

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМ.П.Н.
ЛЕБЕДЕВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Фриман Александр Владимирович

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАТИЧЕСКИХ
И ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ И ВОЛНОВОДНЫХ
СТРУКТУР С РЕЗОНАНСАМИ ФАНО**

Специальность 1.3.6 — Оптика

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2022

Работа выполнена в Федеральном Государственном Бюджетном Учреждении Науки Физическом Институте им П.Н. Лебедева Российской Академии Наук.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
академик РАН
Горбацевич Александр Алексеевич

Официальные оппоненты: **Аракелян Сергей Мартиросович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
Владимирский государственный университет
имени А.Г. и Н.Г. Столетовых,
проректор по инновациям и стратегическому
развитию, заведующий кафедрой Физики и
прикладной математики

Калиш Андрей Николаевич,
кандидат физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего об-
разования "Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова",
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное об-
разовательное учреждение высшего обра-
зования «Московский физико-технический
институт (национальный исследовательский
университет)»

Защита состоится 11 апреля 2022 г. в 10 часов на заседании диссер-
тационного совета 24.1.262.01 на базе Физического Института им. П.Н.
Лебедева Российской Академии Наук по адресу: 119991 ГСП-1 г. Москва,
Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФИАН
(www.lebedev.ru).

Автореферат разослан « ____ » _____ 2022 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.262.01,
доктор физико-математических наук

А.С. Золотько

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Электромагнитное излучение оптического диапазона является ключевым для жизни на Земле. Уже сотни лет изучая способы управления светом, начиная с кристаллов исландского шпата, используемых викингами для навигации, мы расширяем границы нашего понимания природы света. Разработка линз и отражающих плёнок позволила нам создать такие области науки, как астрономия и клеточная биология.

В современном мире управление светом это больше, чем увеличение картинки. В последние десятилетия оптические системы стали использоваться в большинстве каналов высокоскоростной передачи информации, где волноводы применяются как дешёвый, по сравнению с медным, кабель для передачи огромного количества данных на тысячи километров с малыми потерями мощности. Развитие технологии привело к созданию фотонных интегральных схем (ФИС), в которых обработка и преобразование информации может осуществляться путем манипуляции как оптическими сигналами, так и отдельными фотонами. Методы проектирования и создания ФИС представляют собой активно развивающуюся область исследований [1; 2]. В состав ФИС может входить большое число разнообразных элементов, функционирование которых определяется фундаментальными законами распространения световых волн и взаимодействия их с веществом: фотонные кристаллы, интегральные волноводы и разветвители, различного рода резонаторы, оптические переключатели, детекторы, излучатели и др.

Важным элементом современных ФИС служат линии задержки. Замедление светового сигнала естественным образом возникает в структурах со сверхнизким значением групповой скорости, то есть "замедленным светом" (англ. "slow light"). Подобный подход уже использовался в электронике, а в частности как память на линии задержки в первых ЭВМ и радарных установках, и показал свою работоспособность. Помимо ФИС

физические системы с "замедленным светом" находят применение в оптических экспериментах, где требуется высокая интенсивность нелинейных процессов, в частности в комбинационном рассеянии света. Для создания "замедленного света" может быть использовано заполнение пор фотонного кристалла (ФК) на основе опаловой матрицы различными веществами с резонансным характером частотной дисперсии показателя диэлектрической проницаемости, что делает актуальным исследование оптических свойств фотонных кристаллов, заполненных различными материалами.

Для передачи сигналов между элементами ФИС используются волноводы. Одними из основных их типов являются волноводы на основе фотонных кристаллов с линейным дефектом [3] и волноводы с отражающими стенками [4]. Поскольку основная задача волновода – передать сигнал конечной длины с минимальным изменением формы этого сигнала, то необходимо исследовать как стационарные спектры пропускания, так и переходные процессы в волноводе.

Немаловажным направлением современной оптики и фотоники является использование волноводов с резонансами Фано, имеющими близко расположенные максимум и минимум пропускания, управление которыми позволяет добиться эффекта переключения сигнала. Резонанс Фано образуется за счет интерференции состояния, распространяющегося в волноводе, и локализованного состояния резонатора. Этот физический феномен был изначально открыт в рамках квантовой механики, однако его волновая природа позволяет перенести описание на электромагнитные системы, включая системы оптического диапазона. Существует множество работ [5; 6], посвященных спектральным характеристикам оптических систем с резонансами Фано. Тем не менее, полное описание физических систем возможно только при использовании как частотных, так и временных характеристик. Это особенно важно при описании систем обработки информации, так как каждый бит передаваемых данных должен быть обработан в минимально возможный

интервал времени. Такое требование делает актуальным исследование динамических характеристик оптических систем, которые могут применяться в ФИС.

ФИС могут быть также использованы для мультиплексирования сигналов с разделением по времени, что является особенно важным для высокоскоростной передачи данных на дальние расстояния. Мультиплексирование требует эффективного метода сжатия оптических импульсов во времени. На данный момент разработано множество различных физических принципов и конфигураций фотонных устройств для сжатия оптических импульсов [7; 8]. Очевидно, что компактные твердотельные устройства, совместимые с полупроводниковой интегральной технологией, являются приоритетными. Сжатие импульсов было успешно продемонстрировано в оптических системах, содержащих нелинейные материалы: высокодисперсных кремниевых волноводах с фазовой самомодуляцией, вызванной Керровской нелинейностью третьего порядка [7], а также в фотонных кристаллах с асимметричным резонансом Фано, который испытывает смещение в область высоких частот в результате двухфотонного поглощения [8]. Однако, из-за того, что используемые нелинейности могут применяться только в определенном диапазоне плотности оптической энергии, механизм сжатия импульсов на основе нелинейных материалов имеет значительные ограничения в плане интеграции в ФИС и рассеиваемой мощности. Таким образом, актуальными являются исследования динамических оптических характеристик резонаторов Фано на основе материалов без нелинейностей.

Производство уникальных фотонных структур это технически сложный и дорогостоящий процесс, а аналитическое решение для нетривиальных систем не всегда возможно. Поэтому численное моделирование остается оптимальным методом исследования на начальном этапе разработки фотонных структур. Так как расчеты в частотном пространстве не описывают переходных процессов в фотонных системах, то возникает необходимость использования численных методов во временной области, отличающихся большой вычислительной сложностью.

