_{max} и ΔV_{max}, чтобы получить хорошее согласие со спектром поглощения неидеального ФК. Поскольку период рассматриваемого нами ФК равен $a = 0.55$ мкм, искусственная периодичность создает помехи в спектре только на длинах волн порядка нескольких микрон, в то время как в интересующем нас диапазоне длин волн (видимый и ближний ИК) спектр не искажается.

Сравнение результатов моделирования спектра неупорядоченного ФК с экспериментальными данными приведено на Рис. 3.12. Перечислим использованные в расчете параметры. Поперечный размер вычислительного объема (в плоскости XY) - 8x8 элементарные ячейки. Как показали дополнительные численные исследования, при увеличении этого размера результаты практически не меняются. Высота шаровых сегментов в расчете считалась постоянной, и случайному изменению подвергался только радиус основания, при этом максимальное изменение объема равнялось $\Delta V_{max} = 0.5V_0$. Значение величины максимального смещения элемента $\rho_{max} = 0.3a$ позволило нам добиться хорошего согласия наблюдаемой и

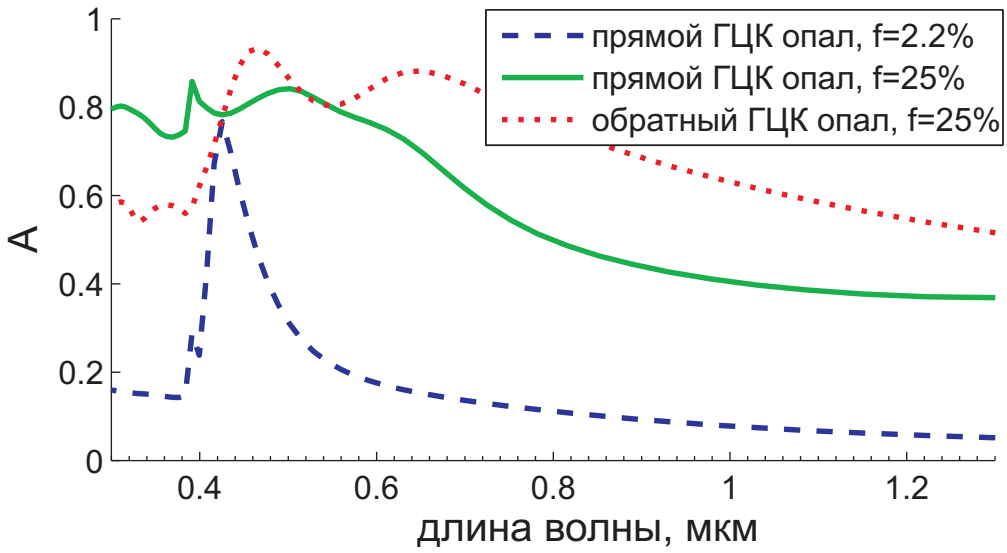

Рис. 3.13. Поглощение прямого и обратного гранецентрированного кубического (ГЦК) опала при нормальном падении для различных значений фактора заполнения f. Период решетки $a = 0.45$ мкм, число слоев $N = 2$, $T = 2400K$. Внешней средой для ФК является вакуум.

расчетной амплитуды пика поглощения в видимом спектре. Отметим, что амплитуда пика поглощения непосредственно зависит от величины ρ_{max}, отвечающей за неупорядоченность ФК: увеличение ρ_{max} приводит к уменьшению пика (Рис. 3.12). При этом ИК-часть спектра поглощения определяется только размером элементов. Последний факт связан с тем, что в ИК диапазоне длина волны существенно больше константы решетки, и поэтому электромагнитное излучение взаимодействует с ФК, как с эффективной средой.

Количественное согласие результатов, полученных нами с помощью FDTD, с результатами эксперимента дает обоснование для применения FDTD к расчету излучательной способности ФК при высоких температурах.

Перейдем к результатам численных расчетов для температуры $T = 2400K$, являющейся характерной рабочей температурой вольфрамовой нити в лампах накаливания.

Мы рассматриваем ФК типа гранецентрированного кубического (ГЦК) прямого опала. Такой выбор обусловлен двумя причинами. Во-

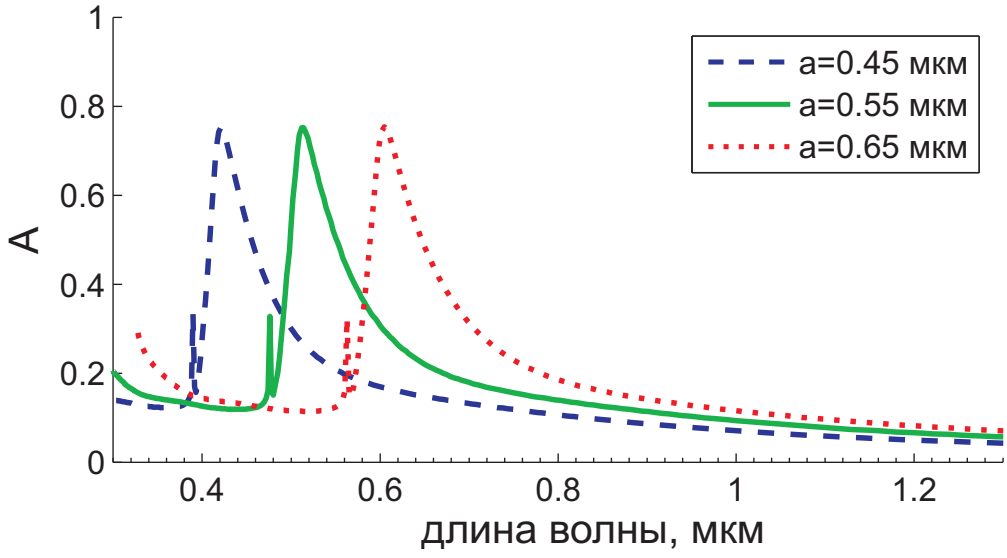

Рис. 3.14. Поглощение ФК при нормальном падении для различных значений периода решетки a при $R = 0.07/0.45a$ и $N = 2$, $T = 2400K$.

первых, прямой опал в отличие от альтернативных геометрий ФК (обратные опалы или ФК типа „поленница“) обладает наилучшей термической устойчивостью при высоких температурах. Во-вторых, прямые опалы позволяют достигать малых значений фактора заполнения металлом. При этом, как показано ниже, именно при малых значениях фактора заполнения металлом достигается больший КПД светового источника. Рассмотрим в качестве иллюстрации Рис. 3.13, на котором представлено сравнение зависимости поглощения от длины волны для ФК типа прямого ГЦК опала со значениями фактора заполнения 2.2% и 25% и обратного ГЦК опала со значением фактора заполнения 25%. Мы видим, что в случае прямого опала с фактором заполнения 2.2% на длине волны 0.5 мкм присутствует ярко выраженный пик поглощения, амплитуда которого в несколько раз выше величины поглощения в ИК области. В это же время для прямого и обратного опалов с фактором заполнения 25% указанный пик сильно размыт, а его амплитуда в 1.5 раза выше величины поглощения в ИК области. Для обратных опалов фактор заполнения металлом не может быть менее 25% (иначе бы перегородки между полостями исчезли), что вместе с их термической неустойчивостью является причиной неперспективности их применения в качестве источников света.

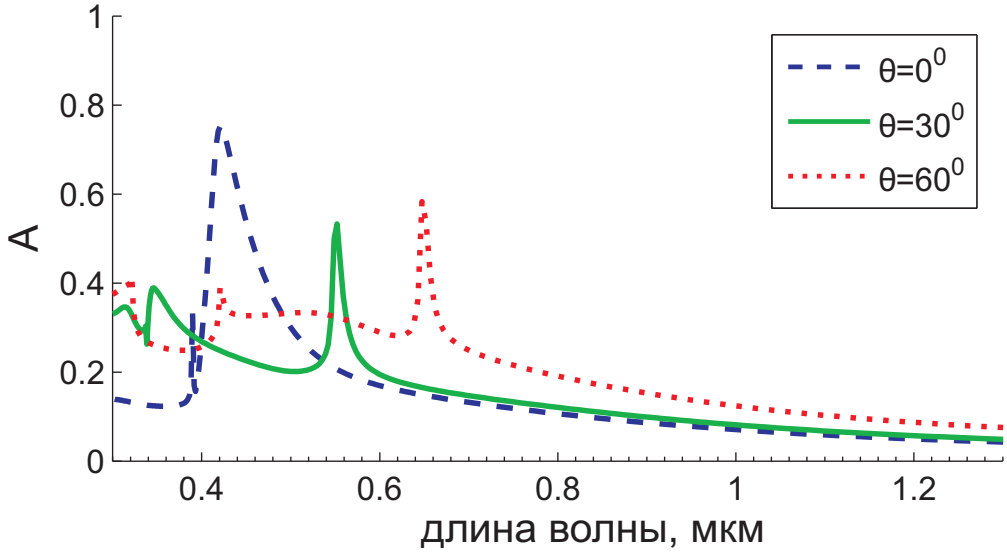

Рис. 3.15. Поглощение ФК при различных углах падения θ s-поляризованной волны при $a = 0.45$ мкм, $R = 0.07$ мкм и $N = 2$, $T = 2400K$. Плоскость падения образована нормалью к слою и направлением трансляции двумерной решетки.

Рассмотрим теперь идеальный случай прямого опала, когда вольфрамовые шарики помещены в вакуум. Мы будем исследовать зависимость поглощательной способности ФК от его геометрических параметров. Как уже говорилось ранее, полученные выводы можно применять к излучательной способности ФК, поскольку она непосредственно связана с поглощательной способностью по закону Кирхгофа.

На Рис. 3.14 представлена зависимость поглощательной способности двухслойного ФК от длины волны падающего света λ для различных значений периода решетки a при сохранении величины отношения R/a постоянной. Мы видим, что в спектре поглощения ФК присутствует ярко выраженный пик. Природа этого пика связана с резонансным поглощением электромагнитного излучения в слоях ФК, каждый из которых представляет собой двумерную треугольную решетку. При нормальном падении резонансное поглощение возникает в том случае, когда величина $2\pi/\lambda$ приближается к величине вектора обратной решетки. На таких критических длинах волн появляются новые направления, в которых происходит рассеяние падающей волны. Рассматриваемый нами пик поглощения связан с наименьшим вектором обратной треугольной решетки, величина кото-

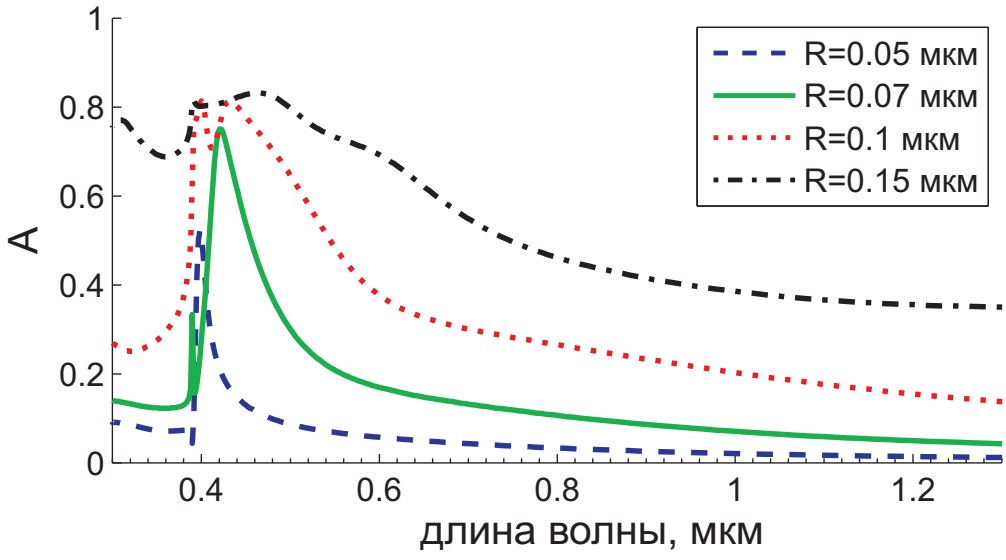

Рис. 3.16. Поглощение ФК при нормальном падении для различных значений радиуса шариков R при $a = 0.45$ мкм и $N = 2$, $T = 2400K$.

рого равна $4\pi/\sqrt{3}a$. Это соответствует длине волны $\lambda = a\sqrt{3}/2$, которая определяет левый край пика.

Как видно из Рис. 3.14, полученные результаты в видимом диапазоне хорошо масштабируются при различных значениях a и при постоянном отношении R/a, что, на наш взгляд, связано со слабой зависимостью мнимой части диэлектрической проницаемости вольфрама в видимом диапазоне от длины волны. Таким образом, изменяя величину a, можно добиться того, чтобы пик в спектре поглощения попадал в видимый диапазон.

Перейдем теперь к рассмотрению поглощательной способности ФК при разных углах падения (Рис. 3.15). Мы видим, что при увеличении угла падения рассматриваемый пик перемещается в сторону ИК области. Это связано с уменьшением критической частоты, на которой свет начинает проходить и отражаться в дополнительных направлениях, отличных от направлений прямого прохождения и зеркального отражения.

Рассмотрим теперь, как влияет на характер пика радиус шариков R и число слоев N в ФК. Результаты соответствующих расчетов приведены на Рис. 3.16, 3.17. Из полученных графиков следует, что увеличение R и N приводит к увеличению амплитуды пика. Мы связываем это с увеличением доли вольфрама в ФК. С одной стороны, это приводит к росту излучаемой

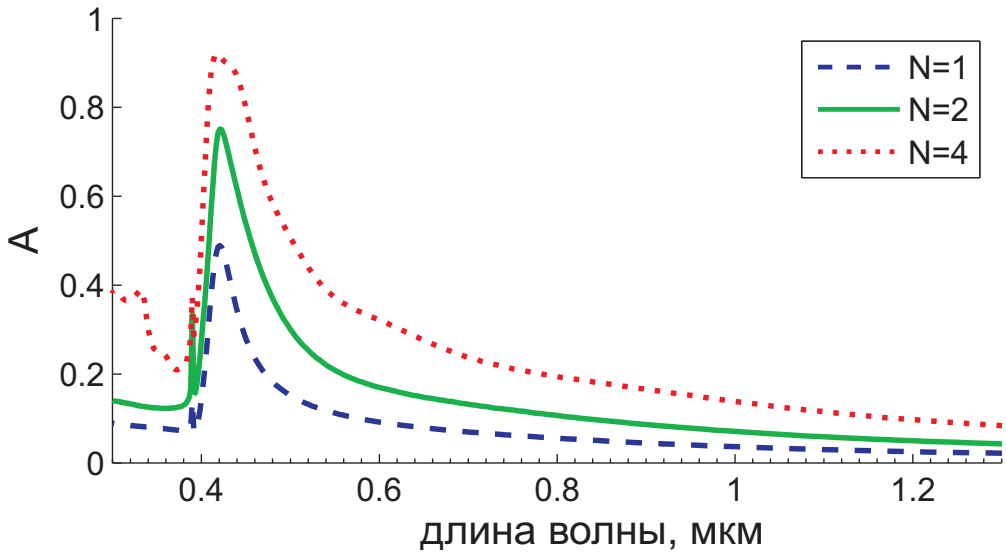

Рис. 3.17. Поглощение ФК при нормальном падении для различных значений числа слоев N при $a = 0.45$ мкм и $R = 0.07$ мкм, $T = 2400K$.

энергии в видимом диапазоне, с другой стороны, при этом падает КПД.

Нами были проведены дополнительные расчеты для различных значений периода 0.3мкм $\leq a \leq$ 0.7мкм, радиуса шариков 0.02мкм $\leq R \leq$ 0.2мкм и числа слоев $1 \leq N \leq 4$. Нашей целью было нахождение таких параметров, при которых достигается максимальный КПД$_{PC}$ при сохранении величины светового потока, излучаемого через единичную площадку, F_{PC} не меньшим аналогичной величины для полубесконечного вольфрамового слоя F_{bulk}. Для расчета светового потока излучения мы производили несколько численных экспериментов FDTD для разных углов падения $0^0 \leq \theta < 90^0$, $0^0 \leq \phi < 360^0$ с последующим интегрированием по ним (см. (3.7)). Наши расчеты показали, что искомыми параметрами ФК являются $a = 0.45$ мкм, $R = 0.07$ мкм и $N = 2$ (фактор заполнения вольфрамом в этом случае примерно равен 2.2%). При этих значениях достигается КПД$_{PC} \approx 4.7\%$, а $F_{PC} \sim 3.8 \cdot 10^6$лм/м^2. При этом при нормальном падении пик поглощения находится в районе 0.42 мкм, а при падении под углом 60^0 - в районе 0.65 мкм (Рис. 3.15). Отметим, что, как уже говорилось ранее, КПД полубесконечного вольфрамового слоя равен КПД$_{bulk} = 1.6\%$, а световой поток, излучаемый через единичную площадку, $F_{bulk} = 3.7 \cdot 10^6$лм/м^2. Таким образом, применение ФК слоя может позволить увеличить КПД

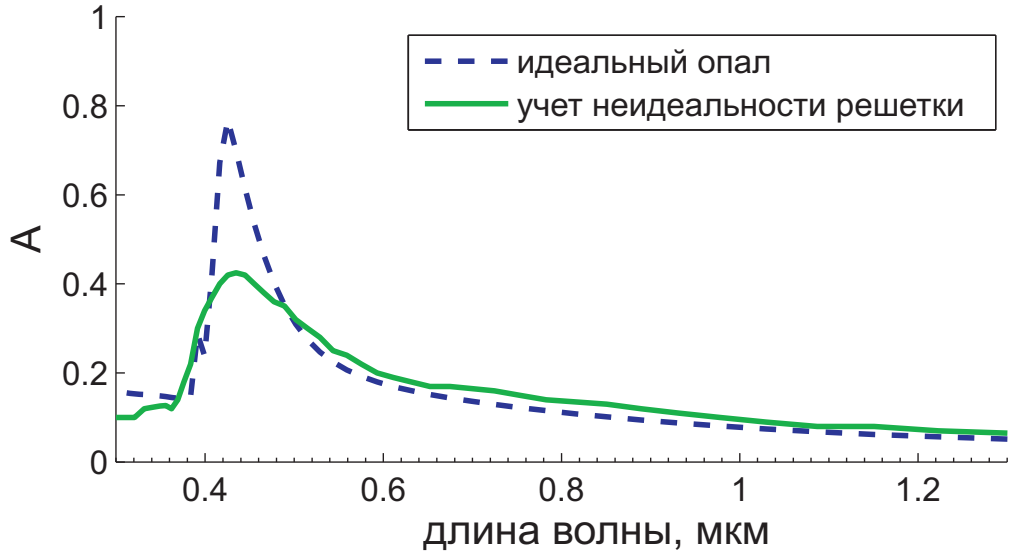

Рис. 3.18. Поглощение при нормальном падении идеального и неидеального ФК (учет неидеальности происходит согласно схеме, описанной в тексте). $a = 0.45$ мкм, $R = 0.07$ мкм и $N = 2$, $T = 2400K$.

примерно в 3 раза.

Реальные ФК образцы характеризуются наличием неупорядоченности расположения рассеивателей в ФК и их дисперсией по размерам, влияние которых необходимо учитывать. Для их моделирования мы использовали схему, применявшуюся нами ранее при численном сравнении с результатами эксперимента General Electric. В качестве значений параметров, отвечающих за неупорядоченность, мы взяли те параметры, при которых достигалось количественное согласие с экспериментом General Electric. Как показали результаты (см. Рис. 3.18), наличие неупорядоченности приводит к уменьшению пика поглощения для неидеального образца и соответственно к уменьшению доли излучаемой энергии в видимом диапазоне. Однако, это не устраняет саму возможность использования ФК в качестве источников видимого излучения, поскольку эффект подавления излучения в ИК диапазоне вместе с появлением фотонного пика излучения в видимом диапазоне сохраняется.

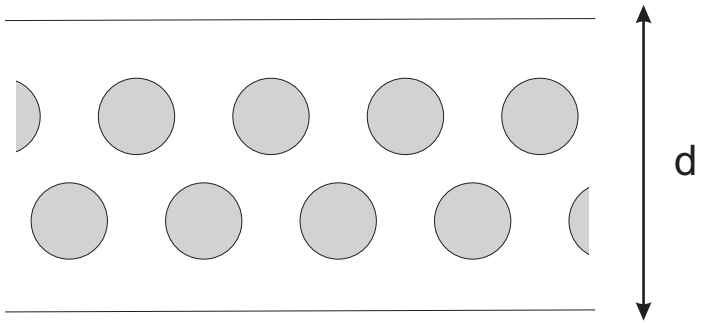

Рис. 3.19. Двуслойный ФК погруженный в плоскопараллельную матрицу толщины d.

3.3. Учет внешней матрицы, необходимой для фиксации фотонного кристалла

При изготовлении ФК образца должна использоваться внешняя матрица, фиксирующая ФК элементы. Известно лишь небольшое количество материалов, которые были бы устойчивы к высоким температурам и которые можно использовать в качестве такой матрицы (в их числе: HfO_2, ZrO_2 стабилизированный Y_2O_3). Однако, при нагревании эти материалы начинают поглощать, а, следовательно, и излучать в ИК диапазоне, что может привести к существенному снижению КПД. Ниже мы исследуем этот вопрос на примере HfO_2. Внешнюю матрицу мы будем моделировать плоскопараллельным слоем толщины d, в которую погружен ФК (см. Рис. 3.19).

Будем вначале считать, что поглощение отсутствует, и рассматривать диэлектрическую проницаемость HfO_2 при комнатной температуре ($\varepsilon = 4.41$). Для того, чтобы исключить осцилляции Фабри-Перо на спектральной кривой поглощения, вызванные конечной толщиной d плоскопараллельной матрицы, мы предварительно рассмотрели ФК, находящийся в бесконечной внешней среде из HfO_2. Изменение диэлектрической проницаемости внешней среды от 1 до ε приводит к тому, что спектральные кривые для поглощения, полученные нами для ФК в вакууме, должны масштабироваться на величину $\sqrt{\varepsilon}$ (см. синюю пунктирную и зеленую сплошную кривые на Рис. 3.20). Это связано с уменьшением длины волны во внешней среде в $\sqrt{\varepsilon}$ раз. Из сказанного следует, что для оптимальных параметров ФК естественно взять такие параметры ($a = 0.214$ мкм, $R = 0.033$ мкм),

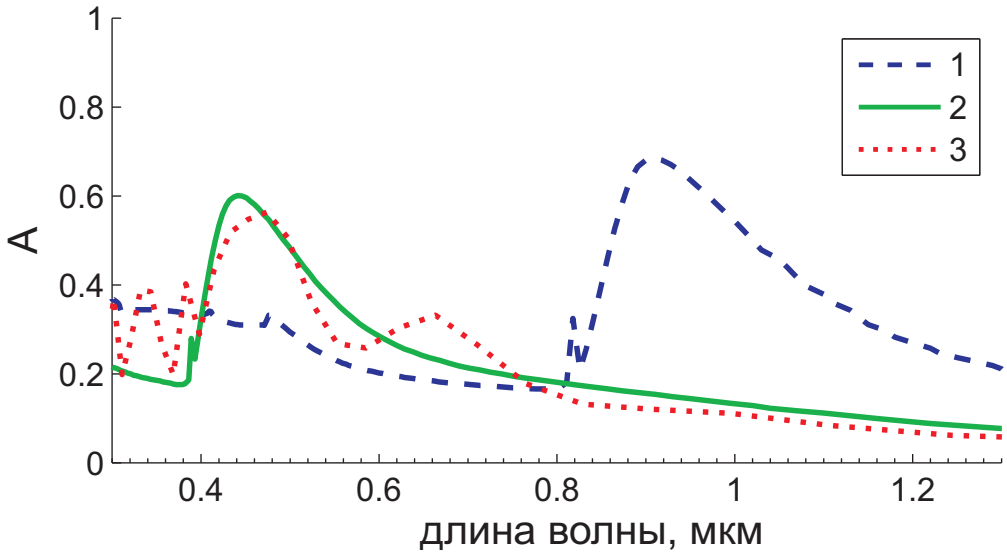

Рис. 3.20. Поглощение ФК при нормальном падении ($T = 2400K$) при $N = 2$. 1 - ФК погружен в HfO_2 при комнатной температуре, $a = 0.45$ мкм и $R = 0.07$ мкм; 2 - то же самое, $a = 0.214$ мкм и $R = 0.033$ мкм; 3 - учитывается конечная толщина матрицы HfO_2, $d = 2R + (1 + 1/\sqrt{3})a$.