Таким образом оптимизация таких расчетов становится актуальной задачей для наиболее эффективного использования ресурсов лаборатории. В частности, одним из подходов к оптимизации расчётов является распараллеливание вычислений на доступных многоядерных вычислителях, например на графических процессорах общего назначения.

Целью данной работы является исследование оптических свойств и характеристик фотонных систем для управления оптическими сигналами, в частности фотонных волноводов с резонансом Фано и фотонных кристаллов.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Исследовать влияние на оптические характеристики одномерного фотонного кристалла, соответствующего матрицам синтетического опала, введения материалов с резонансным характером диэлектрической проницаемости (наночастицы рубина и пары иода).
2. Исследовать зависимость ширины запрещённой зоны в двумерных гексагональных фотонных кристаллах от геометрии воздушного отверстия в полупроводнике.
3. Исследовать спектральные и динамические характеристики волноводов с шарообразными резонаторами
4. Исследовать переходные процессы образования резонанса Фано в структурах, состоящих из волновода и эванесцентно связанных резонаторов.
5. Разработать программное обеспечение для быстрого расчёта электромагнитных полей по методу аппроксимации конечными разностями (FDTD) и визуализации данных.

Научная новизна:

1. Предложена оригинальная модель временного обострителя оптических импульсов на основе волновода с резонансом Фано в системах без нелинейностей.
2. Описан механизм образования квази-связанного состояния в континууме (квази-ССК) распространяющихся частот в линейных системах.
3. Предсказан эффект генерации низкочастотного сигнала при образовании резонанса Фано в системе из волновода,

ограниченного металлическими стенками, с диэлектрической вставкой.

4. Предложены новая геометрия элемента гексагонального фотонного кристалла с увеличенной шириной запрещённой зоны, а также метод изготовления таких фотонных кристаллов.
5. Разработан метод быстрого расчёта оптических свойств трёхмерных фотонных структур произвольной геометрии за счёт использования видеопроцессоров общего назначения для вычисления значений электромагнитных полей параллельным образом.

Научная и практическая значимость представленных результатов заключается в разработке нового метода обострения оптических импульсов до фемтосекундной длительности за счёт использования компактного резонатора, приводящего к резонансу Фано, и методики управления длительностью импульсов с возможностью настройки оптического обострителя. Предсказан эффект генерации низкочастотного сигнала при формировании резонанса Фано. Учет переходных оптических процессов в системах с резонансами Фано может быть полезен при разработке систем анализа сигнала в фотонных интегральных схемах для предотвращения ложных срабатываний триггеров.

Предложенный метод модификации оптических свойств фотонных кристаллов позволяет увеличить ширину фотонной запрещённой зоны без изменения состава материалов фотонного кристалла.

Благодаря использованию параллельных вычислений на видеопроцессорах общего назначения, представленные методы расчёта оптических свойств фотонных структур на практике позволяют ускорить анализ электромагнитных свойств структур с большим количеством расчётных точек и могут быть применены к таким сложным системам, требующим существенных вычислительных мощностей, как, например, трёхмерные фотонные волноводы. Разработанный подход позволит численно исследовать трёхмерные фотонные структуры без необходимости использования суперкомпьютеров. Алгоритм

был имплементирован в программный пакет МЕЕР, который отличается гибкостью настроек, большим количеством поддерживаемых геометрических примитивов и материалов.

Приведенные результаты также могут найти практическое применение при создании элементной базы интегральной оптики, компактных оптических линий задержки и фильтров оптических сигналов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Оптическими свойствами фотонных кристаллов на основе синтетических опалов можно управлять посредством заполнения пор фотонных кристаллов веществами, имеющими резонансный характер частотной дисперсии диэлектрической проницаемости, а в частности парами иода и рубином ($Al_2O_3 : Cr^{3+}$).
2. Возможно использовать динамический механизм образования резонанса Фано в диэлектрическом волноводе с шарообразным диэлектрическим резонатором для формирования оптических сигналов фемтосекундной длительности.
3. Управление параметрами длительности выходного импульса в системе из диэлектрического волновода и шарообразных резонаторов возможно за счёт изменения количества резонаторов, эванесцентно связанных с волноводом.
4. В двумерном волноводе с отражающими стенками и диэлектрической вставкой в процессе накопления электромагнитной энергии внутри диэлектрической вставки при образовании резонанса Фано имеет место генерация затухающих колебаний с частотой равной разности резонансной частоты резонатора Фано и частоты падающего излучения.

Достоверность полученных результатов обеспечивается соответствием результатов численного решения уравнений Максвелла методом конечных разностей во временной области, результатам, полученных посредством разложения поля на собственные моды волновода, а также результатам аналитических

расчетов с использованием теории связанных мод. Свойства оптических волноводов с резонансами Фано и квази-связанными состояниями в континууме проявляют аналогию со свойствами электронных волноводов, имеющими те же волновые эффекты. Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на конференциях:

1. V Всероссийская молодежная конференция по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики, ФИАН Москва, 2013
2. International Conference "Micro- and Nanoelectronics with the Extended Session 2014", Zvenigorod
3. XIV Школа молодых ученых "Актуальные проблемы физики", ФИАН (МОСКВА) 16–20 ноября 2014 года
4. META 2019 The 10th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, Lisbon – Portugal
5. META 2021 The 11th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, Warsaw – Poland
6. 2021 International Applied Computational Electromagnetics Society Symposium (ACES), Hamilton – Canada

Кроме того результаты исследования докладывались на семинаре Отделения Физики Твёрдого Тела ФИАН.

Личный вклад. Все изложенные в диссертации результаты получены автором лично или при его непосредственном участии.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации представлены в 13 печатных изданиях, 7 из которых опубликованы в журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 6 — в материалах научных конференций.

Содержание работы

Во введении приведено обоснование актуальности диссертации, сформулированы цели и задачи работы, проанализирована научная новизна полученных результатов и их практическая значимость. Приведён список защищаемых положений, сведения об апробации работы и её достоверности, список публикаций автора и его личный вклад, описана структура диссертации.

Первая глава посвящена обзору существующей литературы, методов расчёта оптических характеристик фотонных структур и программного обеспечения. В первом разделе описаны опубликованные работы об оптических свойствах фотонных кристаллов, влияние резонансов диэлектрической проницаемости и дефектов на оптические свойства и характеристики ФК. В втором разделе приводится описание механизмов формирования резонансов Фано и связанных состояний в континууме (ССК). Приведен обзор основных типов оптических систем с резонансами Фано и ССК, включающий работы, посвященные определению как спектральных, так и динамических характеристик. Третий раздел посвящен методам параллельных вычислений и существующему программному обеспечению для моделирования оптических процессов в фотонных структурах.

Вторая глава посвящена численному моделированию и исследованию оптических характеристик структур на основе фотонных кристаллов. В первом разделе было проведено исследование оптических свойств ФК при помощи закона дисперсии для одномерных фотонных кристаллов [9]:

$$\begin{aligned} \cos(ka) = \cos\left(\frac{\omega\sqrt{\varepsilon_1}}{c_0}a_1\right) \cos\left(\frac{\omega\sqrt{\varepsilon_2}}{c_0}a_2\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}} \right) \times \\ \times \sin\left(\frac{\omega\sqrt{\varepsilon_1}}{c_0}a_1\right) \sin\left(\frac{\omega\sqrt{\varepsilon_2}}{c_0}a_2\right), \end{aligned}$$

где ω – циклическая частота падающего излучения, k – волновой вектор, $\varepsilon_{1,2}$ – диэлектрическая проницаемость материалов

ФК, a – период решетки ФК, $a_{1,2}$ – толщины слоёв, c_0 – скорость света в вакууме.

Было показано, что в одномерном ФК, имеющем вставки вещества с резонансным характером диэлектрической проницаемости, могут формироваться узкие слабодисперсные зоны в запрещенной зоне ФК. Это происходит в том случае, если частота резонанса расположена в запрещенной зоне ФК без учета резонанса. В области резонанса резонансные диэлектрические слои играют роль зеркал (слабо проницаемых барьеров), и рассматриваемый ФК аналогичен ФК, составленному из диэлектрических и металлических слоев. Слабодисперсная зона при этом соответствует резонансам Фабри-Перо в диэлектрических слоях. На основе данной модели исследовано влияние заполнения пор в глобулярном ФК различными материалами (рубином ($Al_2O_3 : Cr^{3+}$) и парами йода) на его зонную структуру (Рисунок 1). Установлено, что введение в ФК примесей с резонансным характером диэлектрической проницаемости приводит к качественному изменению зонной структуры. В частности,

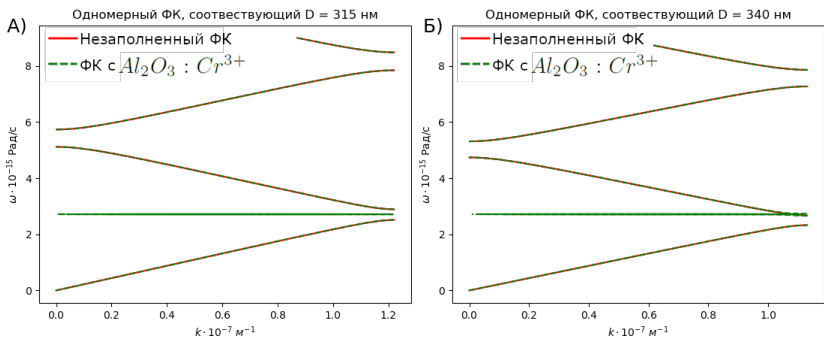


Рис. 1 – Дисперсионные кривые одномерного фотонного кристалла, заполненного $Al_2O_3 : Cr^{3+}$, соответствующего диаметрам глобул: А) 315 нм Б) 340 нм в направлении $[111]$.

наблюдаются две основных особенности: появление бездисперсионных зон и сгущение этих зон, связано с фолдингом закона дисперсии (складыванием пространства волновых векторов в первую зону Бриллюэна). В случае обоих заполняющих полости

в ФК веществ подбором параметров можно поместить особенно сти дисперсионных кривых в первую разрешенную зону, вторую разрешенную зону, а также в запрещенную зону, что приводит к малым значениям групповой скорости.

Во втором разделе приведено исследование влияния геометрии элементарной ячейки планарного фотонного кристалла на ширину фотонной запрещенной зоны. В результате сравнения классического элемента фотонного кристалла с круглым отверстием и элемента с гексагональным отверстием, максимальное отношение частотной ширины первой фотонной запрещенной зоны к центральной частоте запрещенной зоны (англ. gap-midgap ratio) увеличивается на 4.3% без изменения материалов фотонного кристалла. При этом, основные изменения характера дисперсионных кривых происходят во второй разрешенной зоне. Для описанной структуры предложен метод изготовления, основанный на использовании электронного литографа, засвечивающего прямые линии на резисте.

В третьем разделе исследуются динамические характеристики волновода, сформированного с помощью линейного дефекта в планарном гексагональном фотонном кристалле (Рисунок 2). Рассмотрена ситуация ограниченной по y отражающими плоскостями системы. Система представляет собой гибрид двух волноводов – центрального волновода, основанного на линейном дефекте в ФК, и волновода, сформированного отражающими поверхностями, имеющего ширину, равную ширине всей структуры. Это приводит к особенностям динамики распространения света. В частности, особенности результатов

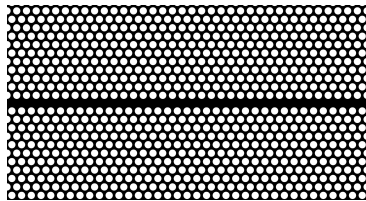


Рис. 2 — Фрагмент структуры гибридного волновода. Черным цветом показан полупроводник с $\epsilon = 12$, белым цветом — воздух. Верхняя и нижняя границы отражающие.

численного моделирования выходной мощности волновода в первые пикосекунды после включения источника излучения, показанные на Рисунке 3. Для гибридной структуры, при нали-

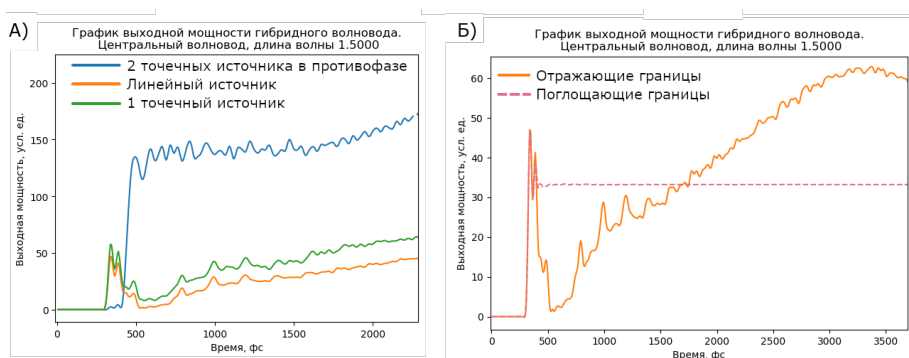


Рис. 3 — График выходной мощности из А) центральной части гибридного волновода с отражающими граничными условиями Б) центральной части гибридного волновода с отражающими и поглощающими граничными условиями.