которые были бы примерно в $\sqrt{\varepsilon}$ раз меньше параметров, найденных для ФК в вакууме (Рис. 3.20).

Конечность толщины d плоскопараллельной матрицы, в которую помещен ФК, приводит к появлению дополнительных осцилляций Фабри-Перо, вызванных интерференцией волн, многократно отраженных от границ между матрицей и вакуумом. Однако, на характер кривой поглощения и местоположение основного пика это никак не влияет. Это видно на Рис. 3.20 при сравнении результатов для ФК в бесконечной внешней среде (зеленая сплошная кривая) и в матрице конечной толщины $d = 2R + (1 + 1/\sqrt{3})a$ (красная точечная кривая).

При высоких температурах HfO_2 становится проводящим материалом. Диэлектрическую проницаемость HfO_2 при $T = 2400K$ с хорошей точностью можно аппроксимировать с помощью формулы Лоренца

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\Delta\varepsilon\omega_0^2}{\omega_0^2 - 2i\omega\gamma - \omega^2}, \tag{3.11}$$

где $\Delta\varepsilon = 3$, $\omega_0 = 1.2{\cdot}10^{16}$ рад/сек, $\gamma = 1.0{\cdot}10^{16}$ рад/сек. Конкретные значения используемых параметров взяты нами из результатов экспериментов,

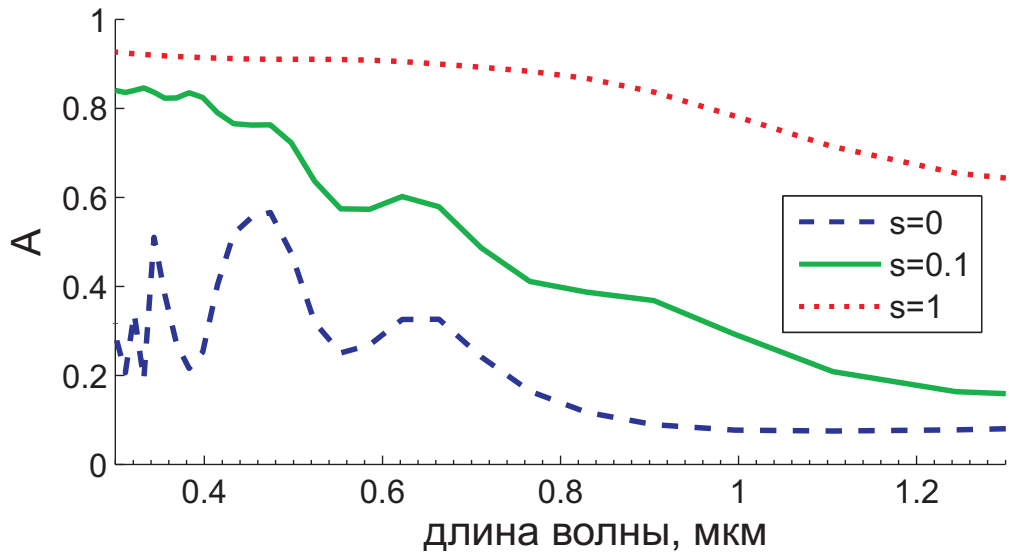

Рис. 3.21. Поглощение ФК при нормальном падении ($T = 2400K$) при $a = 0.214$ мкм, $R = 0.033$ мкм, $N = 2$, $d = 2R + (1 + 1/\sqrt{3})a$. Рассматриваются различные значения коэффициента затухания в формуле Лоренца для поглощающего HfO_2 (см. текст).

проведенных в компании General Electric.

Для того, чтобы последовательно учесть влияние поглощения в матрице, мы полагаем $\gamma = s \cdot 10^{16}$ рад/сек, и постепенно меняем параметр s от нуля до единицы (0 соответствует отсутствию поглощения, а 1 соответствует действительной диэлектрической проницаемости HfO_2). Как видно из Рис. 3.21, при малых значениях s спектр поглощения в основном определяется вольфрамовыми шариками. При увеличении s существование матрицы HfO_2 вносит значительный вклад в поглощение в ИК диапазоне, что приводит к существенному падению КПД. Так, при погружении ФК с найденными нами ранее оптимальными параметрами в матрицу толщины $d = 2R + (1 + 1/\sqrt{3})a$ КПД снижается до 1.7%.

Таким образом, при росте температуры увеличение поглощения у имеющихся термически устойчивых к высоким температурам материалов приводит к полному замыванию эффекта ФК у исследованных нами образцов. Отсюда следует, что для создания высокоэффективных источников света на основе ФК необходимо нахождение материалов со слабым поглощением при высоких температурах.

3.4. Выводы

Найдены геометрические параметры вольфрамового фотонного кристалла типа прямого опала (период решетки порядка нескольких сотен нм, фактор заполнения по вольфраму порядка нескольких процентов), погруженного в керамическую матрицу, при которых в случае отсутствия поглощения в матрице КПД источника света на основе фотонного кристалла оказывается выше в несколько раз по сравнению с обычными лампами накаливания. Показано, что у рассмотренных составляющих матрицу термоустойчивых материалов (оксид гафния) сильное поглощение при высоких температурах приводит к существенному снижению эффективности светового источника на основе фотонного кристалла, вплоть до значения КПД лампы накаливания. Сделан вывод о том, что для создания высокоэффективного источника света на основе фотонного кристалла необходим поиск материалов со слабым поглощением при высоких температурах.

Показано, что наличие дефектов в фотонных кристаллах (неупорядоченности по расположению и разброса по размерам составляющих фотонный кристалл элементов) приводит к уменьшению величины излучения в видимом диапазоне при сохранении подавления излучения в инфракрасном диапазоне. Получено количественное согласие результатов расчетов с результатами специально поставленного эксперимента. Это дает обоснование для применения использованного в расчетах метода FDTD для моделирования источников света на основе фотонных кристаллов.

4. Антиотражающие текстурированные покрытия

4.1. Обзор литературы

Во многих практических приложениях возникает необходимость уменьшения коэффициента отражения от границы между двумя средами. Перечислим некоторые из них:

- В солнечной энергетике уменьшение отражения от фотоэлемента позволяет существенно увеличить его КПД.
- В биноклях, телескопах, фотографических приборах и т. д. уменьшение отражения приводит к увеличению светопропускания и контраста оптического изображения.
- Уменьшение отражения важно в целях устранения блика от дисплеев, а также при использовании контактных линз для увеличения видимости глаз.
- В авиационной технике уменьшение отражения требуется в целях маскировки боевых самолетов и вертолетов, чтобы позволять им проникать незамеченными в воздушное пространство противника.

Одним из способов уменьшения отражения является просветление оптики [78], заключающееся в создании на поверхности тела оптически тонкой пленки. Принцип ее действия основан на взаимном гашении интерферирующих друг с другом лучей, которые отражаются от наружной и внутренней сторон пленки. У однослойных просветляющих покрытий имеется серьезный недостаток: они могут быть использованы только для узкого диапазона длин волн и углов падения. Этот диапазон можно расширить, применяя многослойные покрытия [79,80]. Принцип действия таких покрытий тот же, что и у однослойных, - взаимное интерференционное гашение

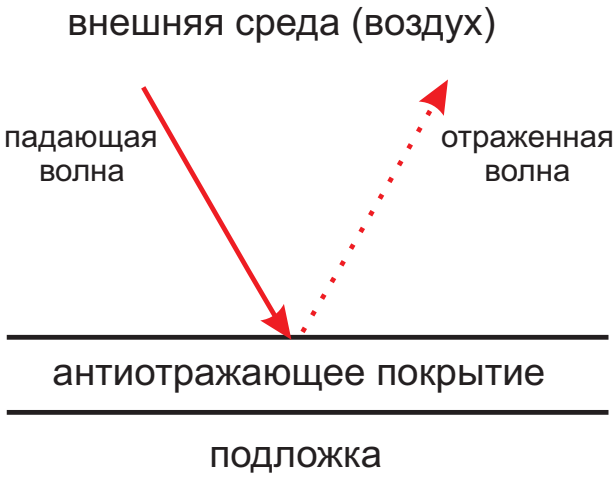

Рис. 4.1. Работа антиотражающего покрытия.

двух или нескольких волн, отраженных от разных границ раздела между слоями. Конкретные значения толщин слоев и их показателей преломления могут подбираться в зависимости от желаемого эффекта: близкий к нулю коэффициент отражения в широкой спектральной области или в широком диапазоне углов для заданной длины волны [80]. Недостатком многослойных покрытий является проблематичность нахождения материалов с нужной диэлектрической проницаемостью.

Альтернативой к многослойным просветляющим покрытиям могут служить слои с непрерывно меняющимся коэффициентом преломления [80–82]. Применение таких покрытий позволяет достичь низких значений коэффициента отражения в широком спектральном диапазоне. Однако и у этого метода есть свои недостатки, среди которых несоответствие температурных коэффициентов расширения получаемых слоев и адгезия.

Добиться плавного изменения показателя преломления можно с помощью текстурирования поверхности, то есть создания на ней массива из конусообразных рассеивателей или двумерных канавок. Такой способ был впервые обнаружен при изучении структуры глаза некоторых видов мотыльков [83, 84]. Наружная поверхность роговицы глаза таких мотыльков, играющая роль линзы, покрыта сетью конусообразных пупырышек, называемых роговичными сосками, обычно высотой $d \leq 300$ нм и примерно таким же расстоянием между ними Λ (Рис. 4.2). Поскольку длина вол-

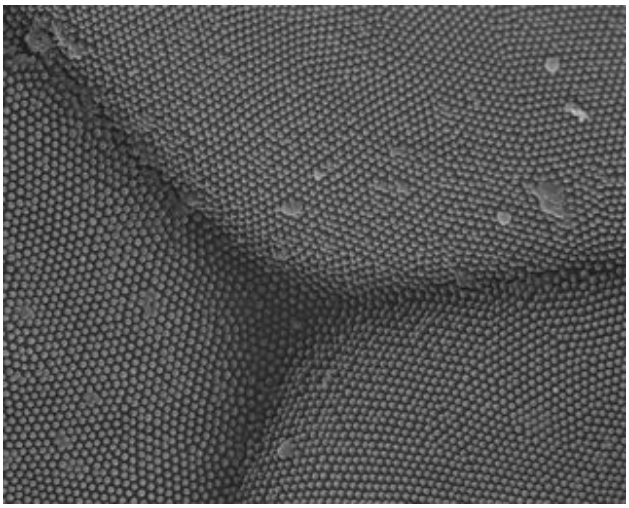

Рис. 4.2. Роговица глаза ночного мотылька.

ны видимого света λ больше размера пупырышек, их оптические свойства могут описываться с помощью приближения эффективной среды [85–87]. Согласно этому приближению свет распространяется через них так же, как если бы он распространялся через среду с непрерывно меняющейся эффективной диэлектрической проницаемостью. Это в свою очередь приводит к уменьшению коэффициента отражения, что позволяет мотылькам хорошо видеть темноте, а также оставаться незамеченными для хищников вследствие уменьшения отражательной способности от глаз.

Текстурированная поверхность обладает антиотражающими свойствами также и в коротковолновом пределе, при длинах волн много меньших характерного размера текстуры. Это связано с тем, что лучи, первоначально отразившиеся от текстурированной поверхности, имеют шанс все же проникнуть в среду при последующих переотражениях [88]. При этом текстурирование поверхности создает условия, при которых прошедший луч может отклониться от нормали, что ведет к эффекту запутывания прошедшего света (англ. - light trapping), используемому, например, в солнечных элементах [89].

Теоретическое и экспериментальное исследование свойств текстурированных поверхностей активно ведется уже начиная с 70х гг. прошлого века. Однако, интерес к этой области особенно возрос в последнее время, а именно, появилась масса новых работ по успешному изготовлению ан-

тиотражающих нанотекстурированных покрытий [4, 90–97], используемых, в частности, в производстве солнечных элементов.

Дальнейшее изложение литературного обзора будет построено следующим образом. В двух следующих параграфах 4.1.1, 4.1.2 мы изложим имеющиеся в литературе теоретические результаты касательно оптических свойств текстурированных поверхностей в длинно- и коротковолновом пределах. Затем в параграфе 4.1.3 мы рассмотрим теоретические и экспериментальные работы, в которых исследуются свойства текстурированных поверхностей при длинах волн порядка размера текстуры. Поскольку наши собственные результаты в параграфе 4.3 касаются кремниевых текстурированных покрытий, применяемых для увеличения эффективности кремниевых солнечных элементов, в параграфе 4.1.3 будут рассматриваться работы, в которых изучаются именно такие покрытия. В заключение мы приведем выводы нашего литературного обзора.

4.1.1. Антиотражающие свойства текстурированных покрытий в длинноволновом пределе

В случае, когда характерная длина волны много больше размера составляющих текстуру рассеивателей, оптические свойства текстурированной поверхности могут описываться в приближении эффективной среды. Как уже говорилось ранее, в рамках этого приближения свет распространяется через текстурированную поверхность так, как если бы он распространялся через пленку с непрерывно меняющейся эффективной диэлектрической проницаемостью.

Поскольку приближение эффективной среды будет применяться в некоторых наших дальнейших вычислениях, мы опишем ниже имеющиеся способы расчета эффективной диэлектрической проницаемости. По этой же причине мы изложим используемые нами в дальнейшем способы расчета коэффициента отражения от пленки с непрерывно меняющейся диэлектрической проницаемостью. Далее в этом параграфе мы приведем основ-

ные имеющиеся в литературе результаты, полученные с использованием приближения эффективной среды.

Изложение способа расчета эффективной диэлектрической проницаемости для текстурированной поверхности будет состоять из нескольких шагов. Вначале мы опишем, как может быть посчитана эффективная диэлектрическая проницаемость для структуры бесконечной в направлении z, так что ее диэлектрическая проницаемость ε зависит только от x, y. Потом мы рассмотрим случай плоскопараллельного слоя, имеющего конечный размер по z. Далее мы покажем, как может быть посчитана эффективная диэлектрическая проницаемость для многослойных плоскопараллельных структур, и наконец перейдем к структурам с непрерывным профилем, которыми и являются текстурированные поверхности. Рис. 4.3 представляет иллюстрацию к нашим рассуждениям.

Рассмотрим первый случай, когда диэлектрическая проницаемость структуры $\varepsilon(x, y)$ периодична по направлениям x и y и не зависит от z. При соответствующем выборе осей x и y эффективная диэлектрическая проницаемость представляется в виде тензора $\hat{\epsilon}$, у которого имеются только три ненулевые отличные друг от друга диагональные компоненты ϵ_x, ϵ_y и ϵ_z. В случае наличия центральной симметрии в плоскости xy две первые компоненты равны $\epsilon_x = \epsilon_y$.

В общем случае для расчета ϵ_x и ϵ_y можно следовать методам, предложенным в работах [98, 99]. Эти методы предполагают нахождение диэлектрической проницаемости в виде разложений по степеням Λ/λ. Отметим, что для коэффициентов в таком разложении не существует простого аналитического выражения, и конкретные их значения могут быть получены только числено.

Точность этих методов снижается при увеличении величины отношения Λ/λ. Более того, при $\Lambda/\lambda \sim 1$ уже нельзя пользоваться тензором диэлектрической проницаемости, который был бы постоянен для всех углов падения и поляризаций [100]. В этом случае уместен способ [101], основан-

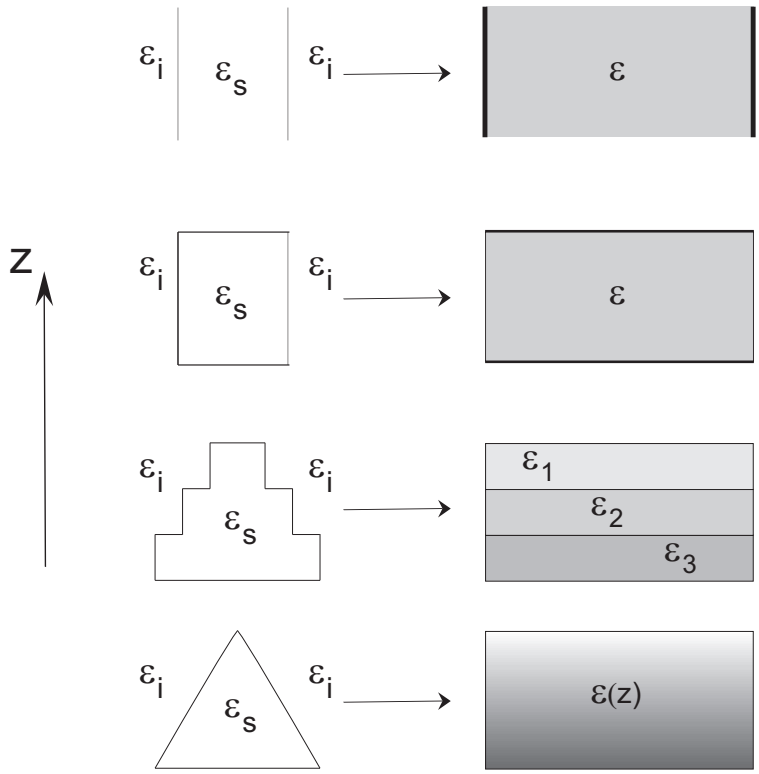

Рис. 4.3. Приближение эффективной среды для различных видов структур. ε_i - диэлектрическая проницаемость внешней среды, ε_s - диэлектрическая проницаемость структуры. Ось z направлена верх.

ный на подборе такого значения эффективной диэлектрической проницаемости, чтобы с помощью нее достигалось хорошее согласие с результатами, полученными с помощью точных методов для некоторых тестовых задач (расчет коэффициента отражения от структуры и т. д.).

Описанные выше методы трудоемки и неудобны для практического применения. В некоторых случаях, три из которых встречаются в наших собственных расчетах и поэтому будут описаны ниже, для эффективной диэлектрической проницаемости существуют простые приближенные выражения.

Рассмотрим вначале случай последовательности параллельных пластин, когда ε зависит только от одной координаты (Рис. 4.4). Пусть t - толщина каждой пластины, Λ - расстояние между ними, ε_s - диэлектрическая проницаемость каждой из пластин, а ε_i - диэлектрическая проницаемость окружающей их среды.

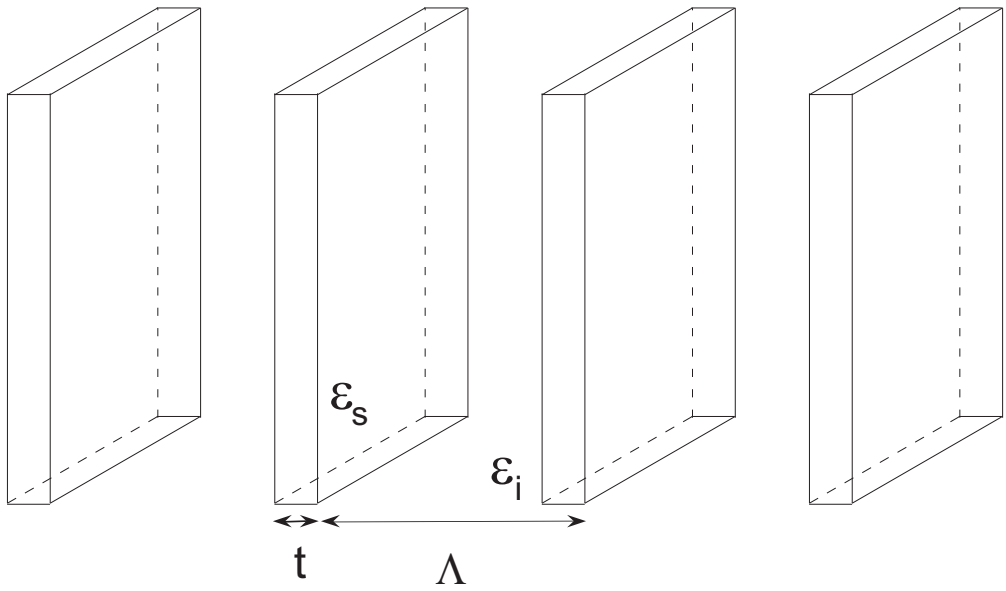

Рис. 4.4. Регулярная последовательность тонких параллельных пластин.

В предположении, что расстояние между пластинами Λ мало по сравнению с длиной волны λ, поле в пластинах и между ними можно считать однородным. Тогда из требований непрерывности на границах пластин нормальной составляющей вектора $\vec{D}$ и тангенциальной составляющей вектора $\vec{E}$ для компонент тензора $\hat{\varepsilon}$, соответствующих перпендикулярным и параллельным к пластинам направлениям, можно получить [78]

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{\vec{D}}{\vec{E}} = \left(\frac{f_s}{\varepsilon_s} + \frac{f_i}{\varepsilon_i}\right)^{-1}, \tag{4.1}$$

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{\vec{D}}{\vec{E}} = f_s\varepsilon_s + f_i\varepsilon_i, \tag{4.2}$$

где $f_s = t/\Lambda$ и $f_i = (\Lambda - t)/\Lambda$ - доли общего объема, занимаемые пластинами и окружающей средой соответственно.

Так как эффективная диэлектрическая проницаемость одинакова для всех направлений, параллельных пластинам, но различна для направлений, перпендикулярных к ним, наша система ведет себя как одноосный кристалл с оптической осью, нормальной к плоскостью пластин.

Рассмотрим теперь структуру, представляющую бесконечно вытянутые в направлении z параллелепипеды с квадратными основаниями, упакованные в квадратную решетку (Рис. 4.5). Для такой структуры в рабо-

те [102] эмпирически было подобрано следующее выражение для эффективного коэффициента преломления в направлениях x и y:

$$n_{2D} = [\bar{n} + 2\hat{n}_{2D} + 2\check{n}_{2D}]/5, \tag{4.3}$$

где $\bar{n}$ - есть простое усреднение коэффициента преломления, а $\hat{n}_{2D}$ и $\check{n}_{2D}$ получаются взятием корня из величин

$$\hat{\varepsilon}_{2D} = (1-f)\varepsilon_i + f\varepsilon_\perp, \tag{4.4}$$

$$1/\check{\varepsilon}_{2D} = (1-f)/\varepsilon_i + f/\varepsilon_\parallel, \tag{4.5}$$

где $f = t/\Lambda$, а $\varepsilon_\perp$ и $\varepsilon_\parallel$ рассчитываются согласно (4.1) и (4.2) соответственно. В работе [102] продемонстрировано, что выражение (4.3) позволяет достигать хорошего согласия с непосредственными численными расчетами.

Для бесконечно вытянутых параллельных друг другу цилиндров эффективная диэлектрическая проницаемость может быть рассчитана по формуле Максвелла-Гарнетта [103]:

$$\varepsilon_{2D} = \epsilon_i + 2f\epsilon_i \frac{\epsilon_s - \epsilon_i}{\epsilon_s + \epsilon_i - f(z)(\epsilon_s - \epsilon_i)}, \tag{4.6}$$

где f - фактор заполнения цилиндров по пространству. Обоснование этой формулы может быть найдено в работе [103].

Отметим, что в двух последних рассмотренных нами случаях, эффективная диэлектрическая проницаемость для волн, поляризованных в x и y направлениях, одинакова по причине наличия центральной симметрии в плоскости xy. Таким образом, эффективная диэлектрическая проницаемость задается тензором $\hat{\epsilon}$, у которого имеются только две ненулевые отличные друг от друга диагональные компоненты ϵ_z и $\epsilon_x = \epsilon_y$. При этом компонента ϵ_z получается с помощью простого усреднения (4.2), что можно показать из тех же соображений непрерывности тангенциальной составляющей электрического поля, которые применяются при выводе (4.2).

До сих пор мы предполагали, что структура бесконечна вдоль направления z. Влияние конечности структуры на значение эффективной диэлектрической проницаемости исследуется в работе [104]. Однако, как

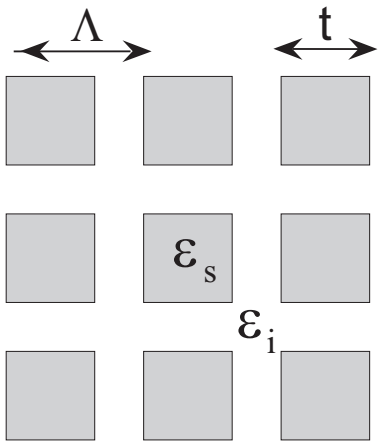

Рис. 4.5. Бесконечно вытянутые параллелепипеды с квадратными основаниями, упакованные в квадратную решетку.

утверждается в [98], когда толщина структуры вдоль направления z много больше критического значения $\lambda/10$, этим влиянием можно пренебречь и пользоваться эффективной диэлектрической проницаемостью, полученной в предположении бесконечности структуры вдоль z.

Приближением эффективной среды также можно пользоваться при описании многослойных структур, таких как на Рис. 4.3. Для этого каждый слой рассматривается отдельно и для него находится своя эффективная диэлектрическая проницаемость.

Приближение эффективной работает также для структур с непрерывным профилем, изображенных на Рис. 4.3. Точного теоретического обоснования для этого в литературе нет, однако этот подход с успехом применяется во многих работах (см., например, [87, 105, 106]) при описании текстурированных поверхностей.

Как следует из сказанного выше, в приближении эффективной среды оптические свойства текстурированной поверхности подобны свойствам неоднородной слоистой среды (Рис. 4.3). В дальнейших расчетах коэффициента отражения от такой среды нами будут использоваться два рассматриваемых ниже метода.

Первый метод заключается в разбиении неоднородной среды на совокупность слоев малой толщины, в каждом из которых значение диэлектри-

ческой проницаемости можно приблизительно считать постоянным. Для каждого слоя находится матрица перехода, а далее путем перемножения этих матриц получается матрица перехода для всей совокупности слоев. С помощью этой матрицы может быть получен коэффициент отражения. Подробное обоснование и описание работы этого метода можно найти в [78].

Для нахождения коэффициента отражения может применен другой метод [87,107], основанный на непосредственном решении уравнений Максвелла в неоднородной среде. Поскольку выражение для коэффициента отражения, получаемое в рамках этого метода, будет использовано в параграфе 4.2, мы остановимся на нем подробнее. Мы будем пользоваться обозначениями, принятыми в [87].

Будем считать, что вектор $\vec{E}$ параллелен оси y и перпендикулярен плоскости падения xz (Рис. 4.6). Значения полей не зависят от y. Зависимость от x находится из требования непрерывности тангенциальных компонент электрического поля и выражается как $\exp(-k_x x)$, где $k_x = (\omega/c) n_i \sin\theta_i$, где n_i - показатель преломления среды, откуда приходит волна, θ_i - угол падения (Рис. 4.6). Выпишем уравнения Максвелла для компонент поля E_y и H_x:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = +i\mu(z)\omega H_x, \tag{4.7}$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = +i\omega\left[\epsilon z - \frac{k_x^2}{\mu(z)\omega^2}\right]. \tag{4.8}$$

Уравнения (4.7), (4.8) аналогичны телеграфным уравнениям, описывающим электрические колебания в проводах [108]

$$\frac{\partial V}{\partial z} = -Z(z)I, \tag{4.9}$$

$$\frac{\partial I}{\partial z} = -Y(z)V, \tag{4.10}$$

где V - напряжение, I - ток, Z - коэффициент индуктивности, а Y - коэффициент утечки. В нашем случае

$$Z(z) = -i\mu(z)\omega, \tag{4.11}$$

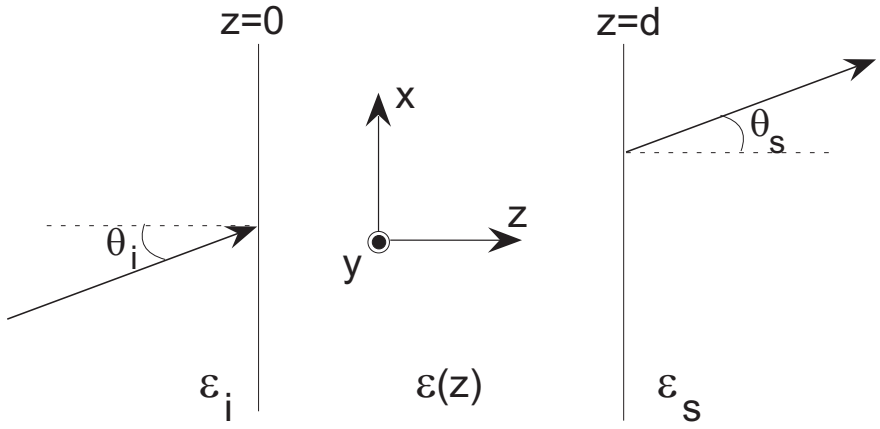

Рис. 4.6. Прохождение света через неоднородную слоистую среду.

$$Y(z) = -i\omega \left[\epsilon(z) - \frac{k_x^2}{\mu(z)\omega^2} \right]. \tag{4.12}$$

Будем считать, что поле в неоднородной среде представляется в виде суммы

$$E(z) = E^-(z) + E^+(z), \quad H(z) = H^-(z) + H^+(z), \tag{4.13}$$

где $+$ и $-$ соответствуют волнам, бегущим в положительном и отрицательном направлении z.

В работах [87, 107] показывается, что для коэффициента отражения $\rho(z)$, равного

$$\rho(z) = \frac{E^-(z)}{E^+(z)}, \tag{4.14}$$

на основании (4.9), (4.10) может быть выписано следующее уравнение

$$\frac{d\rho}{dz} - 2\gamma\rho + \frac{1}{Z_0}\frac{dZ_0}{dz}(1-\rho^2) = 0, \tag{4.15}$$

где

$$Z_0(z) = \left[\frac{Z(z)}{Y(z)} \right]^{1/2}, \tag{4.16}$$

$$\gamma(z) = \left[Y(z)Z(z) \right]^{1/2}. \tag{4.17}$$

Соответствующие коэффициенты для уравнений (4.7) и (4.8) равны

$$\gamma(z) = i\omega \left[\mu(z)\varepsilon(z) - \frac{k_x^2}{\omega^2} \right]^{1/2}, \tag{4.18}$$

$$\frac{1}{Z_0}\frac{dZ_0}{dz} = \frac{1}{2\mu(z)}\frac{\left[\varepsilon(z) - \dfrac{2k_x^2}{\mu(z)\omega^2}\right]\dfrac{d\mu(z)}{dz} - \mu(z)\dfrac{d\varepsilon(z)}{dz}}{\varepsilon(z) - \dfrac{k_x^2}{\mu(z)\omega^2}}. \tag{4.19}$$

Для определенных профилей текстуры и соответствующих им функций $Y(z)$ и $Z(z)$ уравнение (4.15) может быть решено точно, но в общем случае это не так. Однако, предположив, что отражение ρ^2 мало по сравнению единицей, мы можем линеаризовать уравнение (4.15):

$$\frac{d\rho}{dz} - 2\gamma\rho + \frac{1}{Z_0}\frac{dZ_0}{dz} = 0. \tag{4.20}$$

Его решение есть [87]

$$\begin{aligned}\rho(z) = &-\int_z^d \frac{1}{2Z_0}\frac{dZ_0}{dz'}\exp\left[-2\int_z^{z'}\gamma(s)ds\right]dz' \\ &+\rho(d)\exp\left[-2\int_z^d \gamma(s)ds\right],\end{aligned} \tag{4.21}$$

где $\rho(d)$ есть коэффициент отражения от границы между подложкой и прилегающему к нему неоднородного слоя, который в случае $\varepsilon(d) \neq \varepsilon_s$ отличен от нуля. В (4.21) не учитывается возможный разрыв $\varepsilon(0) - \varepsilon_i$. Он может быть учтен с помощью формулы для отражения от бесконечно тонкой пленки [78]:

$$\rho(0-) = \frac{r_i + \rho(0+)}{1 + r_i\rho(0+)}, \tag{4.22}$$

где r_i есть коэффициент отражения от границы между средой, откуда падает волна, и слоистой средой в $z = 0$, а $\rho(0+)$ задается формулой (4.21).

В случае $\mu_i = \mu_s = \mu_0$, где μ_0 есть магнитная постоянная, выражение (4.21) может быть упрошено

$$\begin{aligned}\rho(z) = &-\int_z^d \frac{1}{2n_a}\frac{dn_a}{dz'}\exp\left[-i2k\int_z^{z'} n_a(s)ds\right]dz' \\ &+\rho(d)\exp\left[-i2k\int_z^d n_a(s)ds\right],\end{aligned} \tag{4.23}$$

где $k = (\omega/c)$, а $\varepsilon_0 n_a^2(z) = \varepsilon(z) - \varepsilon_i \sin^2\theta_i$.

В случае, когда вектор $\vec{E}$ лежит в плоскости падения xz, ход рассуждений ненамного отличается от проделанного, и может быть найден в [87].

При нормальном падении, когда различие между двумя различными поляризациями пропадает, из (4.23) получаем

$$\rho(z) = -\int_z^d \frac{1}{2n}\frac{dn}{dz'} \exp\left[-i2k\int_z^{z'} n(s)ds\right] dz' \\ +\rho(d)\exp\left[-i2k\int_z^d n(s)ds\right]. \tag{4.24}$$

Выражение (4.24) может быть также получено из следующих простых (но не совсем точных) соображений. Предположим, что свет может отразиться только один раз, а остальными отражениями можно пренебречь. Тогда общая отраженная волна складывается из волн, отраженных от плоскостей z', где $0 \leq z' \leq d$. Фаза, аккумулированная каждой отразившейся от плоскости z' волной равна удвоенному оптическому пути от 0 до z' умноженному на волновой вектор k. Мы видим, что эта фаза представлена в показателе экспоненты в (4.24). Амплитуда отраженной от плоскости z' волны определяется коэффициентом Френеля $[n(z') - n(z' + \Delta z)]/[n(z') + n(z' + \Delta z)]$, который приблизительно равен $-\Delta n/2n(z')$. Переходя к пределу $\Delta n \to (dn/dz')dz'$, мы получаем выражение (4.24).

В общем случае коэффициент отражения (4.23) может быть рассчитан только численно, однако в некоторых случаях для него можно получить аналитическое выражение (например, в случае линейного или синусоидального профиля одномерной текстуры [87]).

Перейдем теперь к изложению имеющихся в литературе работ, в которых рассчитываются оптические свойства антиотражающих покрытий с использованием приближения эффективной среды. В этих работах исследуется влияние высоты и формы текстуры, а также разницы коэффициентов преломления внешней среды и текстуры на ее антиотражающие свойства.

Рассмотрим работу [87], в которой численно исследуются одномерные текстурированные покрытия с треугольным профилем (см. Рис. 4.3).

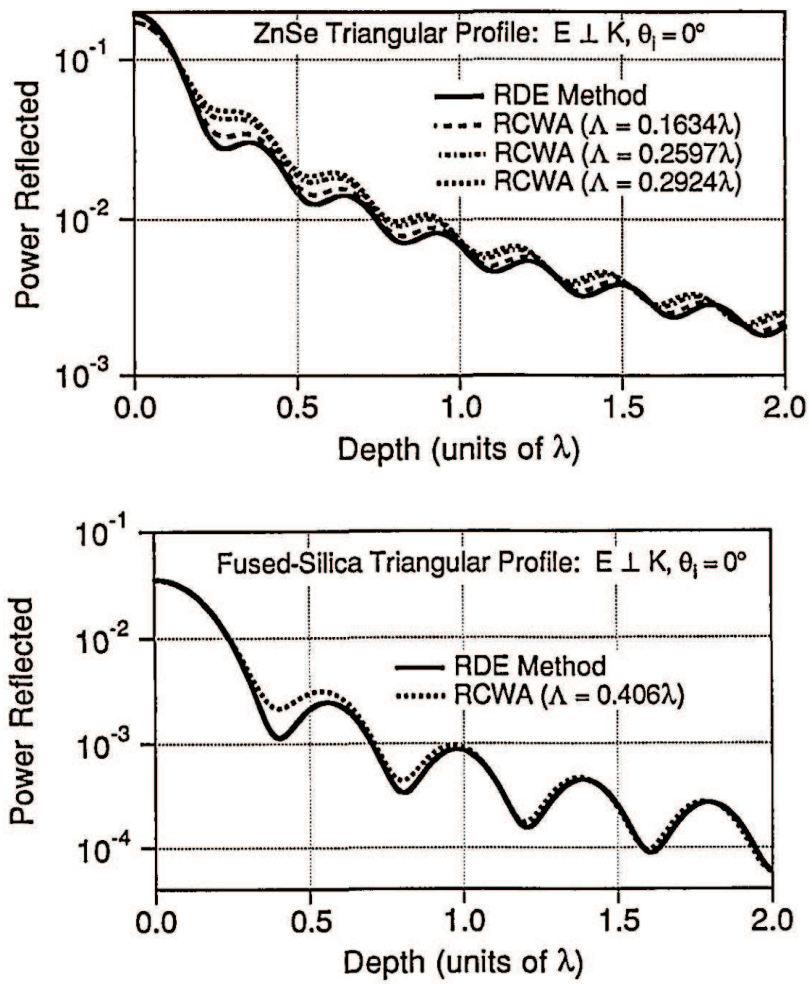

Рис. 4.7. Отражение от одномерной текстурированной поверхности из ZnSe, $n = 2.42$ (вверху) и кварца, $n = 1.46$ (внизу) в зависимости от высоты текстуры для $\mathbf{E} \perp \mathbf{K}$, где $\mathbf{K}$ - вектор трансляции. Результаты получены в приближении эффективной среды (RDE) и с помощью метода связанных волн (RCWA).

Для расчета отражения от текстурированного покрытия используется метод связанных волн [109], а для расчета отражения от соответствующего эффективного переходного слоя используется описанный ранее метод решения уравнений (4.7), (4.8). Для получения эффективного коэффициента преломления в данной работе используется приближение (4.1), (4.2).

На Рис. 4.7 приведена зависимость отражения от высоты текстуры для кварца и для ZnSe. Рассматривается случай нормального падения, направление поляризации полагается перпендикулярным вектору трансляции соответствующей одномерной дифракционной решетки. Из графиков видно, что при увеличении высоты текстуры отражение падает, проходя

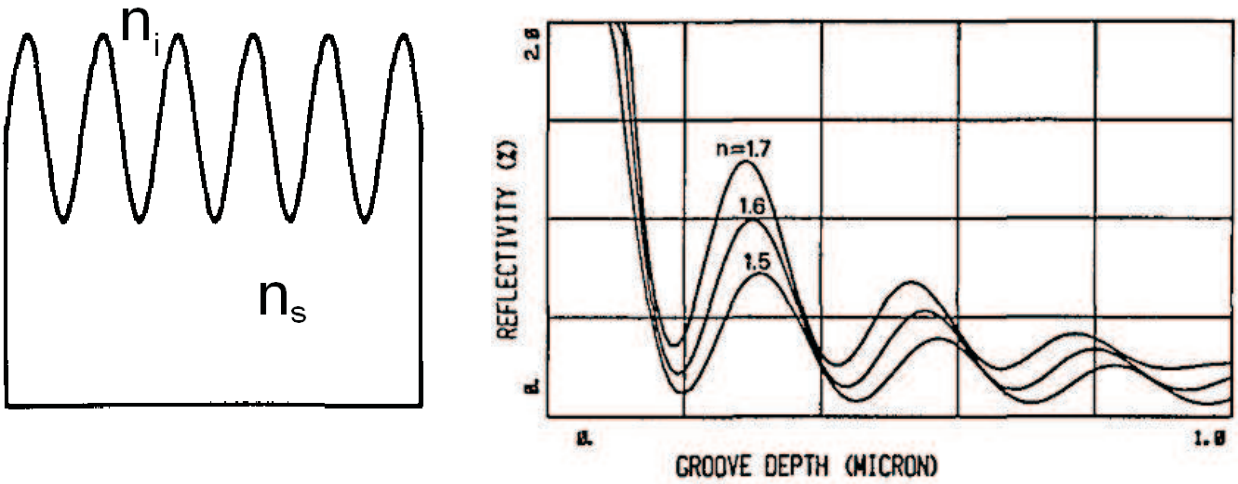

Рис. 4.8. Слева: синусоидальный профиль текстурированной поверхности, исследовавшийся в работе [110]. Справа: отражение от такой поверхности для разных значений n_s. Направление поляризации параллельно поверхности текстуры. Длина волны $\lambda = 632.8$ нм. Результаты получены в приближении эффективной среды.

при этом ряд последовательных максимумов и минимумов. Авторы связывают это с увеличением плавности изменения эффективного коэффициента преломления.

Сравнивая между собой верхний и нижний графики на Рис. 4.7, мы обнаруживаем, что уменьшение контраста между коэффициентами преломления внешней среды и текстуры приводит к падению величины отражения. Это, как утверждается в работе, также связано с увеличением плавности изменения эффективного коэффициента преломления.

Отметим, что расхождение между результатами, полученными в приближении эффективной среды и с помощью метода связанных волн, естественным образом увеличивается при увеличении периода Λ (см. верхний график на Рис. 4.7). Это расхождение также растет при увеличении величины контраста между коэффициентами преломления внешней среды и текстуры, что видно при сравнении верхнего и нижнего графиков на Рис. 4.7.

В работе [110] в приближении эффективной среды исследовались одномерные текстурированные поверхности с синусоидальным профилем. Для получения эффективного коэффициента преломления использовалось

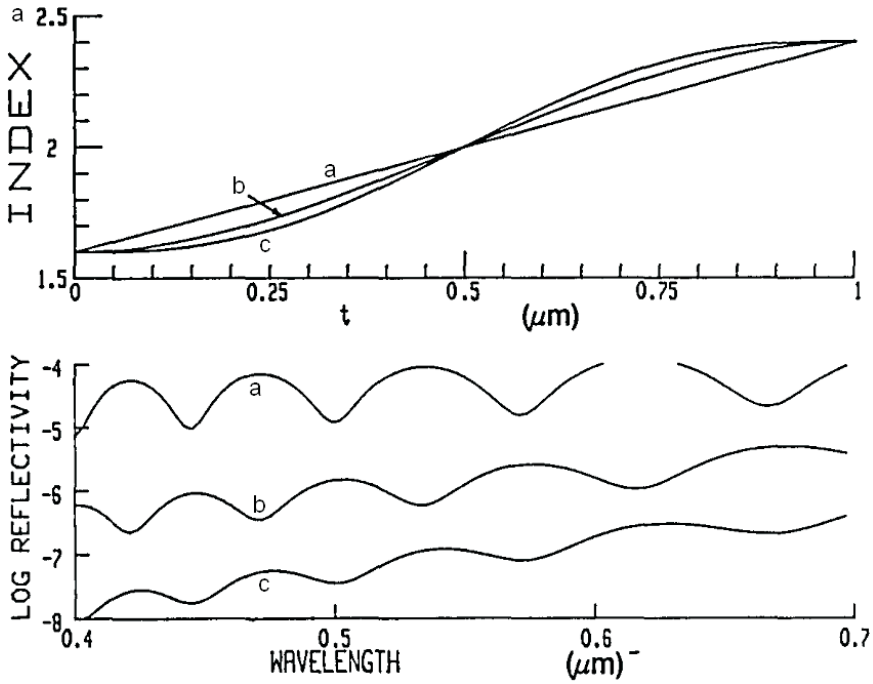

Рис. 4.9. Вверху: коэффициент преломления для различных переходных слоев между средами с $n = 1.6$ и $n = 2.4$. Толщина слоя равна 1 мкм. Внизу: соответствующая величина отражения. Кривая a соответствует слою (4.25), b - (4.26), c - (4.27). Отражение между двумя указанными средами при отсутствии переходного слоя равно 4×10^{-2}.

приближение (4.1), (4.2). На Рис. 4.8 представлены результаты для отражения в зависимости от высоты текстуры для разных значений коэффициента преломления подложки. Как и в предыдущей работе, мы видим, что увеличение высоты текстуры приводит к уменьшению отражения, а увеличение контраста между коэффициентами преломления внешней среды и текстуры, напротив, приводит к его увеличению.

Перейдем теперь к работе [111], в которой исследовались антиотражающие свойства переходного слоя между двумя средами. Эта работа интересна тем, что в ней анализировалось влияние зависимости коэффициента преломления от глубины в переходном слое $n(z)$ на антиотражающие свойства такого слоя.

Оптимальные с точки зрения уменьшения отражения функции $n(z)$ могли бы быть использованы для создания текстурированных поверхностей с такой формой, чтобы в приближении эффективной среды ее оптические свойства были эквивалентны свойствам переходного слоя с $n(z)$.

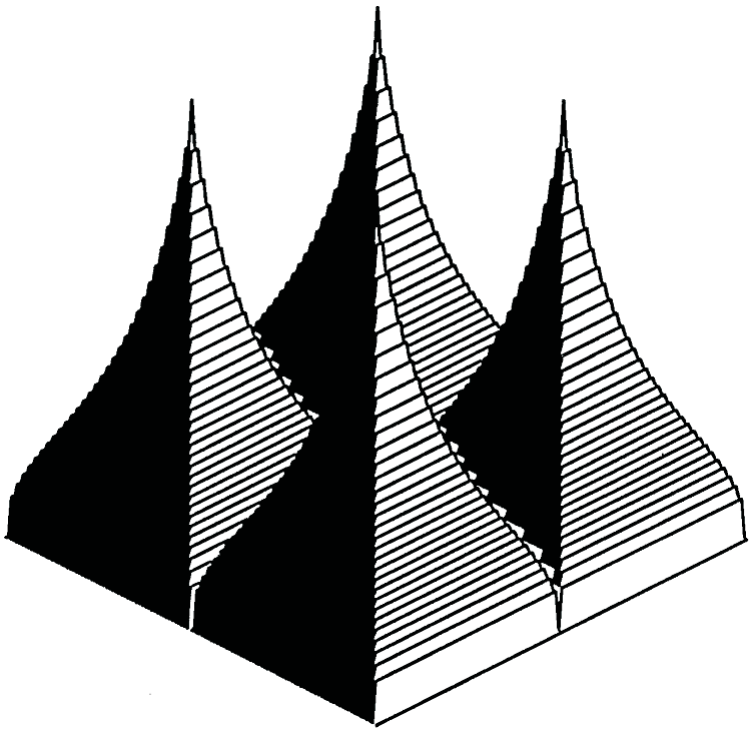

Рис. 4.10. Пирамидка с профилем, соответствующим зависимости (4.27), для $n_i = 1$, $n_s = 3.42$.