ции отражающих границ, характер выходной мощности зависит от конфигурации источников электрического поля. В случае использования одного точечного источника (зелёные кривые) возбуждается преимущественно нулевая волноводная мода. Как показано на Рисунке 3А, выходная мощность нулевой моды имеет всплеск интенсивности в первые 200 фс после прихода волны к области измерения, за которым следует провал выходной мощности с плавным нарастанием. Подобный эффект не проявляется в широком волноводе, сформированном отражающими границами. Следует отметить, что при использовании двух противофазных источников электрического поля (синие кривые) или при отсутствии отражающих границ (пунктирная линия на Рисунке 3Б) не проявляются особенности динамических характеристик, связанных со всплеском и провалом выходной мощности. Был предложен физический механизм эффекта, включающий в себя взаимодействие между модами гибридного волновода. Изложенные во второй главе результаты опубликованы в [A1—A4; A8—A10].

Третья глава посвящена исследованию спектральных и динамических характеристик волноводов с резонансами Фано. В первом разделе рассмотрена структура планарного волновода шириной 1 мкм с отражающими границами и диэлектрической вставкой. Для анализа оптических характеристик использовалось 2 численных метода: FDTD и метод разложения по волноводным модам. Результат работы первого метода это значения компонент полей во всех точках расчетной области в каждый момент времени, второй метод вычисляет амплитуды мод и коэффициенты пропускания и отражения. С целью верификации обоими методами были рассчитаны спектры пропускания, что показало хорошее совпадение формы резонансов, кроме областей ССК, где FDTD не может разрешить сверхузкие резонансы.

Для структуры с длиной вставки 1.10 мкм был проведен анализ динамики накопления электромагнитной энергии во вставке-резонаторе и выходной мощности на длине волны 1.678 мкм при резонансной длине волны 1.6769 мкм (Рисунок 4). Из графика выходной мощности можно видеть, что в первые

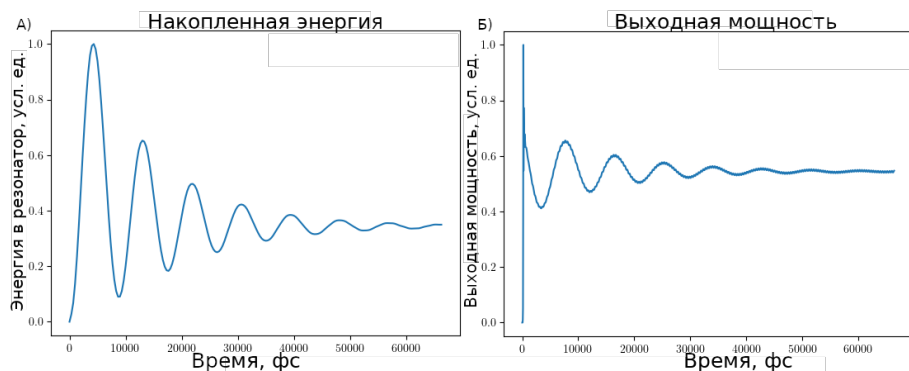


Рис. 4 — Временные зависимости А) накопления энергии в резонаторе и Б) выходной мощности из волновода со вставкой длиной 1.10 мкм при длине волны 1.678 мкм. Данные нормированы на максимальные наблюдаемые значения.

моменты времени выходная мощность максимальна, так как в этот момент резонатор ещё не накопил энергию, необходимую

для интерференции с модой в волноводе. После этого выходная мощность начинает осциллировать с периодом около 9 пс, затухая на уровне около 55% от наблюдаемого максимума.

Использование теории связанных мод приводит к аналитическому выражению накопленной энергии в резонаторе:

$$|a(t)|^2 = s_{in,0}^2 \frac{\tau_c^{-1} \left[1 - 2e^{-t(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})} \cos[(\omega - \omega_r)t] + e^{-2t(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})} \right]}{(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})^2 + (\omega - \omega_r)^2}.$$

Из представленного уравнения можно сделать вывод, что $\cos[(\omega - \omega_r)t]$ обеспечивает низкочастотные осцилляции, а $e^{-t(\tau_c^{-1} + \tau_0^{-1})}$ обеспечивает затухание низкочастотных осцилляций, что даёт аналитическое обоснование наблюдаемому эффекту.

Второй раздел посвящен исследованию оптических характеристик диэлектрического трёхмерного волновода квадратного сечения с шарообразным диэлектрическим резонатором.

Были изучены спектры пропускания волноводной структуры, имеющие вид антирезонанса, сужающегося при отдалении резонатора радиусом 0.487 мкм от волновода сечением 0.278 мкм. В отличие от квантового аналога, электронного волновода с ответвлением, минимум пропускания не достигает нуля в связи с возможностью утечки энергии излучения из резонатора в окружающую среду. Зафиксированное значение минимума пропускания равно 0.04 при расстоянии 278.3 нм и длине волны 1.55 мкм.

Помимо спектральных характеристик, была также изучена динамика переходных процессов для структуры с расстоянием между волноводом и резонатором 278.3 нм. На Рисунке 5А представлены временные зависимости пропускания для структур с одним и двумя резонаторами при входящем сигнале в форме функции Хэвисайда. Проведенное аналитическое решение основано на теории связанных мод при условии совпадения частоты входящего излучения и частоты антирезонанса.

$$T_1(t > 0) = \left[\frac{\tau_0 - \tau_c}{\tau_0 + \tau_c} - \frac{2\tau_0}{\tau_0 + \tau_c} e^{-Wt} \right]^2,$$

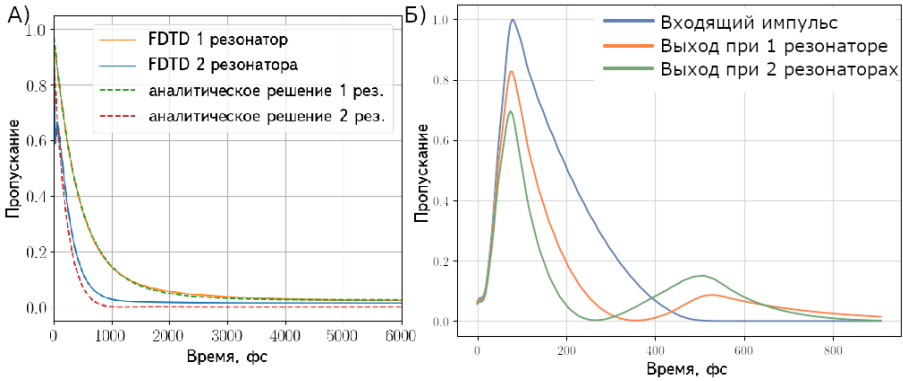


Рис. 5 — Временные характеристики пропускания волноводов с 1 и 2 ша-
рообразными резонаторами на частоте резонанса в случае
А) сигнала с огибающей в виде функции Хэвисайда, Б) затухающего сиг-
нала.

где $W = \frac{\tau_0 + \tau_c}{\tau_0 \tau_c}$. В результате фитирования кривой пропускания, посчитанной методом конечных разностей для одного резонатора (Рисунок 5А, синяя линия), были получены характерные времена $\tau_0 = 1293$ фс, $\tau_c = 1798$ фс. Полученные константы были подставлены в формулу для двух резонаторов

$$T_2(t > 0) = \left[\left(\frac{\tau_0 - \tau_c}{\tau_0 + \tau_c} \right)^2 - \frac{4(W\tau_0 - 1)[Wt(W\tau_0 - 1) - 1]}{W^2\tau_0^2} e^{-Wt} \right]^2.$$

Как видно из Рисунка 5А, существует хорошее совпадение между аналитическим и численным решениями для случая двух резонаторов, что показывает состоятельность применённой аналитической модели.

Исследуемую структуру можно применить для сжатия оптических импульсов. Для этого на вход волновода подается сигнал, огибающая которого показана синей линией на Рисунке 5Б. Можно видеть, что длительность выходного импульса уменьшается как в случае одного резонатора, так и в случае двух резонаторов.

В четвертом разделе описывается метод создания квази-связанного состояния в континууме (квази-ССК) в трёхмерной системе волновод-резонатор. В данном исследовании в качестве механизма образования квази-ССК распространяющихся

частот был выбран механизм манипуляции симметрии состояний. Его физический смысл в данной системе заключается в том, что волновод квадратного сечения имеет достаточно малый поперечный размер, и поддерживает распространение только мод нулевого порядка. Таким образом, если возбудить в шарообразных резонаторах состояния, которые приводят к возбуждению моды первого порядка, то данная мода не может распространяться в рассматриваемом волноводе. Состояния, которые возбуждают нераспространяющуюся первую моду, характеризуются инверсной симметрией с фазовым множителем электрических полей, равным -1 . То есть, их разность фаз равна π .

Так как возбуждение таких состояний посредством энергии, приходящей из волновода, невозможно в связи с невозможностью распространения необходимой моды первого порядка, то в данном исследовании состояния возбуждались искусственно – посредством установки источников поля внутри резонаторов при моделировании по методу FDTD.

В первом, контрольном, случае возбуждение состояний в диэлектрических шарообразных резонаторах производилось при помощи источников поля, расположенных в центрах резонаторов и имеющих идентичные параметры и нулевую разность фаз. Таким образом в диэлектрическом волноводе, расположенном между резонаторами, возникает мода нулевого порядка, распространяющаяся в данном волноводе. Распределение напряженности магнитного поля для данного случая показано на Рисунке 6А. Как можно видеть из Рисунка 6А, электромагнитное поле образует моду, которая уходит из района расположения шарообразных резонаторов вдоль оси X . Достигая границ расчётной области электромагнитная волна затухает в поглощающих слоях, что имитирует уход волны в бесконечность. Измерение добротности проводилось в одном из резонаторов в силу симметрии системы.

Во втором случае, возбуждение локализованных состояний в резонаторах, также расположенных симметрично относительно волновода, производилось при помощи источников расположенных в центрах резонаторов и имеющих временные

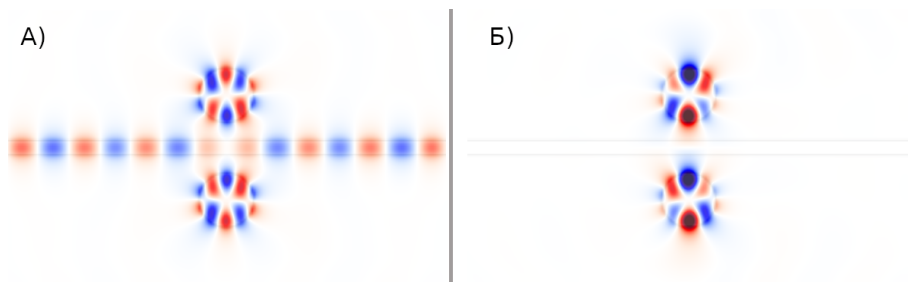


Рис. 6 — Распределения напряженности магнитного поля при возбуждении А) одинаковыми источниками в резонаторах, Б) источниками в противофазе в резонаторах.

зависимости, отличающиеся множителем -1 . Такая конфигурация локализованного в двух резонаторах состояния в широких волноводах приводит к возбуждению моды первого порядка. Распределение напряженности магнитного поля в данном случае показано на Рисунке 6Б. Из Рисунка 6Б можно видеть, что поле локализовано в резонаторах и не распространяется в волноводе. При этом добротность возрастает в 3.6 раза по сравнению с контрольным случаем. Изложенные в третьей главе результаты опубликованы в [А6; А7; А11—А13].

В **четвертой главе** приведено описание разработанных автором алгоритмов численного моделирования фотонных структур. Затронуты две основные темы: оптимизация численных методов решения за счет параллелизации вычислений на доступном аппаратном обеспечении; подход в решению уравнений Максвелла в присутствии гиротропных сред на примере магнитоактивной плазмы. Для решения обеих задач проводилась глубокая модификация программного пакета МЕЕР с открытым программным кодом, изначально разработанного в МИТ.