В указанной работе исследовались следующие функции:

$$n = n_i + (n_s - n_i)t, \tag{4.25}$$

$$n = n_i + (n_s - n_i)(3t^2 - 2t^3), \tag{4.26}$$

$$n = n_i + (n_s - n_i)(10t^3 - 15t^4 + 6t^5), \tag{4.27}$$

где глубина t меняется в пределах $0 \leq t \leq 1$.

На Рис. 4.9 представлен вид функций $n(z)$, а также численно полученные значения для отражения. Видно, что использование переходного слоя с (4.27) позволяет достичь наименьшей величины отражения.

В работе [112] исследовались антиотражающие свойства пирамидок с такой формой, чтобы в приближении эффективной среды эти пирамидки отражали бы как переходный слой с $n(z)$ вида (4.25– 4.27). Было показано, что использование пирамидок с формой, соответствующей функции (4.27) (см. Рис. 4.10) приводит к достижению более низких значений отражения.

Поведем итоги текущего параграфа. В литературе было показано, что увеличение высоты текстуры, а также уменьшение контраста между коэффициентами преломления внешней среды и текстуры, приводит уменьшению коэффициента отражения. Также было показано, что уменьшение коэффициента отражения может быть достигнуто путем подбора специальной формы текстуры. При этом, не было произведено каких-либо оценок характера убывания отражения при увеличении высоты текстуры. Также не было сделано какого-либо теоретического обоснования влияния формы текстуры на ее антиотражающие свойства. Такое исследование будет нами проведено в параграфе 4.2.

4.1.2. Антиотражающие свойства текстурированных покрытий в коротковолновом пределе

Перейдем теперь к имеющимся результатам для антиотражающих свойств текстурованных поверхностей в коротковолновом пределе. Оптические свойства таких поверхностей в этом случае могут быть описаны приближением геометрической оптики. Для численного моделирования в этом приближении широко используется метод трассировки лучей [113, 114]. Этот метод заключается в запуске множества геометрических лучей и отслеживании взаимодействий каждого из них с заданными поверхностями.

Работы с использованием этого метода в основном носят исключительно счетный характер, и в них рассматриваются двумерные структуры (см., например, [115,116]). Среди имеющихся работ следует особо отметить работу [117], посвященную двумерным поглощающим текстурированным поверхностям. В этой работе выводится аналитическое выражение для коэффициента отражения от такой поверхности. Следуя имеющемуся в ней ходу рассуждений, мы будем делить лучи на следующие группы:

- Падающие лучи.
- Отраженные лучи, образованные при отражении падающих от сторон текстуры. Отраженные лучи могут дальше переотражаться. После

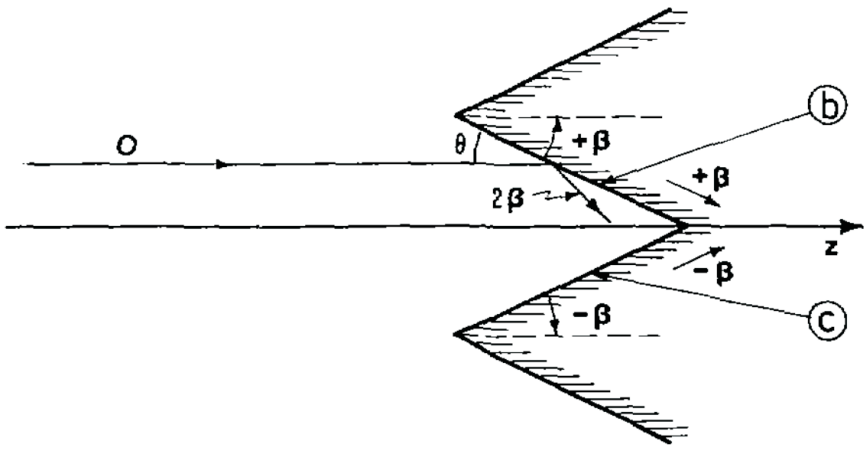

Рис. 4.11. Двумерная текстурированная поверхность.

некоторого числа переотражений N они окончательно отражаются обратно. Угол отражения, амплитуда и фаза таких лучей при каждом отражении могут быть рассчитаны с помощью формул Френеля.

- Преломленные лучи, образованные при прохождении падающих или отраженных лучей в текстуру. В случае наличия поглощения преломленные лучи в пределе геометрической оптики быстро затухают после попадания в текстуру, и при расчете отражения ими можно пренебречь.

- Вторичные лучи, порожденные преломленными лучами, которым удалось после попадания в текстуру выйти из нее наружу. По указанным выше причинам при расчете коэффициента отражения ими тоже можно пренебречь.

- Дифрагированные лучи, образованные при попадании лучей на острие текстуры. В приближении геометрической оптики ими также можно пренебречь.

Будем представлять падающую плоскую волну в виде совокупности параллельных друг другу падающих лучей. Направление луча будем задавать углом между его направлением и положительным направлением оси z. Сторонам текстуры также можно сопоставить в соответствие углы. На Рис. 4.11 стороне b сопоставлен угол β, а стороне c – угол $-\beta$.

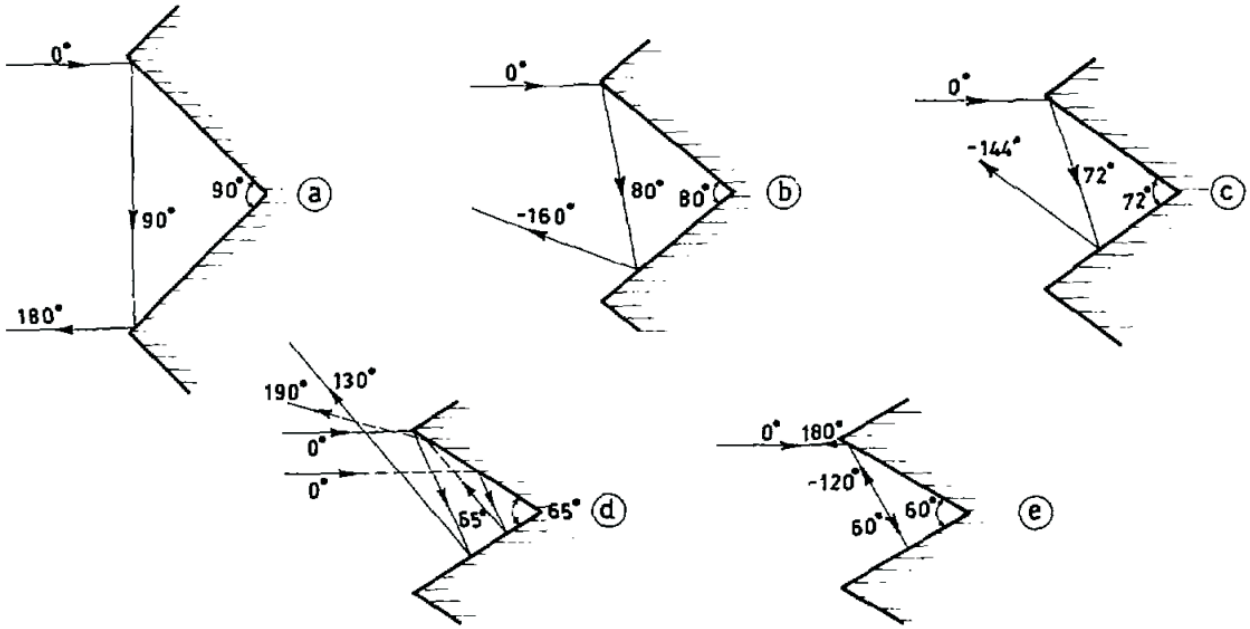

Рис. 4.12. Лучи, отраженные от двумерной текстурированной поверхности.

Легко убедиться в том, что луч, задаваемый углом α и падающий на сторону $+\beta$, отразится от нее под углом $-\alpha + 2\beta$. Из этого следует, что в случае нормального падения все первично отраженные лучи будут характеризоваться углами $\pm 2\beta$, где знаки $+$ и $-$ соответствуют отражению от сторон $+\beta$ и $-\beta$. Вторично отраженные лучи будут характеризоваться углами

$$\pm 2\beta, \quad \mp 4\beta, \quad \pm 6\beta, \quad \ldots, \quad (-1)^{m+(1\pm 1)/2} 2m\beta, \tag{4.28}$$

где m - есть количество испытанных ими переотражений.

Для заданного угла β сопоставим в соответствие два угла β_M и β_{M+1} таких, что

$$\beta_M \geq \beta \geq \beta_{M+1} \beta_M \geq \beta \geq \beta_{M+1}, \tag{4.29}$$

$$2M\beta_M = 2(M+1)\beta_{M+1} = \pi. \tag{4.30}$$

Легко убедиться в том, что при

$$\beta = \beta_M = \frac{\pi}{2M}, \tag{4.31}$$

лучи, окончательно отраженные от текстурированной поверхности, двигаются в направлении $-z$, и каждый такой луч испытал M переотражений (см. Рис. 4.12(a) для $M = 2$).

Для $\beta < \beta_M$ лучи будут отражаться в двух симметричных направлениях $\pm 2M\beta$ (Рис. 4.12(b)), которые параллельны сторонам текстуры при $2M\beta = \pi - \beta$ (Рис. 4.12(c)). Положим

$$2M\beta_{M'} = \pi - \beta_{M'}, \text{ т. е. } \beta_{M'} = \frac{\pi}{2(M + 1/2)}. \tag{4.32}$$

Тогда при $\beta_M > \beta \geq \beta_{M'}$ лучи отражаются в двух симметричных направлениях, отличающихся на угол $\gamma_M = 2(\pi - 2M\beta)$. Чем меньше значение β, тем больше величина этого угла, при этом она никогда не превосходит 2β.

Для $\beta_{M'} > \beta \geq \beta_{M+1}$ часть выходящих из текстуры лучей испытает дополнительное переотражение (Рис. 4.12(d)). Таким образом, существует две симметричные пары углов $\pm 2M\beta$ и $\pm 2(M+1)\beta$, соответствующие лучам, выходящим после M или $M+1$ переотражений соответственно. Чем меньше значение β, тем больше угол между первой парой лучей $\gamma_M = 2(\pi - 2M\beta)$, который достигает своего максимального значения $2\pi/(M+1)$ при $\beta = \beta_{M+1}$, и тем меньше угол между последней парой $\gamma_{M+1} = 2[2(M+1)\beta - \pi]$, который стремится к нулю при $\beta \to \beta_{M+1}$.

При достижении $\beta = \beta_{M+1}$ лучи снова выходят вдоль направления $-z$, испытав при этом $M+1$ переотражений (Рис. 4.12(e)).

Для $\beta_M > \beta \geq \beta_{M'}$ и в случае, когда электрический вектор падающей волны параллелен граням текстур, коэффициент отражения равен

$$R = \prod_{m=1}^{M} \left| \frac{\sin{(2m-1)\beta} + [n^2 - \cos{(2m-1)\beta}]^{-2}}{\sin{(2m-1)\beta} + [n^2 - \cos{(2m-1)\beta}]^{-2}} \right|^2. \tag{4.33}$$

В случае другой поляризации с использованием соответствующих формул Френеля может быть получено схожее выражение.

Для $\beta_{M'} > \beta \geq \beta_{M+1}$ при расчете коэффициента отражения нужно учитывать тот факт, что лучи отражаются под разными углами и интерферируют друг с другом.

Рассмотрим теперь численные результаты, полученные в рассматриваемой работе. Диэлектрическая и магнитная проницаемости исследуемой

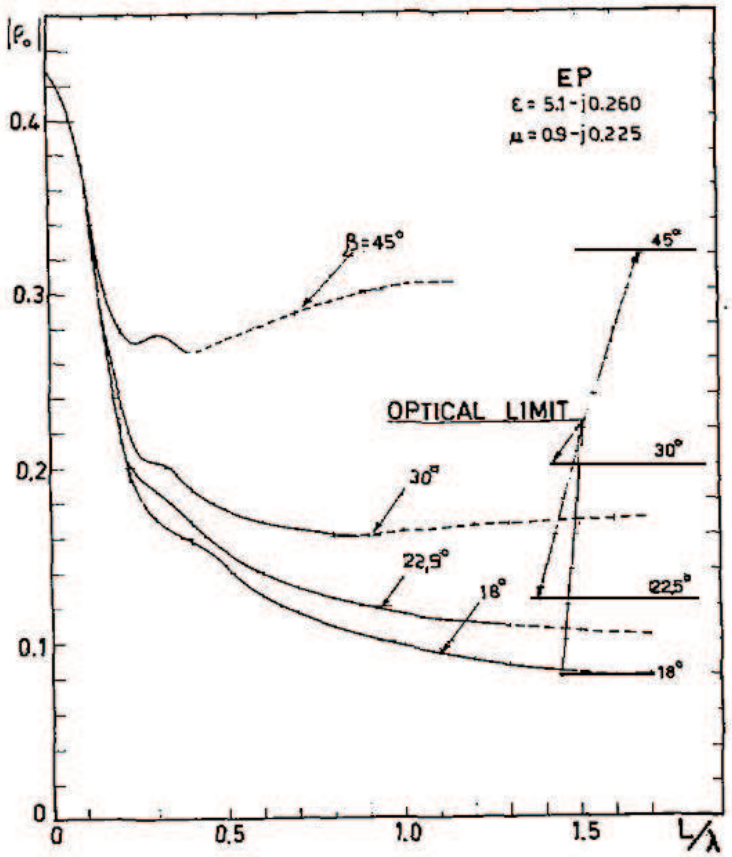

Рис. 4.13. Коэффициент отражения $|\rho| = \sqrt{R}$ для разных значений угла β между осью и боковой поверхностью одномерных канавок для текстурированной поверхности, исследуемой в работе [117]. Результатам, полученным в приближении геометрической оптики, соответствуют горизонтальные прямые в правой части графика. Результатам, полученным в приближении эффективной среды, соответствуют кривые, зависящие от Λ/λ, где Λ - период текстуры, а λ - длина волны.

в ней текстурированной поверхности полагались равными $\varepsilon = 5.1 + 0.26i$, $\mu = 0.9 + 0.225i$.

На Рис. 4.13 представлено сравнение результатов для $|\rho| = \sqrt{R}$, полученных в приближениях геометрической оптики и эффективной среды для разных значений угла β. Результатам, полученным в приближении геометрической оптики с использованием выражения (4.33), соответствуют горизонтальные линии в правой части графика. Результатам, полученным в приближении эффективной среды с использованием (4.1), (4.2), (4.21), соответствуют кривые, зависящие от отношения Λ/λ, где Λ - период текстуры, а λ - длина волны.

Авторы отмечают наличие некоторого соответствия между результатами, полученными в приближении эффективной среды при $\Lambda/\lambda \sim 1$ и в приближении геометрической оптики для разных β, что свидетельствует о том, что при переходе от длинно- к коротковолновому пределу характер изменения отражения имеет плавный характер. Отметим, что в приближении геометрической оптики уменьшение β приводит к падению отражения, что связано с тем, что лучу требуется больше переотражений для того, чтобы полностью выйти из структуры. В приближении эффективной среды уменьшение β при постоянном Λ (или увеличение высоты пирамидок) также приводит к падению отражения, что согласуется с результатами предыдущего параграфа.

Подведем итоги настоящего параграфа. В имеющихся в литературе работах, посвященных свойствам текстурированных поверхностей в приближении геометрической оптики, рассматриваются только двумерные структуры. Наибольший интерес представляет работа [117], в которой приведен вывод выражения для коэффициента отражения от двумерной поглощающей текстурированной поверхности. В этой работе установлено, что увеличение высоты текстуры при фиксированном периоде приводит к падению отражения. Однако не было проведено какой-либо оценки характера убывания отражения при увеличении высоты текстуры. Также не был рассмотрен трехмерный случай. При этом структуры считались поглощающими, в результате чего не учитывалось возможное влияние преломленных и вторичных лучей на характер зависимости отражения текстуры от ее геометрических параметров.

4.1.3. Применение текстурированных покрытий для повышения эффективности кремниевых солнечных элементов

Одним из путей повышения эффективности кремниевого солнечного элемента является применение антиотражающих покрытий. В качестве таковых могут использоваться многослойные покрытия [118], а также по-

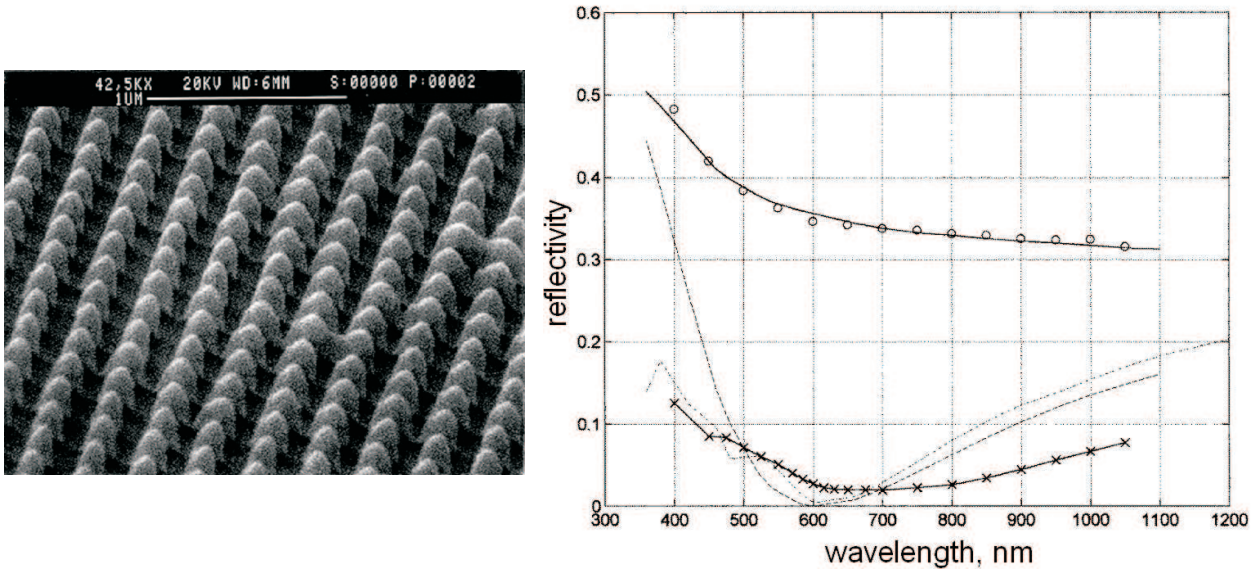

Рис. 4.14. Слева: электронный снимок образца, полученного в работе [120] (высота цилиндров примерно равна 100 нм, диаметр - 130 нм, а период решетки - 260 нм). Справа: верхняя кривая соответствует экспериментально измеренному отражению от кремниевой подложки. Нижняя сплошная кривая соответствует экспериментально измеренному отражению от образца. Пунктирная кривая соответствует численному результату, полученному с помощью метода связанных волн. Прерывистая кривая соответствует аналитически полученному отражению от подложки с нанесенным на нее переходным слоем, соответствующему рассматриваемой структуре в приближении эффективной среды.

крытия из пористого кремния [119], оптические свойства которых подобны свойствам пленки с непрерывно меняющимся показателем преломления, что обусловлено изменением пористости в зависимости от глубины. Однако, обоим этим методам присущи недостатки, обсуждавшиеся нами в начале этой главы.

Альтернативным способом уменьшения отражения является применение нанотекстурированных покрытий, интерес к которым особенно возрос в последнее время [4, 90, 91, 93, 120]. В последних имеющихся экспериментальных работах был достигнут коэффициент отражения для нормального падения менее 5% во всем видимом диапазоне (а для некоторых длин волн менее 1%), что соответствует его уменьшению на один - два порядка по сравнению с нетекстурированной поверхностью (коэффициент отражения 30-40%). Для искусственного изготовления текстурированных покры-

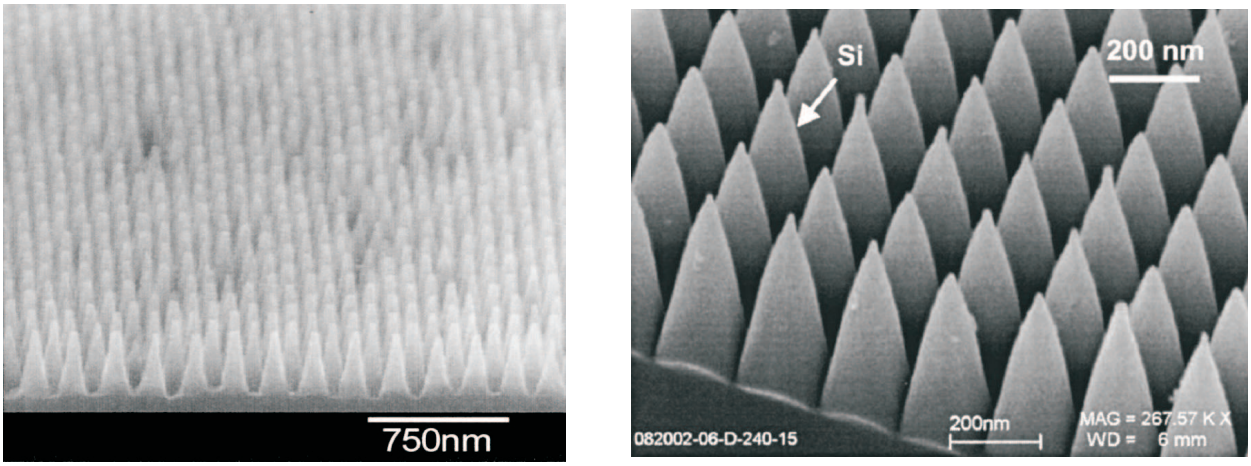

Рис. 4.15. Слева: электронный снимок образца, полученного в работе [91] (высота конусов 350нм, период решетки 150нм,, треугольная упаковка). Справа: электронный снимок образца, полученного в работе [93] (высота конусов 520 нм, период решетки 200 нм, квадратная упаковка).

тий могут применяться различные виды литографических техник [91, 93], голографическое паттернирование фоторезиста с последующим травлением [120], а также плазменное травление, используемое для получения кремниевых нанотрубок [4].

Рассмотрим в качестве примера работу [120]. На Рис. 4.14 показан электронный снимок полученного образца, который представляет из себя массив цилиндров с конусообразными шляпками. Высота цилиндров примерно равна 100 нм, диаметр - 130 нм, а период решетки - 260 нм. Как видно из Рис. 4.14, отражение от такой структуры в видимом диапазоне составляет 3-10%. Авторы провели сравнение экспериментальных результатов с численными, которые были получены с помощью метода связанных волн [109]. Проводится также сравнение с аналитически полученным коэффициентом отражения от переходного слоя с соответствующим эффективным коэффициентом преломления. В обоих случаях наблюдается хорошее качественное согласие с экспериментом.

Рассмотрим теперь работы [91, 93]. На Рис. 4.15 показаны снимки исследуемых структур. Как видно из Рис. 4.16 для обоих структур в видимом диапазоне был достигнут коэффициент отражения в пределах 1%-5%. В то-

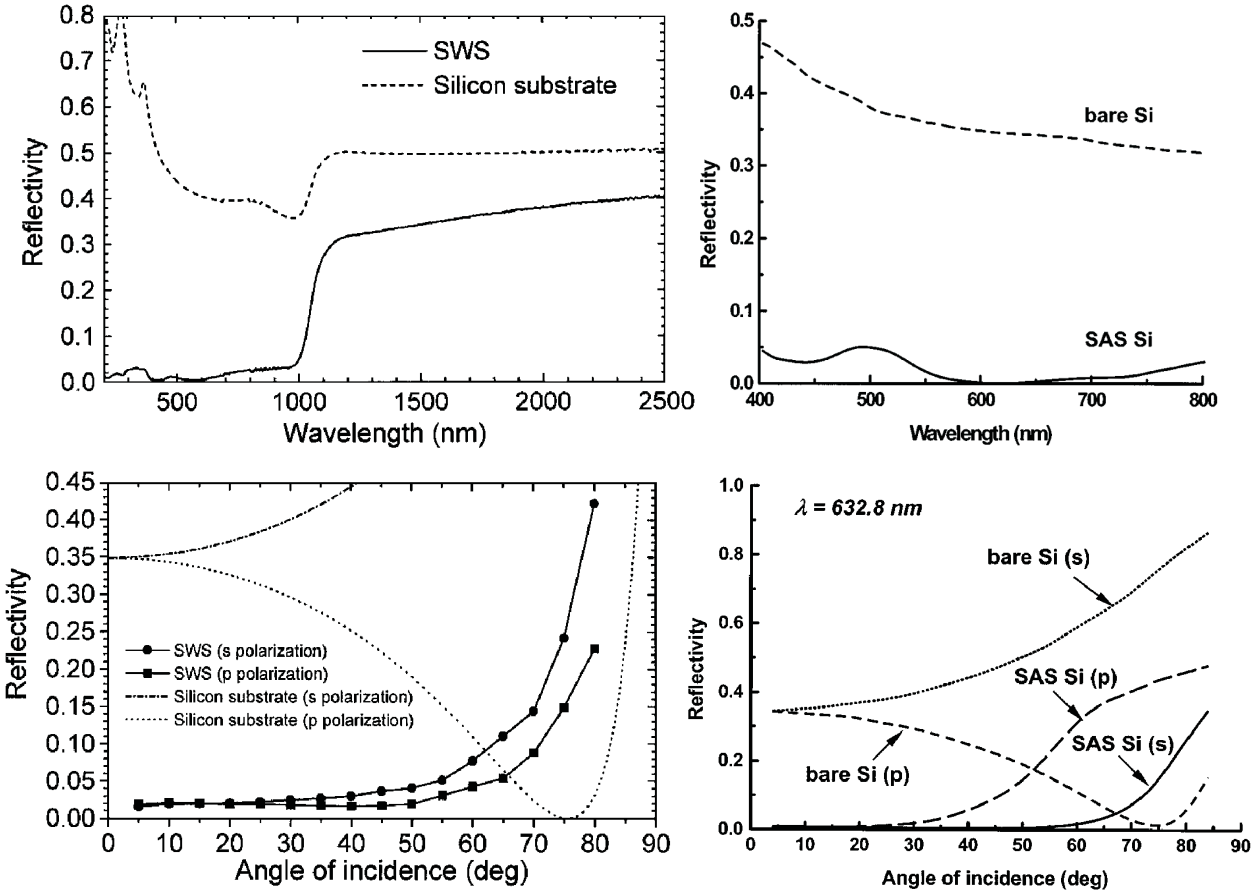

Рис. 4.16. Вверху слева и справа экспериментально измеренный коэффициент отражение от длины волны при нормальном падении от образцов, представленных на Рис. 4.15 слева и справа соответственно. Внизу слева и справа угловая зависимость коэффициента отражения на длине волны $\lambda = 632.8$ нм.

же время отражение растет с увеличением угла падения θ. Заметим, что при падении p-поляризованной волны под углами, близкими к углу Брюстера, отражение от подложки ниже, чем от текстурированной поверхности. Это можно объяснить тем, что в последнем случае волна перестает быть p-поляризованной относительно боковой поверхности нанорассеивателей. Однако, интегрально по всем углам текстурированная поверхность отражает меньше, чем подложка.

Перейдем теперь к результатам численных исследований антиотражающих свойств нанотекстурированных покрытий.

В работе [5] рассматривается одномерное покрытие, представляющее собой массив треугольных канавок с разными значениями периода D и вы-

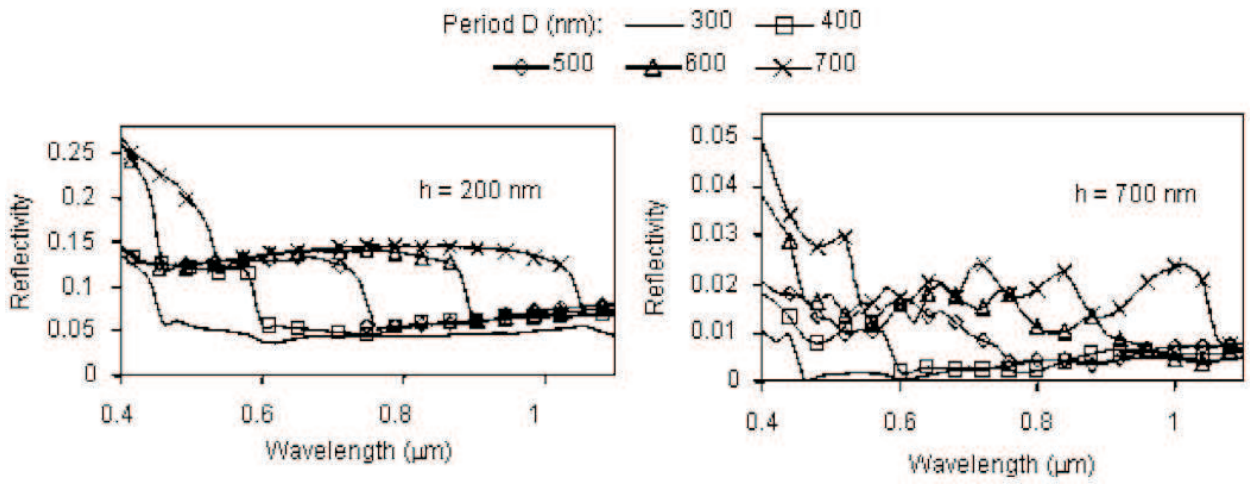

Рис. 4.17. Отражение от одномерной текстурированной поверхности, представляющей собой массив треугольных канавок с периода D и высотой h. Расчет выполнен с помощью метода связанных волн.

соты h. В расчетах используется метод связанных волн. Результаты работы представлены на Рис. 4.17. На основании этих результатов авторы работы делают вывод, что отражение падает с увеличением отношения высоты к периоду. Этому дается качественное объяснение, связывающее падение отражения с увеличением плавности изменения среднего коэффициента преломления.

На Рис. 4.18 представлены результаты, полученные в работе [90] для массива конусообразных рассеивателей. Расчеты велись с помощью метода FDTD. Из полученных результатов видно, что отражение падает при увеличении высоты и сохранении постоянной величины периода. Отметим, что отражение от конусообразных рассеивателей меньше, чем от цилиндрических. Это можно качественно объяснить тем, что в случае конусов средний коэффициент преломления меняется более плавно.

Подведем итоги литературного обзора. В имеющихся работах показано, что текстурированные покрытия обладают антиотражающими свойствами как в длинно-, так и в коротковолновом пределах. В первом случае это связано с тем, что оптические свойства таких покрытий подобны свойствам переходного слоя с плавно меняющимся коэффициентом преломле-

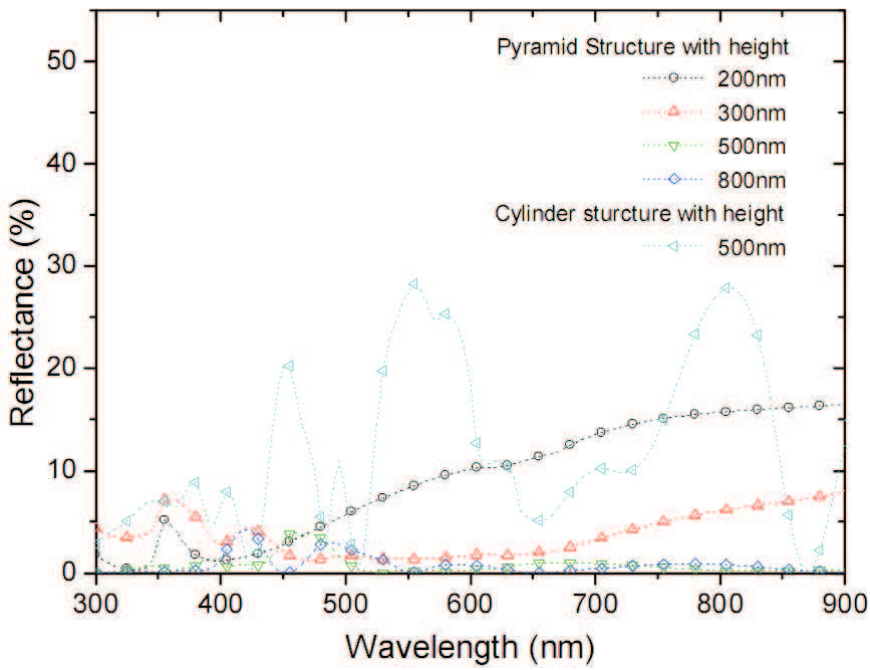

Рис. 4.18. Отражение от конусообразных и цилиндрических рассеивателей различной высоты, плотно упакованных в треугольную решетку с периодом 350 нм. Расчет выполнен с помощью метода FDTD.

ния. В другом предельном случае это связано с тем, что лучу требуются много переотражений внутри такой поверхности прежде чем окончательно отразиться обратно. На примере кремниевых текстурированных покрытий было показано, что достижение низких значений коэффициента отражения возможно и в случае, когда характерный размер текстуры сравним с длиной волны. Был установлен ряд общих закономерностей касательно влияния размера и геометрии текстуры на ее антиотражающие свойства. Было показано, что с увеличением высоты рассеивателей отражение падает, а при постоянной высоте и увеличении размеров их оснований отражение растет. Однако, как уже говорилось ранее, не было сделано какой-либо аналитической оценки характера убывания отражения при изменении геометрии рассеивателей.

Отметим, что в имеющихся работах, как правило, либо отдельно рассматривалось приближение эффективной среды или геометрической оптики (для двумерных структур), либо оптический диапазон для размеров рассеивателей порядка длины волны. Таким образом представляет интерес

единое исследование текстурированных поверхностей во всем диапазоне длин волн, включая длинно- и коротковолновый пределы. Такое исследование позволило бы установить, каков должен быть размер текстуры, чтобы для заданного диапазона длин волн отражение было бы минимальным. Такое исследование будет проведено в следующем параграфе.

4.2. Численное моделирование текстурированных покрытий во всем диапазоне размеров текстуры

В этом параграфе мы собираемся провести исследование антиотражающих свойств текстурированных поверхностей во всем диапазоне размеров текстуры, включающее в себя длинно- и коротковолновый предельные случаи. Это исследование требует использование такого метода, результаты которого были бы верны как для обоих предельных случаев, так и в диапазоне длин волн сопоставимых с размером текстуры. Этот метод позволил бы одновременно учитывать эффекты плавности изменения эффективной диэлектрической проницаемости и многократного перерассеяния лучей, проявляющиеся в двух предельных случаях, а также эффекты дифракции и интерференции волн, рассеянных на текстурированной поверхности для случая размера текстуры порядка длины волны.

Эти рассуждения привели нас к выводу о том, что для численного исследования поставленной задачи наиболее подходит метод решения уравнений Максвелла в конечных разностях (FDTD), изложенный в параграфе 1.1. Этот метод заключается в непосредственном численном решении уравнений Максвелла, поэтому получаемые с помощью него результаты точны для любого диапазона длин волн. Также присущая методу FDTD высокая параллельная эффективность позволяет использовать его для расчета больших трехмерных задач и покрыть таким образом весь диапазон рассматриваемых нами размеров текстурированных покрытий.

Для расчетов FDTD использовался параллельный программный комплекс, реализованный на основании библиотеки EMTL, принципы которой

изложены в главе 2. Для корректного отображения формы текстуры на вычислительную сетку нами был реализован метод подсеточного сглаживания, изложенный в параграфе 1.2.

Вначале данного параграфа мы оценим характер изменения отражения при изменении размеров текстуры в длинно- и коротковолновом пределах с помощью приближения эффективной среды и геометрической оптики соответственно, что позволит нам оценить вклад в наличие антиотражающих свойств различных физических эффектов. Помимо этого мы приведем сравнение результатов, полученных приближенными методами, с результатами FDTD, что даст нам возможность удостовериться в применимости FDTD к рассматриваемой задаче. Затем мы исследуем антиотражающие свойства текстурированной поверхности во всем диапазоне размеров текстуры с помощью FDTD. На основании полученных результатов мы сможем сделать окончательные выводы касательно их оптимальных размеров.

Для моделирования отражения переходного слоя, соответствующего текстурированной поверхности в приближении эффективной среды, мы использовали оба подхода, изложенных в параграфе 4.1.1. Для их реализации была написана специальная программа на языке C++.

Для моделирования текстурированной поверхности в приближении геометрической оптики мы использовали метод трассировки лучей, описанный в параграфе 4.1.2 (см. Рис. 4.21). Метод трассировки лучей был реализован нами в качестве составной части библиотеки EMTL, описанной в главе 2. Это дало возможность одновременно рассчитывать одну и ту же геометрию с помощью метода трассировки лучей и FDTD.

В конкретных численных расчетах мы рассматриваем подложку с нанесенными на нее стеклянными пирамидками (коэффициент преломления $n = 1.5$). Основаниями пирамидок являются треугольники, квадраты и круги (в этом случае пирамидка вырождается в конус) с высотой d. Пирамидки плотно упакованы в квадратную или треугольную решетки с периодом Λ. При этом мы будем отдельно выделять два случая (см. Рис. 4.19): случай полного замощения подложки основаниями пирамидок

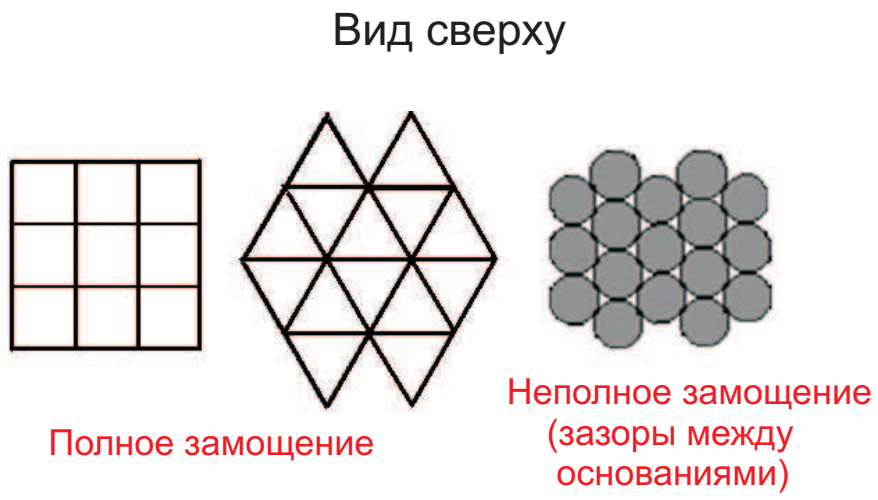

Рис. 4.19. Вид сверху на пирамидки: случаи полного и неполного замощения.

(это соответствует плотной квадратной или треугольной упаковки пирамидок с квадратными или треугольными основаниями соответственно) и случай неполного замощения (это соответствует конусам, поскольку между их круглыми основаниями всегда имеется зазор). Отметим, что полученные нами в этом параграфе результаты могут быть также применены к двумерным структурам (дифракционным решеткам).

В этом параграфе рассматривается случай нормального падения. Случай наклонного падения будет рассмотрен нами в следующем параграфе.

Как уже говорилось ранее, в длинноволновом пределе $\Lambda \ll \lambda$, оптические свойства текстурированной поверхности подобны свойствам промежуточного слоя с непрерывно меняющейся диэлектрической проницаемостью. Увеличение высоты пирамидок d приводит к увеличению плавности изменения эффективной диэлектрической проницаемости и соответственно к уменьшению отражения.

Рассмотрим вначале случай полного замощения, для которого фактор заполнения у вершин пирамидок $f(0) = 0$, а у оснований $f(d) = 1$. Вследствие этого согласно имеющимся выражениям для эффективной диэлектрической проницаемости (см. параграф 4.1) $\varepsilon(0) = \varepsilon_i$ и $\varepsilon(d) = \varepsilon_s$. При малых значениях коэффициента отражения для его расчета примени-

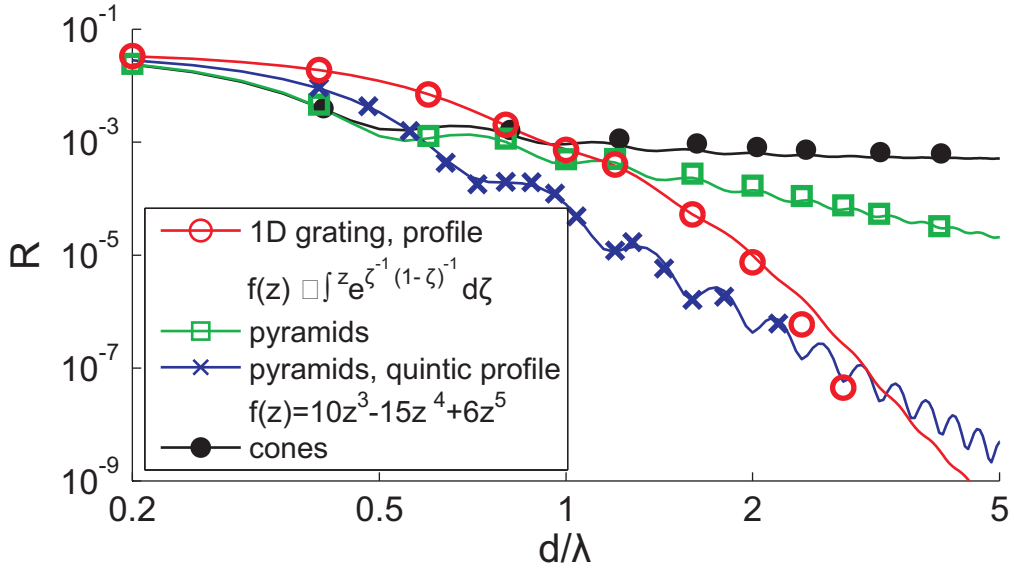

Рис. 4.20. Коэффициент отражения переходного слоя с оптическими свойствами, соответствующими (a) дифракционной решетке с „интегральным“ профилем $f(z) \sim \int_o^z e^{\zeta^{-1}(1-\zeta)^{-1}} d\zeta$ (TE поляризация); (b) плотно упакованным в квадратную решетку квадратным пирамидкам с (c) линейным $k' = 1$ профилем и (d) профилем $k' = 3$; (e) плотно упакованным в треугольную решетку конусам. Выражения для эффективной диэлектрической проницаемости квадратных пирамидок и конусов взяты из работ [102, 103]. Результаты FDTD (точки) соответствуют значениям параметров $\Lambda = 1$, $d = 16$, $4 < \lambda < \infty$, сеточный шаг $\Delta x = 0.01$.

ма формула (4.24), которая может быть также записана как

$$\rho = -\int_0^d \frac{1}{2\tilde{n}} \frac{d\tilde{n}}{dz} \exp\left[-i\frac{4\pi}{\lambda}\int_0^z \tilde{n}(z')dz'\right]dz, \tag{4.34}$$

где $\tilde{n}$ - эффективный коэффициент преломления.

Введем новую переменную интегрирования $g = -4\pi \int_0^z \tilde{n}(z')dz'$. В предположении бесконечной дифференцируемости функции $\tilde{n}$ и следующей отсюда бесконечной дифференцируемости функции $h = \frac{1}{2\tilde{n}}\frac{d\tilde{n}}{dz}\frac{dz}{dg}$ мы можем проинтегрировать (4.34) по частям:

$$\rho = -\int_0^{g(d)} he^{ig/\lambda}dg = \sum_{k=1} i\lambda^k h^{(k-1)} e^{ig/\lambda}\Big|_0^{g(d)}. \tag{4.35}$$

Итак, показано, что степень убывания $R = |\rho|^2$ с уменьшением λ зависит от индекса k' первого ненулевого члена в (4.35) как $R \sim \lambda^{2k'}$. В приближении эффективной среды единственным значимым параметром

задачи является d/λ, а значит $R \sim (d/\lambda)^{-2k'}$ при различных значениях d и λ.

Отметим, что подбирая специальную форму профиля пирамидок $f(z)$ можно изменять степень убывания отражения при увеличении d/λ. Например, если $f(z)$ задавать многочленом степени $(2k'-1)$ таким, что $f^{(i)}(0) = f^{(i)}(d) = 0, 0 < i < k'$, в (4.35) первые k' членов будут равны нулю, а значит и $R \sim (d/\lambda)^{-2k'}$.

Подберем такой специальный профиль, который бы характеризовался равенством нулю всех производных $f^{(i)}$ в точках 0 и d. Без ограничения общности положим $\Lambda = d = 1$. Возьмем за основу бесконечно дифференцируемую функцию $e^{z^{-1}}$, которая вместе со всеми своими производными равна нулю в $z = 0$. Функция $e^{(1-z)^{-1}}$ будем обладать теми же свойствами в $z = 1$. Далее, несложно заметить, что одновременно этими свойствами в $z = 0$ и $z = 1$ обладает функция $e^{z^{-1}(1-z)^{-1}}$. Однако эта функция равна нулю в $z = 0$ и $z = 1$, а нам бы хотелось, чтобы в $z = 1$ она была бы равна единице и задавала таким образом профиль пирамидки. Для этого можно ее проинтегрировать и получить в итоге профиль $f(z) = C\int\limits_0^z e^{\zeta^{-1}(1-\zeta)^{-1}}d\zeta$, где значение константы C побирается таким, чтобы $f = 1$. В случае такого „интегрального“ профиля коэффициент отражения при увеличении d/λ уменьшается экспоненциально, поскольку $f^{(i)}(0) = f^{(i)}(d) = 0, \forall i > 0$ (см. Рис. 4.20).

Мы провели численные расчеты для плотно упакованных квадратных пирамидок с линейным профилем $k' = 1$ ($f(z) = z$) и профилем $k' = 3$ ($f(z) = 10z^3 - 15z^4 + 6z^5$). В соответствии с приведенными рассуждениями, для этих обоих случаев было получено $R \sim (d/\lambda)^{-2}$ и $R \sim (d/\lambda)^{-6}$ соответственно (Рис. 4.20). Отметим, что результаты, полученные с помощью приближения эффективной среды и FDTD находятся в хорошем согласии друг с другом.