В первом разделе описан использованный в исследовании метод ускорения моделирования за счёт параллелизации расчётов. В связи с тем, что центральный процессор (ЦП) имеет на 2-3 порядка меньше вычислительных ядер, чем видеопроцессор (ВП), имеет смысл рассмотреть вариант использования ВП для численного решения задач фотоники. Двумя основными особенностями использования ВП для научных вычислений являются

отдельное от ЦП пространство памяти с малой скоростью обмена между этими двумя пространствами и архитектура, основанная на одиночном потоке команд с множественным потоком данных (ОКМД, англ. single instruction multiple data, SIMD). Так как ВП основаны на архитектуре ОКМД, то они имеют резкое падение производительности при использовании условных переходов, вызванное необходимостью последовательного исполнения обеих веток программы. Был разработан и внедрен алгоритм параллельных расчётов, минимизирующий передачу информации между памятью ЦП и ВП, а также полностью исключаящий операции ветвления.

Для проверки прироста производительности рассматривались типичные задачи моделирования электромагнитных волн в структурах трёх размерностей. Был проведён расчёт полей в вакууме, полей в поглощающих слоях и потока энергии заданной длины волны – интеграла фурье образа вектора Пойнтинга. В одномерном случае это был отрезок, длиной 1 мкм, к которому по необходимости добавлялось 2 поглощающих слоя длиной 1 мкм каждый. Как можно видеть из Рисунка 7А, прирост скорости достигается при десятках тысяч расчетных ячеек, что не является практичным в случае одномерной структуры. Однако, в двумерном и трёхмерном случаях (Рисунки 7Б,В) существенный прирост скорости достигается уже при практически обоснованном количестве точек. Теоретический прирост скорости достигает 16 крат, но на практике при расчёте трёхмерного волновода с шарообразным резонатором этот показатель достиг 12.5 крат. Следует отметить, что немонотонность зависимости прироста скорости вычислений объясняется изменениями вероятности нахождения значения напряженности поля или параметров материала в ячейке памяти, уже загруженной в кэшпамять видеопроцессора (англ. cache hit-miss ratio). При определенных значениях количества расчётных точек в моделируемой структуре число операций считывания из оперативной памяти ВП резко возрастает, что приводит к провалу в производительности.

Во втором разделе представлен метод численного моделирования гиротропных сред на примере магнитоактивной

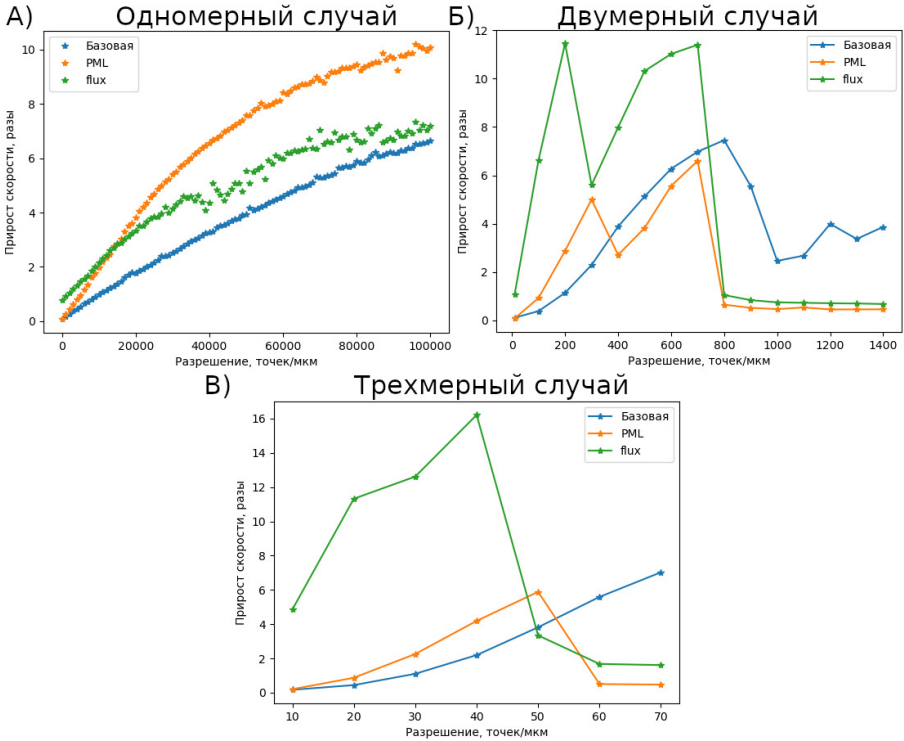


Рис. 7 — Прирост скорости при расчётах на ВП по сравнению с четырёхъядерным ЦП. Базовая структура – вакуум, PML – структура с поглощающими слоями, flux – структура с поглощающими слоями с вычислением потока энергии.

плазмы. Особенностью моделирования материалов с нетривиальным характером диэлектрической проницаемости является возможность описать их влияние на электрическую индукцию за счёт поляризации:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} + \sum \vec{P}_i,$$

где i – номер резонанса диэлектрической проницаемости, соответствующий материалу. Таким образом, при использовании нескольких материалов или резонансов, каждая особенность должна описываться за счёт соответствующего \vec{P}_i . Альтернативным вариантом является модификация системы уравнений Максвелла под каждый материал, но это приведёт к взаимному

негативному влиянию, порождающему ошибки. Другой проблемой, возникающей при моделировании частотной дисперсии, является операция свёртки, вызванная обратным преобразованием фурье операции умножения. Так как операция свёртки является вычислительно затратной, то был применён метод рекурсивных свёрток, снижающий сложность алгоритма с $O(n^2)$ до $O(n)$, где n – число временных шагов алгоритма.