В случае неполного замощения подложки основаниями пирамидок между этими основаниями имеется зазор ($0 < f(d) < 1$). Вследствие этого согласно имеющимся выражениям для эффективной диэлектрической

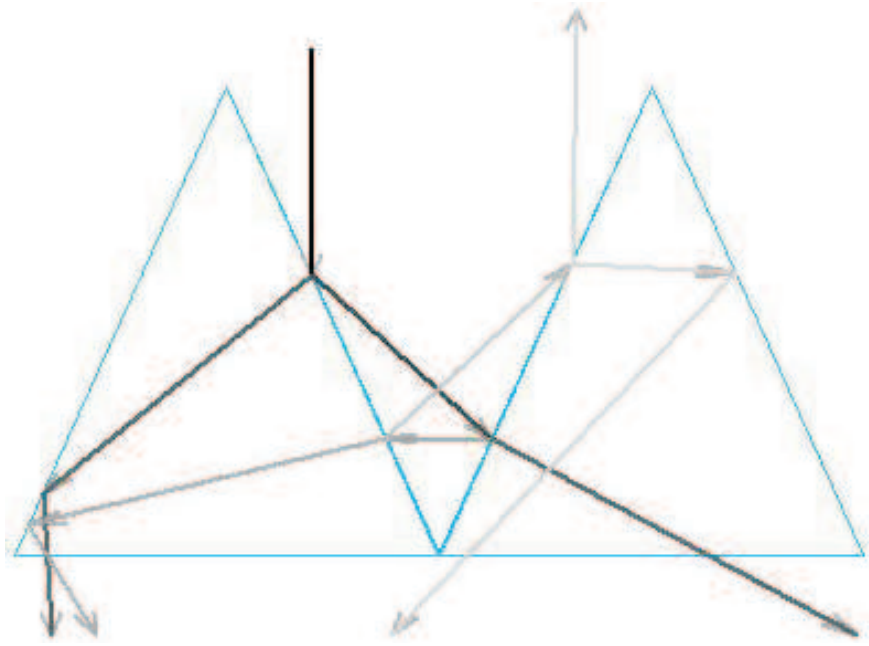

Рис. 4.21. Визуализация работы метода трассировки лучей.

проницаемости (см. параграф 4.1) $\varepsilon(d) \neq \varepsilon_i$, то есть в точке $z = d$ у функции диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z)$ имеется разрыв. Отсюда можно сделать вывод, что при увеличении d/λ отражение выходит на постоянное значение, равное коэффициенту отражения между средами со значениями диэлектрической проницаемости $\varepsilon(d)$ и ε_i. Это показано на Рис. 4.20 в случае плотной треугольной упаковки, для которой фактор заполнения у оснований конусов равен $f(d) = \pi/(2\sqrt{3})$.

Перейдем теперь к рассмотрению оптических свойств текстурированной поверхности в коротковолновом пределе $\Lambda \gg \lambda$. В этом случае они не зависят от длины волны λ и определяются только геометрией задачи.

На Рис. 4.22 представлены результаты расчетов для плотно упакованных треугольных и квадратных пирамидок (полное замощение) и конусов (неполное замощение). Результаты, полученные с помощью FDTD находятся в хорошем согласии с результатами, полученными методом трассировки лучей.

В случае полного замощения проведенные нами расчеты показали экспоненциальное убывание отражения при увеличении высоты пирами-

док (Рис. 4.22). Мы связываем это со следующими соображениями.

Согласно классификации лучей из параграфа 4.1 в коэффициент отражения от текстурированной поверхности вносят вклад отраженные и вторичные лучи $R = R_{refl} + R_{sec}$. Число переотражений, необходимое падающему лучу, чтобы полностью выйти из структуры, может равняться M или $M + 1$, где $M \leq \pi/(2\beta) \leq M + 1$, и β - угол между осью и боковой поверхностью пирамидки. Поскольку для каждого m-ого переотражения луч падает на пирамидку под углом $(2m - 1)\beta$, вклад отраженных лучей в отражение можно оценить сверху как

$$R \leq \prod_{m=1}^{M} R\left((2m-1)\beta\right) \leq \exp\left(-C\beta^{-1}\right), \tag{4.36}$$

где $R(\phi)$ - коэффициент отражения для угла падения ϕ, а C - некоторая константа. Далее, мы предполагаем (без имеющегося доказательства), что R_{sec} сравним по порядку R_{refl} по двум соображениям: (a) поскольку $n_s > n_i$, пирамидка отклоняет выходящие из нее вторичные лучи вниз ближе к нормали, (b) преломленные лучи, после некоторого количества переотражений от внутренней стороны грани пирамидки либо уходят в подложку, либо достигают угла полного внутреннего отражения, что больше не позволяет им выйти из пирамидки.

Отметим, что для случая полного замощения результаты зависят в большей степени от величины угла β, нежели от формы их оснований. Так для квадратных и треугольных пирамидок наклон кривых на Рис. 4.22 приблизительно отличается на $\sqrt{3}$, что соответствует отношению углов β для этих типов пирамидок при фиксированном d/Λ. Проведенные нами результаты расчетов для плотноупакованных пирамидок с основаниями в форме правильных шестиугольников практически полностью совпадали с результатами для квадратных пирамидок, так как при заданном фиксированном d/Λ значения углов β у них равны.

В случае неполного замощения (например, плотно упакованные в треугольную решетку конусы на Рис. 4.22) нами установлено, что при увеличении d/Λ отражение вначале падает, а после достижения некоторого ми-

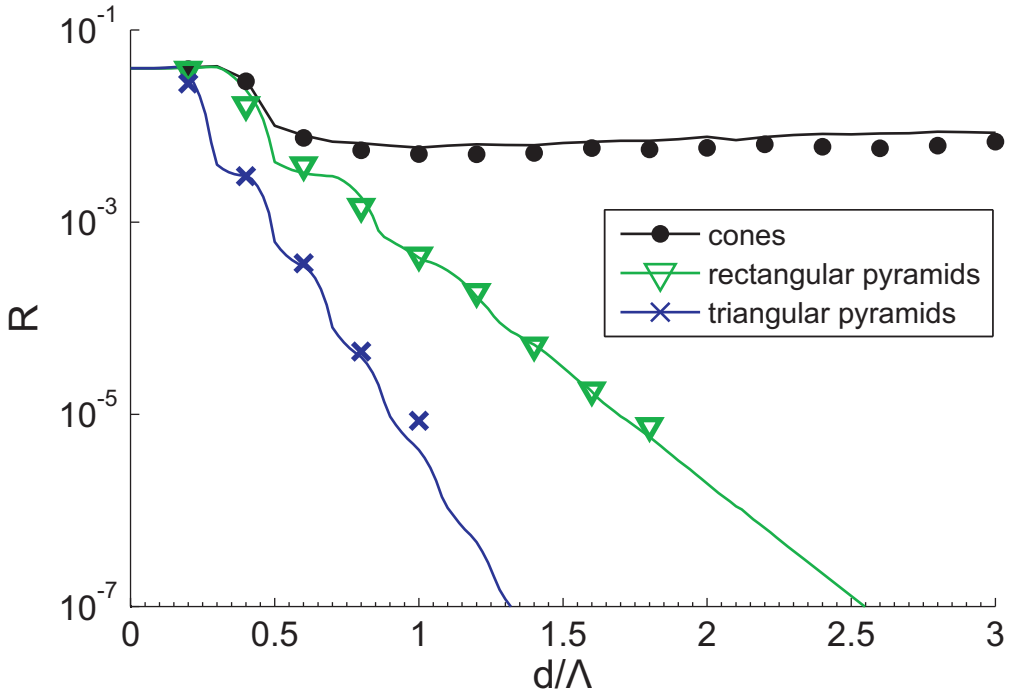

Рис. 4.22. Коэффициент отражения плотно упакованных пирамидок в приближении геометрической оптики. Результаты FDTD (точки) получены для $\Lambda/\lambda = 15$.

нимума поднимается до постоянного значения. Мы связываем это с тем, что при $d/\Lambda \to \infty$ часть лучей после первоначального отражения от боковой поверхности движется почти параллельно ей и неминуемо попадает в зазор между основаниями, от которого эти лучи окончательно отражаются обратно (Рис. 4.23). В нашем примере плотно упакованных в треугольную решетку конусов это касается практически всех лучей (кроме тех исключительных случаев, когда точка их соударения с боковой поверхностью лежит на плоскости, проходящей через оси соседних конусов), и поэтому при $d/\Lambda \to \infty$ коэффициент отражения стремится к коэффициенту отражения подложки.

Перейдем теперь к результатам для оптических свойств текстурированной поверхности во всем диапазоне размеров текстуры. Для их получения нами использовался метод FDTD, представляющий собой прямое численное решение уравнений Максвелла.

Мы осуществили серию расчетов для фиксированного значения периода $\Lambda = 1$ и для ряда значений высот d, лежащего в диапазоне $0 < d < 5$.

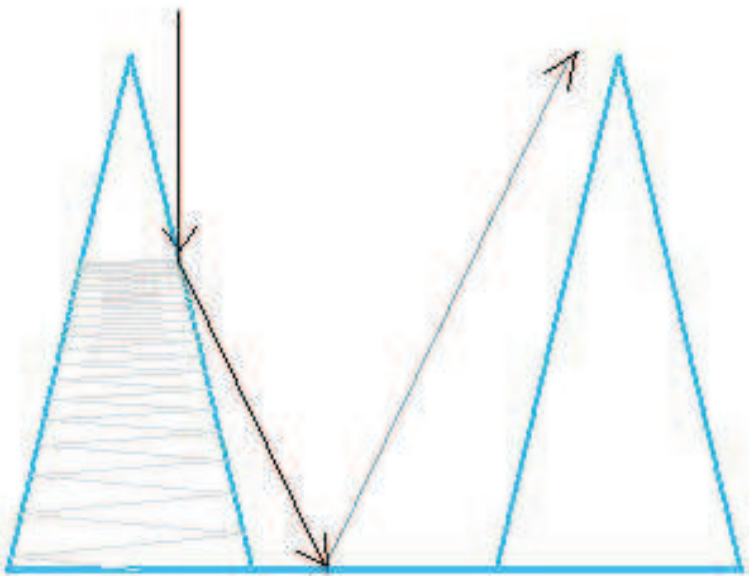

Рис. 4.23. Ход луча в случае неполного замощения.

Для того, чтобы покрыть как можно больший диапазон длин волн, мы делаем по три расчета для каждой высоты d, причем каждому расчету соответствует значение временной ширины падающего на структуру импульса $w = 0.01, 0.1, 1$. Поскольку диэлектрическая проницаемость в рассматриваемом нами случае не зависит от частоты, мы можем интерпретировать полученные результаты, как если бы они были получены при различных значениях Λ/λ и соответствующих d/Λ.

Рассмотрим вначале случай полного замощения подложки основаниями пирамидок (Рис. 4.24). Зафиксируем какое-либо значение d/Λ и исследуем зависимость отражения R от Λ/λ (см. соответствующие черные кривые на Рис. 4.24). При увеличении Λ/λ от 0 до 1 отражение падает и достигает локального минимума при $\Lambda/\lambda = 1$, что качественно объясняется тем, эффективная диэлектрическая проницаемость в нулевом приближении не зависит от Λ/λ, а отражение соответствующего промежуточного слоя падает при увеличении высоты $d/\lambda = (d/\Lambda)(\Lambda/\lambda)$. При $\Lambda/\lambda \geq 1$ отражение продолжает падать, проходя ряд локальных минимумов, соответствующих тем значениям Λ/λ, при которых появляются очередные дифракционные порядки. Отметим, что при $\Lambda/\lambda \geq 1$, приближение эффективной среды становится неприменимым, и падение отражения обусловлено эффектами

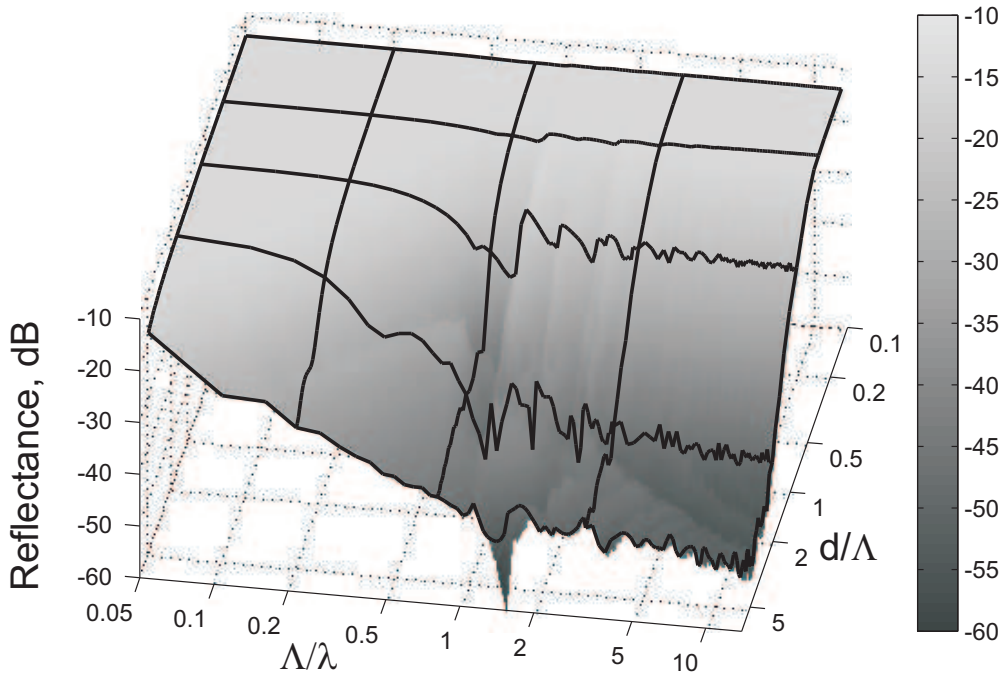

Рис. 4.24. Коэффициент отражения от плотно упакованных квадратных пирамидок при различных значениях Λ/λ и d/Λ. Результаты получены с помощью метода FDTD.

дифракции и интерференции волн, рассеянных на текстурированной поверхности. При больших значениях Λ/λ размах осцилляций уменьшается, и кривая выходит на предел геометрической оптики.

Отметим, что чем больше выбранное значение d/Λ, тем при больших Λ кривая выходит на предел геометрической оптики, что связано с тем, что свету требуется больше переотражений, чтобы выйти из структуры. При этом большая часть этих переотражений находится вблизи оснований пирамидок, в результате чего путь, проходимый лучом между последовательными соударениями, оказывается мал. При недостаточно большом значении Λ/λ длина этого пути может быть сравнима длиной волны, что делает неприменимым приближение геометрической оптики.

В случае неполного замощения, как, например, для случая плотно упакованных в треугольную решетку конусов (Рис. 4.25), наименьшее значение отражения достигается при Λ порядка длины волны.

Итак, нами проведено всестороннее исследование антиотражающих свойств текстурированной поверхности начиная от длинно- и кончая ко-

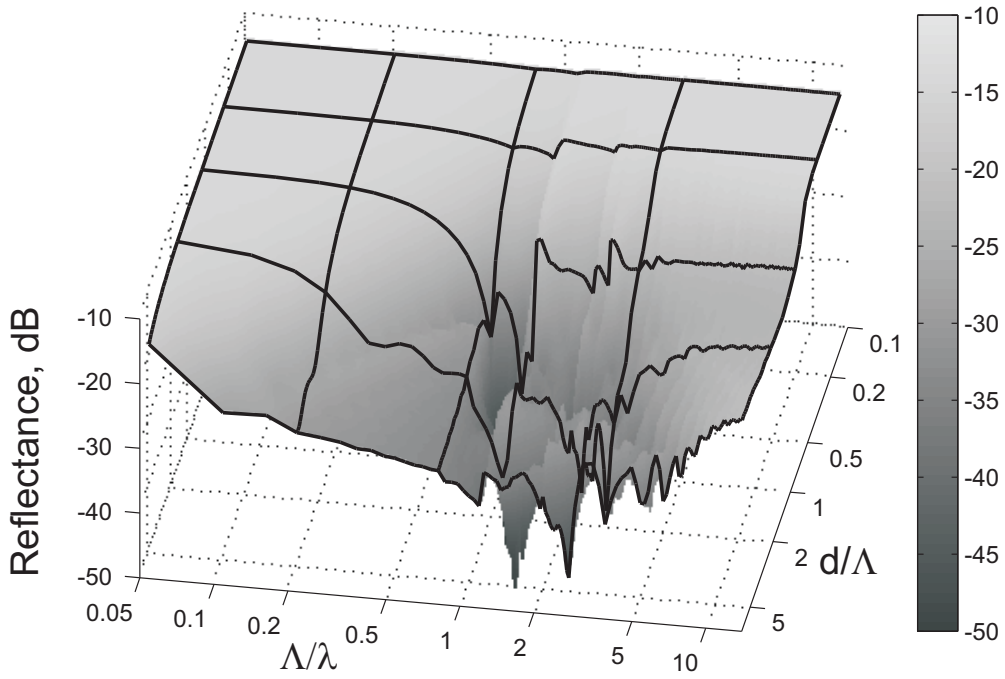

Рис. 4.25. Коэффициент отражения от плотно упакованных в треугольную решетку конусов при различных значениях Λ/λ и d/Λ. Результаты получены с помощью метода FDTD.

ротковолновым пределами. Для этого использовался метод FDTD, который, реализуя прямое численное решение уравнений Максвелла, непосредственно учитывает все имеющиеся физические эффекты, приводящие к уменьшению отражение. Помимо этого для длинно- и коротковолнового предельных случаев использовались приближения эффективной среды и геометрической оптики соответственно.

Установлено, что оптимальные размеры текстуры зависят от характера замощения подложки основаниями пирамидок. В случае полного замощения, когда между основаниями нет зазоров, при фиксированной величине отношения d/Λ наименьшее отражение достигается при $\Lambda \to \infty$. Это согласуется с тем, что, как мы показали, скорость убывания отражения при росте d и фиксированных Λ и λ в приближении геометрической оптики экспоненциальна, в то время как в приближении эффективной среды она имеет степенной характер. При этом малая величина отражения достижима также и при Λ порядка длины волны. В случае неполного замощения оптимальное значение Λ имеет порядок длины волны. Наличие минимума в этом случае также находится в согласии с полученными нами

оценками в приближениях эффективной среды и геометрической оптики.

Отметим, что изготовление макротекстурированных поверхностей может являться технологически сложной и материалозатратной задачей. Альтернативой могут служить относительно недорогие современные способы изготовления нанотекстурированных поверхностей, такие как, метод плазменного травления (см., напр., [4]). Вместе с полученным нами результатом достижимости малых значений коэффициента отражения при размерах текстуры порядка длины волны, это служит обоснованием эффективности нанотекстурированных покрытий для оптического диапазона.

4.3. Кремниевые текстурированные покрытия

Целью этого параграфа является численное исследование антиотражающих свойств кремниевых текстурированных покрытий, используемых для повышения эффективности солнечных элементов. Моделируемая структура представляет собой подложку из кремния с нанесенными на нее конусами диаметра D и высоты d. Эта геометрия адекватно описывает получаемые экспериментально реальные образцы нанотекстурированных антиотражающих покрытий (см. [4, 90, 91, 93, 120]).

Вследствие круглой формы оснований у рассеивателей, полное замощение ими подложки невозможно. Из выводов предыдущего параграфа следует, что наименьшее значение коэффициента отражения в этом случае должно достигаться при характерных размерах конусов порядка длины волны и наиболее плотном их размещении, чему соответствует плотная треугольная упаковка. Нашей целью является продемонстрировать это для кремниевых покрытий. Наше численное исследование предполагает также учет нерегулярности расположения рассеивателей, рассмотрение которой отсутствует в существующих работах.

Вначале мы проводим исследование для случая нормального падения, а после нахождения оптимальных геометрических параметров текстуры выясняем, каков характер зависимости коэффициента отражения

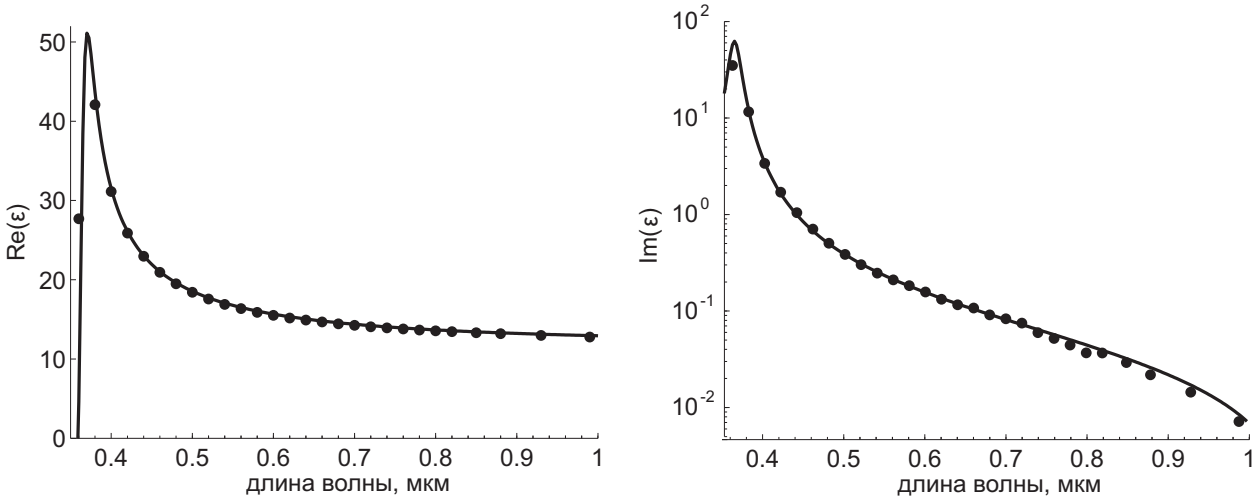

Рис. 4.26. Действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости кремния: сравнение экспериментальных данных (кривые) и аппроксимации с помощью трех членов Лоренца (точки).

от угла падения, а также предлагаем метод для расчета среднего годового коэффициента отражения на выбранной широте. Для расчета антиотражающих свойств текстурированной поверхности в случае наклонного падения используется специально разработанный итерационный алгоритм, описанный в параграфе 1.3. Основные расчеты ведутся для треугольной упаковки конусов за исключением тех случаев, которые будут оговорены отдельно.

Экспериментальные данные для диэлектрической проницаемости кремния $\varepsilon(\omega)$ взяты нами из работы [121]. Поскольку в численной схеме FDTD предполагается задание зависимости $\varepsilon(\omega)$ в виде суммы членов Друде и Лоренца (см. (1.20)), нами была разработана программа для соответствующей аппроксимации табличных данных. Для нахождения конкретных значений параметров в (1.20), в ней фиксируется число членов Друде N_D и Лоренца N_L и подбираются такие значения ε_p, ω_p и γ_p, чтобы разница между $\varepsilon(\omega)$ и табличной зависимостью была минимальна. При этом, чтобы обеспечить устойчивость разностной схемы, на диапазон значений искомых параметров накладываются разумные ограничения. Если удовлетворительные значения параметров найти не удается, поиск продолжается для большего числа членов Друде и Лоренца.