Гиротропные среды описываются недиагональными элементами тензора диэлектрической проницаемости, что приводит к соответствующему вкладу в вектор поляризации $\vec{P}_i(t) = \vec{P}_{i,diag}(t) + \vec{P}_{i,offdiag}(t)$. В случае дискретизации временных шагов по Δt , зависимость от t можно описать как $\vec{P}_i^{(n)} = \vec{P}_i(n \cdot \Delta t)$. Для записи недиагональной компоненты поляризации в виде рекурсивной свёртки необходимо рассматривать вклады линейной и экспоненциальных частей по отдельности. В случае магнитоактивных плазм это приводит к выражениям:

$$P_{i,offdiag} = P_{i,offdiag,1} + P_{i,offdiag,2} = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\omega_b - j\nu_c) \Delta t \sum_n E_j^{(n)} + \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} \frac{\omega_b - j\nu_c}{j\omega_b - \nu_c} \sum_{m=0}^n E_j^{(n-m)} \cdot (e^{-(\nu_c - j\omega_b)(m+1)\Delta t} - e^{-(\nu_c - j\omega_b)m\Delta t})$$

Таким образом, свертки $P_{i,offdiag,1}$ и $P_{i,offdiag,2}$ могут быть вычислены рекурсивным образом на основе значений этих свёрток в предыдущий момент времени:

$$P_{i,offdiag,1}^{(n+1)} = \vec{E}_j^{(n+1)} \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} (\omega_b - j\nu_c) \Delta t + P_{i,offdiag,1}^{(n)}$$

$$P_{i,offdiag,2}^{(n+1)} = \frac{\omega_p^2}{\nu_c^2 + \omega_b^2} \frac{\omega_b - j\nu_c}{j\omega_b - \nu_c} \left[E_j^{(n+1)} (e^{-(\nu_c - j\omega_b)\Delta t} - 1) \right] + P_{i,offdiag,2}^{(n)} \cdot e^{-(\nu_c - j\omega_b)\Delta t}$$

Выведенные соотношения легли в основу созданного класса для описания материалов для модифицированной версии программы МЕЕР. Для проверки правильности метода было проведено сравнение численных результатов, полученных по методу FDTD, с аналитическим решением. Был проведён расчёт

спектров пропускания электромагнитных волн с правой и левой круговыми поляризациями через одномерную структуру, состоящую из слоя магнитоактивной плазмы с $\omega_p = 2\pi \cdot 50 \cdot 10^9$ рад/с, $\omega_b = 2\pi \cdot 3 \cdot 10^{11}$ рад/с и $\nu_c = 2 \cdot 10^{10}$ Гц толщиной 9 мм в окружении вакуума. Результаты представлены на Рисунке 8, из которого можно видеть хорошее совпадение результатов.

Изложенные в четвертой главе результаты опубликованы в [A5].

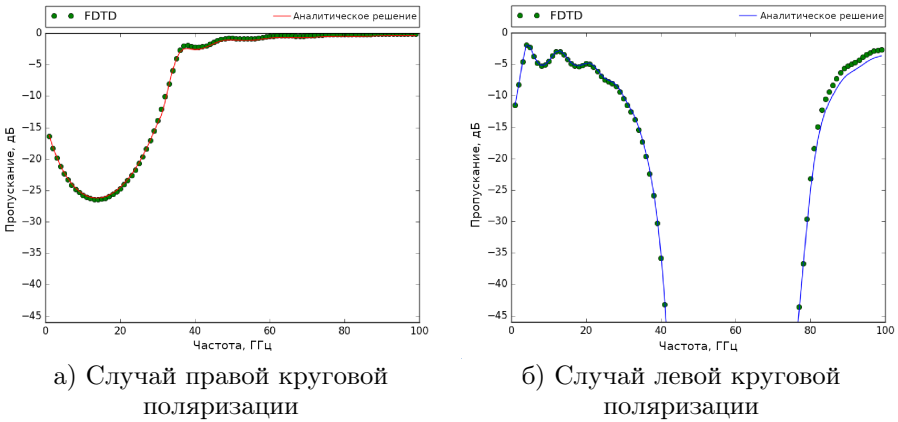


Рис. 8 — Сравнение спектров пропускания электромагнитных круговой поляризации волн через слой магнитоактивной плазмы, полученных при помощи численного расчёта и аналитического решения.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Предложен новый способ генерации оптических импульсов фемтосекундной длительности основанный на динамическом процессе формирования резонанса Фано в системе, состоящей из волновода и шарообразного резонатора, сформированных из диэлектрика с линейным характером диэлектрической проницаемости.
2. Длительность оптических импульсов, генерируемых при накоплении энергии в резонаторе Фано, может быть уменьшена за счёт увеличения количества диэлектрических резонаторов, взаимодействующих с волноводом.

3. Показано, что при формировании резонанса Фано в системе, состоящая из волновода и шарообразного резонатора, сформированных из диэлектрика с линейным характером диэлектрической проницаемости, ширина антирезонанса пропускания резонанса Фано зависит от расстояния между волноводом и резонатором.
4. Показано наличие генерации затухающего низкочастотного сигнала при формировании резонанса Фано в структуре, состоящей из волновода с отражающими стенками и диэлектрической вставки. Предложена аналитическая модель генерации сигнала в которой частота генерируемого сигнала равна разности частоты излучения, распространяющегося в волноводе, и собственной частоты резонатора.
5. Показано, что при введении в фотонный кристалл слоев с резонансным характером диэлектрической проницаемости (рубин или пары иода) и попадании этого резонанса в область запрещенной зоны фотонного кристалла, внутри запрещенной зоны образуются разрешенные состояния. Фотонные состояния, созданные внутри запрещённой зоны за счёт резонанса диэлектрической проницаемости, отличаются низкими значениями групповой скорости электромагнитных волн.
6. Продемонстрировано увеличение ширины запрещенной зоны двумерных гексагональных фотонных кристаллов при использовании элементов с отверстиями в виде гексагона по сравнению с традиционными круглыми отверстиями.
7. Разработанный метод ускорения численного моделирования оптических свойств фотонных систем при использовании алгоритма аппроксимации конечными разностями позволяет ускорить вычисления на персональном компьютере до 16 крат.
8. Разработанный метод численного моделирования фотонных систем, содержащих магнитоактивные плазмы, позволяет суммировать влияние магнитоактивных плазм с

другими видами дисперсии диэлектрической проницаемости.