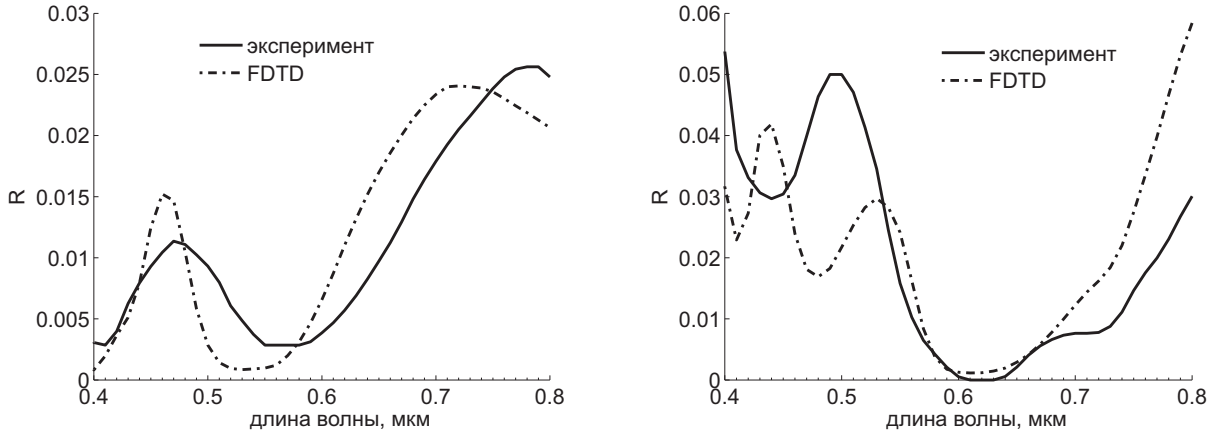

Рис. 4.27. Сравнение экспериментальных данных, представленных в работах [91] и [93] (слева и справа соответственно), с результатами, полученными с помощью FDTD. Электронный снимок соответствующих экспериментальных образцов приведен на Рис. 4.15.

Для диэлектрической проницаемости кремния мы подобрали аппроксимацию тремя членами Лоренца со следующими значениями параметров (ω_p и γ_p измеряются в 1/мкм): $\varepsilon_\infty = 1, \varepsilon_1 = 8, \varepsilon_2 = 2.85, \varepsilon_3 = -0.107, \omega_1 = 3.64, \omega_2 = 2.76, \omega_3 = 1.73, \gamma_1 = 0, \gamma_2 = 0.063, \gamma_3 = 2.5$. Как видно из Рис. 4.26 в видимом диапазоне длин волн достигается отличное согласие с табличной зависимостью диэлектрической проницаемости от частоты.

С целью проверки применимости метода FDTD к рассматриваемой задаче нами было проведено сравнение экспериментальных данных, приведенных в работах [91, 93], с результатами, полученными численно (Рис. 4.27). В рассматриваемых работах исследовались антиотражающие свойства получаемых экспериментально текстурированных поверхностей, которые представляют из себя подложку с нанесенными на нее конусообразными рассеивателями. Для обеих работ наблюдается качественное согласие с результатами FDTD, конкретное количественное расхождение может быть вызвано особой формой рассеивателей в эксперименте, возможной нерегулярностью текстуры, а также самой погрешностью эксперимента.

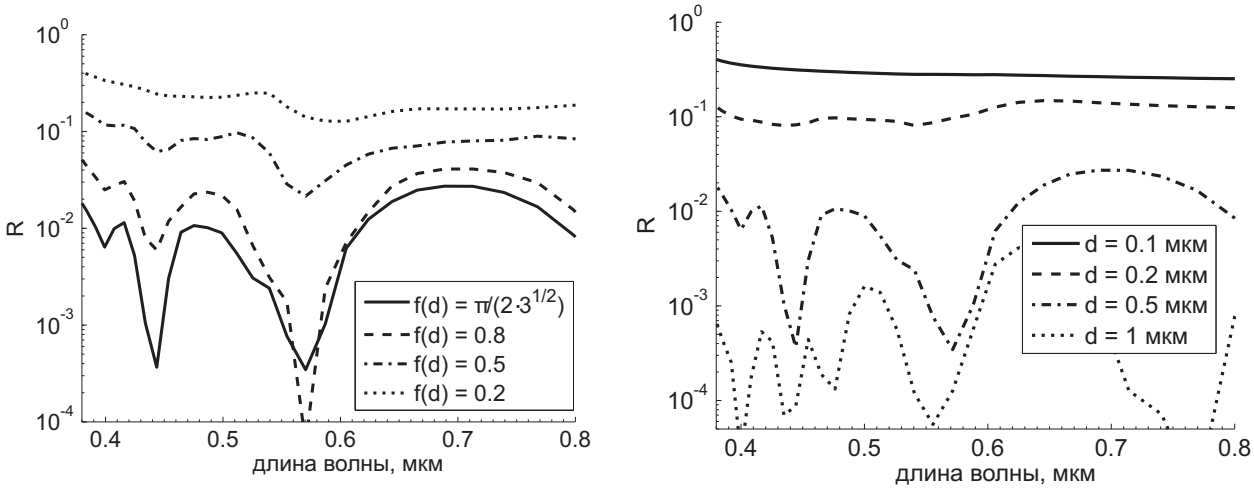

Рис. 4.28. Слева: Коэффициент отражения для конусов $D = 0.3$ мкм, $d = 0.5$ мкм при различных значениях фактора заполнения $f(d)$. Справа: Коэффициент отражения для конусов $D = 0.3$ мкм в случае плотной треугольной упаковки оснований при различных значениях высоты d. Результаты получены с помощью FDTD.

Перейдем теперь к полученным численным результатам.

Нас вначале будет интересовать, как зависит коэффициент отражения от фактора заполнения у оснований $f(d)$ и от высоты d конусов. Для этого мы проводим расчеты FDTD для диаметра оснований конусов $D = 0.3$мкм. Как показывают расчеты FDTD, увеличение величины фактора заполнения $f(d)$ и высоты конусов d приводит к уменьшению коэффициента отражения (см. Рис. 4.28). При этом максимальное значение $f(d)$ достигается в случае плотной треугольной упаковки оснований конусов $f(d) = \pi/(2\sqrt{3})$. Как показали дополнительные расчеты, для 0.05мкм $\leq D \leq 1$мкм эта закономерность не зависят от величины диаметра оснований конусов D. Отметим, что это согласуется с результатами, полученными нами в параграфе 4.2.

Исследуем теперь, каково оптимальное значение диаметра D в случае $f(d) = \pi/(2\sqrt{3})$ и при достаточном значении d. Из Рис. 4.29 видно, что наименьшее значение R достигается при значениях D порядка средней рассматриваемой длины волны в вакууме и в кремнии (длина волны в кремнии меньше в $n = Re(\sqrt{\varepsilon})$ раз длины волны в вакууме, что, как видно

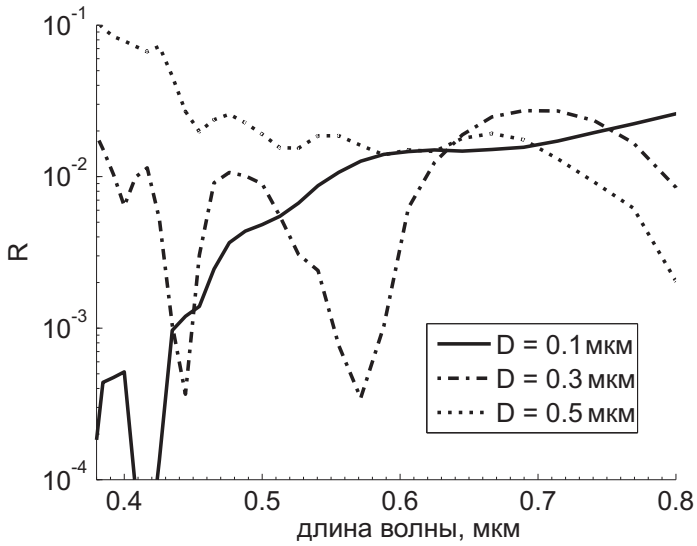

Рис. 4.29. Коэффициент отражения для конусов $d = 0.5$ мкм в случае плотной треугольной упаковки оснований при различных значениях диаметра D. Результаты получены с помощью FDTD. Мы видим, что уменьшение радиуса r приводит к сдвигу диапазона длин волн, в котором достигается наименьший коэффициент отражения, влево.

из Рис. 4.26, в видимом диапазоне примерно равно 4). Таким образом нами установлено, для видимого диапазона света (380-760 нм) оптимальный размер D порядка нескольких сотен нанометров.

Для учета нерегулярности расположения рассеивателей, мы рассчитывали расширенную периодическую ячейку, поперечный размер которой равнялся 10 мкм, что более чем в 10 раз превосходит характерную длину волны. Как показали дополнительные численные эксперименты, для учета нерегулярности такого размера вполне достаточно. На Рис. 4.30 видно, что коэффициент отражения текстурированной поверхности зависит главным образом от фактора заполнения $f(d)$, в то время как способ размещения конусов на его величине почти не сказывается.

Резюмируя, можно сказать, что наименьшее отражение R достигается в случае наиболее плотной упаковки оснований конусов, причем диаметр конусов D должен быть порядка характерной длины волны λ, а высота d - как можно больше. При этом $d \approx 0.5$ мкм уже достаточно для достижения низкого с точки зрения практического значения коэффициента отражения

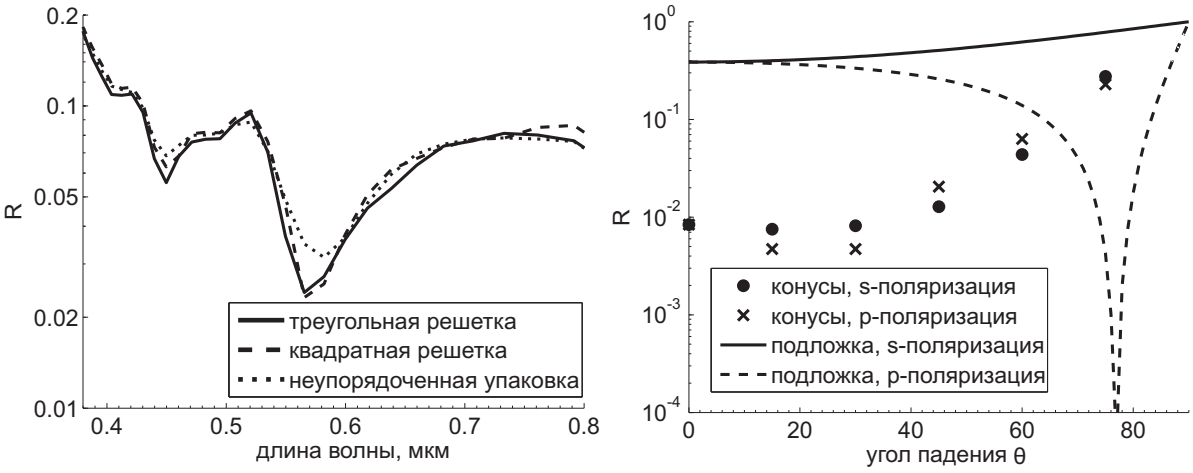

Рис. 4.30. Слева: отражение от текстурированной поверхности в случае разных способов упаковки конусов $D = 0.3$ мкм, $d = 0.5$ мкм при сохранении фактора заполнения постоянным $f(d) = 0.5$. Справа: отражение от плотно упакованных в треугольную решетку конусов $D = 0.3$ мкм, $d = 0.5$ мкм и от не текстурированной подложки для длины волны 0.5 мкм при разных углах падения. Результаты получены с помощью FDTD.

($\sim 1\%$).

Результаты расчетов антиотражающих свойств текстурированной поверхности в случае наклонного падения свидетельствуют о том, что все сделанные выводы относительно оптимальных значений величин $f(d)$, d, D остаются в силе. Вместе с тем, как и следует ожидать, отражение R растет с увеличением угла падения θ (Рис. 4.30). При падении p-поляризованной волны под углами, близкими к углу Брюстера, коэффициент отражения от подложки оказывается ниже, чем от текстурированной поверхности, что можно объяснить тем, что в последнем случае волна перестает быть p-поляризованной относительно боковой поверхности конусов. Однако, как будет показано ниже, интегрально по всем углам текстурированная поверхность дает более низкий коэффициент отражения, чем подложка.

В оставшейся части данного параграфа мы собираемся описать предлагаемую нами простую практическую методику поиска интегрального годового коэффициента отражения. Как известно, плотность тока короткого

замыкания, генерируемого в солнечном элементе, равна [122]

$$J_{sc} = q \int \frac{S(\lambda)}{E_{ph}(\lambda)}(1 - R(\lambda))Q(\lambda), \tag{4.37}$$

где q - заряд электрона, $S(\lambda)$ - поток падающего солнечного излучения через единичную площадку фотоэлемента, $E_{ph}(\lambda)$ - энергия фотона, $R(\lambda)$ - коэффициент отражения, $Q(\lambda)$ - эффективный квантовый выход фотоэлемента, а интегрирование идет по спектру солнечного излучения.

Поток $S(\lambda)$ и коэффициент отражения $R(\lambda)$ зависят от угла, под которым падает солнечный свет. Поэтому при оптимизации геометрии антиотражающего покрытия фотоэлемента необходимо учитывать угловое распределение солнечного излучения в течение года. Поскольку изучение электрофизических свойств фотоэлемента не входит в нашу задачу, мы, исключая из рассмотрения величину $Q(\lambda)$, будем рассчитывать интегральный коэффициент отражения за год.

Для наиболее точного определения углового распределения падающего излучения в течение года нужно задействовать специально написанные для этих целей программы, в которых учитывается все возможное множество более или менее значимых факторов, таких как поправка на атмосферную рефракцию, учет геоцентрического параллакса и т. д. (см., например, [123]). В этой работе в целях сохранения наглядности мы пренебрежем большинством таких факторов и воспользуемся следующей простой моделью. Определение всех используемых ниже астрономических терминов можно найти в пособии [124].

Поток радиации, падающей на горизонтальную площадку единичной площади под углом θ, равен

$$S(\lambda, \theta) = I(\lambda, \theta) \cos\theta. \tag{4.38}$$

Интенсивность падающего излучения $I(\lambda, \theta)$ складывается из интенсивностей прямой солнечной радиации и рассеянной радиации (небесного света). Чтобы иметь возможность пренебречь последним слагаемым, мы будем вести расчет для г. Эйлат (Израиль), для которого количество облачных дней в году пренебрежимо мало.

Интенсивность прямой солнечной радиации зависит от состояния атмосферы и высоты Солнца над горизонтом, которая определяет длину пути лучей в атмосфере. Проходя сквозь атмосферу, радиация претерпевает поглощение, которое в основном определяется водяным паром, и рассеяние, вызываемое молекулами газов и аэрозолями. Существуют различные модели, описывающее уменьшение интенсивности прямой солнечной радиации, и мы будем пользоваться самой простой из них [125]:

$$I(\lambda, \theta) = I_0(\lambda)\tau^{m(\theta)}, \tag{4.39}$$

где $I_0(\lambda)$ - внеатмосферная интенсивность солнечного излучения, τ - пропускная способность атмосферы, которая не зависит от длины волны и в нашем случае примерно равно 0.6 [125], а m - оптическая масса атмосферы. Единичной атмосферной массе соответствует путь, пройденный солнечными лучами при вертикальном падении до уровня моря. Для плоскопараллельной модели атмосферы оптическая масса на уровне моря равна косекансу высоты Солнца над горизонтом $m = 1/\sin(a)$ [125].

Спектр солнечного излучения с хорошей точностью может быть аппроксимирован спектром излучения абсолютно черного тела при температуре $T = 5800K$, интенсивность $u(\lambda)$ которого в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$ согласно закону Планка равна

$$u(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}. \tag{4.40}$$

Угол падения солнечного света на горизонтальную поверхность θ равен $\pi/2 - a$, где a - высота Солнца над горизонтом. Последняя может быть посчитана по формуле

$$\sin a = \sin\phi \sin\delta + \cos\phi \cos\delta \cos H, \tag{4.41}$$

где ϕ - географическая широта местности, δ - склонение Солнца, H - часовой угол, величина которого равномерно меняется в течение звездных суток в интервале 2π [124]. Сама формула (4.41) является следствием теоремы косинусов для сферической геометрии.

Склонение Солнца δ может быть определено из угла β, пройденного Солнцем по эклиптике начиная с дня весеннего равноденствия:

$$\sin\delta = \sin\varepsilon \sin\beta, \tag{4.42}$$

где ε - угол между плоскостями экватора и эклиптики, приближенно равный 23.5^0 [124].

Для упрощения расчета мы будем считать, что земля движется вокруг Солнца с постоянной скоростью по круговой орбите. Тогда β равномерно увеличивается в течение года от 0 до 2π. Помимо этого мы будем пренебрегать тем фактом, что в течение суток Солнце успевает несколько переместиться вдоль эклиптики и изменить свое положение относительно звезд (иначе говоря, скорость вращения Земли вокруг свой оси мы полагаем равной бесконечности). Тогда интегральный коэффициент отражения равен

$$R_{int} = \frac{\int\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} R(\lambda,\theta)u(\lambda)\tau^{1/\cos\theta}\cos\theta d\lambda d\beta dH}{\int\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} u(\lambda)\tau^{1/\cos\theta}\cos\theta d\lambda d\beta dH}, \tag{4.43}$$

где значение $\cos\theta = \sin a(\beta, H)$ может быть расчитано с помощью (4.41-4.42).

В случае нетекстурированной поверхности рассчитанный нами интегральный коэффициент отражения на рассматриваемой широте оказался примерно равен 37.5%, в то время как для геометрии, соответствующей Рис. 4.30, мы получили значение 5%, что соответствует уменьшению в 7.5 раза.

4.4. Выводы

С использованием трех различных методов найдены асимптотические зависимости величины отражения от геометрических параметров составляющих текстуру рассеивателей для длинно- и коротковолнового пределов. Установлено, что ключевым фактором, влияющим на оптимальный размер

рассеивателей, является характер замощения подложки их основаниями. В случае полного замощения наименьшее значение отражения достигается при макроскопических размерах рассеивателей, а в случае неполного - оптимальный размер имеет порядок длины волны.

Показано, что для достижения наименьшей величины отражения в видимом диапазоне наиболее эффективным решением являются нанотекстурированные покрытия. Установлено, что наличие неупорядоченности, а также небольших зазоров в расположении составляющих эти покрытия рассеивателей не сказывается на величине отражения. При этом в случае кремниевых нанотекстурированных покрытий, используемых для увеличения эффективности солнечных элементов, практически достижимой является величина отражения порядка одного процента во всем видимом диапазоне (для нетекстурированной поверхности коэффициент отражения равен 30-40%).

5. Заключение

5.1. Основные результаты и выводы работы

- Найдены геометрические параметры вольфрамового фотонного кристалла типа прямого опала (период решетки порядка нескольких сотен нм, фактор заполнения по вольфраму порядка нескольких процентов), погруженного в керамическую матрицу, при которых в случае отсутствия поглощения в матрице КПД источника света на основе фотонного кристалла оказывается выше в несколько раз по сравнению с обычными лампами накаливания. Показано, что у рассмотренных составляющих матрицу термоустойчивых материалов (оксид гафния) сильное поглощение при высоких температурах приводит к существенному снижению эффективности светового источника на основе фотонного кристалла, вплоть до значения КПД лампы накаливания. Сделан вывод о том, что для создания высокоэффективного источника света на основе фотонного кристалла необходим поиск материалов со слабым поглощением при высоких температурах.

- Показано, что наличие дефектов в фотонных кристаллах (неупорядоченности по расположению и разброса по размерам составляющих фотонный кристалл элементов) приводит к уменьшению величины излучения в видимом диапазоне при сохранении подавления излучения в инфракрасном диапазоне. Получено количественное согласие результатов расчетов с результатами специально поставленного эксперимента. Это дает обоснование для применения использованного в расчетах метода FDTD для моделирования источников света на основе фотонных кристаллов.

- С использованием трех различных методов найдены асимптотические

зависимости величины отражения от геометрических параметров составляющих текстуру рассеивателей для длинно- и коротковолнового пределов. Установлено, что ключевым фактором, влияющим на оптимальный размер рассеивателей, является характер замощения подложки их основаниями. В случае полного замощения наименьшее значение отражения достигается при макроскопических размерах рассеивателей, а в случае неполного - оптимальный размер имеет порядок длины волны.

- Показано, что для достижения наименьшей величины отражения в видимом диапазоне наиболее эффективным решением являются нанотекстурированные покрытия. Установлено, что наличие неупорядоченности, а также небольших зазоров в расположении составляющих эти покрытия рассеивателей не сказывается на величине отражения. При этом в случае кремниевых нанотекстурированных покрытий, используемых для увеличения эффективности солнечных элементов, практически достижимой является величина отражения порядка одного процента во всем видимом диапазоне (для нетекстурированной поверхности коэффициент отражения равен 30-40%).

- Предложен новый подход программной реализации метода решения уравнений Максвелла в конечных разностях (FDTD), основанный на интегральном представлении уравнений Максвелла. В рамках этого подхода написана параллельная программа на языке программирования C++. В ходе ее написания реализован ряд оригинальных решений: оптимизация использования памяти с помощью упаковки используемых в разностных уравнениях коэффициентов; увеличение производительности посредством разбиения алгоритма обновления сеток на основной цикл, поддающийся векторизации, и специализированные поправки к нему; увеличение параллельной эффективности путем балансировки доменов. Специально проведенные тесты показали, что быстродействие программы примерно в два раза выше,

чем у программы MEEP, разработанной в Массачусетском технологическом институте. Также был продемонстрирован линейный характер масштабируемости программы вплоть до тысячи вычислительных ядер. Развитый при написании программы подход обеспечивает возможность расчета с одновременным использованием нескольких сеток, каждая из которых максимально приспособлена к соответствующей ей области моделируемой структуры. Это является особо важным при моделировании оптических свойств структур сложной формы с неоднородностями, много меньшими длины волны. Программа находится в открытом доступе в интернете.

- В рамках метода FDTD предложен и реализован алгоритм подсеточного сглаживания для дисперсных сред, позволяющий существенно уменьшить величину численной ошибки, связанной с неточным отображением тел, обладающих произвольной формой поверхности, на прямоугольную вычислительную сетку. Его применение приводит к увеличению порядка точности метода FDTD по сравнению с обычным „лестничным“ приближением. Это является значимым для самых разнообразных оптических приложений: при моделировании оптических свойств металлических ФК, при расчете антиотражающих свойств текстурированных покрытий и т. д.

- Предложен и реализован итерационный метод для моделирования наклонного падения плоской волны на периодическую структуру в численном расчете FDTD. С его помощью можно получать результаты во всем диапазоне углов от 0^0 до 90^0, а также наблюдать реальное поведение поля во времени. Это позволяет эффективно исследовать излучательные характеристики металлических фотонных кристаллов, а также антиотражающие свойства текстурированных покрытий при любом угле падения.

5.2. Благодарности

Хочу выразить особую благодарность моему руководителю - Потапкину Борису Васильевичу за постановку темы и плодотворное обсуждение результатов. Отдельную благодарность выражаю моим соавторам Юрию Ефремовичу Лозовику, Илье Валуеву, Марии Богдановой, Сергеям Белоусову и Эйдерману за стимулирующие дискуссии.

Литература

1. *Андриевский Р. А., Рагуля А. В.* Наноструктурные материалы. — Москва: Издательский Центр Академия, 2005.

2. *Joannopoulos J. D., G.Johnson S., Winn J. N., Meade R. D.* Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. — Princeton Univ. Press, 2008.

3. *Fleming J. G., Lin S. Y., El-Kady I., Biswas R., Ho K. M.* All-metallic three-dimensional photonic crystals with a large infrared bandgap // *Nature.* — 2002. — Vol. 417. — Pp. 52—-55.

4. Improved broadband and quasi-omnidirectional anti-reflection properties with biomimetic silicon nanostructures / Y.-F. Huang, S. Chattopadhyay, Y.-J. Jen, C.-Y. Peng, T.-A. Liu, Y.-K. Hsu, C.-L. Pan et al. // *Nature Nanotechnology.* — 2007. — Vol. 2. — Pp. 770–774.

5. *Llopis F., Tobias I.* Texture profile and aspect ratio influence on the front reflectance of solar cells // *J. Appl. Phys.* — 2006. — Vol. 100. — P. 124504.

6. *Taflove A., Hagness S. H.* Computational Electrodynamics: The Finite Difference Time-Domain Method. — Boston: Artech House, 2005.

7. *Farjadpour A., Roundy D., Rodriguez A., Ibanescu M., Bermel P.* Improving accuracy by subpixel smoothing in fdtd // *Optics Letters.* — 2006. — Vol. 31. — Pp. 2972–2974.

8. *Deinega A., Valuev I.* Subpixel smoothing for conductive and dispersive media in the fdtd method // *Optics Letters.* — 2007. — Vol. 32. — Pp. 3429–3431.

9. *Valuev I., Deinega A., Belousov S.* Iterative technique for analysis of pe-

riodic structures at oblique incidence in the finite-difference time-domain method // *Optics Letters.* — 2008. — Vol. 33. — Pp. 1491–1493.

10. *Deinega A., Valuev I., Potapkin B., Lozovik Y.* Antireflective properties of pyramidally textured surfaces // *Optics Letters.* — 2010. — Vol. 35. — Pp. 106–108.

11. *Дейнега А. В., Конистяпина И. В., Богданова М. В., Валуев И. А., Лозовик Ю. Е., Потапкин Б. В.* Оптимизация антиотражающего слоя в солнечных батареях на основе первопринципных расчетов // *Известия Вузов. Физика.* — 2009. — Т. 11. — С. 13–19.

12. Предсказательное моделирование оптических свойств металло-диэлектрических метаматериалов / С. А. Белоусов, М. В. Богданова, И. А. Валуев, А. В. Дейнега, С. Л. Эйдерман, А. А. Книжник, И. . Полищук и др. // *Известия Вузов. Физика.* — 2009. — Т. 11. — С. 20–27.

13. *Valuev I., Deinega A., Knizhnik A., Potapkin B.* Creating numerically efficient fdtd simulations using generic c++ programming // *Lecture Notes in Computer Science.* — 2007. — Vol. 4707. — Pp. 213–226.

14. *Yee K. S.* Numerical solution of inital boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media // *IEEE Trans. Antennas and Propagation.* — 1966. — Vol. 14. — Pp. 302–307.

15. *Okoniewski M., Mrozowski M., Stuchly M. A.* Simple tratment of multi-term dispersion in fdtd // *IEEE Microware and Guided Wave Lett.* — 1997. — Vol. 7. — Pp. 121–123.

16. *Joseph R. M., Hagness S. C., Taflove A.* Direct time integration of maxwell's equations in linear dispersive media with absorption for scattering and propagation of femtosecond electromagnetic pulses // *Opt. Lett.* — 1991. — Vol. 16. — Pp. 1412–1414.

17. *Umashankar K. R., Taflove A.* A novel method to analyze electromagnetic scattering of complex objects // *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility.* — 1982. — Vol. 24. — Pp. 397—-405.

18. *Berenger J. P.* A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // *J. Comput. Phys.* — 1994. — Vol. 114. — Pp. 185–200.

19. *Sacks Z. S., Kingsland D. M., Lee R., Lee J.-F.* A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbingboundary condition // *IEEE Trans. Antennas and Propagation.* — 1995. — Vol. 43. — Pp. 1460–1463.

20. *Gedney S. D.* An anisotropic perfectly matched layer absorbing media for the truncation of fdtd latices // *IEEE Trans. Antennas and Propagation.* — 1996. — Vol. 44. — Pp. 1630–1639.

21. *Chew W. C., Weedon W. H.* A 3d perfectly matched medium from modified maxwell's equations with stretched coordinates // *Microwave Optical Tech. Letters.* — 1994. — Vol. 7. — Pp. 590–604.

22. *Teixeira F. L., Chew W. C.* General closed-form pml constitutive tensors to match arbitrary bianisotropic and dispersive linear media // *IEEE Microwave and Guided Wave Letters.* — 1998. — Vol. 8. — Pp. 223–225.

23. *Bohren C. F., Huffman D. R.* Absorption and Scattering of Light by Small Particles. — New York: Wiley-Interscience, 1983.

24. *Zivanovic S. S., Yee K. S., Mei K. K.* A subgridding method for the time domain finite-difference method to solve maxwell's equations // *IEEE Trans. Microware Theory Tech.* — 1991. — Vol. 38. — Pp. 471–479.

25. *Jurgens T. G., Taflove A., Umashankar K., Moore T. G.* Finite-difference time-domain modeling of curved surfaces // *IEEE Trans. Antennas Propag.* — 1992. — Vol. 40. — Pp. 357–366.

26. *Shankar V., Mohammadian A., Hall W. F.* A time-domain finite-volume treatment for the maxwell equations // *Electromagnetics.* — 1990. — Vol. 10. — Pp. 127–145.

27. *Mohammadi A., Nadgaran H., Agio M.* Contour-path effective permettivities for the two-dimensional finite-difference time-domain method // *Optics Express.* — 2005. — Vol. 13. — Pp. 10367–10381.

28. *Lee J.-Y., Myung N.-H.* Locally tensor conformal fdtd method for modeling arbitrary dielectric surface // *Microw. Opt. Technol. Lett.* — 1999. — Vol. 23. — Pp. 245–249.

29. *Nadobny J., Sullivan D., Wlodarczyk W., Deuflhard P., Wust P.* A 3-d tensor fdtd-formulation for treatment of slopes interfaces in electrically inhomogeneous media // *IEEE Trans. Antennas Propag.* — 2003. — Vol. 51. — Pp. 1760–1770.

30. *Dey S., Mittra R.* A coonformal finite-difference time-domain technique for modeling cylindrical dielectric resonators // *IEEE Trans. Microware Theory Tech.* — 1999. — Vol. 47. — Pp. 1737–1739.

31. *Kaneda N., Houshmand B., Itoh T.* Fdtd analysis of dielectric resonators with curved surfaces // *IEEE Trans. Microware Theory Tech.* — 1997. — Vol. 45. — Pp. 1645–1649.

32. *Okoniewski M., Mrozowski M., Stuchly M. A.* Simple tratment of multiterm dispersion in fdtd // *IEEE Microware and Guided Wave Lett.* — 1997. — Vol. 7. — Pp. 121–123.

33. *van de Hulst H. C.* Light Scattering by Small Particles. — New York: Wiley, 1957.

34. *Taflove A., Umashankar K. R.* Radar cross-section of general three-dimensional structures // *IEEE Trans. Electromagn. Compat.* — 1983. — Vol. 25. — Pp. 433–440.

35. *Ordal M. A., Long L. L., Bell R. J., Bell S. E.* Optical properties of the metals al, co, au, fe, pb, ni, pd, pt, ag, ti, and w in the infrared and far infrared // *Appl. Optics.* — 1983. — Vol. 22. — Pp. 1099–1119.

36. *Kao Y. C. A., Atkins R. G.* A finite-difference time-domain approach for frequency selective surfaces at oblique incidence // *Proc. 1996 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium, MD, July 1996.* — 1996. — Vol. 2. — Pp. 1432–1435.

37. *Roden J. A., Gedney S. D., Kesler M. P., Maloney J. G., Harms P. H.* Time-domain analysis of periodic structures at oblique incidence: orthogonal and nonorthogonal fdtd implementations // *Microwave Theory and Techniques.* — 1998. — Vol. 46. — Pp. 420–427.

38. *Harms P., Mittra R., Ko W.* Implementation of the periodic boundary condition in the finite-difference time-domain algorithm for fss structures // *IEEE Trans. Antennas and Propagation.* — 1994. — Vol. 42. — Pp. 1317–1324.

39. *Aminian A., Rahmat-Samii Y.* Spectral fdtd: a novel technique for the analysis of oblique incident plane wave on periodic structures // *IEEE Trans. Antennas and Propagation.* — 2006. — Vol. 54. — Pp. 1818–1825.

40. *Ren J., Gandhi O. P., Walker L. R., Fraschilla J., Boerman C. R.* Floquet-based fdtd analysis of two-dimensional phased array antennas // *IEEE Microwave and Guided Wave Letters.* — 1994. — Vol. 109. — Pp. 109–111.

41. *Stefanou N., Yannopapas N., Modinos A.* Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients // *Comput. Phys. Commun.* — 1998. — Vol. 113. — Pp. 49–77.

42. *Stroustrup B.* What is object-oriented programming? // *IEEE Software.* — 1988. — Vol. 5. — Pp. 10–20.

43. *Корнеев В. Д.* Параллельное программирование в MPI. — Новосибирск: Издательство ИВМиМГ СО РАН, 2002.

44. *Страуструп Б.* Язык программирования C++. — Москва: Издательство Бином, 2005.

45. *Yablonovitch E.* Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58. — Pp. 2059—-2062.

46. *Sakoda K.* Optical Properties of Photonic Crystals. — Berlin: Springer, 2001.

47. *Белотелов В. И., Звездин А. К.* Фотонные кристаллы и другие метаматериалы. — Москва: Наука, 2006.

48. *Narayanaswamy A., Chen G.* Thermal emission control with one-dimensional metallodielectric photonic crystal // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70. — P. 125101.

49. *Li Z.-Y.* Modified thermal radiation in three-dimensional photonic crystals // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 241103.

50. *Celanovic I., Perreault D., Kassakian J.* Resonant-cavity enhanced thermal emission // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 72. — Pp. 075127—-075132.

51. *Florescu M., Lee H., Stimpson A. J., Dowling J.* Thermal emission and absorption of radiation in finite inverted-opal photonic crystals // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72. — P. 033821.

52. *Yannopapas V.* Thermal emission from three-dimensional arrays of gold nanoparticles // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 73. — P. 113108.

53. *Chan D. L. C., Soljacic M., Joannopoulos J. D.* Thermal emission and design in 2d-periodic metallic photonic crystal slab // *Optics Express.* — 2006. — Vol. 14. — Pp. 8785–8796.

54. *Enoch S., Simon J.-J., Escoubas L., Elalmy Z., Lemarquis F., Torchio P., Albrand G.* Simple layer-by-layer photonic crystal for the control of thermal emission // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — Vol. 86. — Pp. 261101—-261103.

55. *Lee B. J., Fu C. J., Zhang Z. M.* Coherent thermal emission from one-dimensional photonic crystals // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — Vol. 87. — P. 071904.

56. *Gall J. L., Olivier M., Greffet J.-J.* Experimental and theoretical study of reflection and coherent thermal emissionby a sic grating supporting a surface-phonon polariton // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55. — Pp. 10105–10114.

57. *Laroche M., Carminati R., Greffet J.-J.* Coherent thermal antenna using a photonic crystal slab // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96. — P. 123903.

58. *Tsai M.-W., Chuang T.-H., Meng C.-Y., Chang Y.-T., Lee S.-C.* High performance midinfrared narrow-band plasmonic thermal emitter // *Appl. Phys. Lett.* — 2006. — Vol. 89. — P. 173116.

59. *Cornelius C. M., Dowling J. P.* Modification of planck blackbody radiation by photonic band-gap structures // *Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 59. — Pp. 4736–4746.

60. *Pigeat P., Rouxel D., Weber B.* Calculation of thermal emissivity for thin films by a direct method // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 57. — Pp. 9293–9300.

61. *Luo C., Narayanaswamy A., Chen G., Joannopoulos J. D.* Thermal radiation from photonic crystals: A direct calculation // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93. — Pp. 213905—-213908.

62. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. — Москва: Наука, 1976. — Т. 5.

63. *Рытов С. М.* Введение в статистическую радиофизику. — Москва: Наука, 1978.

64. *Шёпф Х.-Г.* От Кирхгофа до Планка. — Москва: Мир, 1981.

65. *Greffet J.-J., Nieto-Vesperinas M.* Field theory for generalized bidirectional reflectivity: derivation of helmholtz's reciprocity principle and kirchhoff's law // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1998. — Vol. 15. — Pp. 2735–2744.

66. *Сивухин Д. В.* Общий курс физики. — Москва: Физматлит, 2006. — Т. 4.

67. *Lin S. Y., Moreno J., Fleming J. G.* Three-dimensional photonic-crystal emitter for thermal photovoltaic power generation // *Appl. Phys. Lett.* — 2003. — Vol. 83. — Pp. 380–382.

68. *Coutts T. J., Fitzgerald M. C.* Thermophotovoltaics // *Sci. Am.* — 1998. — Vol. 279. — P. 90.

69. *Sai H., Yugami H., Akiyama Y., Kanamori Y., Hane K.* Spectral control of thermal emission by periodic microstructured surfaces in the near-infrared region // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 2001. — Vol. 18. — Pp. 1471—-1476.

70. *Maruyama S., Kashiwa T., Yugami H., Esashi M.* Thermal radiation from two-dimensionally confined modes in microcavities // *Appl. Phys. Lett.* — 2001. — Vol. 79. — Pp. 1393–1395.

71. *Sai H., Kanamori Y., Yugami H.* High-temperature resistive surface grating for spectral control of thermal radiation // *Applied Physics Letters.* — 2003. — Vol. 82. — Pp. 1685–1687.

72. Photonic crystal enhanced narrow-band infrared emitters / M. U. Pralle, N. Moelders, M. P. McNeal, I. Puscasu, A. C. Greenwald, J. T. Daly, E. A. Johnson et al. // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 81. — Pp. 4685—-4687.

73. *Lin S. Y., Fleming J. G., Li Z. Y., El-Kady I., Biswas R., Ho K. M.* Origin of absorption enhancement in a tungsten, three-dimensional photonic crystal // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 2003. — Vol. 40. — Pp. 1538–1541.

74. *Lin S. Y., Fleming J. G., El-Kady I.* Experimental observation of photonic-crystal emission near a photonic band edge // *Appl. Phys. Lett.* — 2003. — Vol. 83. — Pp. 593–595.

75. *Roberts S.* Optical properties of nickel and tungsten and their interpretation according to drude's formula // *Phys. Rev.* — 1959. — Vol. 114. — Pp. 104–115.

76. *Ландсберг Г. С.* Оптика. — Москва: Физматлит, 2003.

77. *Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А.* Введение в теорию неупорядоченных систем // *ЖЭТФ.* — 1982. — Т. 83, № 6. — С. 2362–2376.

78. *Борн М., Вольф Э.* Основы Оптики. — Москва: Наука, 1973.

79. *Knittl Z.* Optics of thin films. — London: John Wiley, 1976.

80. *Macleod H. A.* Thin film optical filter. — New York: McGraw-Hill, 1989.

81. *Minot M. J.* Single-layer, gradient refractive index antireflection films effective from 0.35 to 2.5 mkm // *J. Opt. Soc. Am.* — 1976. — Vol. 66. — Pp. 515–519.

82. *Jacobson R.* Inhomogeneous and coevaporated homogeneous films for optical applications // Physics of Thin Films / Ed. by G. Hass, M. H. Francombe, R. W. Hoffman. — New York: Academic, 1975. — Vol. 8. — Pp. 51–98.

83. *Bernhard C. G.* Structural and functional adaptation in a visual system // *Endeavour.* — 1967. — Vol. 26. — Pp. 79–84.

84. *Bernhard C. G., Miller W. H., Moller A. R.* The insect corneal nipple array // *Acta Physiol. Scand.* — 1965. — Vol. 63. — Pp. 1–25.

85. *Wilson S. J., Hutley M. C.* The optical properties of 'moth eye' antireflection surfaces // *Opt. Acta.* — 1982. — Vol. 29. — Pp. 993–1009.

86. *Grann E. B., Moharam M. G., Pommet D. A.* Optimal design for antireflective tapered two-dimensional subwavelength grating structures // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1995. — Vol. 12. — Pp. 333–339.

87. *Raguin D. H., Morris G. M.* Analysis of antireflection-structured surfaces with continuous one-dimensional surface profiles // *Appl. Opt.* — 1993. — Vol. 32. — Pp. 2582–2598.

88. *Sopori B. L., Pryor R. A.* Design of antireflection coatings for textured silicon solar cells // *Sol. Cells.* — 1983. — Vol. 8. — Pp. 249–261.

89. *Campbell P., Green M. A.* Light trapping properties of pyramidally textured surfaces // *J. Appl. Physics.* — 1987. — Vol. 62. — Pp. 243–249.

90. *Chen H. L., Chuang S. Y., Lin C. H., Lin Y. H.* Using colloidal lithography to fabricate and optimize sub-wavelength pyramidal and honeycomb structures in solar cells // *Opt. Express.* — 2007. — Vol. 15. — Pp. 14793–14803.

91. *Kanamori Y., Sasaki M., Hane K.* Broadband antireflection gratings fabricated upon silicon substrates // *Opt. Lett.* — 1999. — Vol. 24. — Pp. 1422–142.

92. *Kanamori Y., Hane K., Sai H., Yugami H.* 100 nm period silicon antireflection structures fabricated using a porous alumina membrane mask // *Appl. Phys. Lett.* — 2001. — Vol. 78. — Pp. 142–143.

93. *Yu Z., Gao H., Wu W., Ge H., Chou S. Y.* Fabrication of large area subwavelength anti-reflection structures on si using trilayer resist nanoimprint lithography and lift-off // *Journal of Vacuum Science and Tech. B.* — 2003. — Vol. 21. — Pp. 2874–2877.

94. *Song Y. M., Bae S. Y., Yu J. S., Lee Y. T.* Closely packed and aspect-ratio-controlled antireflection subwavelength gratings on gaas using a lens-like shape transfer // *Opt. Lett.* — 2009. — Vol. 34. — Pp. 1702–1704.

95. *Hadobas K., Kirsch S., Carl A., Acet M., Wassermann E. F.* Reflection properties of nanostructure-arrayed silicon surfaces // *Nanotechnology.* — 2000. — Vol. 11. — Pp. 161–164.

96. *Lee C., Bae S. Y., Mobasser S., Manohara H.* A novel silicon nanotips antireflection surface for the micro sun sensor // *Nanoletters.* — 2009. — Vol. 5. — Pp. 2438–2442.

97. *Boden S. A., Bagnall D. M.* Tunable reflection minima of nanostructured antireflective surfaces // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — Vol. 93. — P. 133108.

98. *Lalanne P., Lemercier-Lalanne D.* On the effective medium theory of subwavelength periodic structure // *J. Mod. Opt.* — 1994. — Vol. 43. — Pp. 7875–7882.

99. *Tao R., Chen Z., Sheng P.* First-principles fourier approach for the calculation of the effective dielectric constant of periodic composites // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 41. — Pp. 2417–2420.

100. *Haggans C. W., Li L., Kostuk R. K.* Effective-medium theory of zeroth-order lamellar gratings in conical mountings // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1993. — Vol. 10. — Pp. 2217–2225.

101. *Grann E. B., Moharam M. G., Pommet D. A.* Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional subwavelength binary gratings // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1994. — Vol. 11. — Pp. 2695–2703.

102. *Brauer R., Bryngdahl O.* Design of antireflection gratings with approximate and rigorous methods // *Appl. Opt.* — 1994. — Vol. 33. — Pp. 7875–7882.

103. *Wu F., Whites K. W.* Computation of static effective permittivity for a multiphase lattice of cylinders // *Electromagnetics.* — 2001. — Vol. 21. — Pp. 97–114.

104. *Lalanne P., Lemercier-Lalanne D.* Depth dependence of the effective properties of subwavelength gratings // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1997. — Vol. 14. — Pp. 450–458.

105. *Raguin D. H., Morris G. M.* Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region // *Appl. Opt.* — 1993. — Vol. 32. — Pp. 1154–1167.

106. *Abouelsaood A. A., El-Naggar S. A., Ghannam M. Y.* Shape and size dependence of the anti-reflective and light-trapping action of periodic grooves // *Prog. Photovolt: Res. Appl.* — 2002. — Vol. 10. — Pp. 513–526.

107. *Franceschetti G.* Scattering from plane layered media // *IEEE Trans. Antennas Propag.* — 1964. — Vol. 12. — Pp. 754–763.

108. *Kraus J. D.* Electromagnetics. — New York: McGraw-Hill, 1984.

109. *Moharam M. G., Gaylord T. K.* Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings // *J. Opt. Soc. Am.* — 1982. — Vol. 72. — Pp. 1385–1392.

110. *Ono Y., Kimura Y., Ohta Y., Nishida N.* Antireflection effect in ultrahigh spatial-frequency holographic relief gratings // *Applied Optics.* — 1987. — Vol. 26. — Pp. 1142–1146.

111. *Southwell W. H.* Gradient-index antireflection coatings // *Opt. Lett.* — 1983. — Vol. 8. — Pp. 584–586.

112. *Southwell W. H.* Pyramid-array surface-relief structures producing antireflection index matching on optical surfaces // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1991. — Vol. 8. — Pp. 549–553.

113. *Smith A. W., Rohatgi A., Neel S. C.* Texture: a ray tracing program for the photovoltaic community // *Photovoltaic Specialists Conference, 1990., Conference Record of the Twenty First IEEE.* — 1990. — Vol. 1. — Pp. 426–431.

114. *Thorp D., Wenham S. R.* Ray-tracing of arbitrary surface textures for light-trapping in thin silicon solar cells // *Solar Energy Materials and Solar Cells.* — 1997. — Vol. 48. — Pp. 295–301.

115. *Correig Z., Gomez J. L., Calderer J.* Optical analysis of textured surfaces for photovoltaic solar cells // *Electrotechnical Conference, 1991. Proceedings., 6th Mediterranean.* — 1991. — Vol. 1. — Pp. 202–205.

116. *Pla J. C., Duran J. C., Skigin D. C., Depine R. A.* Ray tracing vs. electromagnetic methods in the analysis ofantireflective textured surfaces // *Photovoltaic Specialists Conference, 1997., Conference Record of the Twenty-Sixth IEEE.* — 1997. — Pp. 187–190.

117. *Bucci O., Franceschetti G.* Scattering from wedge-tapered absorbers // *IEEE Trans. Antennas Propag.* — 1971. — Vol. 19. — Pp. 96–104.

118. *Aroutiounian V. M., Martirosyan K., Soukiassian P.* Almost zero reflectance of a silicon oxynitride/porous silicon double layer antireflection coating for silicon photovoltaic cells // *J. Phys. D.* — 2006. — Vol. 39. — Pp. 1623–1625.

119. *Striemer C. C., Fauchet P. M.* Dynamic etching of silicon for broadband antireflection applications // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 81. — Pp. 2980–2982.

120. *Lalanne P., Morris G. M.* Antireflection behavior of silicon subwavelength periodic structures for visible light // *Nanotechnology.* — 1997. — Vol. 8. — Pp. 53–56.

121. *Green M. A., Keevers M.* Optical properties of intrinsic silicon at 300 k // *Progress in Photovoltaics.* — 1995. — Vol. 3, no. 3. — Pp. 189–192.

122. *Hovel H. J.* Solar Cells, Semiconductors and Semimetals. — New York: Academic, 1975. — Vol. 11. — 38 pp.

123. *Bird R. E., Riordan C. J.* Simple simple solar spectral model for direct and diffuse irradiance on horizontal and tilted planes at the earth's surface for

cloudless atmospheres // *Journal of Climate and Applied Meteorology.* — 1986. — Vol. 25(1). — Pp. 87–97.

124. *Даффет-Смит П.* Практическая астрономия с калькулятором. — Москва: Мир, 1982.

125. *Bonan G. B.* Ecological Climatology: Concepts and Applications. — Cambridge: Cambridge University Press, 2008.