Публикации автора по теме диссертации:

В журналах, входящих в международные базы цитирования Web of Science или Scopus

- A1. *Горелик, В. С.* Оптические свойства фотонных кристаллов, заполненных металлическими квантовыми точками [Текст] / В. С. Горелик, А. В. Фриман // Краткие сообщения по физике. — 2011. — Т. 4. — С. 23.
- A2. *Горбацевич, А. А.* Оптические свойства фотонных кристаллов, заполненных парами йода [Текст] / А. А. Горбацевич, В. С. Горелик, А. В. Фриман // Краткие сообщения по физике. — 2013. — Т. 2. — С. 28.
- A3. *Горелик, В. С.* Дисперсия электромагнитных волн глобулярного резонансного фотонного кристалла с порами, заполненными $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ [Текст] / В. С. Горелик, А. В. Фриман // Неорганические материалы. — 2013. — Т. 6. — С. 615.
- A4. *Горбацевич, А. А.* Двумерный гексагональный фотонный кристалл с новой геометрией элемента [Текст] / А. А. Горбацевич, А. В. Фриман, В. С. Горелик // Краткие сообщения по физике. — 2014. — Т. 6. — С. 37.
- A5. *Friman, A. V.* Finite-Difference Time-Domain technique for gyroelectric material structure simulation using recursive convolutions in polarization [Текст] / A. V. Friman, A. A. Gorbachevich, P. P. Sverbil // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. — 2017. — Т. 65, № 5. — С. 2745–2747.
- A6. *Friman, A. V.* Subpicosecond light pulses induced by Fano antiresonance buildup process [Текст] / A. V. Friman, N. M. Shubin, V. V. Kapayev, A. A. Gorbachevich // Opt. Express. — 2020. — Т. 28, № 10. — С. 14590–14604.
- A7. *Shubin, N. M.* Bound states in the continuum in asymmetrical quantum-mechanical and electromagnetic waveguides [Текст] / N. M. Shubin, A. V. Friman, V. V. Kapayev, A. A. Gorbachevich // Phys. Rev. B. — 2021. — Т. 104, вып. 12. — С. 125414.

В сборниках трудов конференций

- A8. *Фриман, А.* Перспективы создания приборов на основе фотонных кристаллов. [Текст] / А. Фриман // Сборник трудов V Всероссийской молодежной конференции по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики. — Москва, Россия, 2013. — С. 133.
- A9. *Фриман, А.* Особенности зонной структуры гексагональных планарных фотонных кристаллов [Текст] / А. Фриман // XV Школа молодых ученых "Актуальные проблемы физики" Сборник трудов. — Москва, Россия, 2014. — С. 244–245. — URL: https://sites.lebedev.ru/modules/show_image.php?id=4128.
- A10. *Фриман, А.* Research of band structure features of hexagonal planar photonic crystals. [Текст] / А. Фриман // International Conference Micro- and Nanoelectronics with the Extended Session 2014. Book of ABSTRACTS. — Moscow – Zvenigorod, Russia, 2014. — P1–16.
- A11. *Gorbatsevich, A.* Fano resonances and exceptional points in waveguides and quantum conductors [Текст] / А. Gorbatsevich, N. Shubin, V. Караев, А. Friman // META 2019 The 10th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics. — Lisbon, Portugal, 2019. — С. 1223. — URL: https://metaconferences.org/ocs/files/meta19_proceedings.pdf.
- A12. *Shubin, N.* Bound states in the continuum in asymmetric waveguides: role of proportionate coupling [Текст] / N. Shubin, V. Караев, А. Friman, А. Gorbatsevich // META 2021 The 11 th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics. — Warsaw, Poland, 2021. — С. 1033. — URL: https://metaconferences.org/ocs/files/meta21_proceedings.pdf.
- A13. *Friman, A.* Low Frequency Signal Generation during Fano Resonance Build-up Process [Текст] / А. Friman, N. Shubin, V. Караев, А. Gorbatsevich // 2021 International Applied Computational Electromagnetics Society Symposium (ACES). — 2021. — С. 1–2. — URL: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9528558>.

Список литературы

1. *Augustin, L. M.* InP-based generic foundry platform for photonic integrated circuits [Текст] / L. M. Augustin, R. Santos, E. den Haan, S. Kleijn, P. J. Thijs, S. Latkowski, D. Zhao, W. Yao, J. Bolk, H. Ambrosius [и др.] // IEEE journal of selected topics in quantum electronics. — 2017. — Т. 24, № 1. — С. 1–10.

2. *Kish, F.* System-on-chip photonic integrated circuits [Текст] / F. Kish, V. Lal, P. Evans, S. W. Corzine, M. Ziari, T. Butrie, M. Reffle, H.-S. Tsai, A. Dentai, J. Pleumeekers [и др.] // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. — 2017. — Т. 24, № 1. — С. 1–20.
3. *Di Falco, A.* Photonic crystal slotted slab waveguides [Текст] / A. Di Falco, L. O’Faolain, T. Krauss // Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications. — 2008. — Т. 6, № 1. — С. 38–41. — The Seventh International Symposium on Photonic and Electromagnetic Crystal Structures.
4. *Williams, B. S.* Terahertz quantum-cascade laser at $\lambda \approx 100 \mu\text{m}$ using metal waveguide for mode confinement [Текст] / B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut, Q. Hu, J. L. Reno // Applied Physics Letters. — 2003. — Т. 83, № 11. — С. 2124–2126.
5. *Gao, W.* Fano-resonance in one-dimensional topological photonic crystal heterostructure [Текст] / W. Gao, X. Hu, C. Li, J. Yang, Z. Chai, J. Xie, Q. Gong // Opt. Express. — 2018. — Т. 26, № 7. — С. 8634–8644.
6. *Qi, J.* Independently tunable double Fano resonances in asymmetric MIM waveguide structure [Текст] / J. Qi, Z. Chen, J. Chen, Y. Li, W. Qiang, J. Xu, Q. Sun // Optics express. — 2014. — Т. 22. — С. 14688–14695.
7. *Tan, D. T. H.* Monolithic nonlinear pulse compressor on a silicon chip [Текст] / D. T. H. Tan, P. C. Sun, Y. Fainman // Nature Communications. — 2010. — Т. 1, № 1. — С. 116. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms1113>.
8. *Bekele, D. A.* Signal reshaping and noise suppression using photonic crystal Fano structures [Текст] / D. A. Bekele, Y. Yu, H. Hu, P. Guan, M. Galili, L. Ottaviano, L. K. Oxenlowe, K. Yvind, J. Mork // Opt. Express. — 2018. — Т. 26, № 15. — С. 19596–19605.
9. *Ярив, А.* Оптические волны в кристаллах [Текст] / А. Ярив, П. Юх. — Москва : «Мир», 1987. — С. 616.